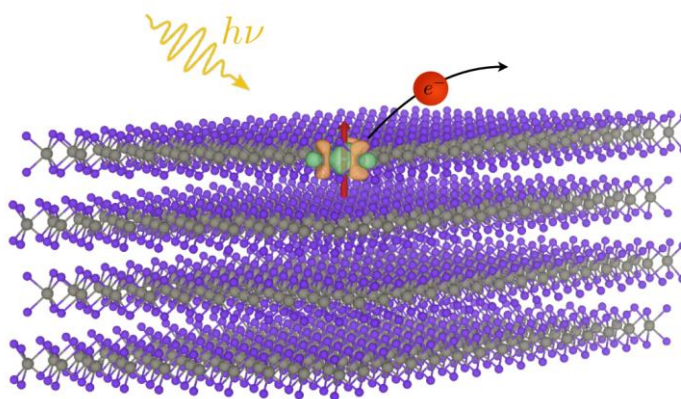


COMUNICATO STAMPA

## Un cambio di paradigma nel calcolo delle proprietà spettrali e ottiche dei semiconduttori

Un nuovo approccio permette di calcolare le strutture a bande dei semiconduttori in modo semplice e a basso costo computazionale. La ricerca è stata pubblicata su *Physical Review Research*



Trieste, 24 luglio 2024

Calcoli accurati e predittivi delle proprietà spettrali e ottiche dei materiali, come il gap di banda dei semiconduttori, sono fondamentali per comprendere, scoprire e progettare materiali per innumerevoli applicazioni nei campi dell'elettronica, dell'accumulo e conservazione dell'energia e della fotonica.

Nonostante i notevoli progressi teorici e la crescita esponenziale della potenza di calcolo avvenuta negli ultimi cinquant'anni, queste simulazioni restano però una sfida sotto molti aspetti. I metodi già consolidati, basati sui diagrammi di Feynman, sono limitati dalla loro complessità e dal costo computazionale. Inoltre, spesso non tengono conto dello spin nel trattare le interazioni tra gli elettroni nei materiali. Ciò è particolarmente rilevante se si considera l'accoppiamento spin-orbita, un effetto relativistico che è forte in presenza di elementi chimici pesanti e che spesso gioca un ruolo importante in applicazioni scientifiche o tecnologiche all'avanguardia.

In un nuovo articolo appena pubblicato sulla rivista *Physical Review Research*, Antimo Marrazzo della Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati di Trieste, Italia, e Nicola Colonna del Paul Scherrer Institute di Villigen, Svizzera, propongono un cambio di paradigma. Lo fanno introducendo un nuovo approccio funzionale che permette di calcolare le strutture a bande dei semiconduttori in

modo semplice e a basso costo computazionale, anche in presenza di accoppiamento spin-orbita o configurazioni magnetiche complesse. Questo sviluppo renderà lo screening computazionale dei database di materiali molto più efficiente e accurato e potrà permettere di simulare materiali complessi in condizioni più realistiche, come in presenza di difetti o tenendo conto di effetti dovuti alla temperatura.

Negli ultimi decenni, fisici, chimici e scienziati dei materiali hanno fatto enormi progressi nella capacità di simulare, spiegare e prevedere le proprietà dei materiali utilizzando strumenti computazionali che si basano sulle leggi fondamentali della meccanica quantistica. Ci sono tuttavia dei punti ancora da esplorare: uno di questi riguarda il calcolo delle proprietà spettrali di alcuni semiconduttori.

Il metodo principale per le simulazioni dei materiali oggi utilizzato, la teoria del funzionale della densità (DFT), può prevedere efficacemente le proprietà di molti materiali nel loro stato fondamentale, che è lo stato stabile al livello di energia più basso possibile. Tuttavia, non consente di accedere alle proprietà spettrali, come il modo in cui gli elettroni di un materiale interagiscono con la luce (ossia con i fotoni). Esistono altre teorie che possono risolvere questo problema, come le funzioni di Green e la teoria delle perturbazioni a molti corpi, spesso basate sui cosiddetti diagrammi di Feynman. Tuttavia, sono molto complesse e spesso non trattano in modo coerente lo spin, che è una proprietà fondamentale delle particelle e degli atomi, particolarmente rilevante per il comportamento magnetico.

"Gestire i gradi di libertà dello spin è difficile a livello teorico e molto costoso dal punto di vista computazionale" affermano Marrazzo e Colonna. Le limitazioni dei metodi attuali diventano particolarmente rilevanti per certi materiali che hanno un forte accoppiamento spin-orbita, come molti semiconduttori. Si tratta di un effetto relativistico particolarmente evidente in presenza di elementi chimici pesanti che spesso giocano un ruolo importante in applicazioni scientifiche o tecnologiche all'avanguardia.

In un nuovo articolo appena pubblicato su *Physical Review Research*, Marrazzo e Colonna propongono un cambio di paradigma introducendo un nuovo approccio che permette di calcolare le strutture a bande dei semiconduttori in modo semplice e a basso costo computazionale, anche in presenza di accoppiamento spin-orbita o configurazioni magnetiche complesse. La struttura a bande è una quantità fondamentale che ha un ruolo chiave nel descrivere molte proprietà dei semiconduttori, che vanno dall'assorbimento della luce al trasporto elettronico, ed è una proprietà ed uno strumento fondamentale della fisica dei semiconduttori.

