

COMPITI E SUDDIVISIONE FONDI TRA LE UNITÀ DI RICERCA  
prot. 2005022492

<b>Coordinatore Scientifico</b>	Marco GRILLI
<b>Ateneo</b>	Università degli Studi di ROMA "La Sapienza"
<b>Titolo della Ricerca</b>	Superconduttività ad alta temperatura critica e sistemi fortemente correlati
<b>Finanziamento assegnato</b>	Euro 414.000
<b>Durata</b>	24 Mesi

## Obiettivo della Ricerca

*Fino a qualche anno fa il paradigma comunemente accettato per descrivere lo stato metallico era la teoria di Landau dei liquidi normali di Fermi (FL), basata sull'accensione adiabatica dell'interazione tra le particelle, le quali modificano alcuni dei loro parametri fisici (ad es. la loro massa efficace), ma mantengono il loro carattere di eccitazioni fermioniche debolmente interagenti (quasiparticelle). Una volta che lo schermaggio riduce l'interazione elettronica tra le quasiparticelle, le interazioni fononiche di bassa energia possono indurre instabilità del FL ed in particolare instaurare un regime superconduttivo. La netta separazione tra scale di energia elettroniche (l'interazione "nuda" elettrone-elettrone, e-e, e l'energia di Fermi) e scale fononiche che mediano l'accoppiamento permetteva l'uso di uno schema perturbativo adiabatico per la superconduttività (teorema di Migdal). La scoperta degli ossidi cuprati superconduttori ad alta temperatura critica (SAT) ha messo in crisi entrambi questi schemi concettuali mostrando che essi dovevano essere rivisti. Da quel momento si sono scoperti e studiati molti sistemi con violazioni più o meno marcate di uno od entrambi questi paradigmi, quello di Landau e di Migdal per lo stato metallico e superconduttivo. Oltre ai cuprati SAT, sono emblematici i casi di altri sistemi fortemente correlati come i fermioni pesanti vicino a transizioni quantistiche del secondo ordine (punti critici quantistici, QCP), le manganiti con magnetoresistenza colossale, il C60 drogato con metalli alcalini o i sistemi elettronici bidimensionali a bassa densità.*

*Oltre a produrre anomalie dello stato metallico e superconduttivo, le forti correlazioni hanno una rilevanza generale. Sul versante applicativo il progressivo processo di miniaturizzazione dei dispositivi elettronici, pone in maniera sempre più evidente il problema delle forti correlazioni elettroniche e dell'interazione elettrone-fonone (e-f). La stessa problematica nasce in molti composti con metalli di transizione, nello studio della struttura elettronica di atomi pesanti (ad es. Fe) in proteine di interesse biologico, o di complessi chimici con un grande numero di atomi, nello studio di sistemi magnetici frustrati e di materiali usati nella "spintronics".*

*Questo progetto si inserisce in pieno nelle problematiche menzionate sopra analizzando i vari effetti delle forti correlazioni lungo tre direttive principali: (A) lo studio di nuovi schemi concettuali per lo stato metallico oltre quello di Landau dei FL, (B) i nuovi schemi concettuali per la superconduttività, sia a livello di nuovi meccanismi di accoppiamento, che a livello di nuove teorie non adiabatiche. Infine, (C) lo studio dei sistemi correlati si svolge necessariamente anche lungo direttive che toccano temi generali come, ad esempio, lo studio dell'interazione e-f o delle proprietà magnetiche in sistemi vicini allo stato isolante di Mott.*

