



Grupo de Propiedades Electrónicas

GIyA-CAC-CNEA

*Modelización cuántica de materiales complejos en el Departamento de Materia Condensada del Centro Atómico Constituyentes:
una presentación necesariamente incompleta*

COMPUMAT
Mayo 2014



Investigadores

- Andrea Barral
- Solange Di Napoli
- Valeria Ferrari
- Javier Guevara
- Ana María Llois
- Hugo Mosca
- Gustavo Murgida
- Diego Perez Daroca
- Pablo Roura
- Verónica Vildosola
- Ruben Weht
- Mariana Weissmann



Doctorandos y Postdocs

- Christian Helman
- Mario Dagrada
- Sebastián Jaroszewicz
- Francisco Guller
- Francisco Pinto
- Fabián Sarmiento
- Corina Urdaniz

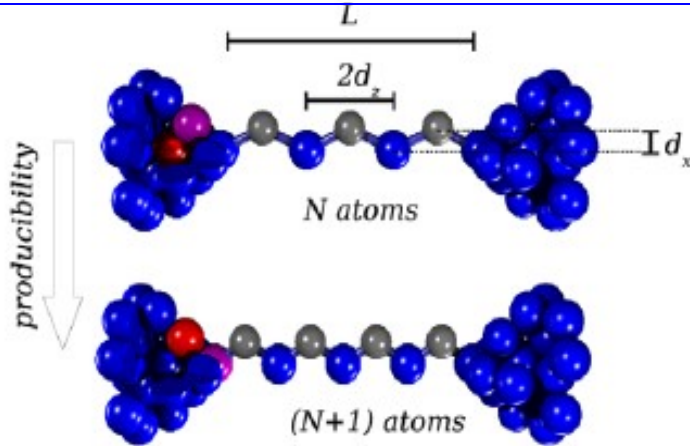
Colaboraciones:

FCEyN-UBA, Bariloche, Rosario, UNLP.
Paris, Grenoble, Marsella (**Francia**)
Trieste (**Italia**)
Ohio (**EE.UU.**)
Jülich (**Alemania**)
Cambridge (**Inglaterra**)
Barcelona y Madrid (**España**)

Objetivos del Grupo y herramientas utilizadas

- ❖ Entender, modelar y explicar resultados experimentales.
- ❖ Predecir comportamientos, diseñar nuevos materiales, dispositivos y materiales con diversas aplicaciones, etc.
- ❖ Utilizamos diversos códigos (Wien2k, Vasp, Quantum Espresso, FLEUR, Abinit, etc) y distintos potenciales de correlación e intercambio DFT y más allá
- ❖ Desarrollamos nuevos programas para extender y complementar dichos códigos
- ❖ Implementamos Hamiltonianos modelo (Heisenberg, Hubbard, Anderson) con el fin de estudiar propiedades de bajas energías a través de teorías que contemplan la física de muchos cuerpos.

Modelos de Producibilidad y Estabilidad de cadenas atómicas basados en la energética de los sistemas

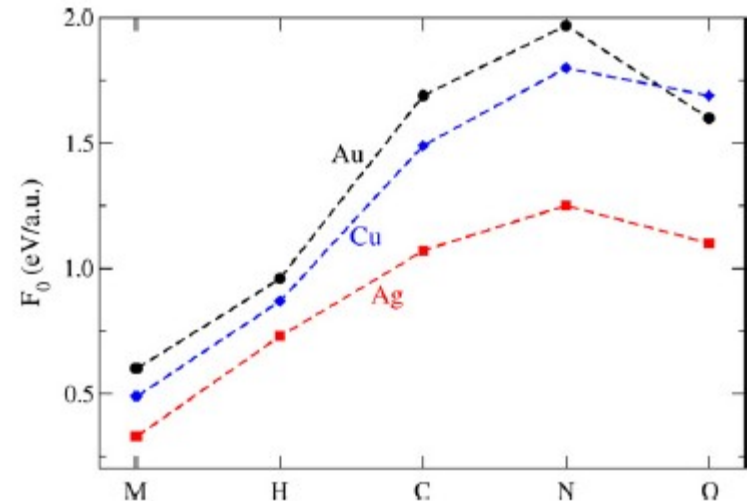
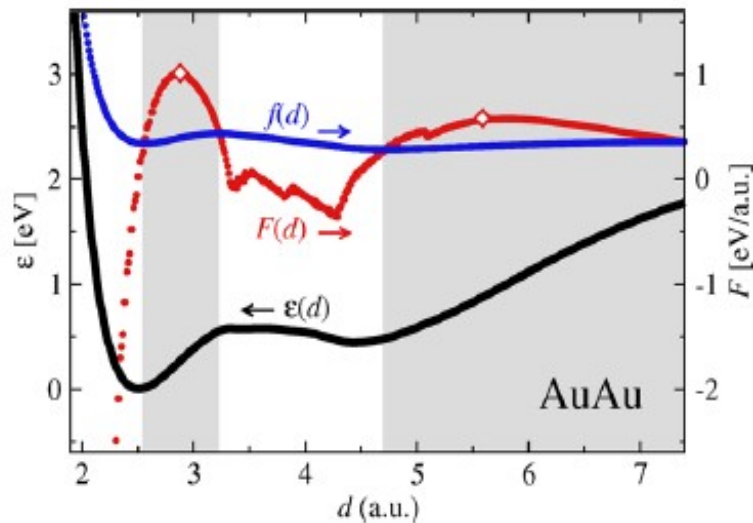


$$E^*(d, N) = (N + 1)\epsilon(d) - \Delta E_{\text{lead}} + (N + 2)\epsilon(\tilde{d}) \quad (2)$$

where $E^*(d, N)$ is a function of the interatomic distance and the number of atoms in the chain. If $E^*(d, N) > 0$ the P-criterion is satisfied and the chain can increase by one atom for that particular pair of parameters (d, N) .

$$F(d) = F(d_z) = \frac{\delta \epsilon(d_z)}{\delta d_z}$$

Cadenas de metales nobles, puros y con dopantes de tipo sp



* S. Di Napoli, A. Thiess, Y. Mokrousov and S. Blügel, JPCM 24, 135501 (2012)

