



DIPARTIMENTO
DI FISICA E GEOLOGIA

Materiali 2D: proprietà ed applicazioni

Giornate di Orientamento alla Scelta delle Tesi in FISICA

24/03/2023

Igor Neri – igor.neri@unipg.it

Outline

- Cosa sono i materiali 2D?
- Proprietà: quali sono e come le misuriamo?
- Applicazioni: cosa possiamo farci?

Materiali 2D

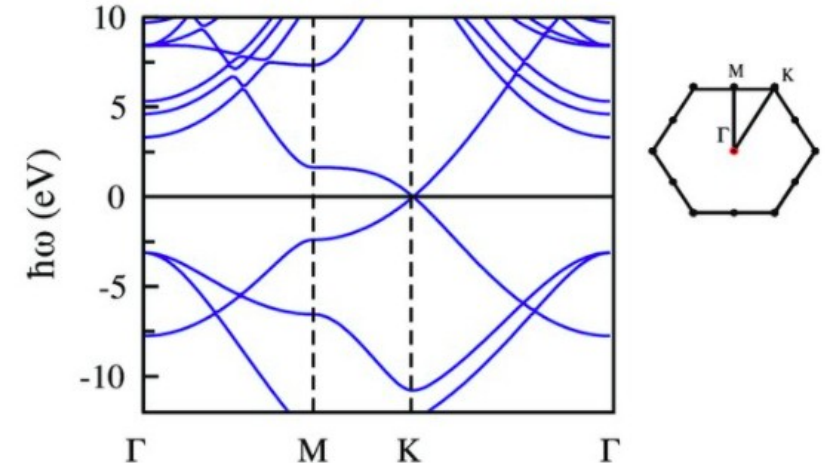
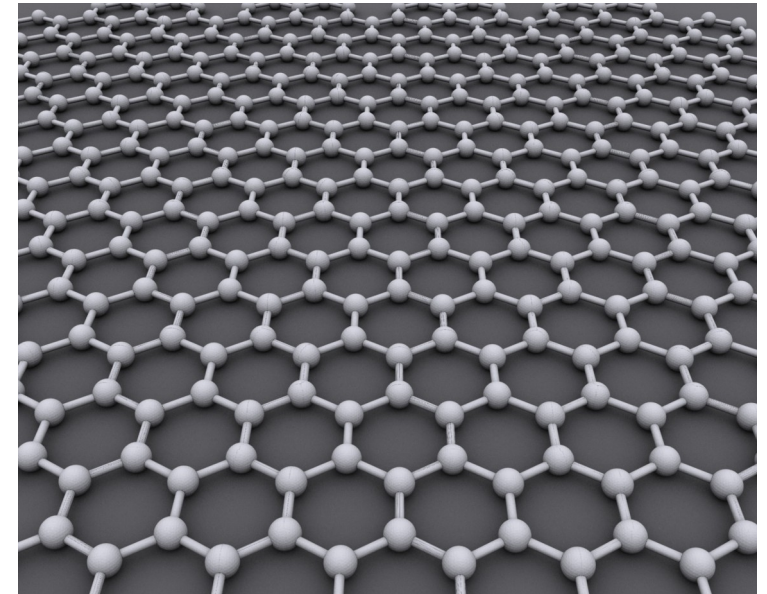
- Materiali costituiti da uno o più (pochi) strati atomici
 - Spessore trascurabile
- Eg. graphene: 1 – 10 layers considerato come materiale 2D
- Se lo spessore non è trascurabile il materiale è considerato 3D

Un po' di storia

- 1859 – Bordie tenta (e fallisce) di esfoliare un singolo layer dalla grafite
- 1937 – Peierls e Landau suggeriscono che materiali strettamente 2D potessero non esistere
- 1962 – Bohm introduce il termine graphene
- 2004 – Geim e Novosolov vincono il premio Nobel per l'esfoliazione e la caratterizzazione del graphene

Graphene

- Allotropo 2D del carbonio con struttura esagonale
- Spessore di un singolo layer $\sim 3.4 \text{ \AA}$
- Quasi trasparente nel visibile (assorbimento $\sim 2.3 \%$)
- 100 volte piú robusto dell'acciaio
- Ottimo conduttore di calore e di elettricit 

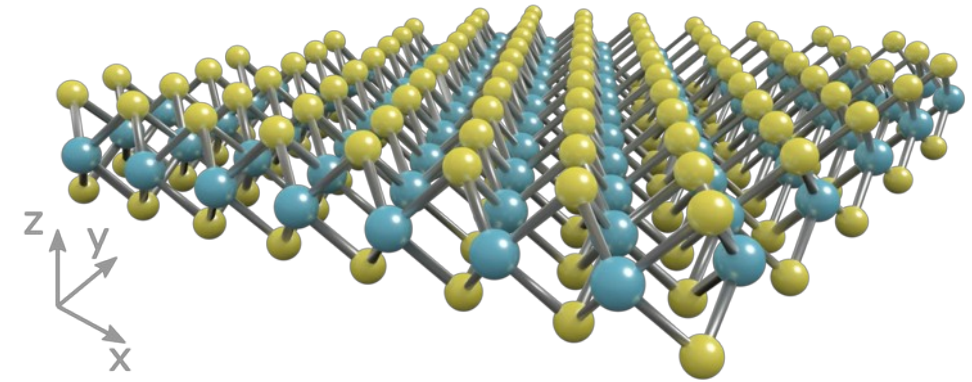


Non solo Graphene

- Germanene: singolo layer di germanio
- Silicene: singolo layer di silicio
- Phosphorene: singolo layer di fosforo (vedi presentazione Dr. Verdini)
- Materiali composti con atomi alternati (eg. H-BN)
- Transition Metal Dichalcogenides: composti 2D di metalli di transizione e calcogenuri

Materiali 2D: studio proprietà

- Strutture cristalline
- Nano-scale -> Pochi atomi, ma non pochissimi
- Studio computazionale
 - Classico -> pseudopotenziali (distanza, angolo, ...)
 - Proprietà meccaniche, dinamica, fononi
 - Milioni di atomi
 - Quantistico -> Equazione di Schrodinger -> Approssimazione Born-Oppenheimer -> Density Functional Theory (DFT)
 - Proprietà meccaniche, bande elettroniche, ...
 - Centinaia di atomi