*Lo scopo principale della linea (A) è quello di individuare un nuovo paradigma che possa sostituire o generalizzare la teoria di Landau dello stato metallico. Questo tema, che può sembrare ambizioso e generico, si svolge nell'ambito di una ricerca già avanzata che ha già individuato da anni precise prospettive di sviluppo. In particolare la proposta di Anderson di uno stato metallico con singoletti risonanti (RVB) e/o la vicinanza dello stato metallico ad instabilità quantistiche sono le principali linee guida. In questo campo le UdR I (Grilli) e III (Sorella) hanno già esperienze e competenze specifiche. Per quanto riguarda il punto (B), lo studio di meccanismi di accoppiamento superconduttivo non convenzionali discende naturalmente dall'analisi dello stato normale e delle sue anomalie (vedi Punto A). Indipendente e per certi versi più generale, in quanto applicabile sia a stati FL che non-FL, è lo studio degli effetti non adiabatici dell'interazione elettrone-fonone (e-f). Questa problematica nasce genericamente in quei sistemi (come ad es. i SAT C60) dove l'energia di Fermi non è molto più grande delle energie fononiche ed è stata oggetto di studio nell'UdR V (Pietronero). Approfondire le conseguenze fisiche della non adiabaticità, che viola gli schemi perturbativi convenzionali ha un ovvio interesse sia per la comprensione della SAT, che per l'interpretazione di anomalie nello stato normale. Infine, per quanto riguarda il punto (C), c'è una varietà di temi ed obiettivi, alcuni trasversali a tutte le UdR, altri specifici di ciascuna UdR. Nel primo caso va ricordata l'interazione e-f in presenza di correlazioni forti. Questo tema generale assume poi connotazioni specifiche come formazione di polaroni, lo schermaggio dell'accoppiamento e-f a grandi momenti trasferiti, la formazione di cristalli di Wigner di grandi polaroni, gli effetti di decoerenza di stati quantistici entangled, etc. Ognuno di questi aspetti è di competenza di una o più UdR del Progetto, ma la loro comune origine induce naturalmente collaborazioni e sinergie tra le UdR. Altri temi, invece, rientrano nell'ambito generale del progetto, ma hanno carattere più specifico e saranno oggetto di analisi indipendenti da parte delle singole UdR.*

## Innovazione rispetto allo stato dell'arte nel campo

*In questo progetto ci si propone di chiarire diversi aspetti della fisica dei sistemi fortemente correlati lungo le tre direttive menzionate nella sezione "Obiettivo della Ricerca":*

(A) NUOVI SCHEMI CONCETTUALI PER LO STATO METALLICO

La possibilità che nei superconduttori ad alta temperatura (SAT) si stabilisca uno stato resonating-valence-bond (RVB), formato da un liquido di singoletti con proprietà diverse dal Fermi-liquid (FL) è fortemente dibattuto. Utilizzando tecniche Monte Carlo Quantistico (QMC) l'UdR III (Sorella) si propone di verificare la cosiddetta separazione tra spin e carica predetta dallo scenario RVB, introducendo fluttuazioni di carica in una funzione d'onda RVB. Questa linea di ricerca si collega direttamente allo studio, svolto nell'UdR I (Grilli) mediante Teoria di Campo Medio Dinamico (DMFT), di modelli con gradi di libertà orbitali in cui lo stato isolante di Mott è formato da singoletti localizzati senza coerenza, e rappresenta pertanto una versione "locale" dell'RVB. In particolare ci si propone di estendere a temperature finite lo studio finora limitato a temperatura nulla per motivi tecnici.

Un altro meccanismo che può distruggere il FL è la presenza di un punto critico quantistico (QCP). In questo progetto si cercherà di estrarre informazioni sulla struttura spaziale delle eccitazioni collettive a bassa energia sia partendo dalla fase non-ordinata, sia nella fase a simmetria rotta. Questo tipo di analisi fornirà importanti informazioni sul tipo di ordine associato al QCP nei SAT. Queste due strategie verranno utilizzate per il calcolo sistematico della conducibilità ottica e delle proprietà di trasporto, in diretto contatto con gli esperimenti dell'UdR II (Calvani).

La parte sperimentale del progetto sarà basata su misure di riflettività di cristalli singoli. Nel lontano infrarosso si intendono studiare le deviazioni da un comportamento ideale di Drude e rivelare la presenza di anomalie a frequenza finita che possano essere ricondotte a fluttuazioni di carica, potenzialmente associate al QCP studiato dall'UdR I. Ci focalizzeremo su due sistemi dove esistono pochissimi dati infrarossi: il  $\text{Bi}(2)\text{Sr}(2)\text{CuO}(6)$  e il composto drogato con elettroni  $\text{Nd}(2-x)\text{Ce}(x)\text{CuO}(4)$ . Anche la spettroscopia basata sull'assorbimento anelastico consentirà l'analisi dei modi collettivi a bassissima energia.

