

COMPITI E SUDDIVISIONE FONDI TRA LE UNITÀ DI RICERCA  
prot. 2005021433

<b>Coordinatore Scientifico</b>	Giovanni STEFANI
<b>Ateneo</b>	Università degli Studi ROMA TRE
<b>Titolo della Ricerca</b>	Studio di sistemi ad alta correlazione e bassa dimensionalità con spettroscopie elettroniche di coincidenza: una nuova generazione di metodi sperimentali e teorici
<b>Finanziamento assegnato</b>	Euro 172.000
<b>Durata</b>	24 Mesi

## Obiettivo della Ricerca

Scopo del progetto è di sviluppare metodologie teoriche e sperimentali per contribuire alla descrizione della correlazione elettrone-elettrone in aggregati fortemente correlati a bassa dimensionalità. I risultati sperimentali acquisiti saranno utilizzati per verificare i vari approcci teorici alla correlazione elettronica. La novità del progetto sta nella potenzialità della tecnica di spettroscopia di coincidenza elettrone-elettrone sviluppata dal gruppo proponente di sperimentali. All'interno del progetto, ci si aspetta che la stretta collaborazione tra teorici e sperimentali porti allo sviluppo di nuovi modelli per descrivere i processi su cui si basa tale tecnica. Diversi ricercatori, a livello internazionale, stanno affrontando il problema di descrivere la correlazione elettronica in aggregati a ridotta dimensionalità. Il presente progetto contribuirà a tale sforzo collettivo con il valore aggiunto di utilizzare, accanto alle usuali spettroscopie elettroniche, una tecnica spettroscopica originale che è particolarmente adatta a evidenziare effetti di correlazione. A tal fine verranno effettuati due diversi tipi di esperimenti: doppia fotoionizzazione di valenza (*double photoionization*, DPE) e doppia fotoionizzazione risonante da buca di core (Auger photoelectron coincidence spectroscopy, APECS). Mentre APECS coniuga la nota selettività al sito atomico e allo stato chimico, peculiari della fotoemissione da core, insieme con la sensibilità allo stato di valenza peculiare della spettroscopia Auger, la tecnica APECS risolta in angolo (*angle resolved APECS*, AR-APECS) aggiunge la nuova capacità di selezionare i sottolivelli magnetici dello stato di buca di core intermedio («selettività in *m*») grazie alla risoluzione in angolo della coppia correlata Auger-fotoelettrone. Queste capacità di AR-APECS sono

state chiaramente stabilite per superfici pulite e utilizzate per distinguere strutture multiple di materiali fortemente correlati. Il presente progetto ha lo scopo di dimostrare che la stessa sensibilità può essere ottenuta anche nello studio di strati di spessore inferiore allo strato atomico (*submonolayer*). D'altro canto la tecnica di DPE è ancora ai suoi inizi ma promette di fornire accesso diretto alla correlazione elettronica dello stato iniziale. Esperimenti preliminari su superfici pulite di metalli di transizione hanno lo scopo di approfondire questo aspetto.

Obiettivi dei partecipanti sono di investigare in modo congiunto una varietà di sistemi a bassa dimensionalità (da adatom su superfici metalliche, a monostrati magnetici e molecole organiche auto assemblanti) utilizzando la stessa stazione sperimentale ALOISA (alla sorgente di sincrotrone ELETTRA). Ci si aspetta che l'approccio proposto porti a una descrizione coerente della dipendenza della correlazione elettronica dalla dimensione quantica e dalla struttura elettronica di valenza dell'aggregato. Allo stesso tempo l'efficienza dello spettrometro di coincidenza alla linea di luce ALOISA verrà aumentata utilizzando uno spettrometro a tempo di volo. Lo sforzo di raccogliere in modo efficiente dati sperimentali sarebbe poco utile senza il supporto della teoria, che fornirà un modello per legare le sezioni d'urto dei complessi eventi di ionizzazione su cui gli esperimenti di coincidenza sono basati, con le proprietà fisiche degli aggregati sotto studio.

