

Alcuni progetti di tesi (altre possibilmente aggiunte in futuro)

Alcuni di questi argomenti sono adatti sia a tesi triennali, sia a tesi magistrali, ovviamente differenziando la profondità dell'indagine che vogliamo condurre. Alcuni altri li vedo più adatti a una tesi soltanto magistrale.

Considerazioni generali

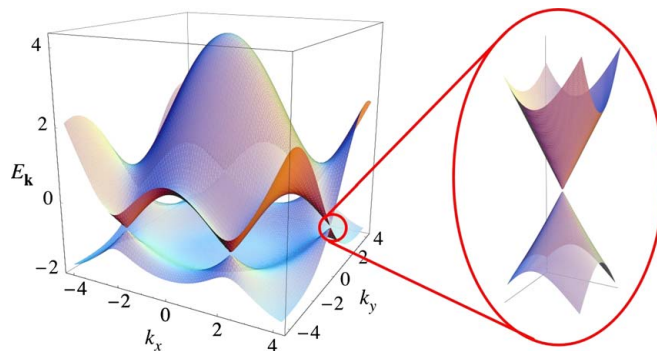
Per ciascuna tesi sono preliminari alcuni esercizi della raccolta IFM, esplicitamente indicati. Sono anche preliminari molti degli esercizi della parte 1 (Algebra lineare), *non indicati* salvo eccezioni.

Nel testo successivo le citazioni [Note, x.x] si riferiscono ad una sezione delle Note del mio corso GTSE, disponibili in rete. Il simbolo ϕ_0 indica il quanto di flusso [Note, 1.6.5]; mentre $\phi = B \times \text{area}$ è il flusso di B sul sistema 2d.

Molte di queste tesi richiedono simulazioni mediante una semplice Hamiltoniana LCAO (a.k.a. tight-binding) alla Hückel; le simulazioni possono essere OBC oppure PBC. L'acronimo OBC (open boundary conditions) significa un sistema finito, con orbitali a quadrato integrabile (se ordinato si chiama cristallite in 3d e "flake" in 2d). L'acronimo PBC (periodic boundary conditions) si riferisce invece a un sistema senza frontiera (toroidale); gli orbitali nel caso cristallino sono funzioni di Bloch. Si tratta di implementare in fortran queste Hamiltoniane tight-binding, di diagonalizzare matrici (sfruttando codici standard), e di presentare in forma anche grafica i risultati delle simulazioni.

L'algebra del metodo di Hückel è identica a quella della dinamica reticolare in meccanica classica, con l'ovvia differenza che gli autovalori di Hückel sono le energie, quelli della dinamica reticolare sono il *quadrato* delle frequenze.

Alcuni esercizi riguardano il grafene e il suo analogo ionico: nitrato di boro (BN) esagonale. In questi materiali molte proprietà elettroniche si possono calcolare e capire con un modello tight binding per i soli orbitali π in 2d—ovvero il solito Hückel a primi vicini—solubile analiticamente: vedi e.g. Sec. I.A in Ref. [1]).



Il grafene non ha un gap: la banda di conduzione tocca la banda di valenza nei “punti di Dirac” (due punti non equivalenti nella zona di Brillouin, BZ). Il BN invece è un vero isolante, con un gap finito. Nel gergo, si parla di quasiparticelle di Dirac “senza massa” (grafene) e “con massa” (BN). Nelle simulazioni tight binding possiamo variare la ionicità a piacimento.

1 Polarizzazione topologica in un polimero centro-simmetrico

Esercizi: 1.19, 3.17, 3.18, 4.32, 4.50, 4.52, 4.53, 4.56

La teoria moderna della polarizzazione è basata su proprietà geometriche e topologiche [Note, Cap. 5]. In un solido cristallino 1d (polimero lineare) la polarizzazione ha le dimensioni di una pura carica (dipolo per unità di lunghezza), e coincide con la carica agli estremi del solido. Se il solido 1d è isolante e centrosimmetrico (nel bulk) la polarizzazione diventa topologica a due valori: può solo essere 0 modulo e (caso pari), oppure $e/2$ modulo e (caso dispari) [Note, 5.3.4 e 5.5].