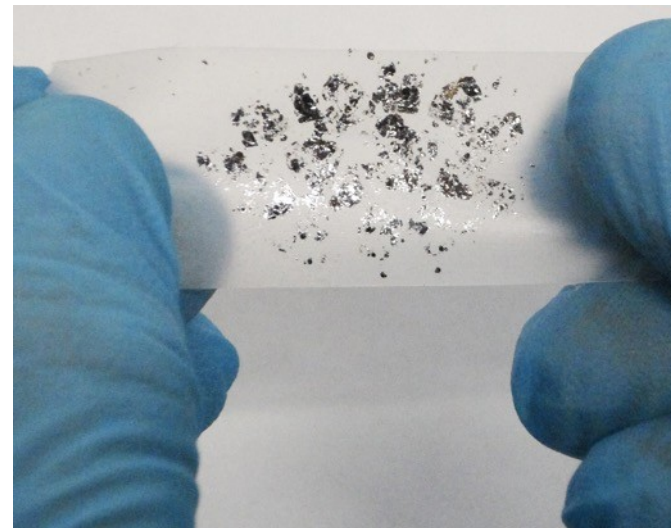
$$\vec{F}_i = m_i \vec{A}_i$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(r, t) = H \Psi(r, t)$$

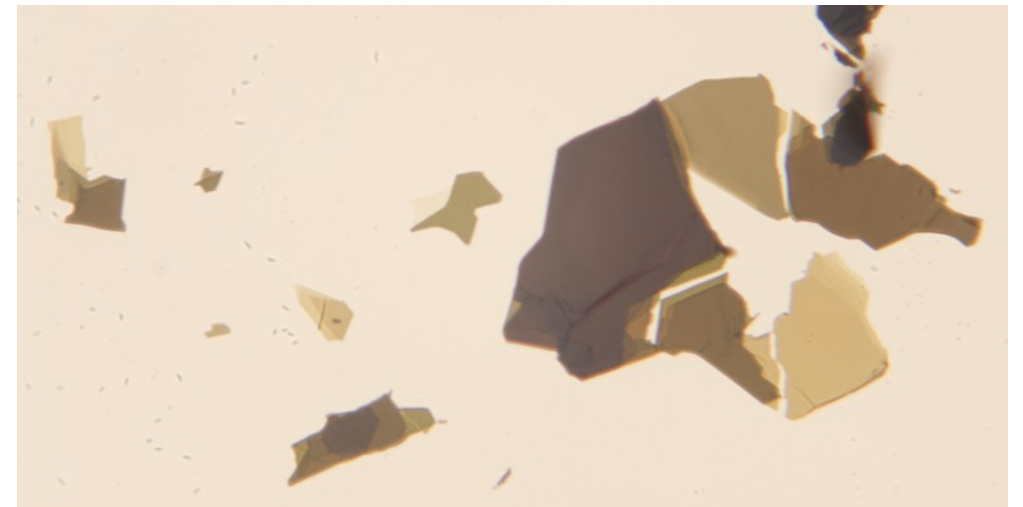
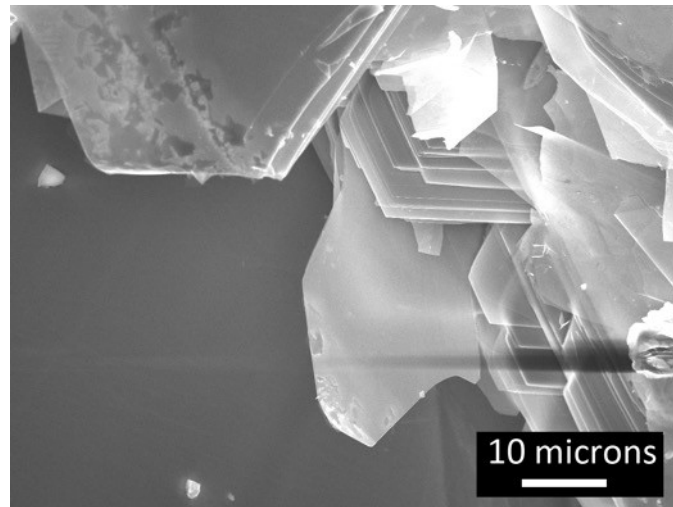
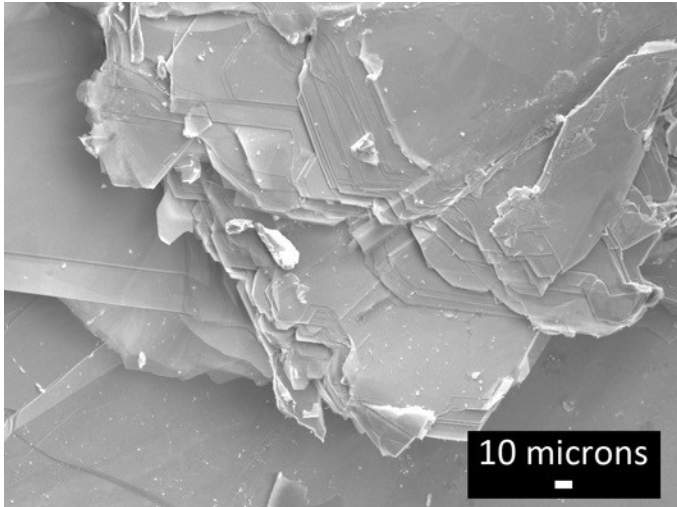
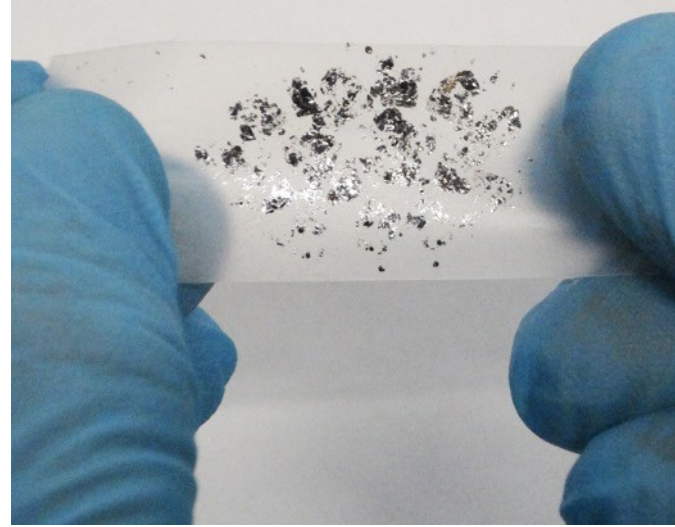
Materiali 2D: produzione



