



DIPARTIMENTO  
DI FISICA E GEOLOGIA

# Materiali 2D: proprietà ed applicazioni

## Giornate di Orientamento alla Scelta delle Tesi in FISICA

05/04/2024

Igor Neri – [igor.neri@unipg.it](mailto:igor.neri@unipg.it)

# Outline

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

# Materiali 2D

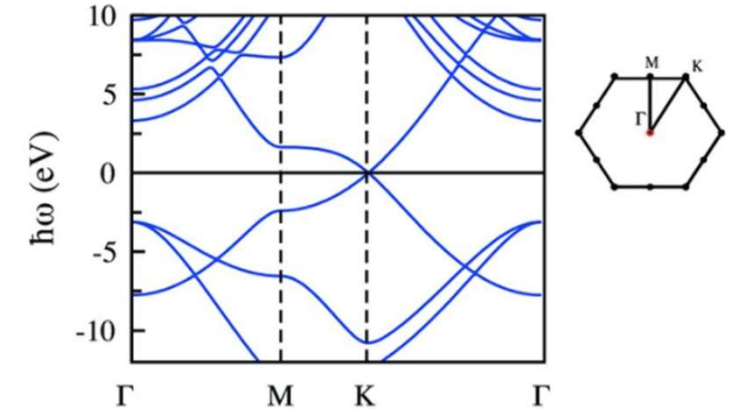
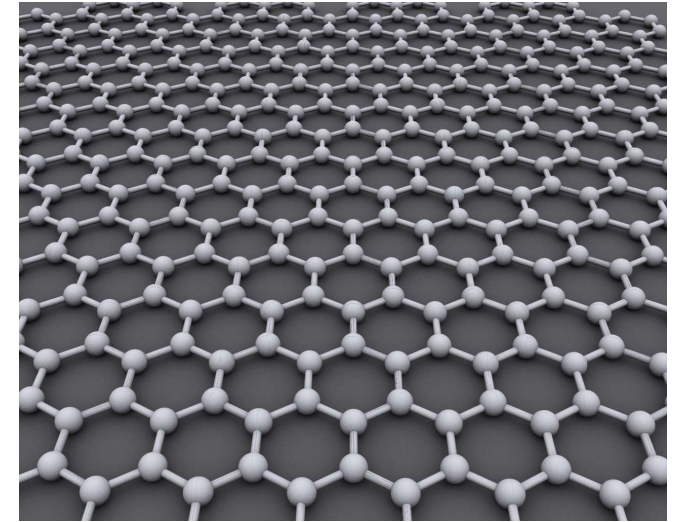
- Materiali costituiti da uno o più (pochi) strati atomici
  - Spessore trascurabile
- Eg. graphene: 1 – 10 layers considerato come materiale 2D
- Se lo spessore non è trascurabile il materiale è considerato 3D

# Un po' di storia

- 1859 – Brodie tenta (e fallisce) di esfoliare un singolo layer dalla grafite
- 1937 – Peierls e Landau suggeriscono che materiali strettamente 2D potessero non esistere
- 1986 – Boehm, Setton e Stumpp introducono 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 elettricitá

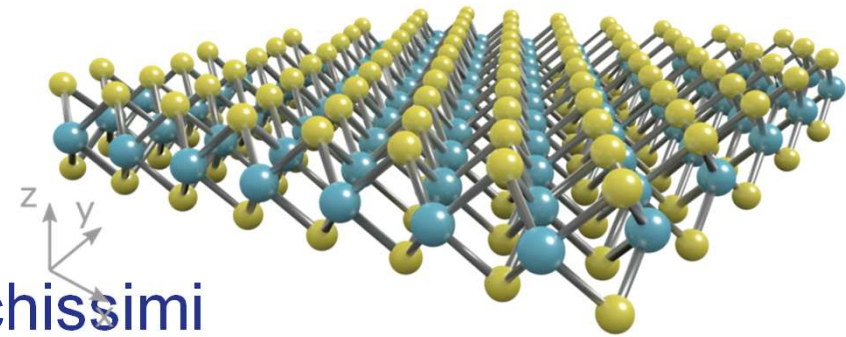


# Non solo Graphene

- Germanene: singolo layer di germanio
- Silicene: singolo layer di silicio
- Phosphorene: singolo layer di fosforo
- 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