#### **(B) NUOVI SCHEMI CONCETTUALI PER LA SUPERCONDUTTIVITÀ**

Ci proponiamo di approfondire lo studio di schemi teorici originali per la superconduttività, sia a livello di meccanismi non convenzionali che di nuovi schemi legati ad effetti non adiabatici del reticolo.

*-Effetti non adiabatici dell'interazione elettrone-fonone*

L'UdR V (Pietronero) ha individuato negli effetti non adiabatici oltre l'approccio di Born-Oppenheimer una possibile sorgente sia per l'alta temperatura critica che per alcune anomalie negli effetti isotopici ed in altre quantità associate con la risposta del reticolo. In questo quadro i principali temi l'attività dell'UdR V si concentrerà sul ruolo delle fluttuazioni reticolari in  $\text{MgB}_2$ ,  $\text{A}_{15}$ ,  $\text{Nb}$ ,  $\text{V}$ , e nella grafite drogata con  $\text{Yb}$  e  $\text{Ca}$ , e sulla loro connessione con la violazione del principio di Born-Oppenheimer.

Calcoli ab-initio saranno impiegati per valutare struttura a bande, potenziale di deformazione, e energie vibrazionali. Si considererà anche il ruolo del ritardo, della natura Jahn-Teller e degli effetti multi-banda nelle proprietà dei fullereni ed interrelazione con effetti di correlazione elettronica.

*-Meccanismi non convenzionali di pairing*

Meccanismi puramente elettronici, basati sul modello  $t$ - $J$ , sono stati spesso invocati per comprendere la fisica dei SAT.

Si intende chiarire il diagramma di fase di questo modello, con particolare riferimento alla superconduttività ed al possibile ruolo dell'anisotropia spaziale.

L'UdR I ha mostrato come la correlazione elettronica possa favorire la superconduttività mediata da interazioni di tipo Jahn-Teller, e dalla competizione tra questi effetti nasca un punto critico quantistico, attraverso una soluzione a  $T=0$  di un modello a due orbitali. Nell'ambito di questo progetto estenderemo la trattazione a temperature finite, e verrà introdotta la struttura spaziale. Il confronto tra i diversi approcci delle unità I e III potrà permettere una comprensione profonda dei meccanismi alla base della superconduttività in sistemi correlati.

#### **(C) CORRELAZIONI FORTI: PROPRIETÀ GENERALI**

*-Gas di elettroni in 2 e 3 dimensioni*

Si intende proseguire l'analisi con uno studio numerico (QMC) e analitico dell'energia di correlazione nel gas di elettroni tridimensionale polarizzato con interazione solo a corto raggio. Possibilmente si considererà anche il gas con interazione a lungo raggio. Tramite simulazioni QMC si studierà il gas bidimensionale con massa effettiva anisotropa (di rilevanza per le eterostrutture) e l'"energia cinetica di correlazione" risolta in spin.

*-Sviluppi e applicazioni di metodi QMC*

Il metodo QMC variazionale (UdR III) può essere utilizzato in combinazione con la DMFT (UdR I) per descrivere transizioni di Mott a temperatura nulla. L'utilizzo combinato dei due approcci può aiutare a chiarire la relazione tra superconduttività e isolanti di Mott.

Ci si propone inoltre di studiare in modo sistematico il modello di Heisenberg frustrato, sia su reticolo triangolare, che su reticolo quadrato con interazioni anche a secondi vicini, in modo da stabilire un confronto con i dati sperimentali su vanadati e composti organici, e fare predizioni su ulteriori esperimenti e nuovi materiali con particolari proprietà magnetiche.

Il QMC verrà utilizzato per lo studio della struttura elettronica degli aggregati di Ferro/zolfo presenti nella classe di proteine HiPIP. Queste strutture sono fondamentali per il metabolismo dell'idrogeno e potrebbero avere implicazioni tecnologiche per la produzione dell'idrogeno come carburante.