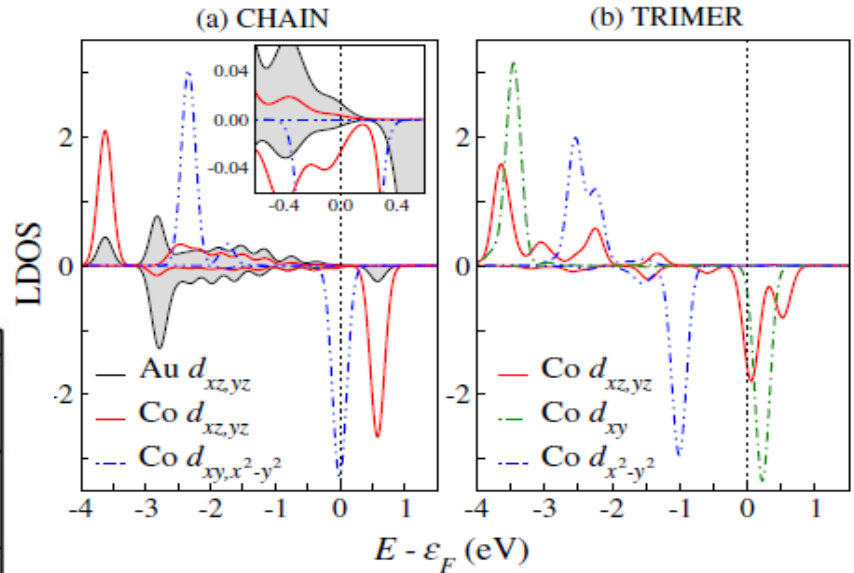
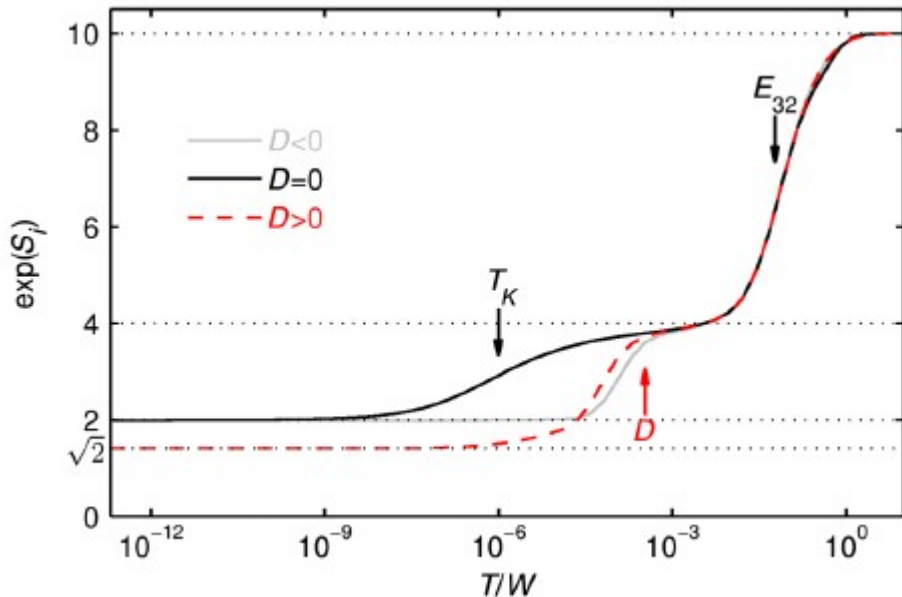
* S. Di Napoli, A. Thiess, Y. Mokrousov and S. Blügel, enviado a JPCM (2013)

Propiedades electrónicas y de transporte en una cadena a través de impureza magnética

Parámetros obtenidos de DFT



Modelo de Kondo de 2 canales para estudiar propiedades de bajas energías incorporando la física de muchos cuerpos.



Rompiendo la simetría de la cadena a través de un contacto BCC

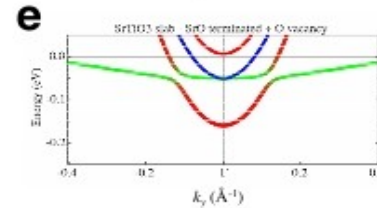
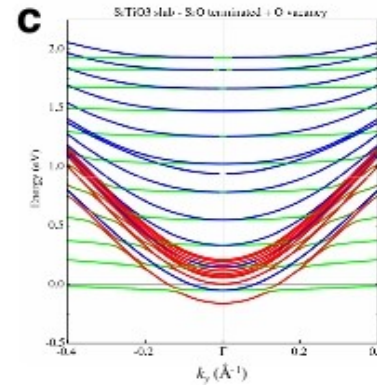
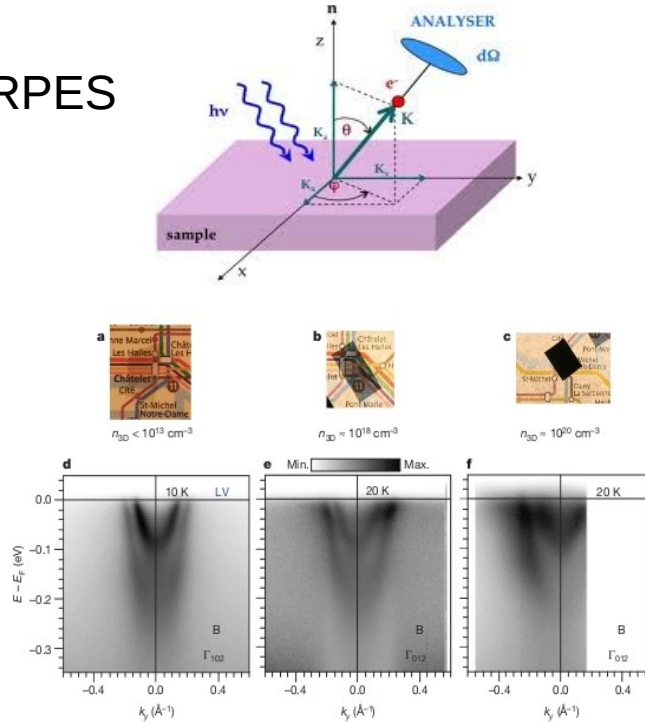
Comportamiento de non-Fermi liquid

* S. Di Napoli, A. Weichselbaum, P. Roura-Bas, A.A. Aligia, Y. Mokrousov and S. Blügel, PRL 110, 196402 (2013)

Formación de gases 2D en la superficie de diferentes óxidos

- Estudio de la superficie (001) SrTiO₃, R. Weht, M. Rozenberg *et al.*, Nature 469, 189 (2011)