Materiali 2D: produzione



Materiali 2D: produzione



Materiali 2D: misura delle proprietà

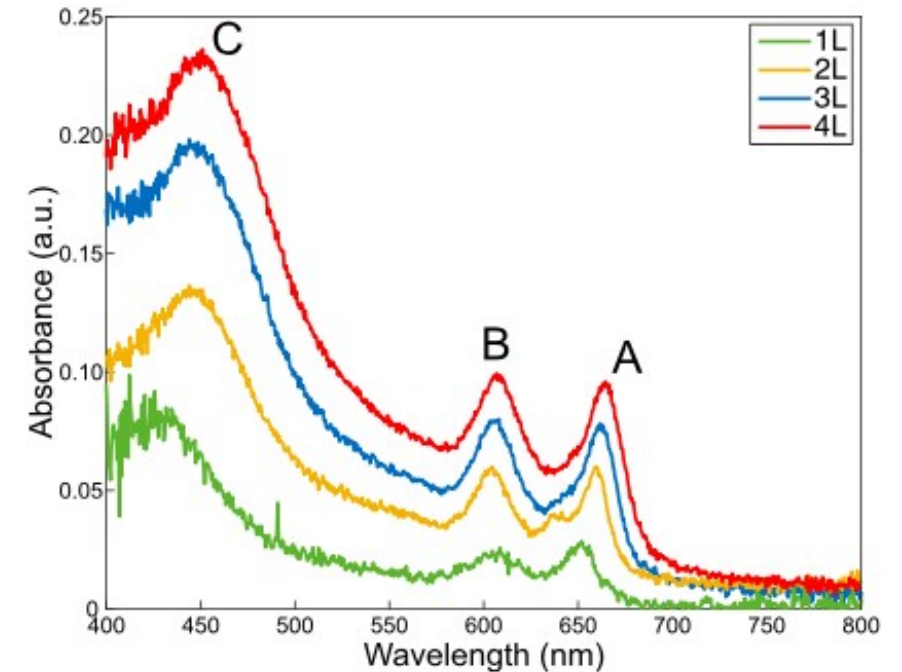
Caratterizzazione e studio sperimentale:

- Microscopia elettronica (SEM)
- Micro-spettroscopia UV-VIS
- Microscopia AFM
- Micro-spettroscopia Raman
- Micro-spettroscopia Brillouin
- Risposta alle deformazioni geometriche
- Trasporto elettronico

Materiali 2D: misura delle proprietà

Caratterizzazione e studio sperimentale:

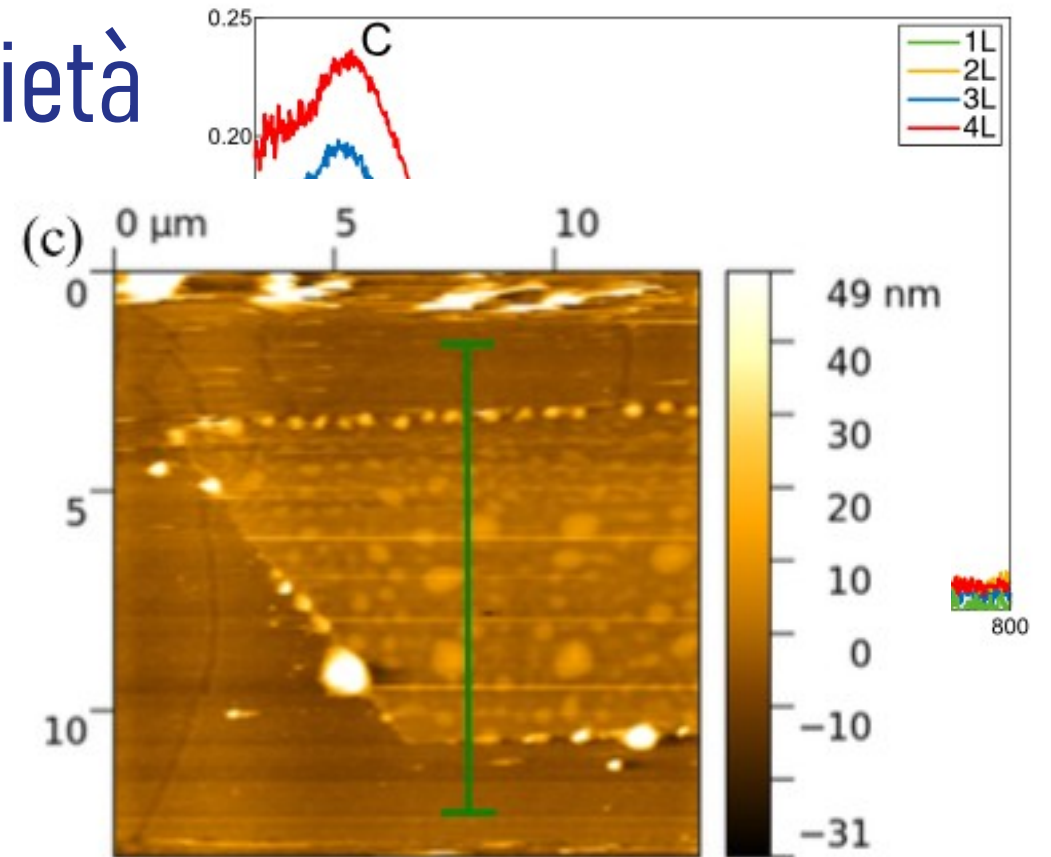
- Microscopia elettronica (SEM)
- Micro-spettroscopia UV-VIS
- Microscopia AFM
- Micro-spettroscopia Raman
- Micro-spettroscopia Brillouin
- Risposta alle deformazioni geometriche
- Trasporto elettronico



Materiali 2D: misura delle proprietà

Caratterizzazione e studio sperimentale:

