

A1 Titolo dell'attività di ricerca

Modelli e Teorie per la Fisica dello Stato Solido

A2 Responsabile

(aggiungere eventuale referente del Dipartimento se il Responsabile non è un afferente ad esso)

Responsabile: Vittorio Cataudella

A3 Personale Dipartimento di Fisica (Professori e Ricercatori)

Prof. Ordinari:

Prof. Associati: Vittorio Cataudella, Giulio De Filippis, Domenico Ninno, Arturo Tagliacozzo

Ricercatori universitari: Carmine Antonio Perroni

RTDA:

RTDB:

A4 Collaborazioni con altri enti

CNR-SPIN, INFN

A5 Personale strutturato ricercatore o tecnologo altri enti convenzionati

Giovanni Cantele, Procolo Lucignano

A6 Altro personale di ricerca (Assegnisti, Borsisti)

Assegnisti:

Borsisti Post-doc:

Borsisti: Gabriele Campagnano

A7 Dottorandi di Ricerca

Paolino Iorio (2014-2016), Loris Maria Cangemi (2017, ...)

B1 Breve descrizione della linea di ricerca

(max 1000 caratteri)

Il gruppo è impegnato nello studio di materiali e dispositivi innovativi che presentano interessanti opportunità applicative. L'approccio scientifico comprende studi a "principi primi" e lo sviluppo di modelli per il calcolo di proprietà elettroniche, di trasporto e di risposta alla radiazione elettromagnetica. I sistemi studiati sono cristalli organici, isolanti topologici, grafene e altri materiali bidimensionali di ultima generazione, ossidi a forte correlazione elettronica, sistemi superconduttivi ibridi, interfacce complesse, giunzioni molecolari ed eterogiunzioni.

L'enfasi della ricerca è sia su questioni fondamentali sia su problematiche di impatto tecnologico. Tra le prime citiamo l'emergenza di fermioni di Majorana o Dirac come modi di bassa energia in sistemi a stato solido e l'individuazione del meccanismo alla base della superconduttività ad alta temperatura critica.

L'ambito applicativo riguarda il design e l'ottimizzazione di materiali per la generazione e la conversione di energia, quali giunzioni molecolari, transistor organici ed interfacce ibride.

B2 Descrizione attività svolta nel triennio 2014-2016

(max 2000 caratteri)

Con metodi di calcolo DFT abbiamo condotto uno studio sistematico delle proprietà elettroniche e delle barriere di Schottky alle interfacce tra lo ZnO e alcuni metalli (Ag, Al, Pd, Pt, Au, Ir e Zr). Abbiamo mostrato che la 'chimica' dell'interfaccia, cioè la natura dei legami e la ricostruzione superficiale, gioca un ruolo importante sulle barriere di Schottky trovando, in alcuni casi, un'ottimo accordo con i dati sperimentali. Questo lavoro è stato inserito nell'elenco degli 'outstanding articles' del 2015 dall'editorial board di Journal of Physics Condensed Matter.

Abbiamo studiato isolanti topologici (TI quantum wires) e sistemi superconduttivi ibridi (topologici e non) con attenzione al ruolo dell'interazione spin-orbita ed alle proprietà di coerenza e topologiche. La coesistenza tra superconduttività e interazione spin orbita, a temperature di poche decine di millikelvin, può dar luogo a eccitazioni tipo fermioni di Majorana che costituiscono i mattoni elementari della computazione quantistica topologica. In collaborazione con gruppi sperimentali del dipartimento e del CNR, abbiamo predetto che i superconduttori ad alta Tc possono costituire una piattaforma nuova e versatile per ottenere fermioni di Majorana. Ciò consentirebbe di effettuare computazione quantistica topologica a temperature due ordini di grandezza più elevate di quelle cui si è limitati dalla tecnologia convenzionale. In quest'ultimo anno ci siamo soffermati sulla possibilità di ottenere Majorana Fermions senza campi magnetici esterni, quindi in presenza di simmetria di Time reversal. E' stato dimostrato che questo è possibile usando superconduttori nodali. Recentemente nell'ambito di una collaborazione con il gruppo sperimentale di ottica del Prof. Marrucci abbiamo studiato sistemi modello quali Su-Schrieffer-Heeger con l'obiettivo di interpretare le misure di momento angolare ottenute utilizzando un setup sperimentale che coinvolge la manipolazione di fotoni (quantum walk).