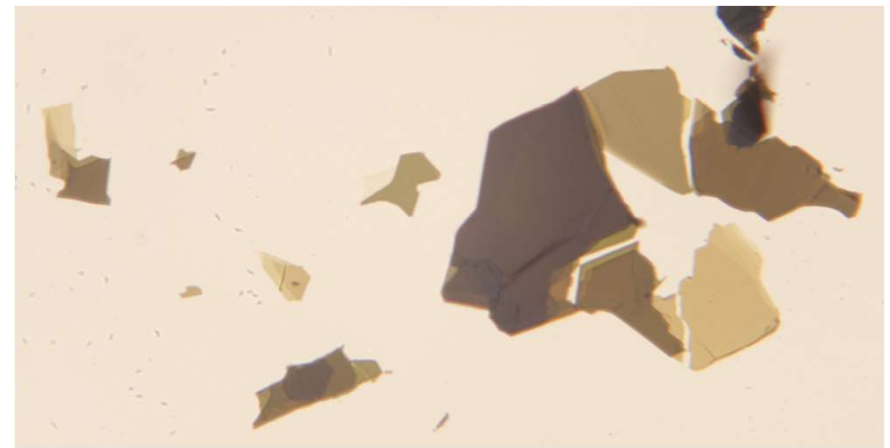
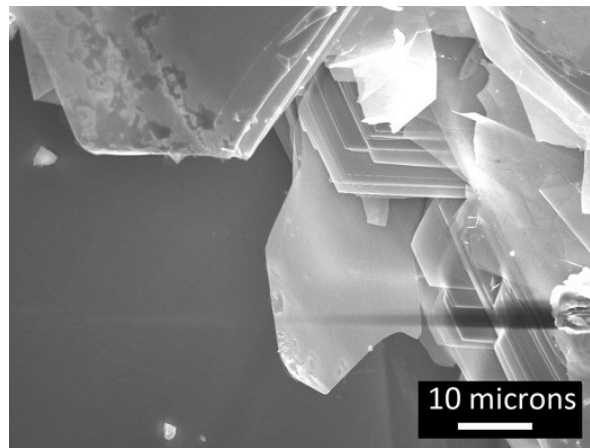
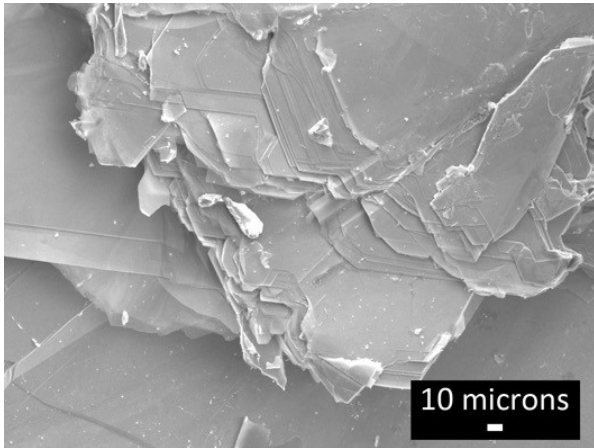
$$\vec{F}_i = m_i \vec{A}_i$$

- Quantistico → Equazione di Schrodinger → Approssimazione Born-Oppenheimer → Density Functional Theory (DFT)