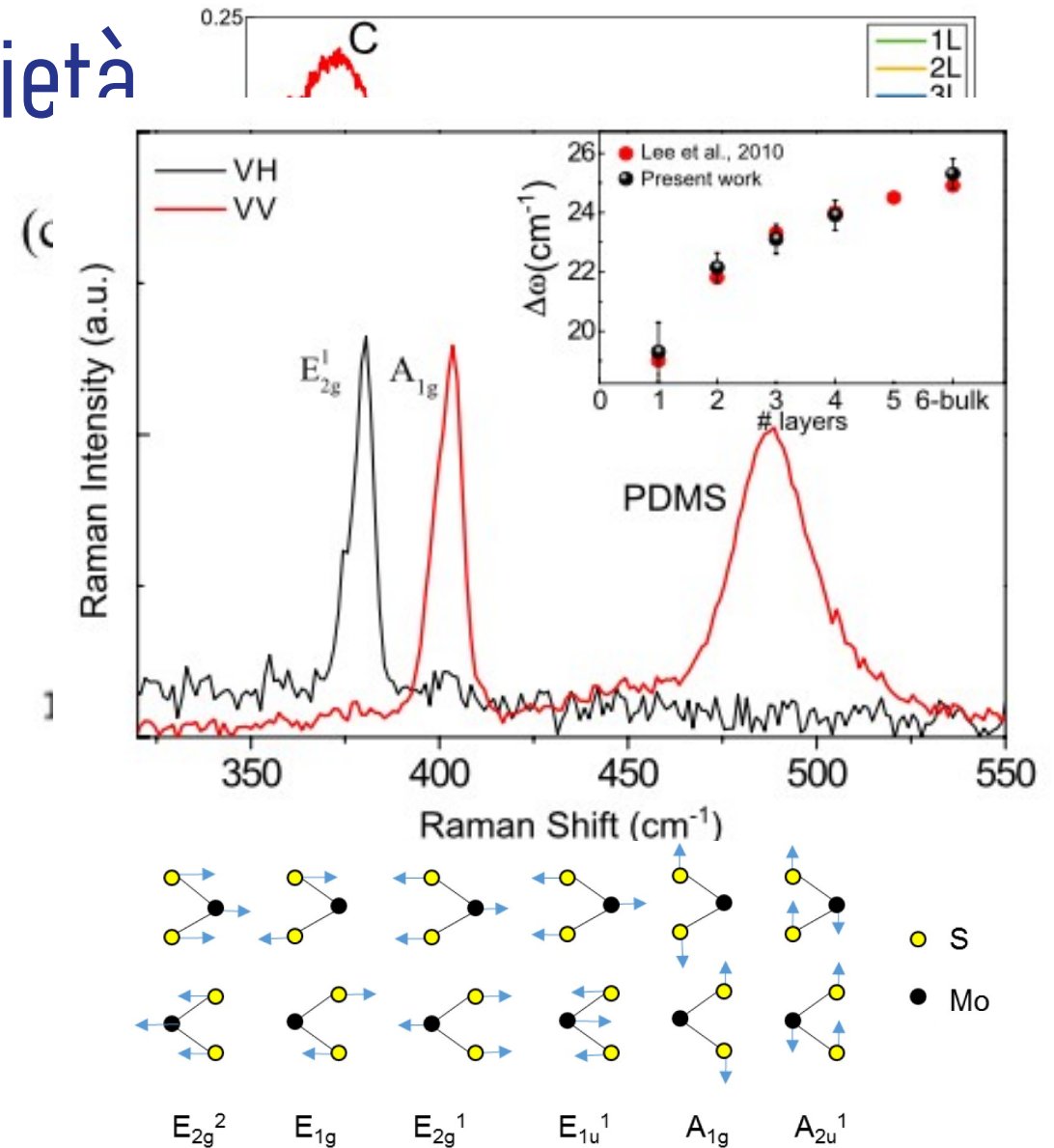
- Microscopia elettronica (SEM)
- Micro-spettroscopia UV-VIS
- Microscopia AFM
- Micro-spettroscopia Raman
- Micro-spettroscopia Brillouin
- Risposta alle deformazioni geometriche
- Trasporto elettronico



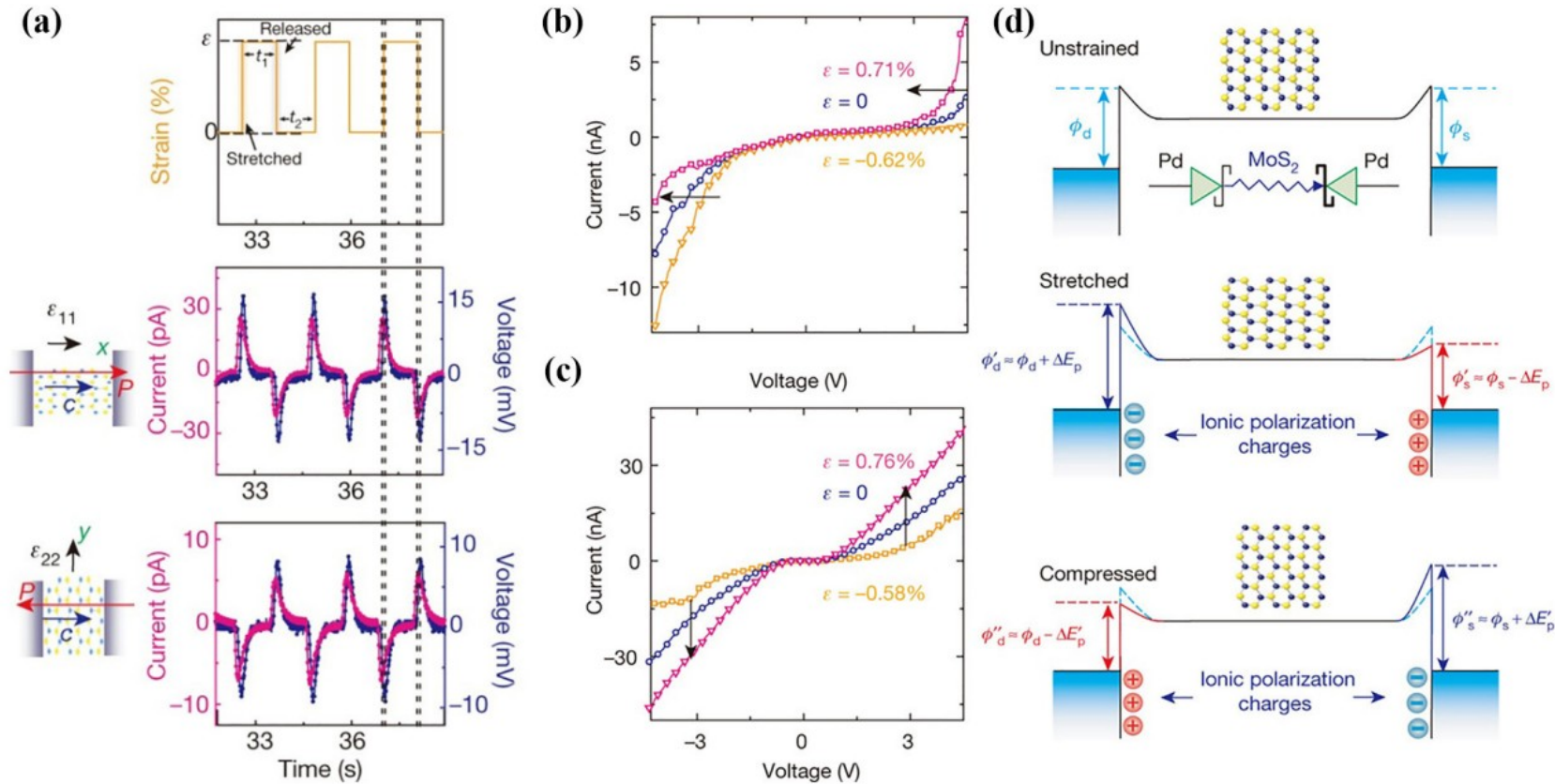
Materiali 2D: misura delle proprietà

Caratterizzazione e studio sperimentale:

- Microscopia elettronica (SEM)
- Micro-spettroscopia UV-VIS
- Microscopia AFM
- Micro-spettroscopia Raman
- Micro-spettroscopia Brillouin
- Risposta alle deformazioni geometriche
- Trasporto elettronico

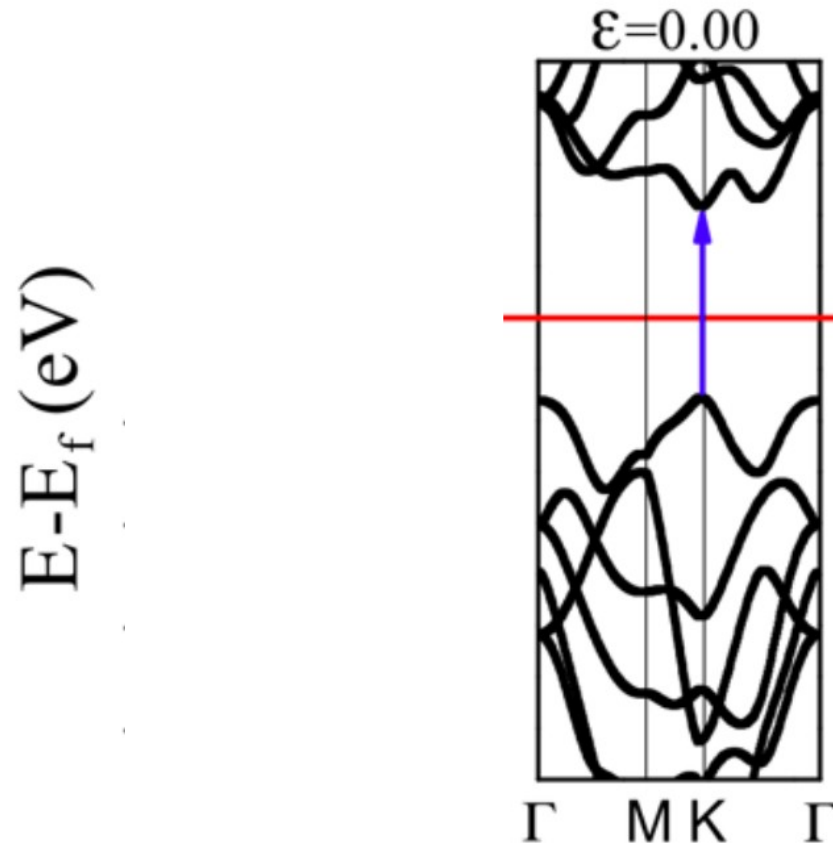


Materiali 2D: proprietà e deformazioni



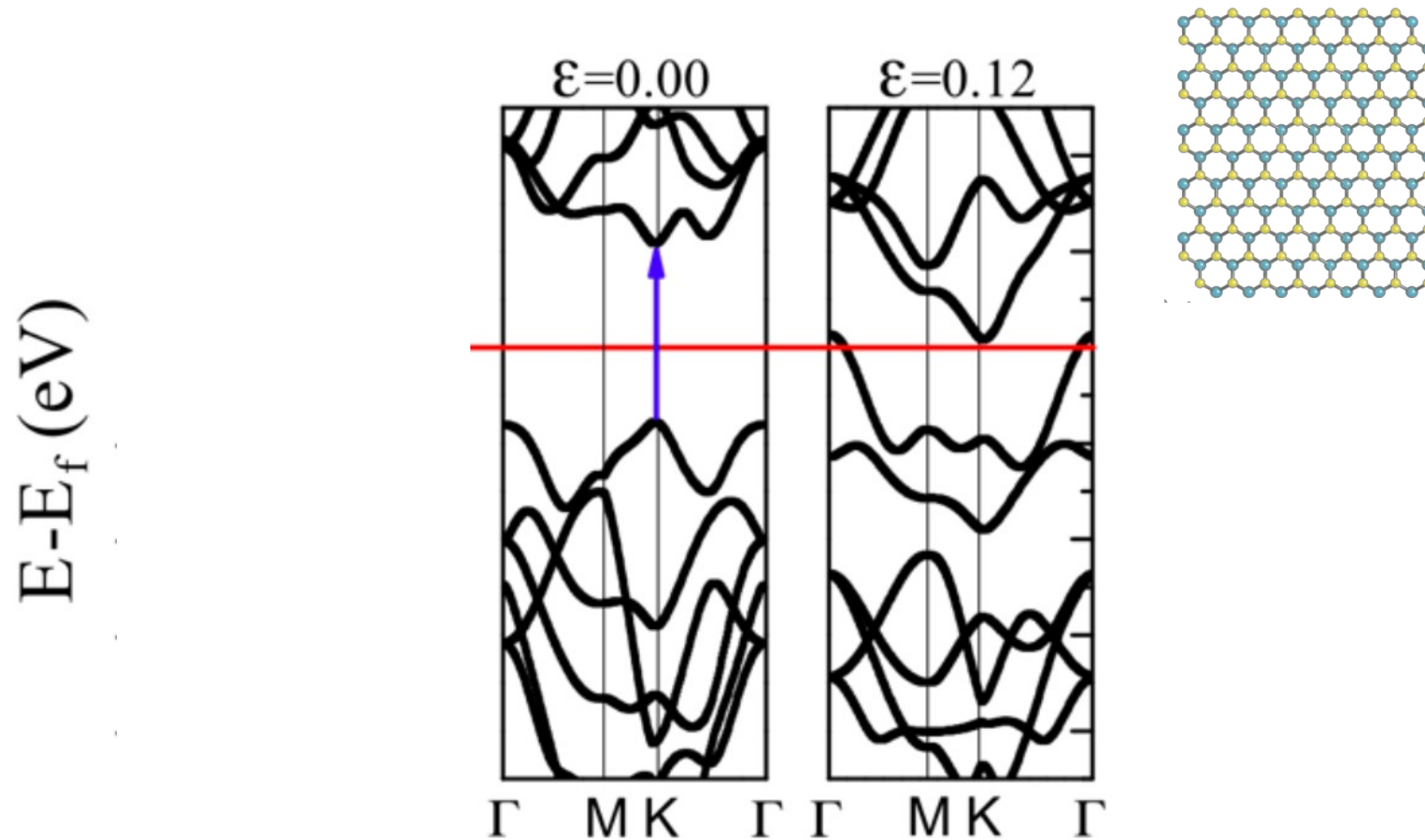
Kou, J., Liu, Y., Zhu, Y., & Zhai, J. (2018). Progress in piezotronics of transition-metal dichalcogenides. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51(49), 493002.