Il progetto può essere suddiviso in quattro punti paralleli nel tempo, che, pur essendo fortemente connessi, generano risultati parziali individuali.

a) Sistemi magnetici e antiferromagnetici. Propedeutico allo studio di questa classe di sistemi sarà dimostrare che l'effetto dicroico in AR-APECS (DEAR-APECS), scoperto in materiali non magnetici [17,24b], è presente in nano sistemi magnetici. In sistemi con un ben definito stato di spin diverso da zero, l'asimmetria indotta dalla geometria dell'esperimento può essere accordata a essere zero, e una DEAR-APECS risulta essere diversa da zero, permettendo quindi di rivelare il livello locale di valenze di un particolare ione. Poiché il processo APECS è riferito allo spin locale, DEAR-APECS risulterà essere diverso da zero per materiali con ordine ferromagnetico e antiferromagnetico, o anche per un sistema con un momento locale. Queste peculiarità di AR-APECS saranno sfruttate per studiare film sottili epitassiali di Fe, Ni e/o Co, dove il segnale di DEAR-APECS verrà misurato a temperature superiori e inferiori alla temperatura di Curie. In un altro set di misure investigheremo il comportamento di DEAR-APECS in sistemi a momento locale, quali il prototipo di solido antiferromagnetico MnF<sub>2</sub>. Al lungo termine è prevista la possibilità di studiare le proprietà magnetiche di film epitassiali e nanostrutture di ZnO drogati con metallo di transizione (*transition metal*, TM). ZnO, drogato sia con Mn sia con Fe, è un sistema con grandi aspettative in vista di applicazioni nell'ambito della spintronica. Questo argomento è il soggetto di un'avviata cooperazione con il Dipartimento di Fisica e Astronomia, Università di Rutgers, New Jersey (USA).

b) Screening da buca di core e trasferimento di carica. Le peculiarità di APECS e AR-APECS verranno usate per investigare le dinamiche di trasferimento di carica tra substrato metallico e molecole organiche macro cicliche. Rame-ftalocianica su Al verrà scelto quale sistema archetipo per molecole organiche auto assemblanti su superfici inorganiche.

c) Correlazione elettronica in stati di valenza di metalli di transizione. Ci si aspetta che la sezione d'urto di DPE completamente differenziale in angolo e in energia, fornisca un'immagine diretta della correlazione elettronica negli stati di valenza. Sarà accertata la fattibilità dell'esperimento a elevate energie di fotone (100-300 eV) e l'attendibilità del modello interpretativo attraverso esperimenti su superfici pulite di metalli 3d. Quest'obiettivo è anche il soggetto di una cooperazione in atto

con il MPI für Mikrostrukturphysik di Halle (Germania).

d) Modellizzazione delle spettroscopie di coincidenza elettrone-elettrone. E' di vitale importanza sviluppare modelli che descrivano accuratamente, possibilmente ab initio, la forma di riga spettrale Auger e la selettività in  $m$  (DEAR-APECS) fornita dalla rivelazione in coincidenza temporale dei due elettroni finali. Si dovrà tenere conto della diffrazione dal reticolo cristallino della coppia correlata Auger-fotoelettrone, lavoro che verrà effettuato da uno dei gruppi teorici nell'ambito dello sforzo congiunto dei tre gruppi partecipanti, mantenendo sempre una forte connessione con gli sperimentali. In conclusione in punti salienti del progetto sono: Stabilire una proficua collaborazione tra gruppi sperimentali e teorici in un campo fondamentale nella caratterizzazione di materiali di dimensione nanometrica.

Mantenere la cooperazione in Italia in prima linea nella ricerca, rafforzando così la sua capacità di partecipare a progetti internazionali.

Permettere alla comunità scientifica italiana di avere il massimo profitto dalle opportunità offerte da infrastrutture scientifiche a larga scala, quali la linea di luce ALOISA a ELETTRA.