ARPES

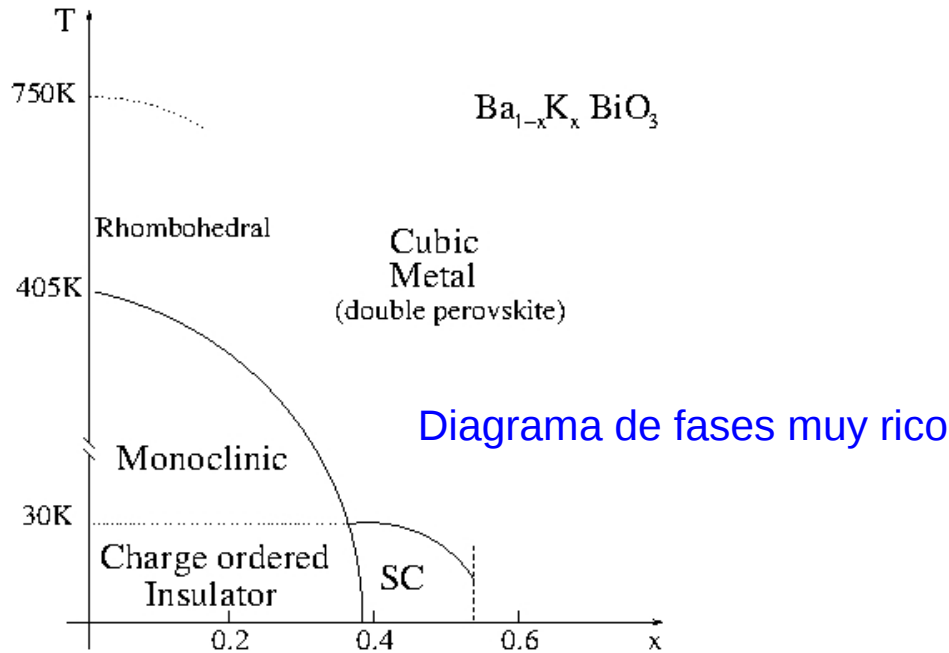


Cálculos DFT
Rol de las vacancias

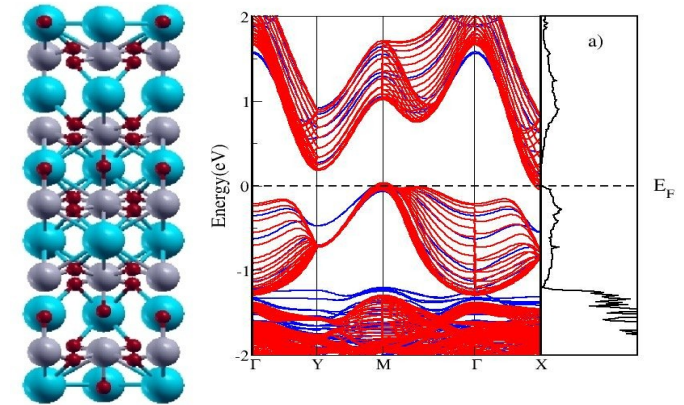
En la actualidad, estudiamos la evolución de las propiedades estructurales capa por capa. Objetivos futuros: propiedades magnéticas, defectos, efecto Espín-Órbita.

Formación de gases 2D en la superficie de diferentes óxidos

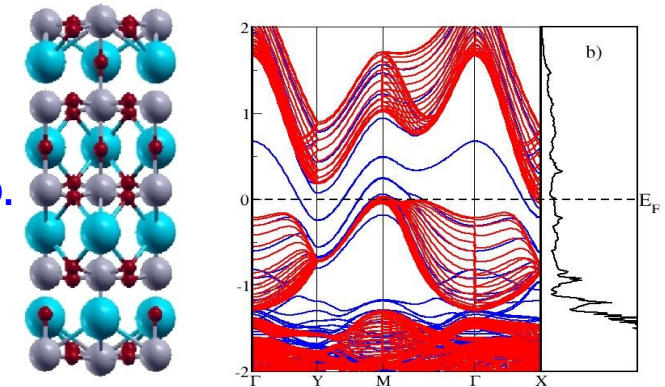
Nuevo mecanismo para la formación de 2DEG en la superficie de óxidos con orden de carga



Terminación BaO: Semiconductor



Terminación BiO2: Metalico (sup.l)

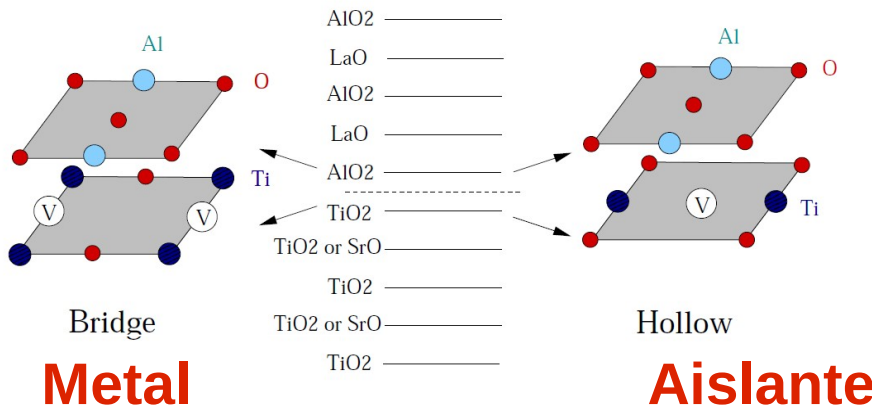


Propusimos un modelo que explica el origen del 2DEG en BBO.

En la actualidad estudiamos la superficie (001) de CaFeO_3 .
Presenta orden de carga, orbital y de espín.
Potencial aplicación en ESPINTRONICA!

Estudio de la superficie (001) BaBiO_3 , Vildosola, Güller, Llois, PRL 110, 206805 (2013)

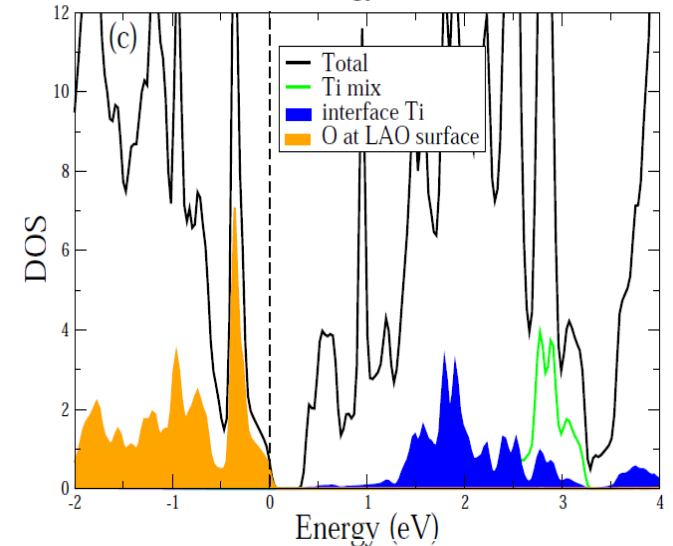
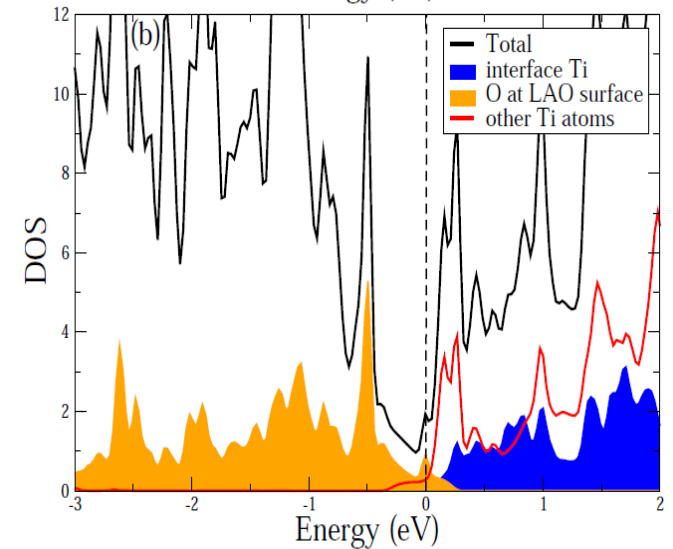
Interfaces de óxidos



Preguntas:

¿Hay magnetismo y conducción en la interfaz de dos óxidos aislantes y no magnéticos?

¿Cuál es el rol de las vacancias de oxígeno, interfaces e intercambio?