*-Interazione elettrone-fonone*

In moltissimi sistemi si manifestano simultaneamente forti correlazioni elettroniche ed effetti dell'accoppiamento  $e$ - $f$ . Diverse UdR hanno studiato questo tipo di problemi. In particolare l'UdR I ha considerato principalmente situazioni in cui si ha prevalenza della correlazione elettronica, studiando l'effetto dei fononi sulla transizione metallo-isolante. È nostra intenzione proseguire tale studio per chiarire il ruolo e gli effetti della struttura spaziale. Le UdR I,IV (Pierleoni) e V proseguiranno la collaborazione nello studio degli effetti isotopici su diverse quantità. L'UdR IV, in collaborazione con I e V, si concentrerà sulla transizione bipolaronica e sulla competizione con la transizione di Mott.

Un ulteriore avanzamento tecnico potrà essere compiuto utilizzando le tecniche di QMC (UdR III) per studiare il modello  $t$ - $J$  con accoppiamento  $e$ - $f$ .

*Per quel che riguarda l'attività sperimentale, l'UdR II si propone di investigare la risposta ottica nel medio infrarosso, e caratterizzare le bande polaroniche, di  $Nd(2-x)Ce(x)CuO(4)$ ,  $Bi(2)Sr(2)CuO(6)$ , e  $Bi(2)Sr(2)Cu(2)O(8-y)$ .*

*-Effetti di decoerenza da fononi in sistemi coerenti quantistici*

*Le UdR IV e V considereranno il problema della perdita di coerenza quantistica per un elettrone interagente con i fononi. Questo problema è rilevante nello studio del trasporto in sistemi polaronici e per il trasporto dell'informazione quantistica.*

*-Diagramma di fase dell'Idrogeno in fase molecolare*

*Dopo una serie di sviluppi tecnici necessari l'UdR IV potrà considerare il diagramma di fase dell'idrogeno in fase molecolare isolante e attraverso la transizione metallo-isolante. Un altro aspetto centrale è la transizione solido-liquido. È interessante capire la posizione relativa della linea di transizione solido-liquido e la linea di transizione di dissociazione molecolare (o MIT). Il diverso comportamento delle due linee può rivelare diversi scenari, tra cui la comparsa di un nuovo tipo di liquido quantistico.*

## **Criteri di verificabilità**

*La ricerca alla base di questo Progetto ha un carattere fondamentale sia per quanto riguarda la parte sperimentale che quella teorica. Pertanto il tipo di "prodotto" che ci si aspetta di ottenere consisterà principalmente in un ampliamento ed un approfondimento della conoscenza dei sistemi elettronici fortemente correlati. Per tutti e tre i filoni di ricerca descritti sinteticamente nel paragrafo "Obiettivo della Ricerca" e più dettagliatamente nel Modello A, il principale criterio per verificare il successo del Progetto consisterà nel numero e nel fattore di impatto delle pubblicazioni su riviste internazionali, che le UdR produrranno. Oltre a questo, anche il numero di inviti a presentare i risultati in congressi e workshops internazionali sarà fortemente indicativo del successo (e del relativo riconoscimento internazionale) del Progetto.*

## **Elenco delle Unità di Ricerca**

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi di ROMA "La Sapienza"
<b>Responsabile Scientifico</b>	Marco GRILLI
<b>Finanziamento assegnato</b>	<b>Euro</b> 75.000

## **Compito dell'Unità**

*L'UdR I intende occuparsi dal punto di vista teorico di tutte e tre le linee indicate nel paragrafo "Obiettivo della Ricerca". In particolare intende studiare:*

- (A) l'insorgere di possibili stati metallici anomali sia in conseguenza di formazione di stati di tipo RVB che a causa di instabilità di carica associate ad un punto critico quantistico per formazione di "stripes";*
- (B) la formazione di superconduttività ad alta temperatura a causa delle forti correlazioni e/o della prossimità ad un punto critico quantistico;*
- (C) effetti generali delle correlazioni forti: transizione metallo-isolante alla Mott, effetti sull'accoppiamento elettrone-fonone e relative conseguenze sugli effetti isotopici, sulle instabilità di carica e polaroniche, etc.*

*In tutti questi filoni di ricerca sarà importante stabilire sinergie e collaborazioni sia con l'unità sperimentale (UdR II) che con le altre unità teoriche.*