## **Innovazione rispetto allo stato dell'arte nel campo**

E' convincimento comune che le correlazioni elettroniche giochino un ruolo fondamentale nel determinare proprietà e fenomeni propri dello stato solido, come transizioni metallo-isolante, superconduttività ad alta temperatura, ordine ferro- ed anti-ferromagnetico, fenomeni di auto-organizzazione, folding delle proteine, ibridizzazione delle catene di DNA. Ci si aspetta che la correlazione fra elettroni sia ancora più importante per tutta la prossima generazione di dispositivi nano-elettronici e nano-elettromeccanici costituiti da pochi atomi o molecole. Dar conto di questi effetti e' tuttora fra i problemi più evasivi di quanto-meccanica posti a teorici e sperimentali.

Per la teoria e' difficile l'inclusione ab-initio della correlazione elettronica già per atomi pesanti, per non parlare di sistemi complessi di rilevanza tecnologica. Il metodo Kohn-Sham (KS) e' attualmente l'applicazione della Teoria del Funzionale Densità (DFT) più largamente accettata per descrivere le proprietà elettroniche dei sistemi quantistici a molti corpi. Nell'approccio KS il problema a molti corpi e' risolto in maniera formale proiettandolo in un insieme di problemi a particella singola. Così facendo tutti gli effetti rilevanti di tipo "many body" sono confinati nell'energia di correlazione-scambio (CXE). Sono state sviluppate diverse approssimazioni negli ultimi trenta anni per la CXE, come la Local Density (LDA), la Generalised Gradient Functionals (GGA) e l'Orbital Functional (OF). I recenti sviluppi di sistemi quantistici con dimensionalità di scala atomica: overlayers, clusters, quantum wires e quantum dots, pongono un'altra interessante domanda: quale e' l'interdipendenza fra dimensione e correlazione elettronica nei sistemi quantistici? Ne scaturisce una richiesta per esperimenti che abbiano una sensibilità accentuata per gli effetti di correlazione e scambio in aggregati quantistici. Lo scopo di questo progetto e' contribuire alla risposta stabilendo una nuova generazione di strumenti sperimentali e teorici. Esistono parecchie spettroscopie largamente usate (EELS, Auger, UPS, XPS ecc.) per studiare gli effetti di correlazione-scambio anche in aggregati quantistici. La fotoemissione di valenza e di core e' fra le tecniche più impiegate e da' informazioni sulla densità degli stati di particella singola. La creazione di una buca di core e' accompagnata da emissione di radiazione (fluorescenza) o da decadimento non radiativo (emissione di elettroni) verso stati di valenza multiplamente carichi. Il decadimento si studia in genere con la spettroscopia Auger, che porta informazione sulla densità di stati a due particelle. La correlazione elettronica si manifesta attraverso lo spettro energetico degli elettroni autoionizzanti. La forma di riga Auger contiene informazioni sulla struttura elettronica locale dei solidi che e' risultato difficile estrarre per via della complessità dei processi di decadimento. La limitazione principale sta nel fatto che nelle misure non si distinguono canali di decadimento originati da differenti "stati parente" di buca e quando si studiano eterostrutture complesse (elemento-elemento, superficie-overlayer) la mancanza di discriminazione rispetto allo stato intermedio della buca rende non semplice la determinazione delle proprietà elettroniche. Le difficoltà principali derivano dalla sovrapposizione di strutture spettrali derivanti da siti non equivalenti e da un aumento degli effetti delle correlazioni elettroniche per aggregati di dimensionalità ridotta. Per questi motivi le spettroscopie convenzionali di fotoemissione ed Auger sono state affiancate da misure in cui due elettroni liberi finali prodotti dall'assorbimento di un fotone vengono rivelati in coincidenza. Nel caso della ionizzazione di core questi esperimenti consistono nell'eccitare il campione facendo assorbire un fotone ed andando a misurare energia e distribuzione angolare della coppia correlata Auger-fotoelettrone. Negli ultimi dieci anni e' stato mostrato chiaramente come gli esperimenti di coincidenza elettrone-elettrone siano estremamente utili nell'investigare le correlazioni in atomi a shell chiusa, sia per stati discreti che del continuo.