Transición metal-aislante debido al intercambio de cationes en LAO/STO

Nitruros: impurezas magnéticas en la superficie de GaN



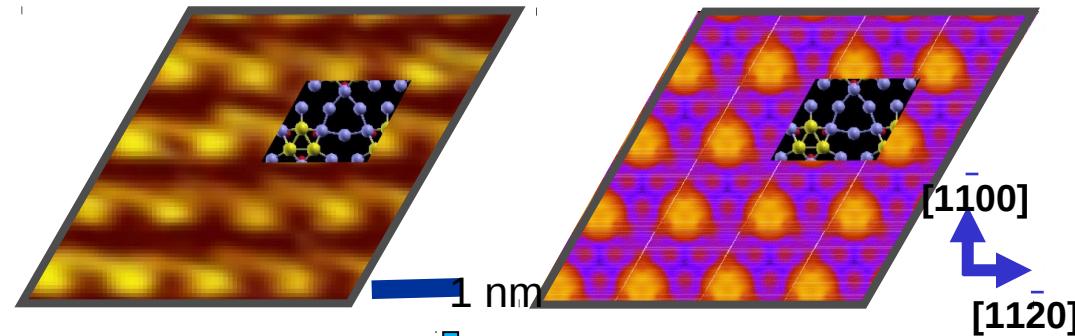
OHIO
UNIVERSITY

A. Barral, V. Ferrari en colaboración con Ohio

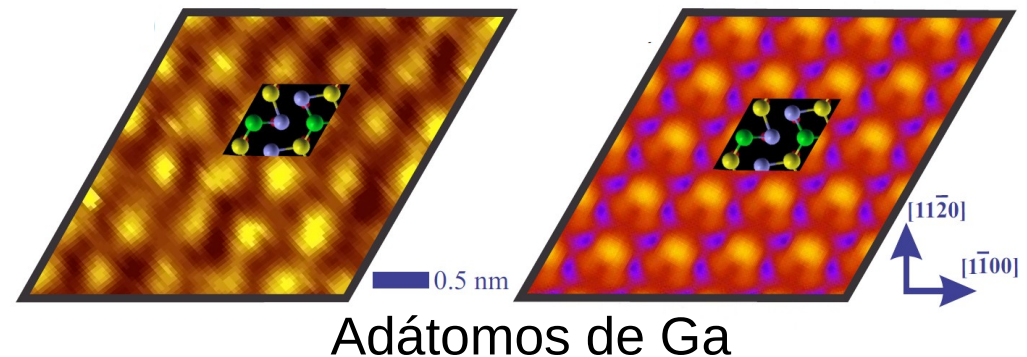
Preguntas:

- ¿Cómo es la estructura de átomos en la superficie?
- ¿Hay magnetismo?

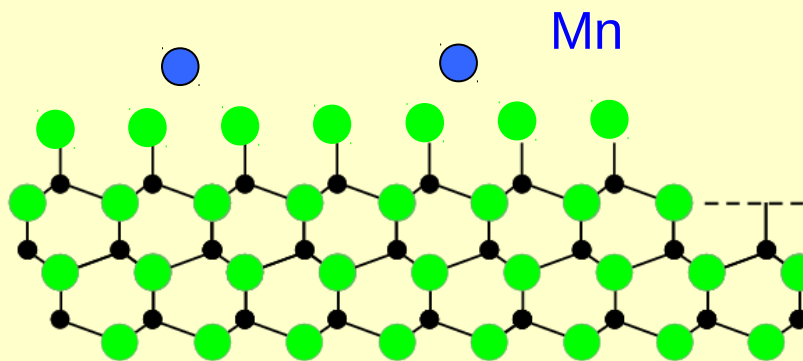
Trímeros de Mn



Al subir la T



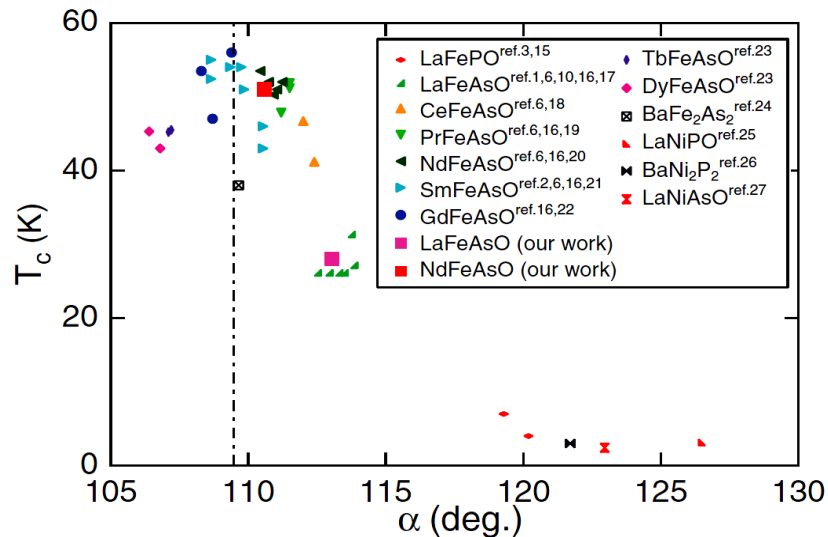
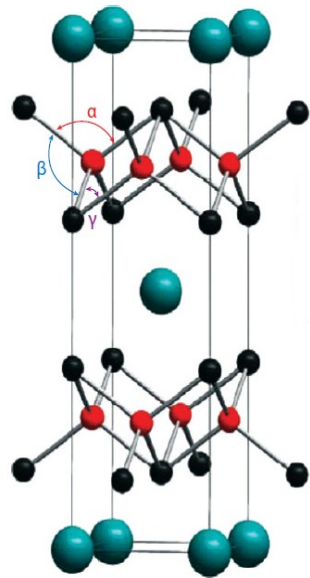
Adátomos de Ga



Nitruro de Ga (GaN)

Materiales Superconductores basados en Hierro

La temperatura crítica y la estructura presentan una gran correlación

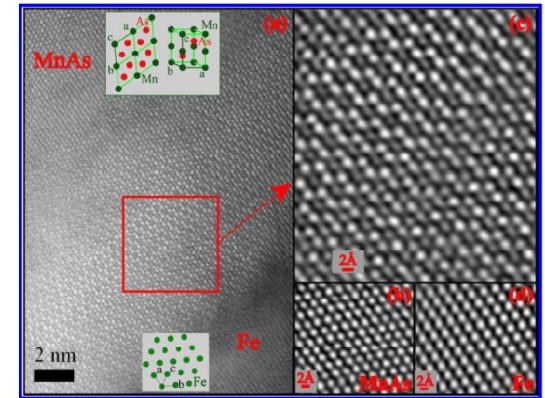
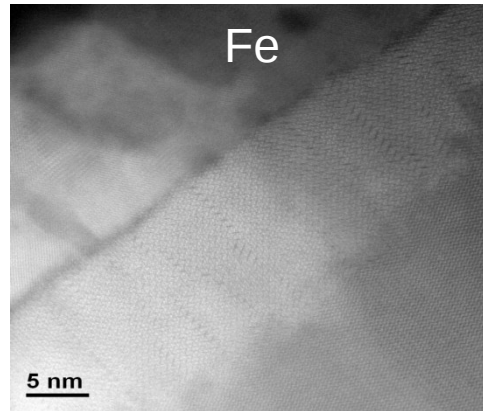
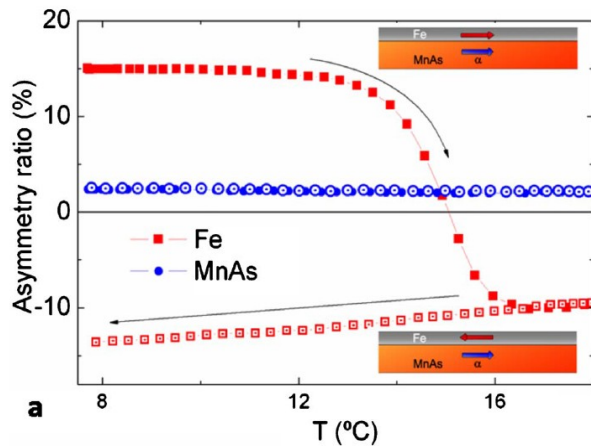