---

<b>Sede dell'Unità</b>	Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati di TRIESTE
<b>Responsabile Scientifico</b>	Sandro SORELLA
<b>Finanziamento assegnato</b>	<b>Euro</b> 56.000

## **Compito dell'Unità**

*1) Superconduttività in sistemi bidimensionali in presenza di forte correlazione e di accoppiamento con i fononi. Alcune proprietà dei superconduttori ad alta temperatura critica possono essere interpretate per mezzo di un modello semplice, il modello t-J. Ci sono forti indicazioni che lo stato fondamentale del modello sia superconduttore nella regione di interesse fisico. Ci si propone quindi di approfondire lo studio di questo modello e di generalizzarlo con un accoppiamento elettrone-fonone di tipo Holstein per chiarire se alcuni aspetti della fisica dei Cuprati possono essere spiegati in modo più realistico.*

*2) Proprietà di fotoemissione nei superconduttori ad alta Tc. Studiando il modello t-J bidimensionale, con hopping fino a secondi*

vicini ci si propone di spiegare come mai la velocità di Fermi misurata ad alte energie non corrisponde alle predizioni di questo modello. In questo caso l'effetto dell'interazione elettrone-fonone potrebbe essere importante. Intendiamo inoltre esplorare la possibilità di costruire eccitazioni di singola particella usando nell'ansatz variazionale anche le fluttuazioni di carica descritte dal termine di Jastrow a lungo raggio, che è stato usato per descrivere lo stato fondamentale. Partendo da questo ansatz è possibile riprodurre la cosiddetta separazione dello spin e della carica che caratterizza i sistemi unidimensionali. In questo modo sarebbe possibile studiare questo peculiare effetto dovuto alla correlazione, anche in sistemi bidimensionali o tridimensionali.

3) *Descrizione variazionale della transizione di Mott.*

Il metodo variazionale basato sulla tecnica Monte Carlo, sviluppato alla SISSA di Trieste, sarà applicato allo studio della transizione di Mott a temperatura nulla in funzione del drogaggio o della pressione. Inoltre una caratterizzazione completa della funzione d'onda dell'isolante potrebbe chiarire come mai sperimentalmente fasi superconduttive non convenzionali appaiono in prossimità di un isolante di Mott.

Per tutti questi punti 1)-3) si prevede di sviluppare contatti e collaborazioni con l'unità I di Roma.

4) *Trattazione sistematica della frustrazione nel modello di Heisenberg.* Come mostrato in precedenza, per mezzo dell'approccio variazionale, è possibile descrivere in modo soddisfacente le proprietà di temperatura nulla di sistemi antiferromagnetici frustrati descritti dal modello di Heisenberg sia su reticolo quadrato che su reticolo triangolare. Ci si propone di studiare in modo sistematico il diagramma di fase dei due modelli.

5) *Ruolo del ferro nelle proteine.* Lo scopo di questa parte del progetto è di studiare la struttura elettronica dei cluster di Ferro/zolfo presenti nella classe di proteine HiPIP, con una tecnica di Monte Carlo quantistico innovativa. Queste strutture sono fondamentali nel campo biologico per il metabolismo dell'idrogeno e potrebbero persino avere implicazioni utili dal punto di vista tecnologico per la produzione dell'idrogeno come carburante. Il nostro approccio innovativo permette l'inclusione degli pseudopotenziali non-locali tramite una "regolarizzazione su reticolo" che si è dimostrata molto accurata e che consente di trattare la non località del potenziale in modo efficiente e variazionale. Si prevede di collaborare con Giovanni Bachelet, dell'UdR V.

6) *Idrogeno ad alte pressioni.* Il diagramma di fase dell'idrogeno, l'elemento più semplice in natura, e tuttavia di grande importanza, potrebbe rivelare alcune fasi in cui la correlazione gioca un ruolo fondamentale. Ci si propone, con la nostra tecnica variazionale di verificare l'esistenza di una fase superconduttiva non convenzionale, ovvero di tipo RVB, ad alte pressioni e a temperature sufficientemente basse. Si prevede di collaborare con Carlo Pierleoni (UdR IV).

