

CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE  
PROGRAMMA SHORT TERM MOBILITY 2008

Proponente: Dott. Nicola Mastronardi  
c/o Istituto per le Applicazioni del Calcolo “Mauro Picone” (Bari)

Fruitore: Dott. Massimo Ladisa  
c/o Istituto di Cristallografia (Bari)

RELAZIONE FINALE

L'attività di ricerca del Fruitore del programma SHORT TERM MOBILITY 2008—CNR si è svolta nel periodo 3—24 Aprile 2008 presso l'Istituto Louis Néel del CNRS a Grenoble (Francia). Essa ha certamente consolidato una collaborazione iniziata nel 2007 con uno stage formativo del Fruitore presso la medesima Istituzione e finanziato dal programma di formazione del personale del CNR. Tale collaborazione è ulteriormente proseguita nel 2007 con un soggiorno del Fruitore presso la medesima istituzione e finanziato con il programma SHORT TERM MOBILITY 2007--CNR.

Nel periodo in esame il Fruitore ha inteso proseguire l'indagine avviata nel corso del soggiorno ultimo sulla applicabilità di vincoli cristallografici alla cosiddetta Teoria del Funzionale della Densità (evolatasi negli anni nella teoria delle funzioni di Green in stati condensati), una teoria consolidata da diversi decenni per il calcolo dell'energia totale, della densità elettronica e dei parametri di cella cristallografica, insieme al posizionamento degli atomi nella unità asimmetrica del solido cristallino. Tale studio è finalizzato alla riduzione dei tempi di esecuzione di software dedicati mediante l'implementazione di relazioni ben determinate tra gli operatori di simmetria dei gruppi cristallografici. In effetti questi software realizzano uno studio cosiddetto ab-initio delle proprietà elettroniche ed ottiche dei materiali e l'approccio utilizzato è quello della teoria dei campi al di là della singola particella effettiva: la teoria di campo a molti-corpi.

Il Fruitore ha conseguito i seguenti due obiettivi entro il termine del breve soggiorno:

- 1) ha studiato la compatibilità delle equazioni esatte di campo che regolano lo studio delle proprietà elettroniche ed ottiche di un materiale cristallino (equazioni di Hedin) con l'Elettrodinamica Quantistica che governa la fenomenologia sottostante;
- 2) ha contribuito all'interpretazione di un risultato sperimentale di recente acquisizione (spettro di fotoemissione) per un materiale ben preciso (grafene) con simmetria cristallografica appartenente al gruppo planare esagonale.

Circa il punto 1), le equazioni di Hedin vengono formulate nell'ambito della Teoria delle Funzioni di Green applicate alla Teoria Non-Relativistica a Molti-Corpi. In effetti il Fruitore aveva già dimostrato analiticamente, nel corso del soggiorno del 2007, come le medesime siano ottenibili direttamente dalla Hamiltoniana di Elettrodinamica Quantistica (fermionica) per valori nulli del 4-impulso del fotone (caso della identità di Ward). L'estensione delle medesime al caso di valori non nulli del 4-impulso del fotone (caso più generale delle equazioni di Green) è stato esplorato nel corso del breve soggiorno del 2008. Pertanto la conclusione dell'indagine di cui al punto 1) è che le simmetrie cristallografiche, introdotte ab-inizio nella Hamiltoniana della Teoria a Molti-Corpi, non sono direttamente responsabili della forma delle equazioni di Hedin ma subentrano in un secondo momento per contestualizzare la forma esplicita del vertice di interazione corrente elettromagnetica—campo elettromagnetico in un materiale cristallino ben specifico. Questo punto di analisi è cruciale dal momento che gran parte della complicazione computazionale dei software dedicati allo studio delle proprietà elettroniche ed ottiche deriva proprio dalla rottura della simmetria spazio-temporale della Hamiltoniana di

Elettrodinamica Quantistica ad opera del campo cristallino non dinamico. E' in corso la stesura di due lavori teorici sull' argomento per chiarire il ruolo svolto dal campo cristallino alla luce della deducibilità del cosiddetto sistema di equazioni di Hedin dal formalismo della Teoria di Campo a Molti-Corpi (approccio alla Schwinger--Dyson). Il ruolo della gauge-invarianza della Teoria si manifesta nella Identità di Ward-Takahashi che consente di ricavare una delle equazioni di Hedin.

Per quanto attiene al punto 2), lo studio dello spettro di fotoemissione del grafene (un foglio di grafite a simmetria esagonale) ha prodotto un diagramma di dispersione energia—impulso di quasiparticella di tipo lineare, suggerendo la possibilità di considerare le quasiparticelle di tipo “luce” (fermioni a massa nulla). La Hamiltoniana che descrive questo peculiare sistema cristallino a dimensionalità ridotta è, inaspettatamente, non relativistica e produce, in approssimazione tight—binding, una rinormalizzazione (meglio correzione) della velocità effettiva delle quasiparticelle nel materiale. Inoltre l' assenza di correzioni di massa non consente di analizzare correttamente l' eventuale apertura della gap ottica che alcuni ricercatori sperimentali sostengono di non aver misurato, contro le misure di altri gruppi sperimentali. Il Fruitore ha partecipato al calcolo ab-initio della self-energy, del plot a bande e delle funzioni spettrali di un foglio di grafene non drogato. Il calcolo è stato effettuato nell' ambito della cosiddetta approssimazione GW del sistema ab-initio delle eqq. di Hedin. Rispetto ad altri approcci, il calcolo tiene numericamente conto della intera struttura ionica ed elettronica del grafene reale. Inoltre l' interazione elettrone-elettrone, così come gli effetti di correlazione, provengono da principii primi. Sia le componenti dinamiche sia quelle non-hermitiane della self-energy sono state pienamente considerate. Rispetto all' approccio della Teoria del Funzionale della Densità Dipendente dal Tempo, in approssimazione di Densità Locale (DFT-LDA), la velocità di Fermi viene rinormalizzata ed assume valori incrementati del 17%, in miglior accordo coi dati sperimentali di magnetotrasporto. Inoltre la relazione di dispersione lineare Energia-Impulso, vicino al punto di Dirac, viene modificata dalla presenza di disuniformità (kinks), come osservato negli esperimenti di Fotoemissione Risolta in Angolo. Il calcolo, cui il Fruitore ha partecipato, mostra che tali disuniformità sono dovute ad eccitazioni di singola particella nelle transizioni inter-banda ( $\pi$ -greca  $\rightarrow$   $\pi$ -greca\*) ed ai plasmoni  $\pi$ -greca. Infine in tale approssimazione non si trova alcuna gap ottica. Tale lavoro è stato sottomesso per la pubblicazione sulla rivista Physical Review Letter nell' Aprile 2008, durante il soggiorno del Fruitore presso la struttura ospitante.

In conclusione, il programma di SHORT TERM MOBILITY 2008—CNR ha consentito una fruttuosa collaborazione tra due Istituzioni omologhe (CNR—CNRS) già avviata nel 2007. L' augurio di entrambe le parti è che possa continuare proficuamente nel futuro nell' ambito di programmi di finanziamento dedicati.

Bari, 19 Maggio 2008

In fede,

Dott. Massimo Ladisa (Fruitore)

Dott. Nicola Mastronardi (Proponente)