

Tesi di laurea Magistrale in Fisica

Titolo: Difetti e funzionalizzazione chimica: nuove opportunità nella scienza dei (nano)materiali.

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

Abstract: È noto che nei materiali tradizionali per l'elettronica, il canale di conduzione deve essere estremamente puro (privo di difetti atomici e/o strutturali) che altrimenti ne degraderebbero notevolmente le proprietà "macroscopiche". Tuttavia, le moderne nanotecnologie hanno consentito sia l'ingegnerizzazione che l'osservazione di proprietà a livello atomico. Questo vuol dire che modifiche "controllate" alla nanoscala e fino a livello del singolo atomo, possono determinare modifiche delle proprietà elettroniche e di trasporto che sono misurabili. In tal senso, la presenza di difetti (vacanze atomiche, atomi sostituzioni, etc.) o funzionalizzazione (ad esempio specie chimiche adsorbite in superficie) sono diventati una nuova opportunità.

Scopo della tesi è l'analisi delle modifiche indotte dalla presenza di difetti e/o funzionalizzazioni chimiche sulle proprietà elettroniche e strutturali di materiali innovativi basati su semiconduttori nanostrutturati e relative interfacce o materiali bidimensionali quali il grafene. Lo studente utilizzerà codici di calcolo e risorse di calcolo ad alte prestazioni per lo studio delle proprietà elettroniche e strutturali di tali sistemi con accuratezza atomica.