Materiali 2D: proprietà e deformazioni



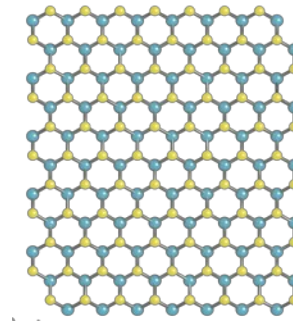
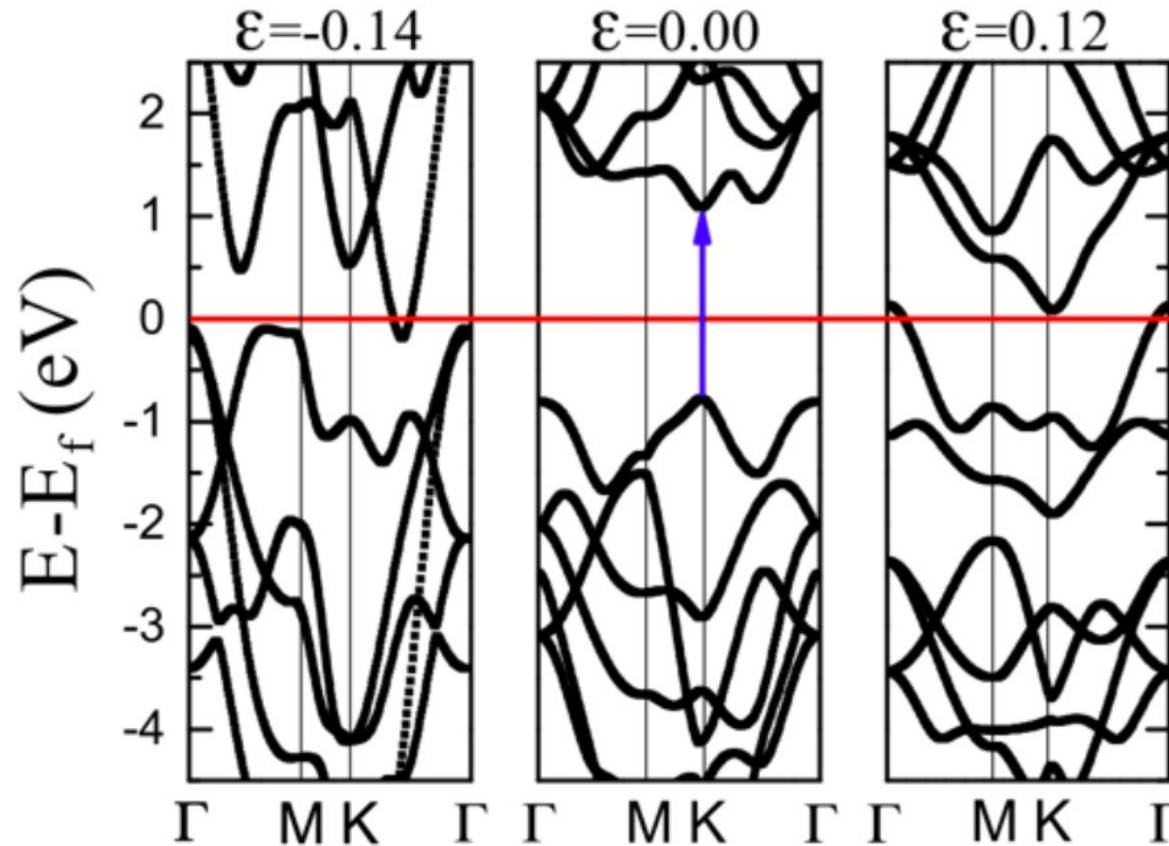
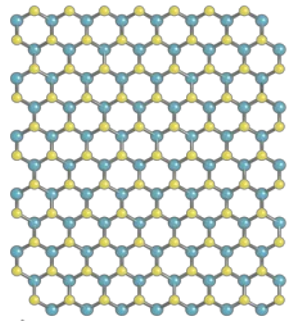
Band gap engineering of MoS₂ upon compression M López-Suárez, I Neri, R Rurali, *Journal of Applied Physics* 119 (16), 165105 (2016)

