

Relazione scientifica dell'attivit  di ricerca

Il programma di ricerca svolto presso il Massachusetts Institute of Technology, Department of Materials Science & Engineering si   proposto lo studio delle propriet  elettroniche e di trasporto di fogli e nanostriscie di grafene.

Lo studio da principi primi della conduttanza in sistemi nanoscopici puo' essere effettuato combinando il formalismo di Landauer con il calcolo delle funzioni di Wannier massimamente localizzate. Quest'ultimo, in particolare, consente di estendere l'accuratezza di calcoli da principi primi a sistemi descritti da un'Hamiltoniana a larga scala (in cui, cioe', il numero di elettroni coinvolti   dell'ordine delle migliaia) di tipo tight-binding.

L'attivit  presso l'MIT ha consentito di acquisire gli strumenti (teorici e computazionali) di base per eseguire questo tipo di calcoli e di partire con un progetto congiunto di ricerca riguardante il grafene nanostrutturato. Per un dato sistema,   necessario preliminarmente determinare la geometria di equilibrio e i livelli elettronici a partire da un calcolo da principi primi (si utilizza il formalismo della densit  funzionale e degli pseudopotenziali, come implementato nel codice Quantum-Espresso, <http://www.quantum-espresso.org>). A partire da questo   possibile calcolare le funzioni di Wannier: esse costituiscono orbitali localizzati che si ottengono come combinazioni lineari degli orbitali elettronici calcolati al passo precedente. Tali funzioni risultano generalmente localizzate sugli atomi o i legami interatomici, e consentono di fornire una descrizione della natura chimica di tali legami (ionico, covalente, etc.). Gli elementi di matrice dell'Hamiltoniana, nella nuova base costituita dalle funzioni di Wannier, costituiscono il punto di partenza per il calcolo della conduttanza. Inoltre, a partire da essi,   possibile studiare sistemi su scala maggiore: ad esempio se la prima simulazione riguarda un foglio di grafene in presenza di una vacanza di carbonio, da essa   possibile costruire l'Hamiltoniana di un foglio di grafene contenente una distribuzione casuale di vacanze non interagenti.

Esperimenti recentissimi hanno mostrato che questo materiale presenta proprietà molto promettenti nel campo dell'elettronica alla nanoscala. Il raffinamento delle tecniche ha consentito la sintesi sia di singoli o pochi fogli di grafene, che di nanostriscie. Si è mostrata anche la realizzazione di sensori di molecole di interesse ambientale, in cui il limite di sensibilità può essere spinto fino al limite estremo (rivelazione di singola molecola o di concentrazioni bassissime). Tuttavia, esistono molti aspetti ancora da chiarire, sia dal punto di vista sperimentale che teorico.

Il programma di ricerca ha riguardato lo studio del grafene nanostrutturato puro e in presenza di difetti: vacanze di carbonio, impurezze sostituzionali (B,N), molecole adsorbite. Lo scopo ultimo è quello di caratterizzare questi sistemi dal punto di vista delle proprietà elettroniche e di trasporto, in particolare di evidenziare l'effetto della presenza di questi difetti sulla conducibilità. Risultati preliminari sono stati ottenuti su sistemi contenenti vacanze o atomi passivanti (F, O) sui bordi della nanostriscia.

Il proponente

Prof. Ruggero Vaglio

Resp. CNR-INFN u.o. Napoli