- Proprietà meccaniche, bande elettroniche, ...
- Centinaia di atomi

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

# Materiali 2D: produzione

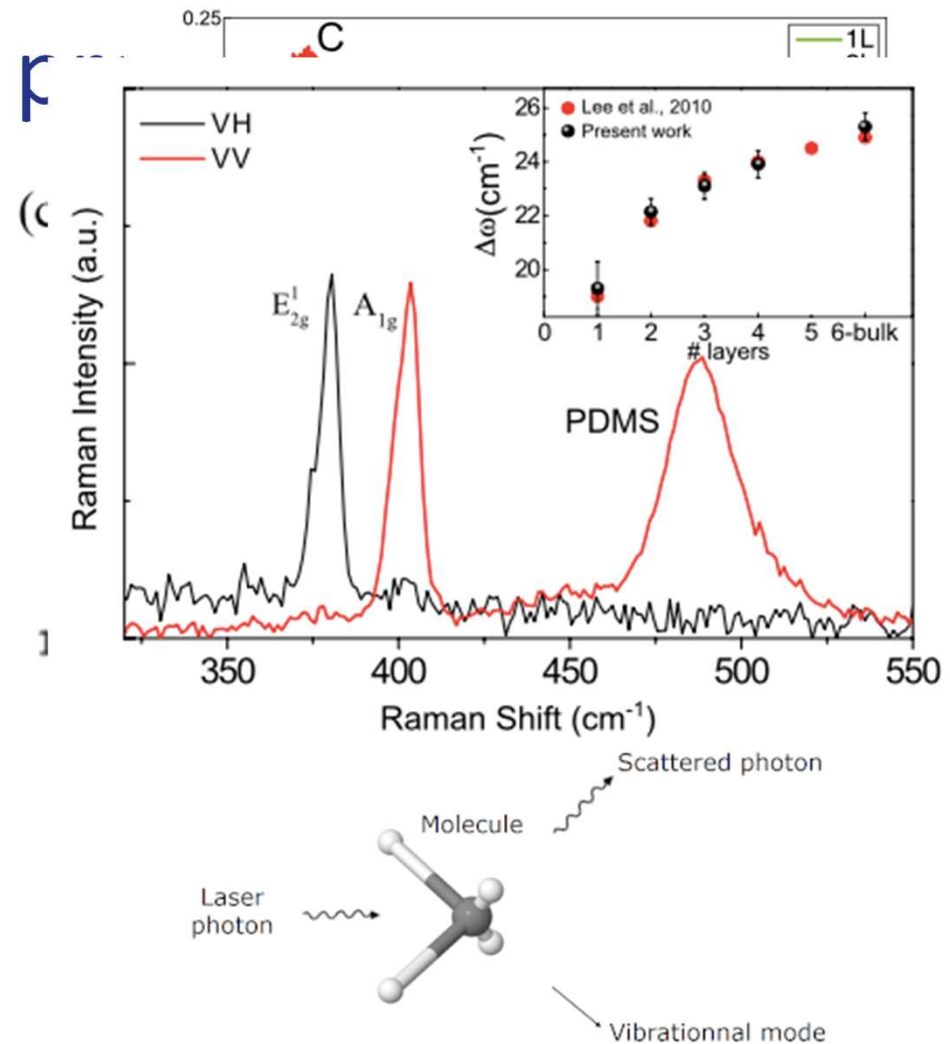




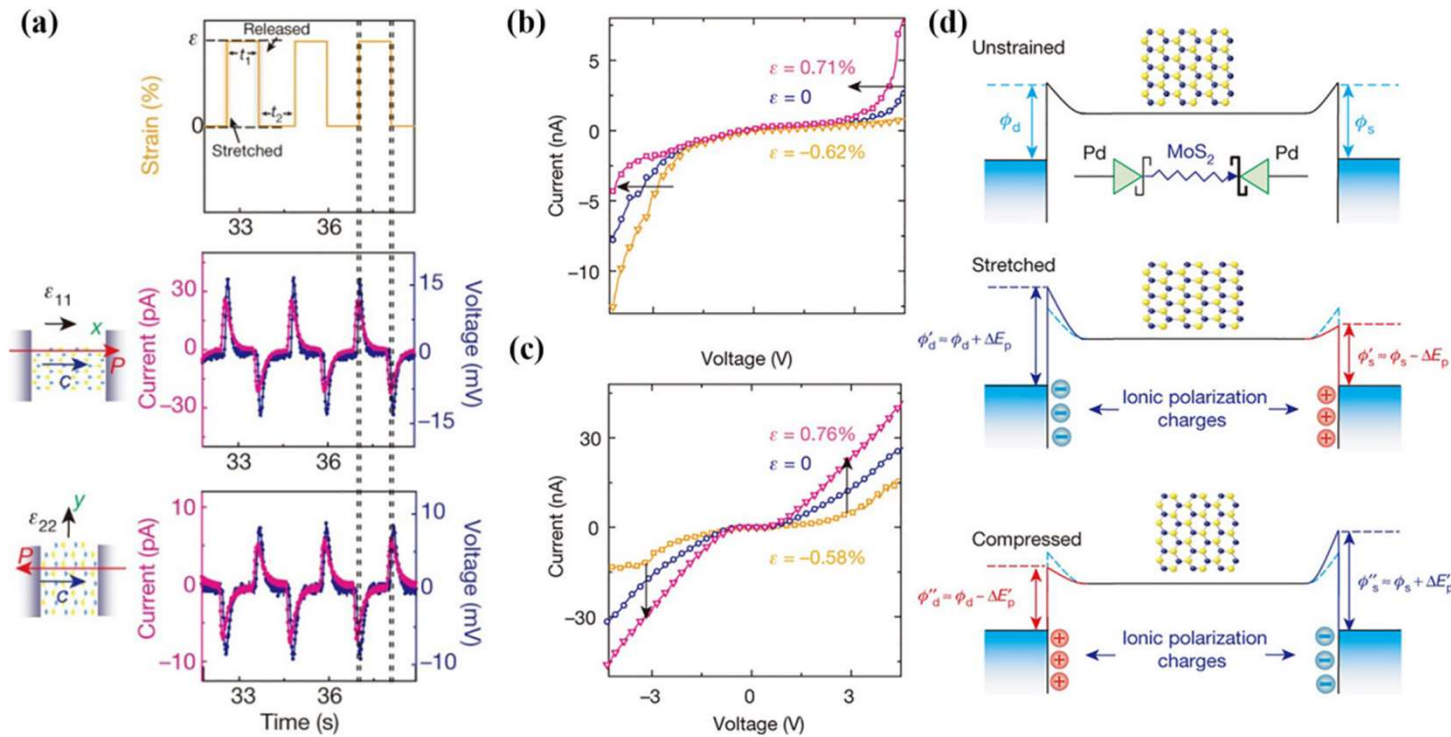
# Materiali 2D: misura delle p

Caratterizzazione e studio sperimentale:

- Microscopia elettronica (SEM)
- Micro-spettroscopia UV-VIS
- Microscopia AFM
- Micro-spettroscopia Raman
- Micro-spettroscopia Brillouin
- Bande elettroniche