La quantizzazione topologica appare solo nel limite di lunghezza infinita: vedi [Note, Fig. 5.5] dove si mostra un caso pari. Si propone di studiare il tipo di convergenza, in funzione della ionicità e del gap, per catene finite dispari, con la stessa Hamiltoniana dell’esercizio 4.50.

Poiché la quantizzazione ha anche un aspetto Wannieristico [2], potremmo anche studiare le corrispondenti funzioni di Wannier mediante proiezione e ortonormalizzazione [3].

Altro argomento che potremmo studiare è quanto la quantizzazione sia robusta in presenza di disordine.

2 Cariche di vertice in sistemi 2d

Esercizi: 3.17, 3.18, 4.32, 4.52, 4.53, 4.56

La teoria moderna della polarizzazione è basata su proprietà geometriche e topologiche [Note, Ch. 5]. In un solido cristallino 1d (polimero lineare) la polarizzazione ha le dimensioni di una pura carica (dipolo per unità di lunghezza), e coincide con la carica agli estremi del solido. Se il solido 1d è isolante e centrosimmetrico (nel bulk) la polarizzazione diventa topologica a due valori: può solo essere 0 modulo e , oppure $e/2$ modulo e [Note, 5.3.4 e 5.5]. In 2d il quadrupolo per unità di superficie ha anch’esso le dimensioni di una pura carica. Un recente importante lavoro ha proposto, nel caso 2d, il nuovo concetto di polarizzazione di bordo e cariche di vertice [4]. Alla luce di esso congetturo che il quadrupolo per unità di superficie (equivalentemente la carica di vertice) possa essere topologico in solidi 2d di alta simmetria.

Si tratta di studiare il problema con una Hamiltoniana alla Hückel. Con simulazioni in OBC senza affrontare la parte Berryologica (tesi triennale) oppure anche in PBC e studiando anche la Berryologia del problema, secondo Ref. [4] (tesi magistrale).

Nota aggiunta nel Marzo 2016. Era talmente ovvio e semplice che qualcuno lo sta già facendo: <http://meetings.aps.org/Meeting/MAR16/Session/L28.10>. Congetturo tuttavia che la generalizzazione all'ottupolo in 3d sia sbagliata, ma cercare di dimostrarlo mi pare macchinoso.

3 Magnetizzazione di un nastro

Esercizi: 3.18, 3.19, 4.3, 4.58, 4.59, 4.60

La magnetizzazione orbitale ha una definizione banale nei libri di elettromagnetismo, ma essa si applica solo ad un sistema finito in OBC (molecola, cluster, cristallite, flake). Il problema della magnetizzazione orbitale in PBC è stato risolto solo nel 2005-06, e un'importante ulteriore progresso è stato fatto nel 2013 [Note, Ch. 8]. La formula analitica per un nastro (OBC lungo x , PBC lungo y) non è nota ma mi pare facilmente ipotizzabile. Si tratta di verificarla analiticamente e validarla numericamente al solito con una adeguata Hamiltoniana alla Hückel. Si tratta anche di confrontare con l'approccio dei chimici teorici (ring currents) [5, 6, 7] per un nastro di grafene e BN.

4 Funzioni di Wannier in grafene & BN

Esercizi: 1.19, 4.2, 4.3, 4.45, 4.53, 4.56

In un sistema cristallino le autofunzioni di un'Hamiltoniana di campo medio sono funzioni di Bloch, estese a tutto il solido. Se il sistema è isolante, possiamo costruire una trasformazione unitaria degli stati occupati che li localizza e che ha molte proprietà utili. Gli stati trasformati si chiamano funzioni di Wannier (WFs). Da oltre 15 anni, a seguito di un articolo di successo di Marzari (nostro alunno) e Vanderbilt, le WFs sono molto popolari. Articolo di rassegna molto completo in Ref. [3]. Negli isolanti le WFs si possono localizzare esponenzialmente.

