

# PROPUESTA DE TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

## DATOS GENERALES DE LA PROPUESTA

Título de la propuesta: **Propiedades electrónicas y dinámica de espines en nuevos superconductores no-convencionales**

Apellido y Nombres del director: **VENTURA, Cecilia Ileana**

Teléfono: **2944581036**

Dirección electrónica del director (ingresar una sola dirección): **ventura@cab.cnea.gov.ar**

Cargo IB: **En IB llegué a ser Profesora Invitada (2003, y 2006), a cargo de materias de postgrado. Desde 2009 soy profesora en UNRN: PROFESORA TITULAR Regular, actualmente.**

¿Propone codirector? : **NO**

Datos Co-director:

Dirección electrónica del codirector (ingresar una sola dirección):

Título máximo alcanzado del codirector (Doctor, Magister, otros) :

Cargo docente del codirector en el IB (no excluyente):

Justifique brevemente el rol del Codirector:

Lugar de realización: **Teoría de la Materia Condensada , Gerencia de Física, CAB**

## DETALLE TÉCNICO DE LA PROPUESTA

Orientación:

**Materia Condensada**

Breve descripción: **Es factible investigar diagramas de fases de nuevos materiales mediante el cálculo de excitaciones magnéticas con modelos microscópicos propuestos para su descripción. Apoyándonos en nuestro trabajo previo en esta área para diversos sistemas con electrones correlacionados,[1] y en superconductores no-convencionales[2], proponemos avanzar en la descripción teórica de los superconductores no-convencionales con Fe y con Bi.**

**Las nuevas familias de superconductores laminares no-convencionales incluyen superconductores laminares basados en Fe. El origen de la superconductividad y sus propiedades físicas en estos superconductores laminares no-convencionales, se estudian intensamente, existen muchos modelos y propuestas de mecanismos diferentes, y preguntas abiertas. [3] Se caracterizan por la coexistencia en el nivel de Fermi de electrones de distintas bandas, provenientes de distintos orbitales, que participan directamente en el estado superconductor, por lo cual se los denomina también superconductores multi-banda y el acoplamiento superconductor puede tener contribuciones intra- o inter-bandas (que inclusive pueden coexistir, o bien dominar alguna de ellas dependiendo de los valores de parámetros externos, como dopaje o presión).**

**Concretamente, proponemos estudiar para familias de calcogenuros de Fe u otros metales de transición, y los bismutatos superconductores, las propiedades electrónicas y excitaciones magnéticas en función de dopaje y temperatura. En particular, estudiar efectos de selectividad orbital en las excitaciones magnéticas y otras propiedades de estos superconductores no-convencionales.**

**El trabajo estaría enmarcado en la colaboración teórico-experimental prevista con la Prof. Gladys**

Nieva (IB) y colaboradores del lab. de Bajas Temperaturas-CAB (ver caso LANH presentado en 30/8/21, anexo en la información adicional) , y mi colaboración con la Prof. Roberta Citro del Depto. de Física de la Univ. de Salerno, Italia [4].

#### Referencias:

- [1] "Magnons in the half-doped manganites", C.I.Ventura y B.Alascio, Phys. Rev. B Vol. 68, (Rapid Communication) 020404-1/4 ( 2003 ); "Spin Dynamics of CMR Pyrochlore  $Tl_2Mn_2O_7$ ", C.I. Ventura y M. Acquarone, Journal of Magnetism & Magnetic Materials 272-276 , 286-287 (2004); "Dimer Formation in Half-Doped Manganites", C.I.Ventura y B. Alascio, Journal of Magnetism & Magnetic Materials 272-276 , 295-296 (2004); "Magnons in the colossal magnetoresistance pyrochlore  $Tl_2Mn_2O_7$ ", C.I.Ventura y M. Acquarone, Phys. Rev. B 70, 184409-1/7 (2004); "Renormalization of antiferromagnetic spin waves in heavy fermion compounds with  $T_{Neel} \sim T_{Kondo}$ ", M. Acquarone y C.I.Ventura, Journal of Magnetism & Magnetic Materials 321, 2648-2662 (2009); "Spin excitations in half-doped manganites", I. R. Buitrago, C. I. Ventura, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 26, 2303-2305 (2013); "Quantum magnons of the intermediate phase of half-doped manganite oxides", I.R. Buitrago, C.I. Ventura, L.O. Manuel, IEEE Transactions on Magnetics 49, 4691-4694 (2013) . "Magnetic excitations of perovskite rare-earth nickelates:  $RNiO_3$ ", I.R. Buitrago, C.I. Ventura, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 394, 148-154 (2015).
- [2] "Doping and temperature dependence of the electronic structure in a two-band model for ferropnictides", J. D. Querales Flores, C. I. Ventura, R. Citro, J.J. Rodríguez-Núñez, Phys. Letters A 380, 1648-1657 (2016); "Normal-state magnetotransport properties of  $FeSe$  superconductors", J. D. Querales Flores, M.L. Amigó, G.Nieva, C. I. Ventura, Europhysics Letters 113, 17005-1 a 17005-6 (2016).
- [3] H. Hosono et al, Materials Today Vol. 21, Nr. 3 , 278 (2018)
- [4] "Normal state electronic properties of  $La_{1-x}F_xBiS_2$  superconductors", J. D. Querales Flores, C. I. Ventura, R. Citro, J.J. Rodríguez-Núñez, Physica B 488, 32- 42 (2016).