---

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi di ROMA "La Sapienza"
<b>Responsabile Scientifico</b>	Paolo CALVANI
<b>Finanziamento assegnato</b>	Euro 117.000

## **Compito dell'Unità**

La parte sperimentale del programma sui superconduttori ad alta  $T_c$  sarà basata su misure di riflettività di cristalli singoli, di gran lunga più significative di quelle su campioni policristallini e sui film. La riflettività sarà misurata tra 20 e 40000  $\text{cm}^{-1}$  con un interferometro di Michelson nell'infrarosso e con un monocromatore nel visibile e nell'UV. Se necessario, sui cristalli più grandi si potrà spingere il limite inferiore a 5  $\text{cm}^{-1}$  usando luce coerente di sincrotrone. La conducibilità ottica verrà poi estratta dai dati di riflettività mediante trasformazioni di Kramers-Kronig.

Nel lontano infrarosso si intendono studiare le deviazioni da un comportamento ideale di Drude e rivelare la presenza di anomalie a frequenza finita che possano essere ricondotte a fluttuazioni di ordine di carica. Ci focalizzeremo su due sistemi semplici dove esistono pochissimi dati infrarossi e che inoltre presentano un debole assorbimento di Drude da cariche libere (che potrebbe coprire gli effetti più interessanti): il  $\text{Bi}(2)\text{Sr}(2)\text{CuO}(6)$  (con diverse concentrazioni di ossigeno e anche con l'aggiunta di Pb, per studiare un grande intervallo di drogaggi) e il sistema drogato per elettroni  $\text{Nd}(2-x)\text{Ce}(x)\text{CuO}(4)$ .

Nel medio infrarosso verranno studiate in  $\text{Nd}(2-x)\text{Ce}(x)\text{CuO}(4)$ ,  $\text{Bi}(2)\text{Sr}(2)\text{CuO}(6)$ , e  $\text{Bi}(2)\text{Sr}(2)\text{Cu}(2)\text{O}(8-y)$  per diversi drogaggi e temperature, le bande polaroniche che ci aspettiamo di trovarvi, allo scopo di fornire forme di riga affidabili ai teorici e di effettuare un confronto tra sistemi drogati per elettroni e per buche. Un precedente studio ha portato alla rivelazione di tali bande nel  $\text{Nd}(2-x)\text{Ce}(x)\text{CuO}(4)$ .

Infine, usando i dati sull'intero intervallo spettrale e su tutti e tre i sistemi, integreremo la conducibilità ottica per estrarre il peso spettrale in funzione del limite superiore di integrazione (frequenza di taglio). Così facendo potremo studiare le regole di somma ristrette nei cuprati drogati per buche ed elettroni, al fine di generalizzare lo studio di una nuova funzione di notevole interesse teorico, la "risposta termica del sistema correlato dei portatori" che il nostro gruppo ha introdotto di recente.

I monocristalli di BSCO necessari saranno inizialmente forniti da una collaborazione internazionale con il Prof. Manzke a Berlino. Tuttavia, anche membri del gruppo di Salerno inizieranno a crescere cuprati superconduttori usando una fornace basata sul metodo della Travelling Solvent Floating Zone operativa dall'inizio del 2005. Il know-how necessario è stato ottenuto con una collaborazione con il Prof. Maeno e con un lungo soggiorno, nel suo laboratorio in Giappone, di due membri del gruppo. Il gruppo dell'università di Salerno e del centro regionale INFN-CNR "Supermat" comincerà a produrre  $\text{Nd}(2-x)\text{Ce}(x)\text{CuO}(4)$  e  $\text{Bi}(2)\text{Sr}(2)\text{Cu}(2)\text{O}(8-y)$  con vari drogaggi  $x$  e  $y$ , mentre alla Sapienza il gruppo di spettroscopia IR inizierà a misurare i monocristalli

di  $\text{Bi(2)Sr(2)CuO(6)}$  con diverse  $T_c$ , prodotti a Berlino.