Il grafene non è un isolante, tuttavia la superficie di Fermi è di misura nulla e gli stati occupati corrispondono a una banda intera, su tutta la zona di Brillouin. Possiamo dunque costruire le trasformazioni unitarie di cui sopra, limitandoci alla banda π . Ci aspettiamo che l'unica WF sia localizzata, ma non esponenzialmente. Sarebbe stato provato (con metodologie di fisica matematica a me incomprensibili) che le WFs del grafene sono localizzate in legge di potenza [8].

Oggetto di questa tesi è lo studio della localizzazione delle WFs nel grafene e nel BN (che è un isolante) mediante simulazioni tight-binding. Propongo di calcolare le WFs mediante proiezione e ortonormalizzazione [3].

Una questione interessante riguarda dove è centrata la WF. Nel BN è ovvio aspettarsi che sia sull'anione. Ma quando il gap si chiude il centro potrebbe essere "bistabile" (su uno dei due siti equivalenti), oppure saltare sul centro dell'esagono.

5 Distribuzione dei livelli di Landau (i)

Esercizi: 4.39, 4.47, 4.48, 4.58, 4.59,

Per un elettrone libero (potenziale piatto) in 2d la densità degli stati $\mathcal{D}_0(\epsilon)$ è costante; in presenza di campo B lo spettro diventa discreto: $\epsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega_c$, con $\omega_c \propto B$. Nel grafene nella regione vicino al punto di Dirac invece (vedi figura) si ha $\mathcal{D}_0(\epsilon) \propto \epsilon$; in presenza di campo B lo spettro diventa pure discreto, ma con spettro: $\epsilon_n = \pm\sqrt{n}\hbar\omega_c$, e con $\omega_c \propto \sqrt{B}$ [1].

È facile verificare che in entrambi i casi di cui sopra vale l'identità

$$\int_{\epsilon_n}^{\epsilon_{n+1}} d\epsilon \mathcal{D}_0(\epsilon) = \frac{\phi}{\phi_0}, \quad (1)$$

dove ϕ è il flusso di B , e $\epsilon_n, \epsilon_{n+1}$ sono due livelli di Landau contigui. Il significato semiclassico di Eq. (1) è abbastanza ovvio: la misura dello spazio delle fasi si conserva all'accensione del campo B (la degenerazione di ogni livello di Landau nei casi semplici è ϕ/ϕ_0). Si noti anche che la quantizzazione semiclassica (alla Bohr-Sommerfeld) porge spettri un po' diversi: $\epsilon_n = n\hbar\omega_c$ in potenziale piatto, $\epsilon_n = \pm\sqrt{n+1/2}\hbar\omega_c$ in grafene vicino al punto di Dirac. Anche questi spettri soddisfano Eq. (1).

Vogliamo esplorare Eq. (1) nel caso di un potenziale periodico semplice (al solito, alla Hückel), e quindi con $\mathcal{D}_0(\epsilon)$ di forma più generica. Si tratta di fare simulazioni su supercelle a flussi (per cella elementare) commensurati. Per esempio con una supercella 8×8 si possono studiare i valori $\phi/\phi_0 = 1/64, 1/32, 1/16, \dots$

Si prevede di usare un approccio semplificato, trascurando complicazioni esotiche dovute alla farfalla di Hofstadter (vedi sotto).

6 Distribuzione dei livelli di Landau (ii)

Esercizi: 4.39, 4.45, 4.47, 4.48, 4.58, 4.59,

Si propone uno studio analogo al precedente, ma per il grafene, dove ci sono complicazioni varie.

