

COMPITI E SUDDIVISIONE FONDI TRA LE UNITÀ DI RICERCA  
prot. 2005028402

<b>Coordinatore Scientifico</b>	Vincenzo FIORENTINI
<b>Ateneo</b>	Università degli Studi di CAGLIARI
<b>Titolo della Ricerca</b>	Coesistenza di antiferromagnetismo e metallicità negli ossidi superconduttori ad alta temperatura critica
<b>Finanziamento assegnato</b>	Euro 52.000
<b>Durata</b>	24 Mesi

### Obiettivo della Ricerca

Abbiamo recentemente dimostrato con misure di muon spin rotation la coesistenza di SC e ordine antiferromagnetico (AF) a corto raggio in una limitata regione di drogaggio in  $YBa_2Cu_3O_{(6+y)}$ , mostrando che questa proprietà è intrinseca dei layer superconduttivi  $CuO_2$  "puliti" e strutturalmente non distorti, e che i domini AF e SC coesistono sulla scala nanoscopica. Recentemente, inoltre, abbiamo sviluppato una tecnica di calcolo da principi primi che permette il trattamento di sistemi correlati non accessibili da parte della teoria del funzionale densità. Come descritto in dettaglio nel modello A, questo progetto studierà la coesistenza di ordine magnetico e superconduttività (SC) in ossidi della classe  $YBaCuO$  nel limite 'pulito' (nessun drogante divalente) e in quello 'sporco' (drogante divalente, e.g. Ca, a sostituire Ba), combinando misure di muon spin rotation e calcoli da principi primi in teoria density functional con correzioni di autointerazione.

### Innovazione rispetto allo stato dell'arte nel campo

Questo progetto si propone come altamente innovativo. Come descritto nel modello A, la tecnica teorica post-DFT da noi sviluppata (pseudo-SIC) è l'unica da principi primi applicabile a sistemi della complessità di quelli di interesse qui. Altre tecniche sofisticate, come la full-SIC e la dynamical mean field theory (DMFT), sono ancora troppo costose computazionalmente. La necessità di trattare questi sistemi in modo realistico, cosa difficile o impossibile per le hamiltoniane modello, è evidenziata dagli stessi studi DMFT della superconduttività nel modello di Hubbard bidimensionale, che indicano che avvicinandosi al limite esatto la temperatura di transizione superconduttiva tende a zero, e quindi che il carattere tridimensionale e le proprietà strutturali dettagliate sono essenziali alla superconduttività. Dal lato sperimentale, il diagramma di fase magnetismo-superconduttività da noi proposto recentemente è considerato lo stato dell'arte nel campo, e la sua estensione alle regioni 'sporche' dello spazio dei parametri di drogaggio non è mai stata realizzata.

### Criteri di verificabilità

I risultati saranno riportati, come d'uso, in pubblicazioni su rivista internazionale con referee e comunicazioni a conferenze internazionali del settore. Dato il fisiologico ritardo della pubblicazione a stampa rispetto all'effettuazione della ricerca, i risultati saranno riportati in aggiornamento incrementale sul sito web dedicato "Magnetism and metallicity in hi-Tc oxides" disponibile all'URL <http://hitc.blogspot.com/>

### Elenco delle Unità di Ricerca

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi di CAGLIARI
<b>Responsabile Scientifico</b>	Vincenzo FIORENTINI
<b>Finanziamento assegnato</b>	Euro 52.000

### Compito dell'Unità

Questa unità di ricerca è l'unica coinvolta nel progetto. I fondi sono perciò tutti assegnati ad essa. I compiti dell'unità sono quelli previsti nel progetto generale.