

Tesi di laurea Magistrale in Fisica

Titolo: Proprietà elettroniche di materiali bidimensionali

Relatori: Dr. G. Cantele - Prof. D. Ninno

Abstract: Scopo della tesi è lo studio numerico delle proprietà elettroniche e strutturali di sistemi bidimensionali (2D) basati sul grafene ed altri cristalli 2D quali BN, NbSe₂, TaS₂, MoS₂. Le tecniche di sintesi, sempre più sofisticate, consentono oggi l'ingegnerizzazione delle proprietà optoelettroniche combinando differenti strati di tali materiali e aprendo così la strada al "design" di materiali innovativi e multifunzionali con date proprietà (gap di energia, assorbimento ottico, emissione, trasporto e mobilità dei portatori, etc.). Le tecniche di simulazione numerica consentono di fornire una descrizione accurata di questi sistemi, a livello atomico. In particolare, non solo è possibile studiare e interpretare le misure sperimentali, ma anche di proporre "nuovi" materiali con proprietà desiderate, in una sorta di laboratorio virtuale di Scienza dei Materiali.

Lo studente avrà a disposizione risorse di calcolo ad alte prestazioni e utilizzerà codici di calcolo numerico innovativi per lo studio di tali sistemi.