Il lavoro dei due scienziati ha riguardato i funzionali di tipo Koopmans, dove l'idea chiave è passare da una teoria funzionale della sola densità elettronica totale (come la DFT) ad una teoria funzionale delle molteplici densità orbitali (tante quante il numero di elettroni), imponendo che l'energia che deriva dalla teoria vari linearmente se aggiungiamo o rimuoviamo elettroni dal sistema. Finora, la teoria non è stata in grado di gestire materiali con forte accoppiamento spin-orbita o con spin che non sono tutti allineati nella stessa direzione, e i due autori l'hanno ampliata a questi casi particolarmente rilevanti. "Mentre la DFT ed i funzionali Koopmans si basano rispettivamente sulla densità totale degli elettroni e sulla densità orbitale di ciascun elettrone, qui abbiamo aggiunto anche la densità degli spin, o la densità della magnetizzazione dello spin", affermano. Il risultato è un calcolo che dipende da un numero significativamente inferiore di variabili rispetto alle funzioni di Green ed ai relativi metodi all'avanguardia tipicamente usati, e quindi più gestibile.

"Quando abbiamo iniziato il progetto, il nostro obiettivo era essere in grado di simulare le strutture a bande (e le proprietà spettrali e ottiche in generale) in materiali in cui gli effetti relativistici sono forti. Quindi per arrivarci abbiamo iniziato a sviluppare una teoria di densità orbitali non collineare e successivamente abbiamo implementato questo nuovo metodo nel software scientifico Quantum ESPRESSO", afferma Antimo Marrazzo, primo autore del lavoro. "Nel fare questo, in realtà abbiamo finito per scoprire e comprendere un aspetto più fondamentale e generale della struttura elettronica: includere lo spin nell'interazione efficace tra gli elettroni in un materiale è essenziale per descrivere accuratamente le sue proprietà spettrali anche in sistemi in cui l'accoppiamento spin-orbita è debole o non c'è magnetismo affatto, come nel silicio".

"L'importanza cruciale del nostro approccio", continua Marrazzo, "è che include interazioni ed effetti di screening che dipendono dallo spin, i quali mancano o sono piuttosto complessi da includere negli approcci concorrenti, mentre emergono in maniera molto naturale nel nostro metodo basato su questi funzionali orbitali non collineari".

Il nuovo metodo computazionale è stato validato su alcuni materiali ben studiati come l'arseniuro di gallio, un semiconduttore con molte applicazioni conosciute, e altri sistemi caratterizzati più recentemente come il CsPbBr<sub>3</sub>, un membro della famiglia delle perovskiti, che sono ottime candidate per applicazioni nelle celle solari; il diseleniuro di tungsteno (WSe<sub>2</sub>), che è interessante per il suo forte accoppiamento spin-orbita e anche perché può essere esfoliato in monostrati bidimensionali, e CrI<sub>3</sub> che è ferromagnetico ed ha un forte accoppiamento spin-orbita.

I risultati dei calcoli si sono dimostrati in ottimo accordo con altre teorie ben consolidate ma più costose e difficili da usare (come la teoria delle perturbazioni a molti corpi) e con gli esperimenti.

Il metodo è stato sviluppato e reso disponibile in Quantum ESPRESSO, una suite integrata di codici informatici open-source per calcoli di struttura elettronica e modellazione dei materiali su scala nanometrica. Quantum ESPRESSO è un'iniziativa aperta, condotta in collaborazione con molti gruppi a livello mondiale e coordinata dalla Quantum ESPRESSO Foundation che include la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), il Centro Internazionale di Fisica Teorica Abdus Salam (ICTP), il Centro Nazionale di Supercalcolo CINECA, il Politecnico Federale di Losanna (EPFL), l'Oden Institute for Computational Engineering and Sciences presso l'Università del Texas ad Austin, in partnership con il Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR) italiano. "Trieste, e la SISSA in particolare, ha una tradizione molto forte e un ruolo leader a livello mondiale nelle simulazioni della struttura elettronica", afferma Marrazzo. "E questo è vero soprattutto per i metodi da principi primi (ab initio), che non richiedono input sperimentali ma si basano invece sulle equazioni fondamentali della meccanica quantistica, dell'elettromagnetismo e della relatività speciale, permettendo così di prevedere proprietà complesse dei materiali con i computer". "Le interazioni con i principali sviluppatori di Quantum ESPRESSO e altri colleghi qui a Trieste, sia alla SISSA che alla Quantum ESPRESSO Foundation, sono state molto importanti per questo lavoro", afferma Marrazzo, "così come il supporto del PNRR e delle istituzioni locali, nazionali ed europee, come la SISSA, l'Università di Trieste e la fondazione ICSC che gestisce il Centro Nazionale di Ricerca in High Performance Computing (HPC), Big Data e Quantum Computing".

Il lavoro è stato finanziato dall'Unione Europea–NextGenerationEU, attraverso l'ICSC Centro Nazionale HPC ed il Progetto PRIN italiano "Controllo elettrico simultaneo della polarizzazione di spin e valle nei materiali magnetici van der Waals" e anche dalla Regione Friuli-Venezia Giulia attraverso il programma Microgrant 2023 dell'Università di Trieste.

---

**LINK UTILI**

[Articolo completo](#)

**IMMAGINE**

Crediti: Antimo Marrazzo, Nicola Colonna

**SISSA**

Scuola Internazionale  
Superiore di Studi Avanzati  
Via Bonomea 265, Trieste  
**W** [www.sissa.it](http://www.sissa.it)

**Facebook, Twitter**  
[@SISSAschool](#)

**CONTATTI**

**Nico Pitrelli**  
**M** [pitrelli@sissa.it](mailto:pitrelli@sissa.it)  
**T** +39 3391337950

**Donato Ramani**

**M** [ramani@sissa.it](mailto:ramani@sissa.it)  
**T** +39 342 80 22237