La temperatura crítica más alta se da para un tetraedro regular

Líneas de trabajo en marcha (Mario Dagrada, Vildosola, Weht):

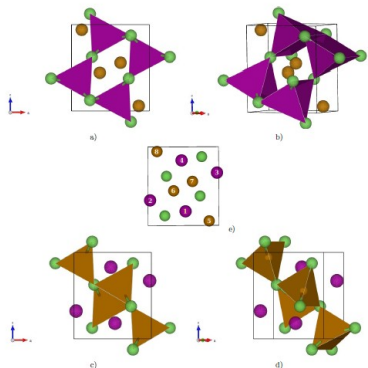
- ❖ Estudios de sistemas bajo presión uniaxial (FeSeTe) (Carlos Acha, Maricel Rodriguez (FCEyN-UBA))
- ❖ Continuación de estudios de materiales bajo presión (Núñez Regueiro, Gastón Garbarino (Grenoble))

Origin of the observed magnetic decoupling between the two ferromagnetic systems, α -MnAs and Fe, below phase coexistence.



Sacchi et al, Phys Rev B 81, 220401 (2010)

Recent experimental results together with electronic structure calculations



THE AFM ORTHORHOMBIC INTERMEDIATE STRUCTURE IS THE ORIGIN OF UNCOUPLED Fe OVERLAYER AND MnAs SUBSTRATE !!!

Figure 2. Different views of unit cell. The coloured shadows emphasize the pyramidal (violet)/tetrahedral (brown) [p]t environments. In a) site going from 1 to 4 corresponds to Mn species and from 5 to 8 corresponds to Fe species. Green balls stand for As. Note the stacking in c-direction: 1-2-3-4-5-6, meaning 1 p p 1 p p 1. In a) and b) one manganese is inside each violet pyramids and for c) and d) one iron is inside each tetrahedron.

Structural phase	H	T	O
a (Å)	6.26	3.74	6.36
b (Å)			3.825
c (Å)	3.54	5.99	7.04
Volume / Z (Å ³) *	13.38	14.00	14.27
Magnetic configuration	F	AF	AF
Fe (t-site) (μ _B)	1.2 (1.1)	0.6 ** (0.03)	1.6
Mn (p-site) (μ _B)	3.11 (3.13)	3.30 (3.36)	3.44

Interacciones magnéticas en la interfaz de ML de Fe sobre MnAs

$$H = \hat{H}_0 - \sum_{i \neq j} J_{ij}(\sigma_i \cdot \sigma_j).$$

DFT magnetic structure mapped onto Heisenberg Hamiltonian. Due to collinearity Spin operators replaced by classical spins.

$J_{ij} > 0$ FM interaction, < 0 AFM

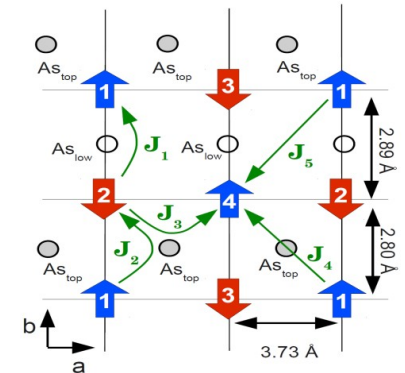
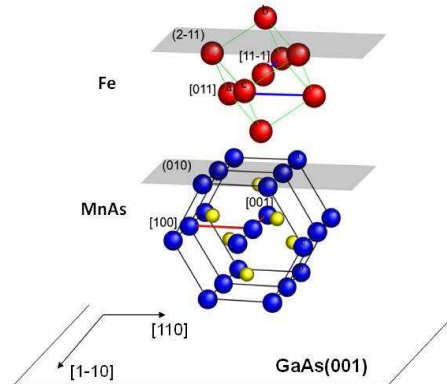
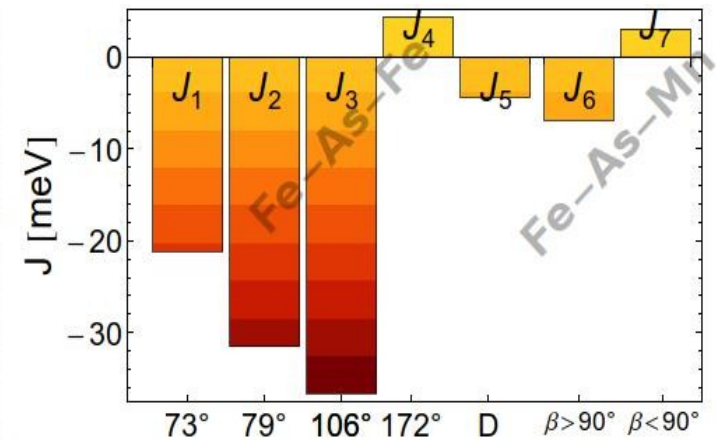
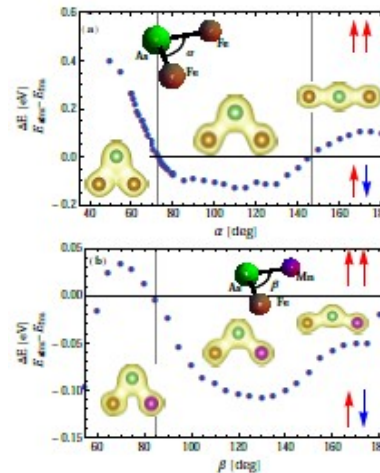
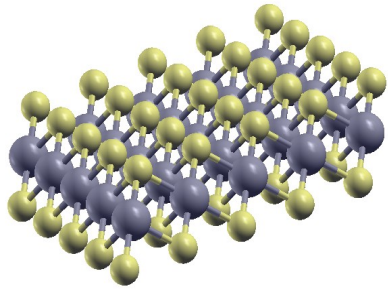


TABLE II. Table of the magnetic spin couplings sketched in Fig.5. The angle is define by Fe-As-Fe bonding.

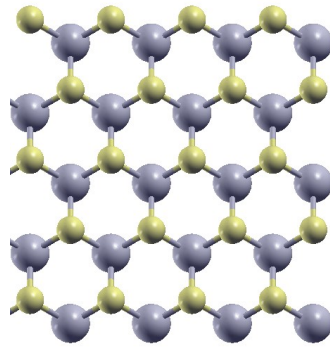
J	mediated by atoms	Angle	distance	meV/atom
J_1	As-low	$\hat{1}, \hat{2}$ $\alpha = 73^\circ$	2.89 Å	-21.2
J_2		$\hat{1}, \hat{2}$ $\alpha = 79^\circ$	2.8 Å	-31.5
J_3	As-top	$\hat{1}, \hat{3}$ $\alpha = 106^\circ$	3.73 Å	-36.7
J_4		$\hat{1}, \hat{4}$ $\alpha = 180^\circ$	4.66 Å	4.4
J_5	direct		4.72 Å	-4.3
$J_6^{F_c, Mn}$	both As	$\beta > 90^\circ$		-6.7
$J_7^{F_c, Mn}$	both As	$\beta < 90^\circ$		3.1