La morfologia dei cristalli verrà studiata con analisi SEM. La composizione chimica effettiva verrà poi determinata con la spettroscopia dispersa in energia (EDS). I migliori campioni verranno selezionati infine in base alle loro proprietà magnetiche, usando un magnetometro VSM a bobina superconduttrice da 7 Tesla capace di misurare la suscettività e la magnetizzazione tra 4 e 400 K. Così verranno misurate sia le  $T_c$  che le larghezze delle curve di transizione superconduttiva.

Verrà inoltre studiata otticamente la superconduttività del diamante drogato con boro, scoperta nel 2004, sia per verificare se segue la teoria BCS, sia per individuare i mediatori del pairing. A questo scopo è stata stabilita una collaborazione col Dr. Y. Takano, del National Institute for Materials Science di Tsukuba, che produce i film di diamante superconduttore con la più alta temperatura critica (fino a 10 K).

---

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi di ROMA "La Sapienza"
<b>Responsabile Scientifico</b>	Luciano PIETRONERO
<b>Finanziamento assegnato</b>	<b>Euro</b> 138.000

### **Compito dell'Unità**

Obiettivo della ricerca di questa Unità sarà lo studio delle proprietà complesse a multi-corpi dell'interazione elettrone-reticolo e della correlazione elettronica dovuta all'interazione elettrone-elettrone, sia all'interno di modelli paradigmatici per tali tematiche sia in materiali realistici. In questo quadro compiti specifici dell'Unità di ricerca saranno:

- studio delle proprietà elettrone- fonone e superconduttive in sistemi in regime nonadiabatico in cui il principio di Born-Oppenheimer viene meno. Materiali di riferimento per tale studio saranno gli ossidi rameici, fullereni,  $\text{MgB}_2$ . e i composti grafittici.
- studio delle proprietà multicorpi in gas di elettroni in 2 e 3 dimensioni. Studio della correlazione di coppia e dell'energia di correlazione con tecniche Density Functional Theory. Effetti del disordine e dell'anisotropia di massa.
- studio delle proprietà del reticolo e di rilassamento tramite misure anelastiche in sistemi come gli ossidi rameici, fullereni, ed  $\text{MgB}_2$ .
- analisi delle proprietà di coerenza e di entanglement in sistemi quantistici accoppiati.

---

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi de L'AQUILA
<b>Responsabile Scientifico</b>	Carlo PIERLEONI
<b>Finanziamento assegnato</b>	<b>Euro</b> 28.000

### **Compito dell'Unità**

I compiti dell'unità IV (Pierleoni) attengono ai seguenti studi

- Studio di sistemi con interazione locale tramite modelli reticolari.
- Studio di sistemi con interazione a lunga portata sia tramite modelli effettivi che tramite simulazioni ab-initio.

Nell'ambito i) L'UdR IV, in collaborazione con le UdR I (Grilli) e V (Pietronero), si concentrerà sulla transizione bipolaronica e sulla regione di parametri in cui essa compete con la transizione di Mott-Hubbard. Nel primo anno lo studio si concentrerà sugli effetti isotopici, ad esempio per la massa efficace, anche come indicatori del carattere della transizione. Contemporaneamente sempre in ambito DMFT verrà portato avanti un metodo in grado di trattare in modo numericamente accurato il regime adiabatico dell'accoppiamento e-f.

Per quanto riguarda ii) intendiamo estendere l'applicazione del Coupled Electron-Ion Monte Carlo (CEIMC) alla fase molecolare dell'idrogeno e allo studio della transizione MIT. In una prima parte cercheremo di determinare anche il carattere metallico del sistema al variare della densità e individuare la metallizzazione in relazione alla dissociazione molecolare. Nella seconda parte dello studio affronteremo la determinazione della linea di fusione per l'idrogeno. In questo caso sarà molto importante la collaborazione con l'UdR III (Sorella), che ha recentemente sviluppato un metodo alternativo al CEIMC, e basato sulla dinamica molecolare con forze ricavate dal QMC, per studiare l'idrogeno. Questa collaborazione permetterà di verificare la presenza o meno di una fase liquida a bassa temperatura in cui funzioni d'onda di tipo RVB, recentemente sviluppate dell'unità III, potrebbero rivelarsi superiori alle funzioni di tipo Slater-Jastrow usate nel CEIMC.