La formazione di eccitazioni metastabili nei cuprati sono state studiate ed osservate sperimentalmente in collaborazione con un team internazionale di ricercatori aprendo la strada ad una più completa comprensione dei meccanismi di interazione presenti nei superconduttori ad alta temperatura critica.

Alcune delle anomalie osservate nelle proprietà di trasporto di cristalli organici quasi uni-dimensionali sono state spiegate facendo ricorso per la prima volta ad un approccio di calcolo originale basato sulla dinamica MonteCarlo.

Da circa un decennio, i materiali termoelettrici sono oggetto di un rinnovato interesse da parte di molte industrie ed enti di ricerca. La motivazione principale è legata alla possibilità, avanzata in sede teorica, di poter migliorare decisamente l'efficienza dei dispositivi termoelettrici ricorrendo a sistemi a

bassa dimensionalità. In questa ottica siamo stati in grado di caratterizzare il ruolo dei modi vibrazionali a bassa frequenza nell'efficienza termoelettrica di giunzioni molecolari.

B3 Descrizione attività programmata nel triennio 2017-2019

(max 2000 caratteri)

Nel prossimo triennio sarà rafforzata la linea di ricerca teorica riguardante il trasporto di carica e di energia in materiali bulk, interfacce e nanostrutture multifunzionali focalizzandosi sulle proprietà termoelettriche e optoelettroniche. Teoria e simulazione saranno utilizzate sia per la progettazione di nuovi materiali che per la comprensione del comportamento di materiali e dispositivi sperimentalmente già disponibili. Al programma parteciperà il CNR-SPIN Napoli.

In particolare, utilizzando tecniche numeriche da principi primi, saranno caratterizzate le proprietà strutturali, elettroniche, termoelettriche ed ottiche di eterostrutture basate su materiali bidimensionali (dicalcogenuri di metalli di transizione, grafene, silicene, etc.) al variare della composizione chimica, del numero di strati atomici, anche intercalando composti molecolari tra i vari strati.

Saranno allo stesso tempo perseguiti approcci top-down per la ingegnerizzazione delle bande fononiche con l'obiettivo di ridurre il trasporto di energia attraverso il canale vibrazionale condizione essenziale per migliorare il fattore di merito di dispositivi termoelettrici.

Un'altra linea di azione prevista si concentrerà sul confronto tra dinamiche classiche e quantistiche in sistemi rilevanti per "l'adiabatic quantum computing". Studieremo correzioni non-stoquastiche al fine di migliorare le performance di annealing in problemi di Ising totalmente connessi (p-spin), che nel limite di p-grandi codificano l'algoritmo di Grover. Inoltre, includeremo il ruolo della decoerenza nell'ambito di differenti schemi, adottando sia l'approccio alla Lindblad per l'equazione del moto della matrice densità ridotta (ottenuta tracciando via il bagno di decoerenza), e un'approccio numerico basato sulla diagonalizzazione Lanczos dell'Hamiltoniana totale inclusiva dei gradi di libertà di bagno (fononici).

Continuerà altresì la nostra attività di ricerca sui materiali a forte correlazione elettronica (ossidi superconduttivi e non). In particolare studieremo l'effetto Raman nel YBCO e la superconduttività "antiadiabatica" in BMO e nelle interfacce LAO/STO.