E' stato già fatto vedere che, raccogliendo coppie Auger-fotoelettrone in coincidenza (APECS), lo spettro Auger riflette la struttura elettronica locale sul sito specifico del fotoelettrone. APECS ha mostrato, cioè, di saper indagare la struttura elettronica su un sito particolare e per uno specifico stato di core in un solido, e monitorare come cambia il sito a seguito di una perturbazione del solid. In particolare i lavori effettuati finora hanno rivelato che APECS e' in grado di: isolare siti individuali in un solido ed esplorarne la struttura elettronica locale, separare strutture spettrali sovrapposte, ridurre l'allargamento dovuto alla vita media rivelando la presenza di strutture nascoste, esplorare la struttura elettronica con elevata sensibilità superficiale, associare in maniera selettiva i decadimenti Auger agli "stati parente" di buca. Recenti esperimenti condotti su atomi hanno fatto vedere una ulteriore, unica, capacità della tecnica di investigare la dinamica delle buche di core e gli effetti di interferenza quantica fra i canali di fotoemissione ed Auger. In questi esperimenti in fase gassosa e' stato osservato l'allineamento dello tone e sono stati associati i sottolivelli della fotoemissione, in termini di momento angolare, momento magnetico e di spin, a quelli dell'emissione Auger. Sarebbe importante estendere ai solidi questa specifica capacità di discriminazione della tecnica AR-APECS per lo studio di materiali fortemente correlati.

La difficoltà per una estensione ai solidi sta nella diffrazione degli elettroni, che potrebbe distruggere gli effetti dell'allineamento. Secondo recenti risultati su monolayer 1/3 di Sn depositato su una superficie di Ge(111), ottenuti dal team Trieste-RomaTre-Rutgers University, e' dimostrato che le configurazioni dello stato finale Auger di tripletto (simmetriche rispetto allo spin) o di singoletto (antisimmetriche) risultano intensificate o sopresse negli spettri imponendo vincoli laschi sui tre vettori rilevanti per la cinematica APECS (polarizzazione del fotone e i due momenti del fotoelettrone e dell'Auger). Questa capacità deriva dalla selettività di AR-APECS per i numeri quantici magnetici  $m$  dello stato finale a due buche e produce una asimmetria spin-dipendente, cioè un effetto dicroico (DEAR-APECS). Questa discriminazione aggiuntiva, scoperta dai proponenti, aumenta le già note specificità atomica e selettività allo stato chimico ed alla profondità dell'emissione di APECS. In sintesi, un esperimento

che misuri, in maniera differenziale rispetto all'energia ed all'angolo, la probabilità di produzione di coppie correlate Auger-fotoelettrone (AR-APECS) ha l'impareggiabile capacità di discriminare gli stati intermedi del processo Auger e di essere sensibile agli effetti di correlazione fra gli elettroni finali.

Oltre ai processi che portano alla creazione di uno stato con due buche in valenza passando attraverso uno stato intermedio di buca interna a vita breve (APECS), i gruppi proponenti hanno effettuato degli studi esplorativi di coincidenza elettrone-elettrone su processi in cui lo stesso stato finale a due buche si produce in maniera diretta (doppia fotoemissione DPE). Questa classe di esperimenti dovrebbe fornire evidenze ancor più immediate sulla correlazione elettronica. La realizzabilità di un esperimento DPE da un solido si basa su due esperimenti piuttosto recenti, condotti con energia del fotone sotto la soglia di ionizzazione di core. Ci sono tentativi presso gruppi di ricerca in Germania ed in Italia (fra i proponenti) per accertare la fattibilità della DPE ad energie del fotone più elevate. Nel limite di alte energie, infatti, ci si aspetta una maggior sensibilità alla correlazione elettronica di stato iniziale.