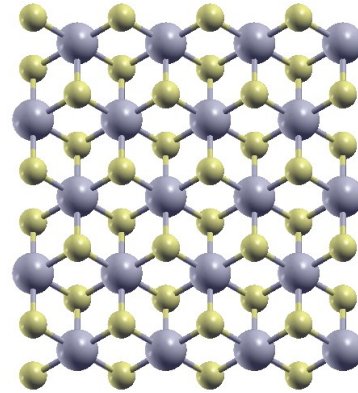
Efectos de polaridad en nanocintas de dicalcogenuros de metales de transición



Tricapa 2D



Cinta 2H

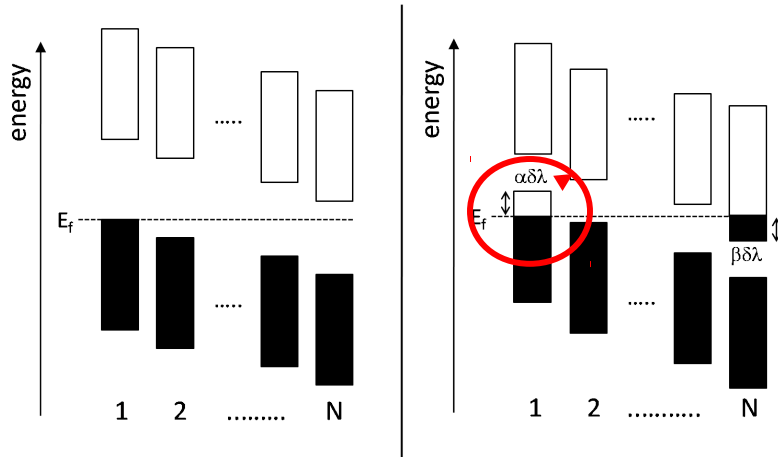


Cinta 1T

- Estructura laminar cuasi 2D
- Nanocintas cuasi 1D
- 2H polar
- 1T no polar

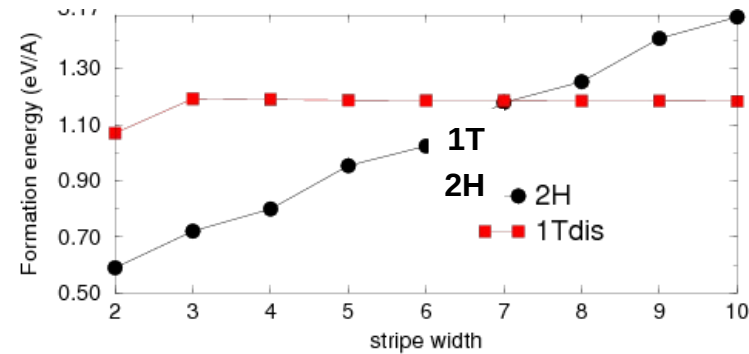


Periodicidad



Cargas de borde

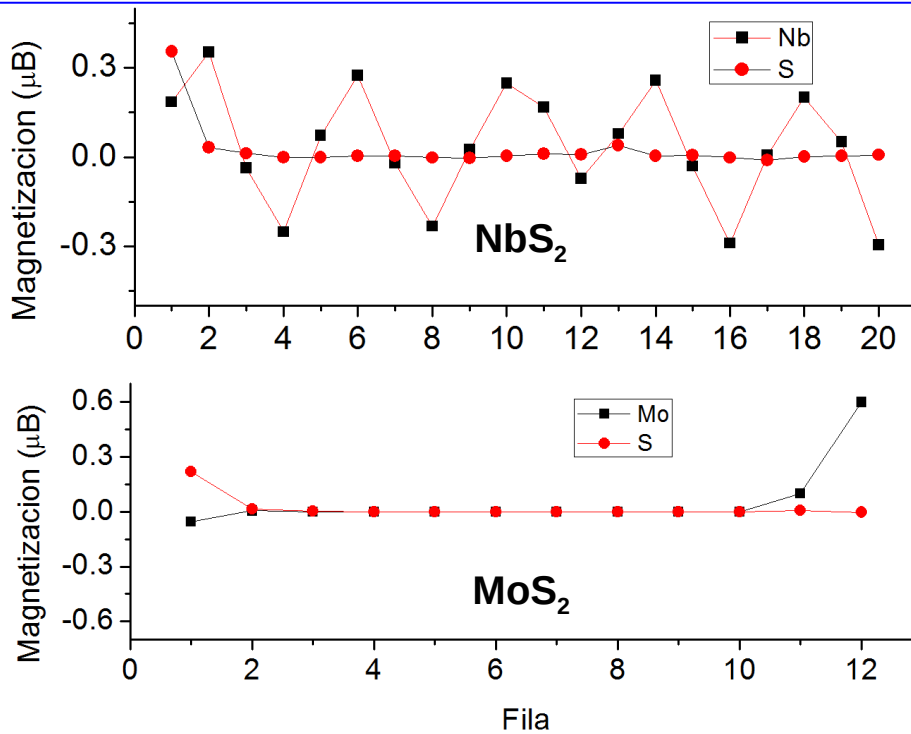
MoS₂ 2H vs. 1T



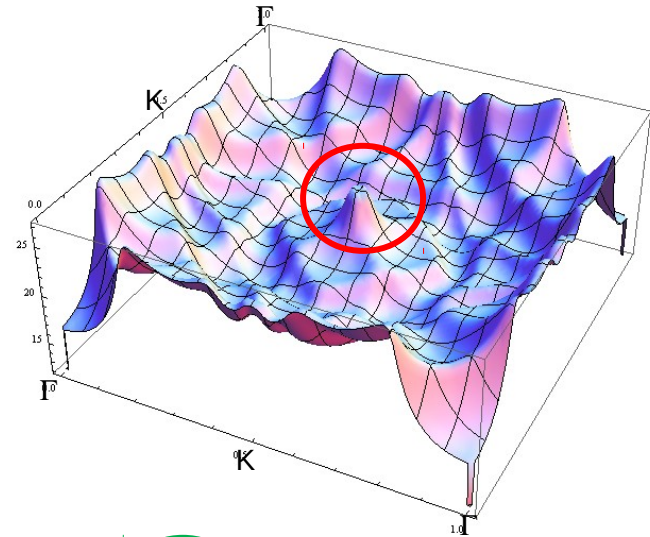
- Cruce en N=7
- Polaridad vs. estructura

Catastrofe polar: compensado vs. no compensado

Ondas de densidad de espín en dicalcogenuros de Metales de transición

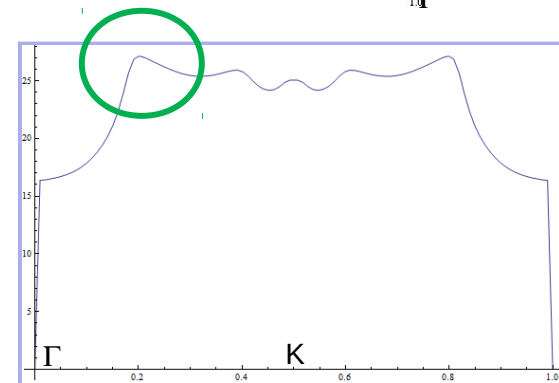


- SDW en nanocintas NbS₂ (metálico)
- Sin SDW en nanocintas MoS₂ (aislante)
- Periodo: cuatro celdas



Máximos en función de Lindhard de tricapa NbS₂:

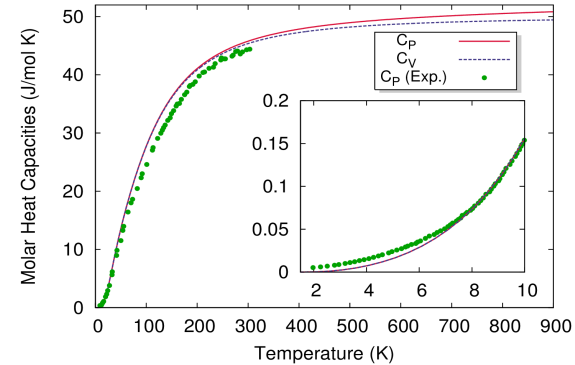
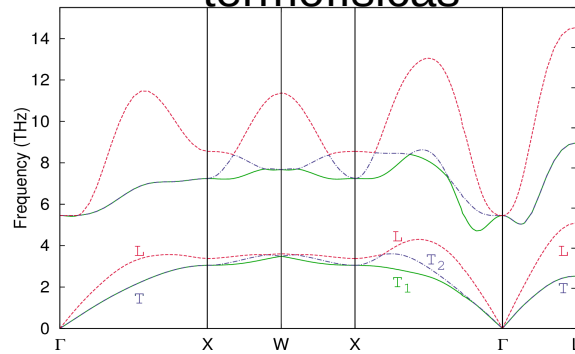
- $-\Gamma K/2$: SDW en nanocintas
- KK : borde de zona, estado ferromagnético



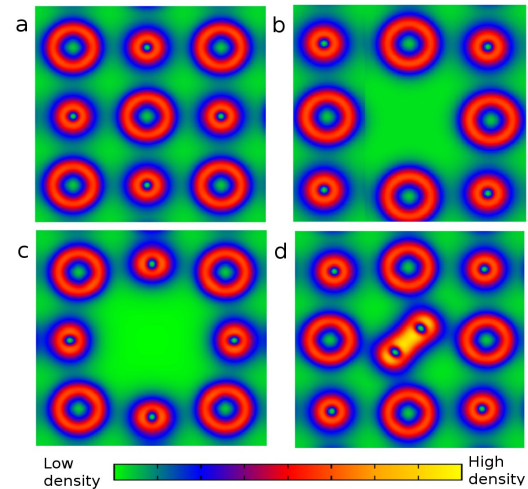
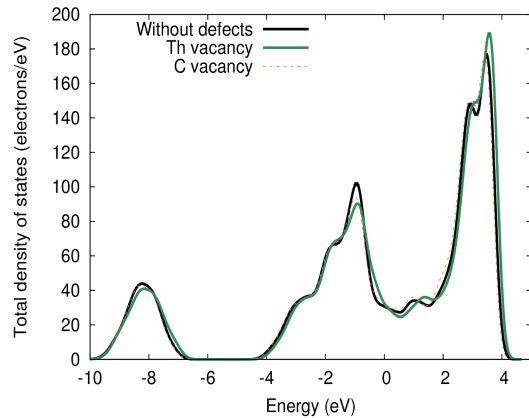
Estudio de materiales de interés nuclear

Carburo de Torio

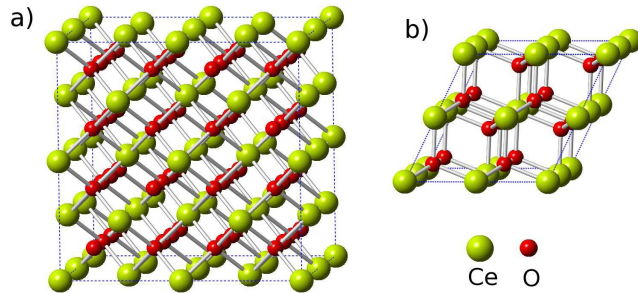
Cálculo de fonones y propiedades termofísicas



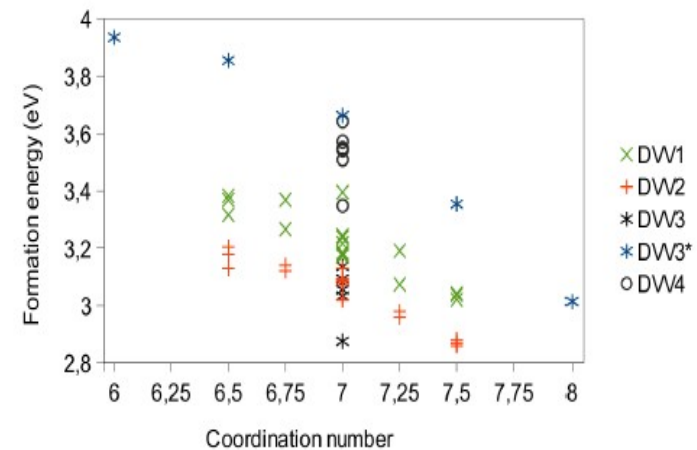
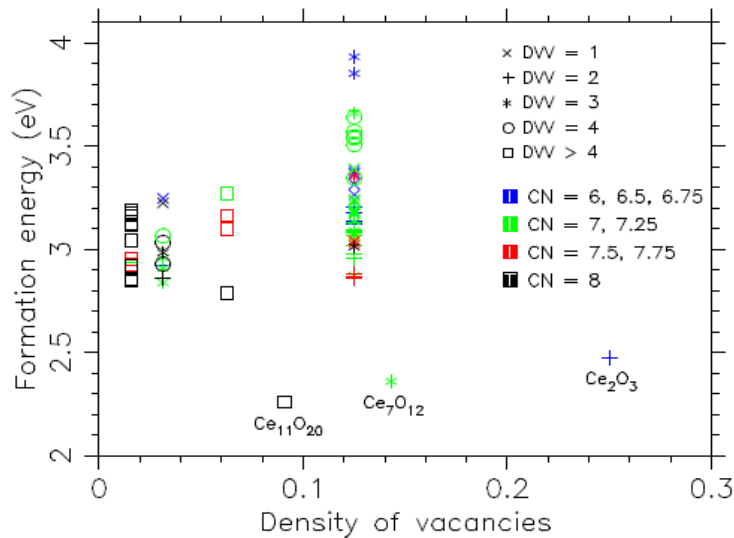
Estudio de defectos \rightarrow vacancias, intersticiales, dumbbells