C1 Pubblicazioni scientifiche nel triennio 2014-2016

(indicare il numero complessivo nel triennio e elencare le più significative (max 10))

N. complessivo: 28

Pubblicazioni più significative:

1)Title: Ubiquitous long-range antiferromagnetic coupling across the interface between superconducting and ferromagnetic oxides
By: De Luca, GM; Ghiringhelli, G; Perroni, CA; Cataudella, V; Chiarella, F; Cantoni, C; Lupini, AR; Brookes, NB; Huijben, M ; Koster, G; Rijnders, G ; Salluzzo, M
Source: **NATURE COMMUNICATIONS**
Article Number: 5626
DOI: 10.1038/ncomms6626
Published: NOV 2014

2)Title: Mobility of Holstein Polaron at Finite Temperature: An Unbiased Approach
By: Mishchenko, AS ; Nagaosa, N ; De Filippis, G ; de Candia, A ; Cataudella, V
Source: **PHYSICAL REVIEW LETTERS**
Volume: 114
Article Number: 146401
DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.146401
Published: APR 7 2015

3)Title: Crossover from Super- to Subdiffusive Motion and Memory Effects in Crystalline Organic Semiconductors
By: De Filippis, ; Cataudella, V ; Mishchenko, AS (; Nagaosa, N ; Fierro, A ; de Candia, A
Source: **PHYSICAL REVIEW LETTERS**
Volume: 114
Article Number: 086601
DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.086601
Published: FEB 24 2015

4)Title: Witnessing the formation and relaxation of dressed quasi-particles in a strongly correlated electron system
By: Novelli, F ; De Filippis, G; Cataudella, V; Esposito, M; Vergara, I; Cilento, F; Sindici, E; Amaricci, A; Giannetti, C; Prabhakaran, D; Wall, S; Perucchi, A; Dal Conte, S; Cerullo, G; Capone, M; Mishchenko, A; Gruninger, M; Nagaosa, N; Parmigiani, F; Fausti, D
Source: **NATURE COMMUNICATIONS**
Article Number: 5112
DOI: 10.1038/ncomms6112
Published: OCT 2014

5)Title: Recent Achievements on the Physics of High-T (C) Superconductor Josephson Junctions: Background, Perspectives and Inspiration
By: Tafuri, F; Massarotti, D; Galletti, L; Stornaiuolo, D; Montemurro, D; Longobardi, L; Lucignano, P; Rotoli, G; Pepe, GP; Tagliacozzo, A; Lombardi, F
Source: **JOURNAL OF SUPERCONDUCTIVITY AND NOVEL MAGNETISM**
Volume: 26
Pages: 21-41
DOI: 10.1007/s10948-012-1773-0
Published: JAN 2013

6)Title: Electronic properties and Schottky barriers at ZnO-metal interfaces from first principles
by: D'Amico, NRi; Cantele, Gi; Perroni, CA; Ninno, D
Source: **JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER**
Volume: 27
Article Number: 015006
DOI: 10.1088/0953-8984/27/1/015006

Published: JAN 14 2015

7) Title: Graphene nanoribbon electrical decoupling from metallic substrates

By: Borriello, I; Cantele, G; Ninno, D

Source: **NANOSCALE**

Volume: 5

Pages: 291-298

DOI: 10.1039/c2nr31937c

Published: 2013

8) Title: Statistical moments of quantum-walk dynamics reveal topological quantum transitions

By: Cardano, Filippo; Maffei, Maria; Massa, Francesco; et al.

Source: **NATURE COMMUNICATIONS**

Volume: 7

Pages: 11439

Published: 2016

9) Title: High critical temperature nodal superconductors as building block for time-reversal invariant topological superconductivity

By: Trani, F.; Campagnano, G.; Tagliacozzo, A.; et al.

Source: **PHYSICAL REVIEW B**

Volume: 94

Page: 134518

Published: 2016

10) Title: Chirality and current-current correlation in fractional quantum Hall systems

By: Campagnano, G.; Lucignano, P.; Giuliano, D.