Metodología principal: Teórico

Metodología secundaria: Computacional

Información adicional: PROPUESTA de caso LANH -Lab. Nac. de Haces Dde Neutrones (CNEA) :

**Título del proyecto:** Orden magnético y dinámica de espines en nuevos superconductores no-convencionales

**Responsables:** Dras. Gladys NIEVA (1) y Cecilia VENTURA (2)

**Cargo o función:** Investigadoras CONICET -(1) Lab. Bajas Temperaturas-CAB; (2) Div. Teoría de Materia Condensada-CAB.

**E-mail:** ventura@cab.cnea.gov.ar

**Integrantes:** CAB: Gladys Nieva, Diego Franco , Lourdes Amigó; Roberta Citro (Univ. Salerno, Italia)

#### Descripción de la línea de trabajo

Es factible investigar diagramas de fases de nuevos materiales mediante el cálculo de excitaciones magnéticas con modelos microscópicos propuestos para su descripción. Apoyándonos en nuestro trabajo previo en esta área para diversos sistemas con electrones correlacionados,[1] y en superconductores no-convencionales[2], proponemos un trabajo combinado que implicará desde la preparación de muestras monocristalinas, su caracterización experimental magnética y eléctrica con campos magnéticos aplicados, hasta técnicas neutrónicas en el LANH (difracción y dispersión elástica de neutrones, y especialmente dispersión inelástica de neutrones (INS)), que posibilitará su descripción teórica para entender mecanismos microscópicos.

Las nuevas familias de superconductores laminares no-convencionales incluyen superconductores laminares basados en Fe. El origen de la superconductividad y sus propiedades físicas en estos

superconductores laminares no-convencionales, se estudian intensamente, existen muchos modelos y propuestas de mecanismos diferentes, y preguntas abiertas. [3] Se caracterizan por la coexistencia en el nivel de Fermi de electrones de distintas bandas, provenientes de distintos orbitales, que participan directamente en el estado superconductor, por lo cual se los denomina también superconductores multi-banda y el acoplamiento superconductor puede tener contribuciones intra- o inter-bandas (que inclusive pueden coexistir, o bien dominar alguna de ellas dependiendo de los valores de parámetros externos, como dopaje o presión).

Concretamente, proponemos estudiar familias de calcogenuros de Fe u otros metales de transición: se producirán las muestras monocristalinas, se estudiarán las propiedades electrónicas de la fase normal en calcogenuros de Fe con dopaje y en particular con tensiones uniaxiales. Se propone estudiar efectos de selectividad orbital en las excitaciones magnéticas de estos superconductores no-convencionales.

#### Referencias:

[1] C.I.Ventura y M. Acquarone, Phys. Rev. B 70, 184409-1/7 (2004)

[2] J. D. Querales Flores, M.L. Amigó, G.Nieva, C. I. Ventura, Europhysics Letters 113, 17005-1 a 17005-6 (2016)

[3] H. Hosono et al, Materials Today Vol. 21, Nr. 3 , 278 (2018)

#### Aporte de las técnicas neutrónicas:

Es de vital importancia el aporte de las técnicas neutrónicas para la obtención de datos de las características de las fluctuaciones magnéticas que ocurren en los calcogenuros superconductores a estudiar. En estos materiales la estructura en el espacio de momentos de las fluctuaciones de spin difieren cualitativamente de la de la mayoría de los otros superconductores en base a hierro que poseen transiciones magnéticas. [10.1126/science.1251853]. Se erige entonces en una de las pocas técnicas para el estudio de estas fluctuaciones, que pueden ser determinantes como mecanismo de acoplamiento superconductor. Los efectos de dopaje, las mediciones en función de temperatura y el desafío de las mediciones con tensiones uniaxiales aplicadas en muestras pequeñas como los monocristales constituyen una de las razones por las que las mediciones de dispersión inelástica de neutrones en estos sistemas no fueron estudiadas con completitud. Entendemos que la superación de desafíos técnicos como la obtención de los monocristales de tamaño grande o moderado, o el ensamble de varios monocristales y su combinación con los aparatos de generación de tensiones uniaxiales en el criostato requerido para el experimento podrán generar un avance que irá más allá del campo de los superconductores basados en hierro.

En esta línea de investigación, además de incorporar colegas que en el LANH pudiesen llevar a cabo el estudio de estos materiales con las técnicas neutrónicas (difracción, y dispersión elástica e inelástica de neutrones), sería deseable poder incorporar nuevos becarios que se sumen como colaboradores, tanto en la parte teórica como experimentos, para poder avanzar simultáneamente más rápido en el trabajo combinado propuesto.

Bariloche, 30 de agosto de 2021

¿Propone que el tema sea considerado para suplemento de beca por tema prioritario? **NO**

Justifique porqué su propuesta debe ser considerada como tema prioritario:

Indique Gerente o Jefe de Departamento que avala su petición: