CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE
PROGRAMMA SHORT TERM MOBILITY 2007

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 2007—CNR si è svolta nel periodo 3—24 Settembre 2007 presso l'Istituto Louis Néel del CNRS a Grenoble (Francia). Essa ha certamente consolidato una collaborazione iniziata nel periodo Febbraio—Marzo 2007 con uno stage formativo del Fruitore presso la medesima Istituzione e finanziato dal programma di formazione del personale del CNR.

Nel periodo in esame il Fruitore ha svolto indagini sulla applicabilità di vincoli cristallografici alla cosiddetta Teoria della Densità Funzionale (evolutesi 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. Questi ultimi consentono la ripetizione dell'unità asimmetrica nello spazio del solido cristallino fino a saturarne l'occupazione spaziale.

Ad oggi i vincoli cristallografici sono stati ben implementati in software dedicati alla comunità scientifica dei soli cristallografi e l'estensione ad una comunità più ampia non è ovvia dal momento che lo studio delle proprietà elettroniche di un solido va al di là delle mere proprietà geometriche dello stesso.

Durante il periodo di soggiorno il Fruitore si è occupato giustappunto della compatibilità delle relazioni di cui sopra con lo studio delle proprietà elettroniche ed in particolare con i metodi di calcolo utilizzati nei software dedicati, già disponibili nella comunità dei fisici dello stato solido da diversi anni. In effetti questi ultimi 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 si è posto i seguenti due obiettivi da impostare entro il termine del breve soggiorno:

- 1) la compatibilità delle simmetrie cristallografiche con le equazioni esatte di campo che regolano lo studio delle proprietà elettroniche ed ottiche di un materiale cristallino (equazioni di Hedin);
- 2) l'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 ha dimostrato analiticamente 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) sarà esplorato in un futuro prossimo. Pertanto la conclusione dell'indagine preliminare 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.

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 dimostrato analiticamente come una correzione di massa possa essere ottenuta in modo consistente con la simmetria relativistica delle quasiparticelle nell' ambito di un modello fenomenologico con accoppiamento a quattro fermioni a massa nulla molto diffuso nella comunità dei fisici (Nambu—Jona-Lasinio) per la generazione dinamica di massa. Il punto delicato che integra la speculazione del Fruitore con lo studio dei vincoli cristallografici del materiale in esame, il grafene giustappunto, riguarda il calcolo della costante di accoppiamento corrente-corrente del modello di Nambu—Jona-Lasinio. Il Fruitore ha proposto che tale accoppiamento venga calcolato nell' ambito dell' approssimazione GW delle equazioni di Hedin, già implementate nel software dedicato ABINIT, di cui l' Istituzione ospitante cura lo sviluppo e la diffusione nella comunità dei fisici dello stato solido per il calcolo delle proprietà elettroniche ed ottiche dei materiali cristallini. Tale calcolo, computazionalmente gravoso, è in fase di studio da parte degli autori del software di cui sopra.

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

Bari, 27 Settembre 2007

In fede,

Dott. Massimo Ladisa (Fruitore)

Dott. Nicola Mastronardi (Proponente)