Source: **PHYSICAL REVIEW B**

Volume: 93

Pages: 07544

Published: 2016

C2 Presentazioni a Conferenze internazionali e nazionali

(solo se lo speaker è tra il personale elencato nel punto A3)

25-31 Luglio 2014 (Erice) Workshop "Superstripes 2014"

Invited Talk: Boson-mediated effects following ultrafast pumping of strongly correlated materials: thermal and non-thermal response. **V. Cataudella**

11 August -15 Settembre 2014 Conference and Workshop on "Quantum Engineering of States and Devices, Nordita, Stockholm

Talk: " Majorana bound state at superconducting vortices & in hybrid HTc systems" **A. Tagliacozzo**

4 Giugno 2015 (Bordeaux) Workshop on "Nano electromechanical systems and beyond"

Talk: "Charge and heat transport of soft nanosystems in the presence of time dependent perturbations " **C.A. Perroni**

13-18 Giugno 2015 (Ischia) Workshop "Superstripes 2015"

Invited Talk: Transient polaron response in out of equilibrium cuprates" **V.**

Cataudella

8 Luglio 2015 (Parigi) CECAM Workshop on “Advanced thermoelectric at nanoscale: from materials to devices”

Talk: “Thermoelectric efficiency of molecular junctions” **C.A. Perroni**

28 september -02 October 2015: “Nanoscience & Nanotechnology 2015”, Frascati,

Talk: "Probing deep interface electron-phonon interaction in Bi₂Te₃/ Ga As with Brillouin scattering experiment and DFT modeling of the interface with the topological insulator" **A. Tagliacozzo**

16-19 Novembre 2015 (Las Vegas) EMN Meeting on Ultrafast Research

Invited talk: Time resolved photoexcited states in La₂CuO₄: unveiling interactions in low and high-energy states of a Mott insulator. **V. Cataudella**

27-29 June 2016 “13rd Workshop on Surfaces, Interfaces and Functionalization Processes in Organic Compounds and Applications – SINFO III Naples

Talk “Charge and heat transport in soft nanosystems” **C. A. Perroni**, A. Nocera, D. Ninno and V. Cataudella

22-26 August (2016): ElecMol - 8th International Conference on Molecular electronics Talk: Thermoelectric efficiency of molecular junctions” – Paris

Talk: “Thermoelectric efficiency of molecular junctions” **C. A. Perroni**, D. Ninno, V. Cataudella

Infine va sottolineato che nel triennio il gruppo è stato coinvolto nell'organizzazione di differenti workshops:

16-19 Novembre 2015 (Las Vegas) EMN Meeting on Ultrafast Research Scientific Board: **G. De Filippis**

Il meeting annuale “The Cpri Spring School on Traspoert in Nanonstructures” giunto alla 13esima edizione. Scientific Board: **A. Tagliacozzo**

Partecipazione al comitato organizzativo di ISEC 2017 e al comitato editoriale del numero speciale di IEEE che pubblicherà gli atti della conferenza. **P.**

Lucignano

C3 Presentazioni di brevetti internazionali e nazionali

D1 Progetti di ricerca attivi

(Progetti di Enti di ricerca, Progetti Europei, Progetti MIUR, PON, POR, ...)

GREEN

Materiali per la Generazione ed il REcupero di ENergia da fonti rinnovabili

Inizio luglio 2012 – Fine giugno 2015

Finanziamento per l'attività modelling: 120 Keur

Soggetto attuatore: IMAST

Referente: **D. Ninno**

Progetto Legge 5/2007 Regione Campania

“Il ruolo delle interfacce in ossidi magnetici con forte correlazione elettronica: eterostrutture di manganite” Novembre 2015- Novembre 2016

Referente: **C.A. Perroni**

Finanziamento: 20 Keuro

PICS Italia-Francia CNR-CNRS 2014-2016

Trasporto spin dipendente a bassa temperatura in dispositivi di grafene e prossimità superconduttiva

Referente (CNR): **P. Lucignano**

Finanziamento 15k€

FIRB: RBFR1236VV

Nanostrutture ibride superconduttore-semiconduttore: applicazioni nanoelettroniche,

proprietà topologiche, correlazione e disordine.

Inizio Marzo 2013 - Fine Novembre 2016

Referente unità locale (CNR): **P. Lucignano**

Finanziamento: 267.968 k€

Partecipazione a Progetto Premiale INFN-CNR (2015-2016) “EOS – Elettronica Organica per Strumentazione Innovativa di Ricerca” coordinatori nazionali prof. A. Aloisio e A. Cassinese, “Federico II” Napoli: **C.A. Perroni**