Materiali 2D: proprietà e deformazioni



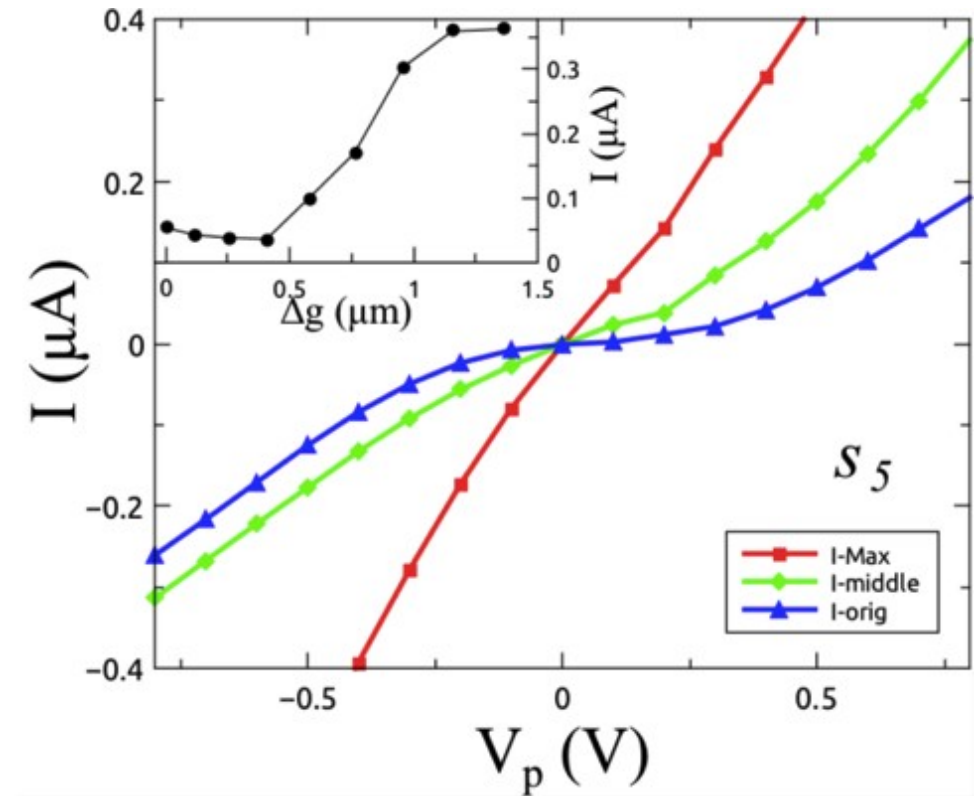
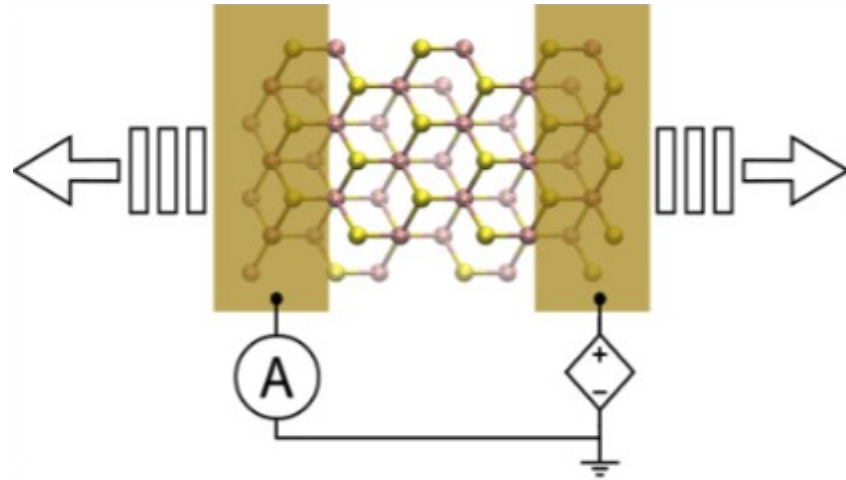
Band gap engineering of MoS₂ upon compression M López-Suárez, I Neri, R Rurali, *Journal of Applied Physics* 119 (16), 165105 (2016)

Materiali 2D: proprietà e deformazioni



Band gap engineering of MoS2 upon compression M López-Suárez, I Neri, R Rurali, Journal of Applied Physics 119 (16), 165105 (2016)

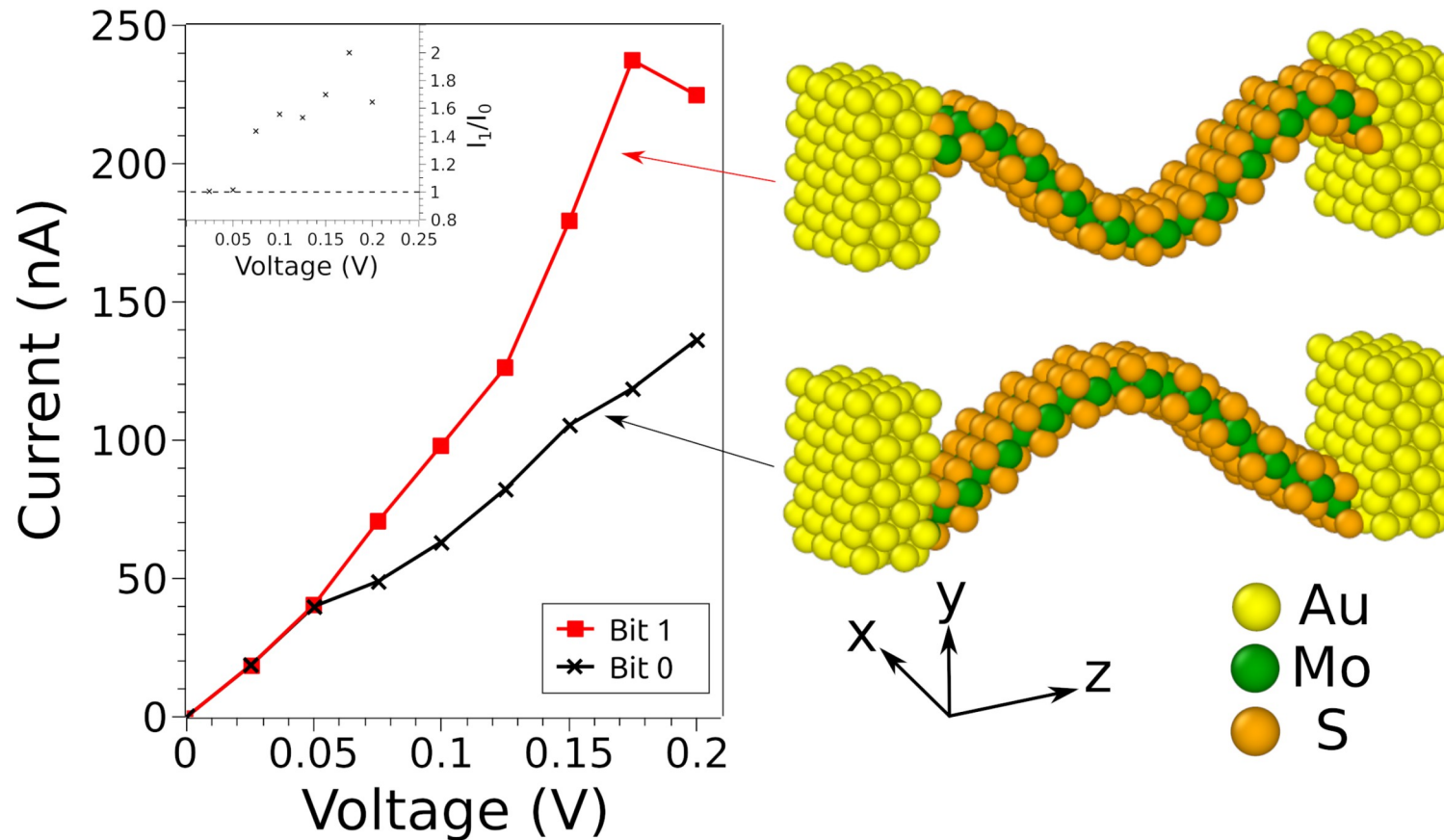
Materiali 2D: esempi applicazioni – sensore strain



Tunable MoS2 strain sensor, I Neri, M López-Suárez, L Gammaitoni, IEEE Instrumentation & Measurement Magazine 23 (1), 30-33 (2020)

