

# Com són els nous superconductors d'elevada temperatura crítica?

**Conèixer millor la naturalesa dels materials superconductors i fer aportacions que contribueixin a esbrinar l'origen del fenomen de la superconductivitat dels materials d'elevada temperatura crítica és la contribució més destacada d'un article publicat al *Journal of the American Chemical Society* (JACS), liderat pel catedràtic Francesc Illas, director de l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (UB). L'estudi està signat també per Ibério de P. R. Moreira (UB) i Jacek C. Wojdeł, becari postdoctoral Beatriu de Pinós a la UB el 2006 i 2007 i ara contractat com investigador postdoctoral a l'ICMAB-CSIC.**

■ Els superconductors són materials que a temperatures prou baixes, de fet per sota d'una temperatura anomenada temperatura crítica, transporten corrent elèctric sense resistència. Descoberta el 1911, l'aparició de la superconductivitat en alguns metalls és un dels efectes de la física de l'estat sòlid amb més ressò en els Premis Nobel de Física: H. K. Onnes (1913), descobridor d'aquest fenomen extraordinari; J. Bardeen, L. Cooper i R. Schrieffer (1972), per la Teoria BCS de la superconductivitat, que explica com es formen les parelles d'electrons (parells de Cooper) i transporten el corrent elèctric sense cap resistència.

Bastants anys més tard, J. C. Bednorz i K. A. Müller (1987) reben el premi Nobel de Física per la descoberta un any abans de superconductivitat en materials que en principi són aïllants (òxids de coure o cuprats) i, a més, troben que la temperatura crítica a què aquests cuprats esdevenen superconductors resulta ser superior a la dels superconductors convencionals. La temperatura crítica assoleix ràpidament valors prou alts (35 K o -238°C) i arriba després més enllà del punt d'ebullició del nitrogen líquid (-196°C) en alguns materials del mateix tipus. Aquests nous superconductors es coneixen usualment com a superconductors d'alta temperatura crítica o simplement cuprats HTC, de l'anglès *high Tc superconducting cuprates*.

“Si bé la teoria BCS explica la superconductivitat en els superconductors convencionals, cap teoria pot explicar bé la superconductivitat en els HTC, tot i que sembla que està fortament relacionada amb les propietats magnètiques dels materials”, explica Francesc Illas. Amb la descoberta, el 2008, d'una nova família de superconductors a alta temperatura crítica basats en ferro i arsènic (AsFe), arriba la segona revolució en l'univers de la superconductivitat i una nova oportunitat per desxifrar aquest jeroglífic, potser un dels enigmes més fascinants de la física moderna. Els nous compostos, sense coure (Cu) i amb oxigen (O), fluor (F) o arsènic (As), amplien les perspectives dels científics per resoldre aquests incògnites obertes en el món de la física de l'estat sòlid.

Però, són tan diferents les dues famílies de superconductors a alta temperatura? Per a Francesc Illas, “la principal idea del nostre treball és destacar que aquests materials no són tan diferents dels cuprats com es creia. Aquesta és una conclusió clau per unificar la visió sobre les dues famílies de materials superconductors i mostrar que les interaccions magnètiques juguen un paper clau”. Segons l'estudi, l'estructura electrònica és similar en les dues famílies de materials superconductors: en concret, l'article destaca que els compostos de ferro (Fe) i As són antiferromagnètics, i mostren una gran

frustració d'espín, és a dir, unes fortes interaccions magnètiques que dificulten la interpretació dels experiments en termes de models senzills.

Una altra innovació clau de l'article és l'ús de tècniques sofisticades d'estudi de l'estructura electrònica. Tècniques, com per exemple, els funcionals híbrids. “En els cuprats -explica Illas- les metodologies més emprades han estat les estàndards LDA (Local Density Approximation) i GGA (Generalized Gradient Approximation), que predeuen que aquests sistemes haurien de tenir un fort caràcter metàl·lic. Ara bé, en estudis experimentals, i amb compostos sense dopatge, que són les impureses que faciliten la superconductivitat, s'ha vist que els cuprats són aïllants i antiferromagnètics, però no metàl·lics. Ja el 1997, treballs del nostre grup mostraven que els funcionals híbrids predeuen correctament l'estructura electrònica dels cuprats”.

És a dir, cal abordar l'estudi d'aquest tipus de sistemes amb mètodes més acurats que els estàndard LDA i GGA per obtenir una descripció satisfactòria de la seva estructura electrònica i de les seves



**Els superconductors exclouen el camp magnètic, cosa que permet que aquest petit imant pugui flotar damunt d'un fragment de superconductor d'alta temperatura. El 1957, la teoria BCS va explicar la superconductivitat a baixa temperatura anomenada també convencional quasi 50 anys després del seu descobriment.**

propietats. Segons els experts, si s'estudia l'estructura electrònica dels nous compostos amb Fe i As amb LDA i GGA, tornen a detectar-se resultats erronis, com ja es va demostrar per als cuprats. "Aquestes tècniques –apunta Illas– no són adequades per descriure bé els sistemes fortament correlacionats (cuprats, noves famílies de superconductors, etc.), i les limitacions estan ben descrites en la literatura científica". Cal utilitzar, per tant, aproximacions més elaborades per descriure correctament l'estructura electrònica i les propietats d'aquests materials magnètics.