## **Criteri di verificabilità**

I risultati raggiunti dal progetto potranno essere verificati considerando che le attività previste nel biennio possono, per chiarezza, essere raggruppate nelle tre classi seguenti:

a. Implementazioni sperimentali

b. Risultati sperimentali

c. Supporto teorico

Ognuna di queste classi di attività prevede di raggiungere i risultati elencati cronologicamente nel seguito.

a. Entro i primi otto mesi del progetto tutte le implementazioni sperimentali programmate saranno completate:

Un analizzatore a tempo di volo convenzionale verrà installato e sarà operativo alla stazione sperimentale ALOISA. Sarà caratterizzato da un angolo solido accettato di 10-2 sr e da un potere risolvete in energia di 500. Con questo analizzatore lo spettrometro di coincidenza verrà operato sia nella configurazione tradizionale sia nella configurazione ibrida.

Sullo spettrometro di Roma Tre sarà operativa la sorgente di raggi X focalizzata. La sorgente migliorata aumenterà la brillantezza, permettendo quindi di effettuare con migliore efficienza tutti gli esperimenti preliminari (caratterizzazione spettroscopica e ottimizzazione delle procedure di preparazione del campione) necessari per sfruttare in modo proprio la potenzialità della stazione sperimentale di ALOISA. In casi selezionati (ad esempio il rilassamento della buca di core in Al) la nuova sorgente permetterà di effettuare in laboratorio esperimenti APECS.

b. Risultati attesi da run sperimentali individuali effettuati a ELETTRA o a Roma Tre, come più appropriato.

Alla fine del primo anno:

Verrà completato, grazie allo spettrometro di Roma Tre, lo studio delle dinamiche di screening di buche di core in metalli a elettroni liberi (Al). Misure di APECS risolte in angolo dovranno essere effettuate su due diverse superfici: (100), (111) e su atomi alcalini.

Alla fine del secondo anno

Le misure di spettri di APECS e AR-APECS di CuPc/Al, cominciate durante il primo anno, verranno completate. Misurando le forme di riga Auger di C e N in coincidenza con le linee di fotoemissione parente principale e satellite verranno messi in risalto effetti di trasferimento di carica dal substrato.

Esperimenti di AR-APECS su submonolayer film magnetici e non magnetici verranno completati facendo completa luce sulle potenzialità dell'effetto di DEAR-APECS.

Sarà stata misurata la distribuzione angolare della DPE di Cu(100), a diverse energie del fotone. Sarà stato stabilito il limite inferiore di energia per raccogliere informazioni sulle correlazioni nello stato iniziale, e una valutazione diretta sul raggio di correlazione elettronica.

c. La guida teorica verrà fornita agli esperimenti durante i due anni dai gruppi (Mi), (R2) e (R3). Essi computeranno:

Forme di riga CCV e CVV per superfici pulite e atomi fortemente correlati.

Distribuzioni angolari delle coppie di elettroni correlate emesse da submonolayer magnetici.

Il supporto finanziario richiesto verrà utilizzato principalmente per:

1) Implementazione completa di uno spettrometro a tempo di volo sulla stazione sperimentale ALOISA in modo da ottenere una rivelazione in energia completamente parallela, cioè in modo da effettuare AR-APECS in modo multi canale in energia, riducendo così l'attuale tempo di acquisizione di un fattore 10 almeno (lo spettrometro sarà sviluppato e costruito a Roma Tre).

2) Migliorare la brillantezza della sorgente a raggi X di Roma Tre, allo scopo di effettuare in modo efficiente esperimenti APECS e per l'iniziale caratterizzazione di tutti gli studi sperimentali programmati.

3) Implementare le installazioni computazionali dei gruppi teorici.

4) Coprire parzialmente le spese di spostamento dei membri dei gruppi in cooperazione e finanziare completamente una borsa di dottorato.

5) Organizzare un meeting annuale su modello di un workshop per valutare e comunicare risultati parziali e finali.

6) Ultimo ma non meno importante finanziare la forza lavoro (borse di post dottorato), necessaria per sviluppare le nuove metodologie che sono gli obiettivi principali sia della teoria sia dell'esperimento.