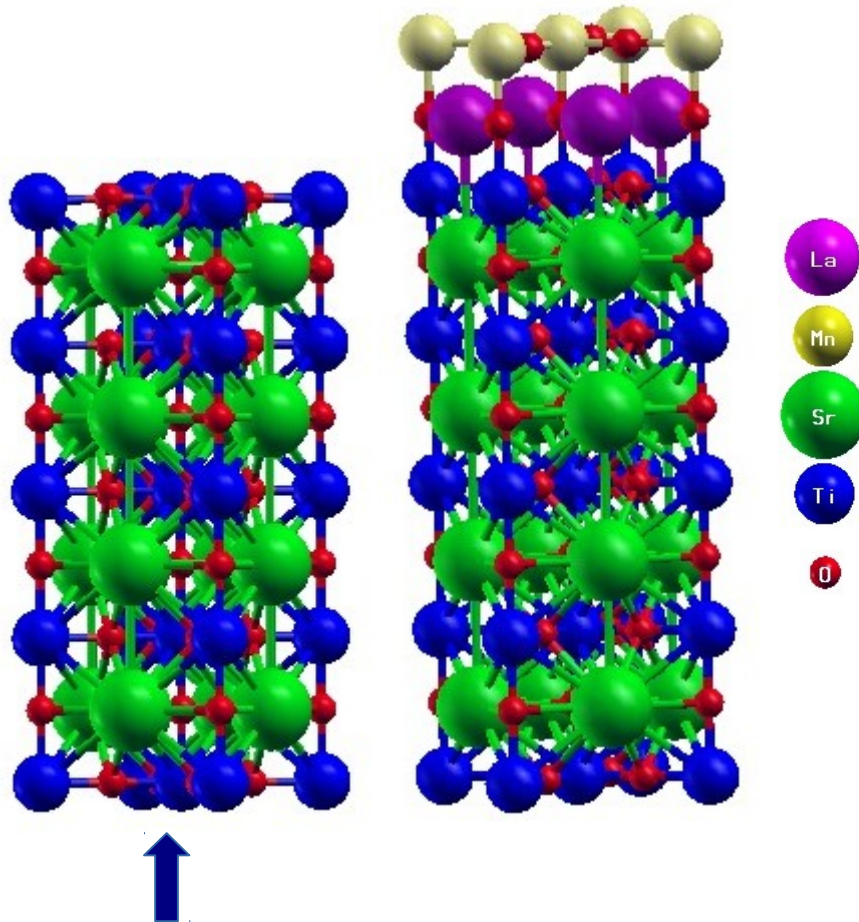
Localización de la carga y distribución de vacancias de O en CeO_2



- Estudiamos la localización de la carga liberada en ceria al crearse vacancias de oxígeno.
- Calculamos energías de formación para vacancias aisladas y para dos vacancias en una dada celda
- Hicimos cálculos para distintas concentraciones de vacancias.



Propiedades magnéticas de films delgados de $\text{LaMnO}_3/\text{SrTiO}_3$



Modelado del sustrato STO

Colaboración con el grupo de
L. Streen

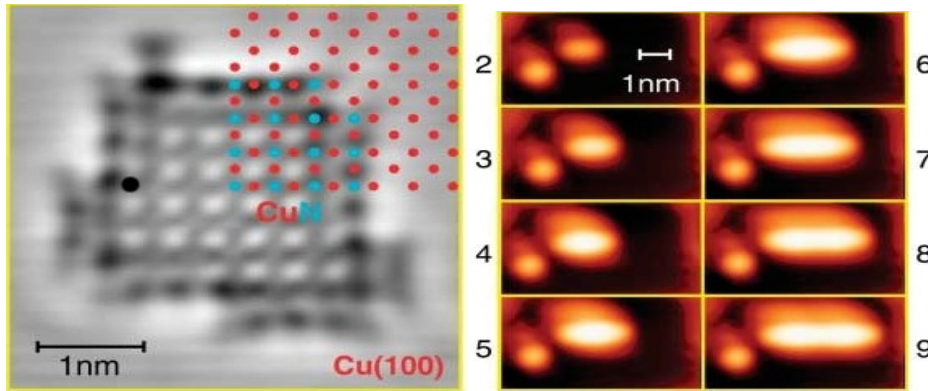


Cambio de orden magnético con
el número de capas de LMO?

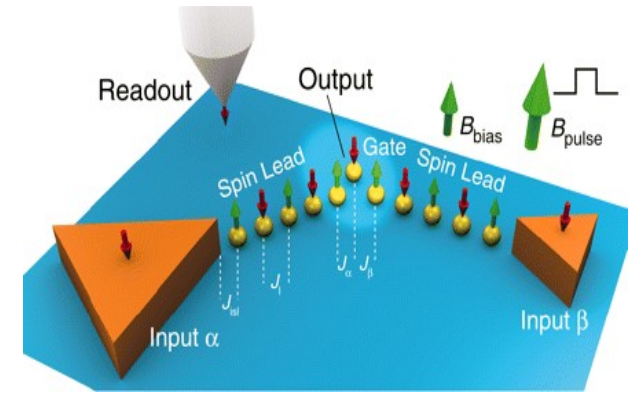
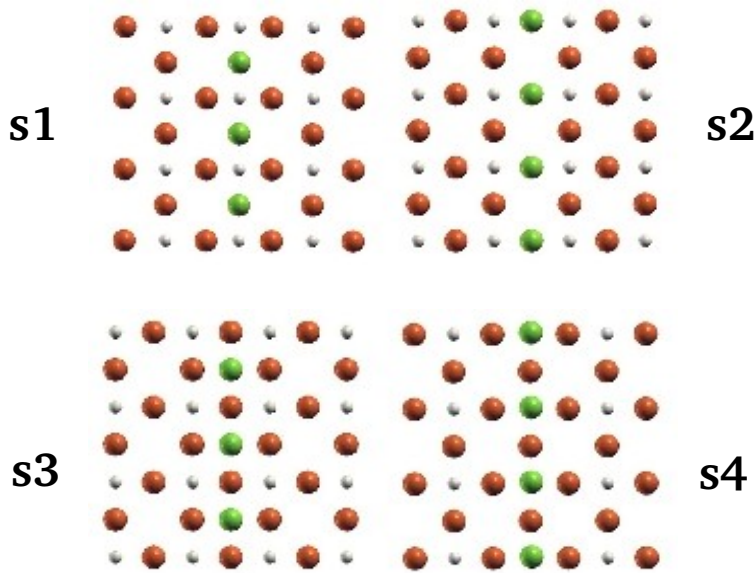


Estudiamos en forma teórica
el efecto del número de capas
de LMO en las propiedades
magnéticas del film:
strain, dimensión,
ordenamiento orbital, etc.,
considerando al sustrato
en forma explícita

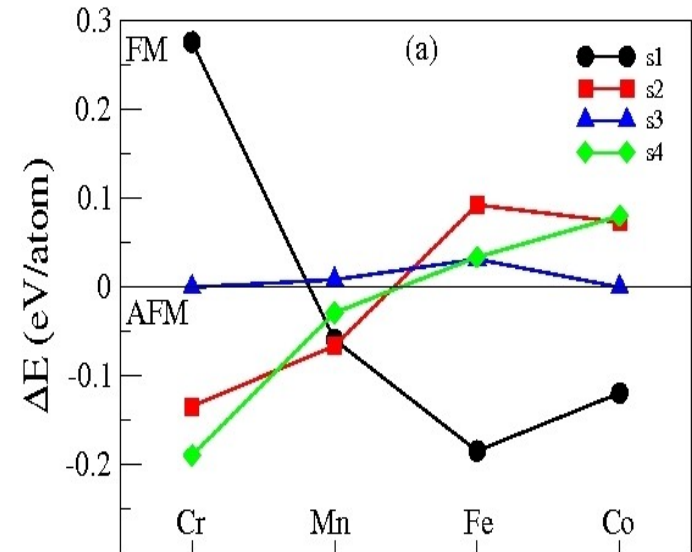
Control de interacciones magnéticas a escala atómica en superficies



Cadenas de Mn sobre sustrato covalente



Circuito lógico a través de control de espines



Enormes diferencias en el tipo de interacciones magnéticas

Gracias por vuestra amable atención

Y

éxitos COMPUMAT !!!

(creced y multiplicaos, dice la ley)