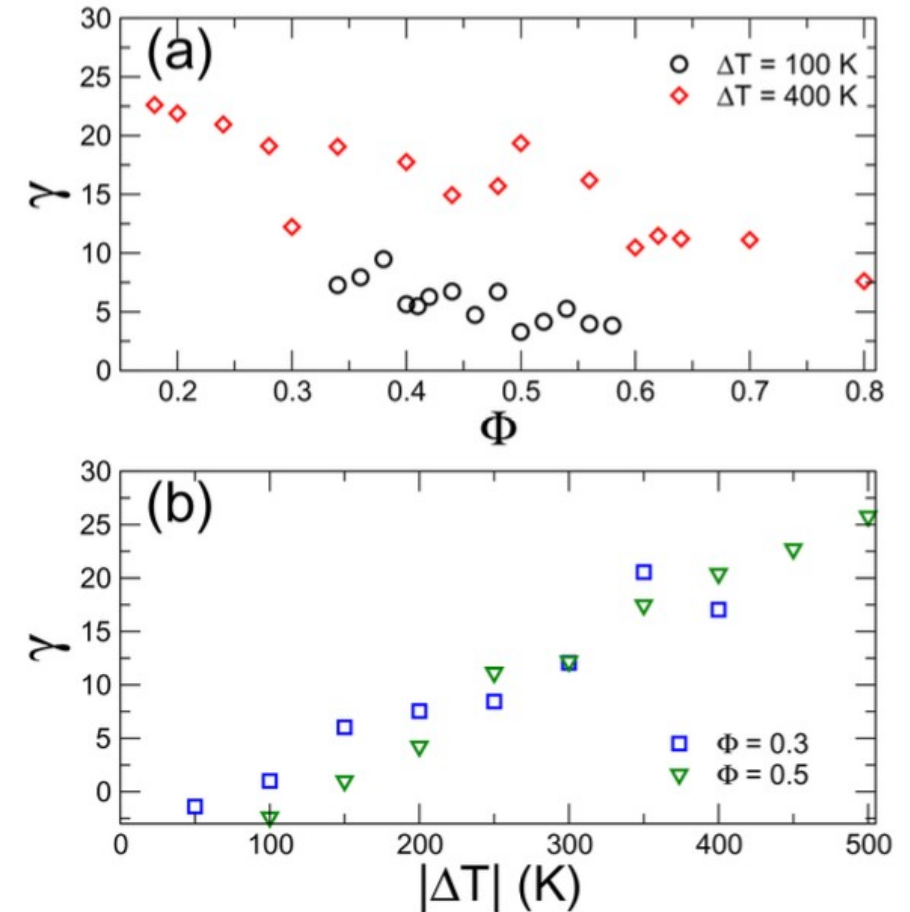
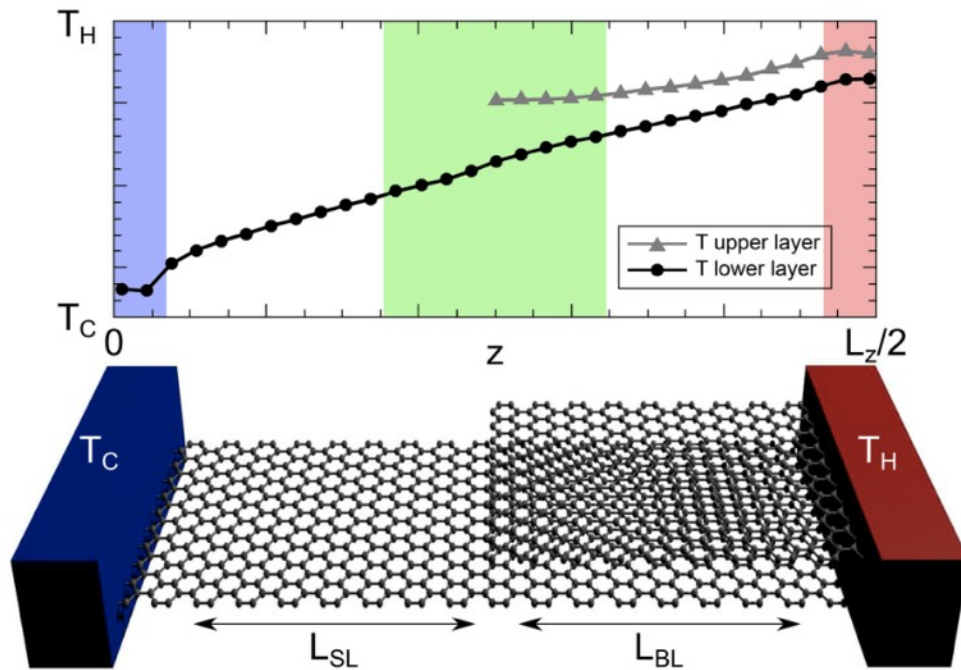
Electronic transport modulation on suspended few-layer under strain, I Neri, M López-Suárez, Physical Review B 97 (24), 241408 (2018)

Materiali 2D: esempi applicazioni – bit di memoria



López-Suárez, M., Cottone, F., & Neri, I. (2022). Piezoresistive Memories Based on Two-Dimensional Nano-Scale Electromechanical Systems. *Crystals*, 12(7), 968.

Materiali 2D: esempi applicazioni – diodo termico



Interface driven thermal rectification in a graphene–bilayer graphene junction from nonequilibrium molecular dynamics, M López-Suárez, I Neri, R Rurali, *Journal of Applied Physics* 124 (22), 224301 (2018)

Collaborazioni

- Italia
- Europa
- USA
- Brasile



Corsi (opzionali) utili e di riferimento

- Metodi statistici di analisi dati
- Fondamenti di Fisica delle Superfici
- Fisica dei Dispositivi
- Complementi di Fisica della Materia
- Tecniche Sperimentali di Fisica della Materia
- Biofotonica

- Energy Physics (LT)

Proposte di tesi

Compilative [LT]:

- Proprietà materiali 2D (I. Neri, L. Gammaitoni, M. Mattarelli, A. Di Michele, F. Cottone)
- Metodi computazionali per simulazioni MD e *ab initio* (I. Neri)

Sperimentali:

- Preparazione campioni [LT] (I. Neri, A. Di Michele)
- Caratterizzazione sperimentale materiali 2D [LT e LM] (I. Neri, M. Mattarelli, S. Caponi)
- Dispositivi basati su materiali 2D [LT e LM] (L. Gammaitoni, I. Neri, F. Cottone)
- Studio computazionale materiali 2D [LM] (I. Neri)
- Apparato per micro-imaging iperspettrale a scansione [LT e LM] (I. Neri, M. Mattarelli, S. Caponi)

Thank you for your attention