## **Elenco delle Unità di Ricerca**

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi ROMA TRE
<b>Responsabile Scientifico</b>	Giovanni STEFANI
<b>Finanziamento assegnato</b>	<b>Euro</b> 106.800

### **Compito dell'Unità**

*Il gruppo di Roma Tre, oltre a contribuire al progetto con la propria esperienza in ambito teorico e sperimentale, garantirà il coordinamento per fondere insieme tutto il lavoro fatto, in modo individuale o in cooperazione, dalle quattro unità operative, in uno sforzo coerente verso un comune obiettivo. In effetti, l'ambizioso scopo del progetto è di ottenere il risultato comune di sviluppare un nuovo set di strumenti teorici e sperimentali per studiare le correlazioni elettroniche in sistemi di dimensione nanometrica, utilizzando la spettroscopia di coincidenza elettrone-elettrone. Tale obiettivo può essere raggiunto solo utilizzando al meglio la competenza complementare e*

*peculiare delle unità individuali partecipanti al progetto. A questo proposito è utile considerare che ogni singolo gruppo è esperto in un campo complementare con quelli degli altri partecipanti. In particolare:*

*- Il gruppo di Tor Vergata, guidato da M. Cini, ha fornito importanti contributi nello sforzo di modellare spettri Auger, come per esempio la ben nota teoria di Cini-Sawatzky, dove l'energia di correlazione buca-buca è inclusa in modo originale nella descrizione della forma di riga Auger. Il progetto farà affidamento sui contributi di questo gruppo per una descrizione propria dei meccanismi Auger in sistemi fortemente correlati.*

*- Il gruppo di Milano Bicocca, guidato da G. P. Brivio, metterà a disposizione la sua esperienza di lungo corso nei calcoli DFT della densità di stati, competenza che ha recentemente prodotto risultati rilevanti nella connessione tra la forma di riga Auger di metalli alcalini con le proprietà del sito di assorbimento in superfici metalliche.*

*- Il gruppo di Trieste, guidato da F. Tommasini, ha progettato e sviluppato la linea di luce ALOISA presso la sorgente di radiazione di sincrotrone ELETTRA. Tale stazione sperimentale è uno strumento unico nel suo genere per effettuare esperimenti di spettroscopia di coincidenza Auger-fotoelettrone risolta in angolo. L'unità di Trieste garantirà al progetto il know-how e la competenza necessaria per affrontare lo scopo ambizioso di migliorare le performance dello spettrometro di coincidenza di ALOISA. Fornirà inoltre la base sperimentale per effettuare gli studi preliminari di DPE.*

*Inoltre il gruppo di Roma Tre fornirà un doppio contributo specifico al progetto:*

*- Da un punto di vista sperimentale, contribuirà a tracciare un modello completo dei processi di AR-APECS e DPE, fornendo una descrizione originale della diffrazione coerente da parte del reticolo cristallino dei due elettroni finali.*

*Questo sarà effettuato sotto la guida di G. Natoli, uno dei massimi esperti nella trattazione di fotoassorbimento e diffrazione di fotoelettroni in un approccio legato a teorie di scattering multiplo.*

*- Da un punto di vista sperimentale gli obiettivi di questo gruppo saranno:*

*a. Implementare lo spettrometro a tempo di volo che sarà utilizzato per aumentare l'efficienza su ALOISA.*

*b. Effettuare gli studi preliminari per utilizzare in modo efficiente il beam time a ELETTRA.*

*c. Studiare i meccanismi tra substrato e molecole attraverso esperimenti di APECS e AR-APECS.*

*L'attività sperimentale sarà guidata da G. Stefani, che ha più di trent'anni di esperienza nello sviluppo di spettroscopie di coincidenza di elettroni e ha realizzato diverse notevoli scoperte in questo campo.*

---

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi di ROMA "Tor Vergata"
<b>Responsabile Scientifico</b>	Michele CINI
<b>Finanziamento assegnato</b>	<b>Euro</b> 14.700

### **Compito dell'Unità**

*E' importante distinguere fra le diverse sfide che vengono dai sistemi di interesse del Gruppo sperimentale; dal lavoro fatto con Auger Line Shape Analysis (ALA) sappiamo che :*