I risultati di una simulazione del tipo di quelle proposte sono pubblicati in Ref. [9], Fig. 1(a), in blu. I valori sono $\phi/\phi_0 = 1/48$, e la supercella è 48×96 . Vicino alla singolarità di $\mathcal{D}_0(\epsilon)$ (detta singolarità di van Hove, Fig. 15 in Ref. [1]) accadono cose strane; vorremmo vederci più chiaro, anche alla luce di Eq. (1).

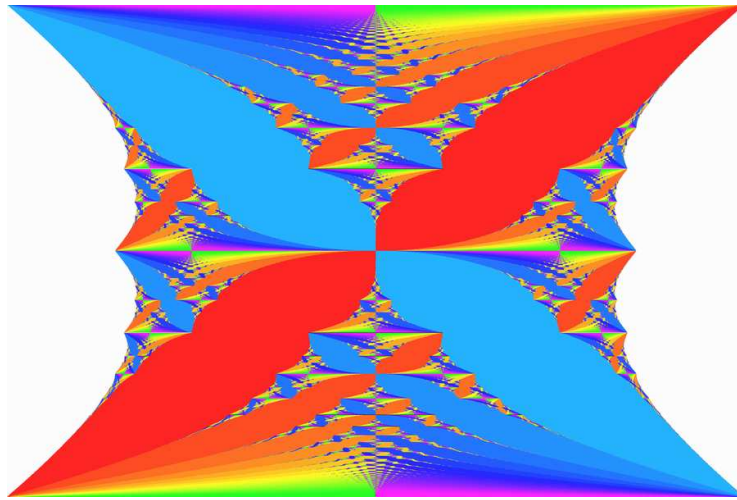
Anche qui, comunque, speriamo di poter trascurare complicazioni esotiche dovute alla farfalla di Hofstadter (vedi sotto).

7 Farfalla di Hofstadter

Esercizi: 4.50, 4.51, 4.52, 4.53, 4.58, 4.59

Lo spettro di una Hamiltoniana periodica in campo magnetico assume la forma frattale famosissima, detta farfalla di Hofstadter (ved. Wikipedia, e anche <http://demonstrations.wolfram.com/HofstadtersQuantumMechanicalButterfly/>).

Tale spettro si ottiene risolvendo un'equazione molto semplice, detta Diofantina. In rete si trova pure software chiavi in mano (Mathematica & Matlab) che lo produce.



Energia di Fermi in ascissa, ϕ/ϕ_0 in ordinata

Nella geometria di un nastro e nella gauge di Landau, il problema si riduce ad una Hamiltoniana alla Hückel 1d a molte bande. Per ogni assegnata larghezza del nastro lo spettro è analitico. Si tratta di studiare come la larghezza finita del nastro regolarizza lo spettro frattale.

Quanto sopra si riferisce ad una semplice tesi triennale; per una tesi magistrale possiamo considerare versioni più complicate ed avanzate. Si veda per esempio Ref. [10].

Riferimenti bibliografici

- [1] A. H. Castro Neto *et al.*, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [2] K. N. Kudin, R. Car, and R. Resta, J. Chem. Phys. **127**, 194902 (2007).
- [3] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, Rev. Mod. Phys. **84**, 1419 (2012).
- [4] Y. Zhou, K.M. Rabe, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B (RC) **92**, 041102 (2015).
- [5] J. A. Pople, Mol. Phys. **1**, 175 (1958).
- [6] R. McWeeny, , Mol. Phys. **1**, 311 (1958).
- [7] T. K. Dickens and R. B. Mallion, J. Phys. Chem. A **118**, 3688 (2014).
- [8] D. Monaco and G. Panati, J. Stat. Phys. **155**, 1027 (2014).
- [9] D. N. Sheng, Z. Y. Weng, L. Sheng, and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **97**, 036808 (2006).

[10] A. Lau, C. Ortix, and J. van den Brink, Phys. Rev. Lett. **115**, 216805 (2015).