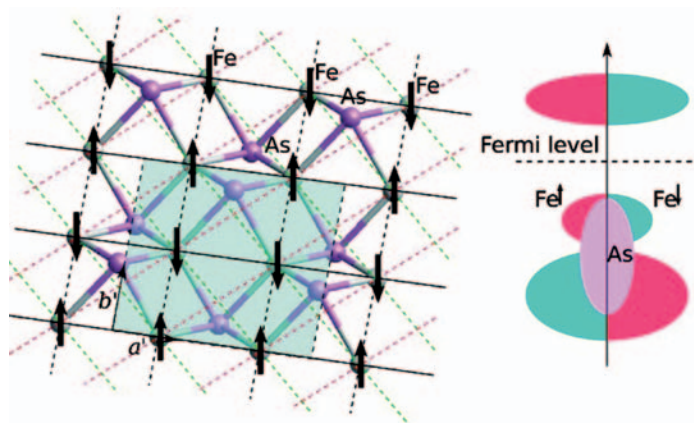
La descoberta de la superconductivitat és un dels capítols més sorprenents de la ciència moderna. Dins l'univers de la física, és un enorme avenç en el món de les tecnologies futures i els nous compostos. El gran somni, per als experts, és establir un model teòric satisfactori de la

**Ben al contrari del que es creia, l'estructura electrònica és similar en les dues famílies de materials superconductors, els cuprats i els pnics basats en ferro i arsènic**

seva estructura electrònica per poder esbrinar el mecanisme de formació de la fase superconductora per proposar la síntesi de superconductors a temperatura ambient, i tot apunta que l'objectiu no és impossible. De moment, però, la formulació més realista és conèixer millor les propietats de compostos superconductors en rangs de temperatures cada cop més altes, acotant els diferents aspectes de l'estructura electrònica dels materials que hi contribueixen, un àmbit de recerca en el qual el grup coordinat per Francesc Illas és un dels líders a escala de tot l'Estat.

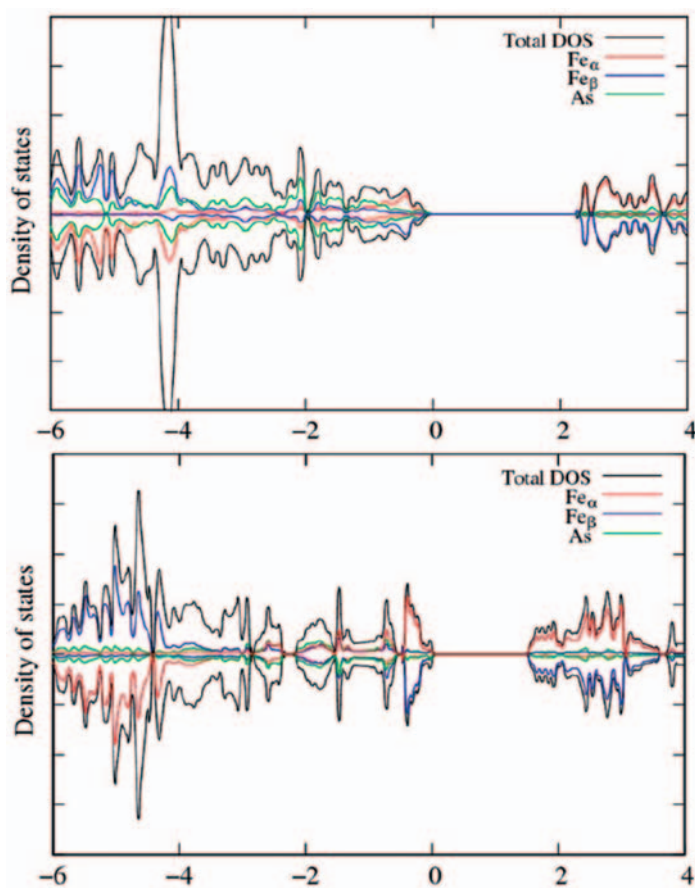
Per dur a terme aquesta recerca, el grup liderat per Illas ha usat tant els recursos de càlcul del Barcelona Supercomputing Center com del Centre de Supercomputació de Catalunya, ja que els càlculs periòdics emprant aquests funcionals híbrids poden ser especialment costosos en termes de temps de càlcul. ■

(1) J.C. WOJDEŁ, I. de P. R. MOREIRA and F. ILLAS, *J. Am. Chem. Soc.*, 131 (2009) 90



$J_1$  nearest neighbours       $J_2$  next nearest neighbours  
 FM —————                      subnet 1 - - - - -  
 AFM - - - - -                              subnet 2 - - - - -

Distribució d'espín a l'estat fonamental on es veu clarament l'aparició de cadenes horitzontals ferromagnètiques alternades, cadenes verticals antiferromagnètiques i una forta frustració d'espín entre cadenes verticals.



Densitat d'estats (DOS) total i projectada per àtom, calculada per a l'estat fonamental AF2 del LaOFeAs. La DOS del ferro es divideix formalment en posicions amb espín  $\alpha$  i  $\beta$  per a la solució AF2 (espín amunt i avall per a cada posició es mostra com a valors de DOS positius i negatius). Els càlculs han estat realitzats usant tant el funcional híbrid B3LYP i un conjunt de bases d'orbitals atòmics (Gaussianes) com el funcional híbrid HSE06 i un conjunt de bases d'ones planes. Les energies es donen referides al nivell Fermi.