*1) sistemi come Silicio e Grafite sono stati studiati con successo; sistemi a bande chiuse o trattabili con approssimazioni di bassa densità sono fra i meglio capiti anche con forti correlazioni;*

*2) forme di riga dai primi metalli di transizione sono comprese almeno in modo qualitativo; questioni sul cosiddetto comportamento  $U > 0$  sono abbastanza chiare; però ci vuole un trattamento che tenga conto in qualche modo degli effetti one-step e sono importanti gli effetti di shake-up;*

*3) cristalli con forti correlazioni e bande mezze piene creano i problemi peggiori e possono richiedere una difficoltosa descrizione one-step;*

*4) inoltre di solito le transizioni CCV sembrano più agevoli da trattare di quelle CVV.*

*Nel primo anno si partirà; dalla teoria di Cini-Sawatzky, e si dedicherà il massimo interesse al miglioramento della comprensione attuale di ALA e APECS; si intraprenderà questo lavoro in stretta collaborazione con gli altri teorici.*

*Sn/Cu(111) e' nella categoria 1) summenzionata e gli daremo priorità'.*

*Si estenderà la teoria alle correlazioni angolari e la si porrà su una base "ab initio", mettendo insieme dati atomici da RM3 risultati di calcoli DFT sui sistemi reali fatti dal Gruppo MI.*

*Si faranno le cose da principi primi pe quanto possibile, anche sedettagli come le perdite ed i satelliti estrinseci richiederanno modelli.*

*Nel secondo anno includeremo la diffusione multipla dalla superficie ed un confronto piu' ravvicinato con gli esperimenti. Il sistema Fe/Cu(111) interesse per la collaborazione noi lo riteniamo nella categoria 3).*

*Sara' visto caso per caso se e come realizzare la descrizione one-step.*

*Occorre dire che non possiamo essere piu'; dettagliati nel programma perche' non sappiamo quali difficolta' incontreremo a quel punto*

---

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi di MILANO-BICOCCA
<b>Responsabile Scientifico</b>	Gianpaolo BRIVIO
<b>Finanziamento assegnato</b>	<b>Euro 23.500</b>

### **Compito dell'Unità**

*The main task of the Milano-Bicocca Unit will be to contribute theoretically to the study of electron correlation of low dimension systems taking advantage of its experience on the ab initio approach of adsorption and of the realistic calculation of Auger spectra of adatoms, within the Kohn-Sham framework density functional theory (DFT), which only partially includes correlation. Our effort will be first to compute surface Auger spectra within the DFT at different degrees of approximation. Comparison with experiments (Trieste and Roma Tre) will elucidate those systems in which correlation effects are more important and the above method is not sufficient. In such a case we plan a GW many-body treatment and ab initio calculations of the main quantities entering the physical models developed at Roma Tor Vergata.*

*In particular, we shall verify first the merits and the limitations of the single particle approach, successfully used for the CCV spectra for two coverages of Na on Al(111). This method is based on the local density of states (LDOS) around the ionized impurity, and we plan to use it for the CCV Auger spectra of Na/Cu(111) and later of Fe/Cu(111) and Sn/Cu(111), and the CVV spectra of closed band systems. The energy of the electron peaks will be computed by using a spin-dependent approach with fractional occupancy based on the Janak theorem. According to the quality of these results we shall try to improve them, still within the single particle approach: (i) by realistic calculations of the Auger matrix elements; (ii) by using different Hamiltonian for the initial and final states of the system.*

*We expect treatments beyond the single particle approach to be most relevant for CVV spectra. Here we plan to compute the many-body single particle Green function by the GW approach, starting from a jellium approximation of the substrate and then adding an overlayer of adatoms. The LDOS calculated via the imaginary part of such a Green function may also include the effect of plasmon excitations. In the field of hole-hole correlation effects, our task will be to supply, by DFT calculations, the main ingredients for the many-body models developed at Roma Tor Vergata, such as the single particle Green function, matrix elements entering the golden rule, and the screening energy of a core hole.*

---

<b>Sede dell'Unità</b>	Università degli Studi di TRIESTE
<b>Responsabile Scientifico</b>	Fernando TOMMASINI
<b>Finanziamento assegnato</b>	<b>Euro 27.000</b>

### **Compito dell'Unità**

*Il primo esperimento APECS risale a un quarto di secolo fa.. Da allora pochi gruppi al mondo si sono cimentati nello sviluppo di tecniche di coincidenza da solidi (USA, Australia, Germania e Italia) a causa delle complicanze introdotte dal lungo tempo di acquisizione necessario per giungere a valori accettabili del rapporto segnale fondo.*

*Negli ultimi anni, grazie alla notevole brillantezza delle sorgenti di radiazioni di sincrotrone e alla migliore efficienza degli analizzatori di elettroni adottati per gli spettrometri (detezione multicanale in energia, tempo di volo, ecc.), l'interesse nei confronti dell'APECS è rinvigorito e sempre più gruppi sono coinvolti; ad esempio Giappone e Francia stanno pianificando l'implementazione di tali metodologie presso le loro nuove sorgenti di sincrotrone. In realtà APECS, come la maggior parte delle spettroscopie elettroniche, trae notevoli benefici dalla tunabilità, polarizzazione variabile e brillantezza senza precedenti delle sorgenti di luce di sincrotrone. E' da sottolineare in questo contesto il cresciuto interesse dei gruppi di ricerca italiani nell'effettuare esperimenti di coincidenza elettrone-elettrone presso la beamline ALOISA (Elettra, Trieste).*

*I gruppi sperimentali coinvolti in questa proposta sono stati promotori e sviluppatori del progetto ALOISA-INFM (Advanced Line for Overlayer Interface and Surface Analysis) presso il sincrotrone ELETTRA di Trieste. Attualmente ALOISA è l'unico apparato sperimentale al mondo capace di condurre spettroscopie elettroniche in coincidenza da superfici solide con risoluzioni energetica ed angolare tipiche delle spettroscopie di diffrazione di fotoelettroni.*

*La possibilità di utilizzare fotoni che incidono sulla superficie ad angoli radenti (sotto l'angolo critico), l'ampio intervallo di configurazioni cinematiche accessibili, la detezione angolare e in energia parallela su più canali, fornisce ad ALOISA performance non riscontrabili altrove, che hanno permesso al gruppo in cooperazione RomaTre-Trieste di raggiungere un posizione di rilievo a livello mondiale e di aprire nuove promettenti prospettive nel settore della doppia fotoionizzazione (DPE), tramite l'utilizzo di una nuova configurazione ibrida dell'apparato sperimentale che combina analizzatori emisferici e a tempo di volo.*

*L'attività di ricerca è condotta in collaborazione con gruppi che sono leader a livello internazionale nello sviluppo di spettroscopie in coincidenza (Rutgers University NJ; MPI für Mikrostrukturphysik, Halle D; SOLEIL, Orsay, F).*

*Scendendo più in particolare ALOISA è uno strumento polivalente per l'analisi di superfici e interfacce, che si avvale della presenza, su una stessa camera sperimentale, sia di tecniche d'indagine strutturale come la diffrazione di raggi-X o di fotoelettroni, sia di tecniche spettroscopiche per l'analisi delle proprietà elettroniche, quali fotoemissione, assorbimento, fotoemissione risonante e APECS. Oltre a questa peculiarità, ALOISA si è contraddistinta, rispetto ad altri apparati sperimentali, per l'elevato numero di gradi di libertà indipendenti, che permettono una definizione estremamente libera dei parametri di scattering negli esperimenti. Nella tipica configurazione, il campione è montato su un manipolatore a sei gradi di libertà. La radiazione incide radente sul campione con polarizzazione lineare selezionabile con continuità senza variare l'angolo d'incidenza. All'interno della camera sperimentale trovano sede due supporti di analizzatori. Uno ospita 2 analizzatori l'altro 5 ospita cinque. I 7 analizzatori, consentono di misurare 10 coppie in coincidenza simultanea*

---