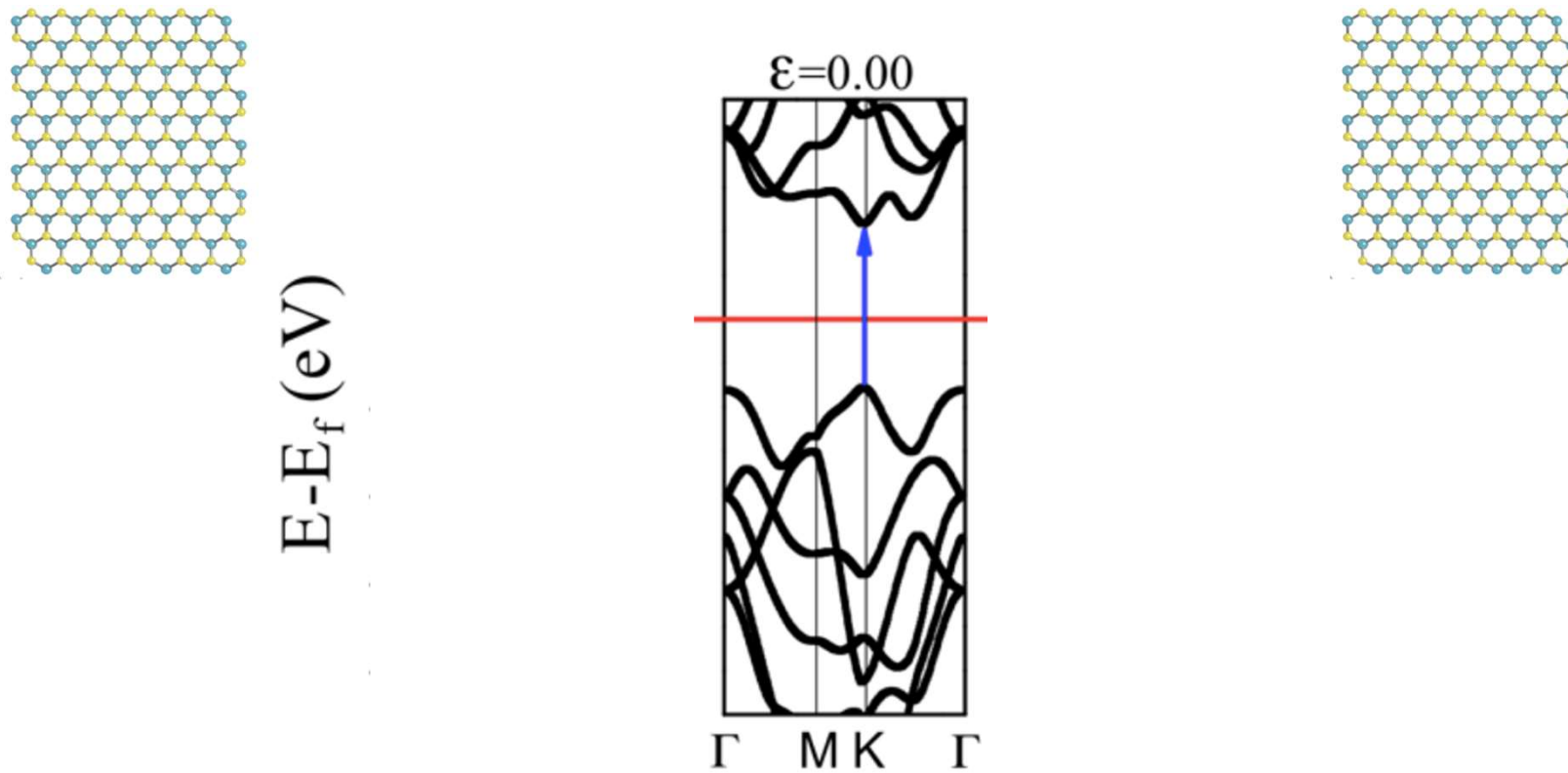


# Materiali 2D: proprietà e deformazioni → piezoelettricità



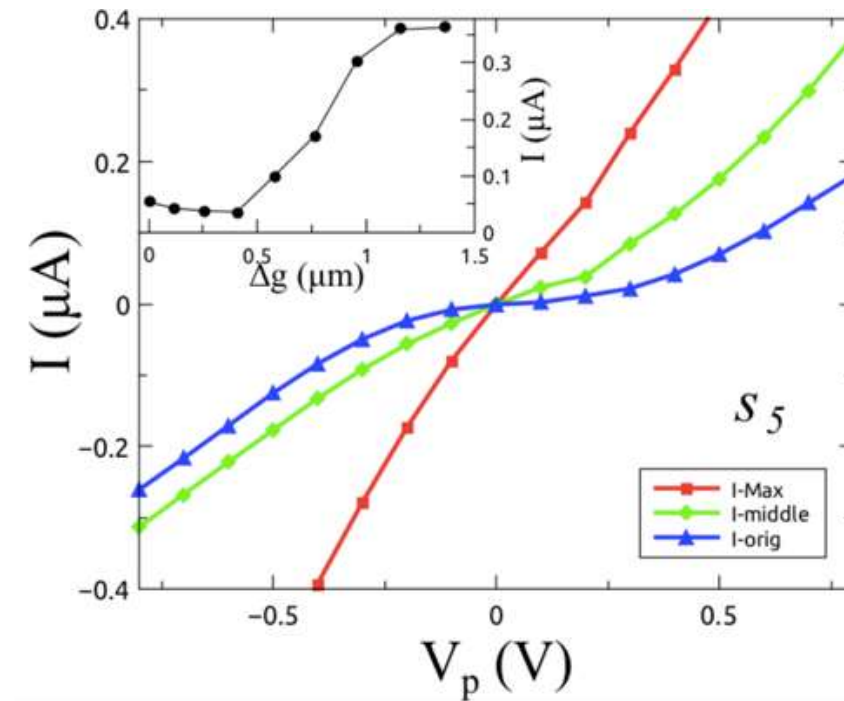
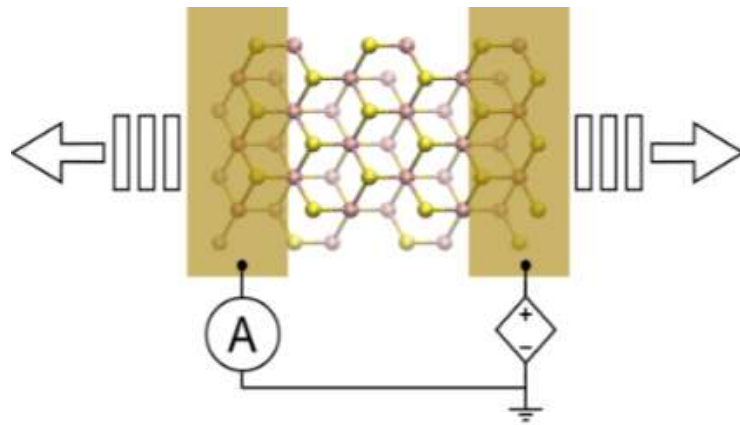
Kou, J., Liu, Y., Zhu, Y., & Zhai, J. (2018). Progress in piezotronics of transition-metal dichalcogenides. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51(49), 493002.

# Materiali 2D: proprietà e deformazioni → Straintronics



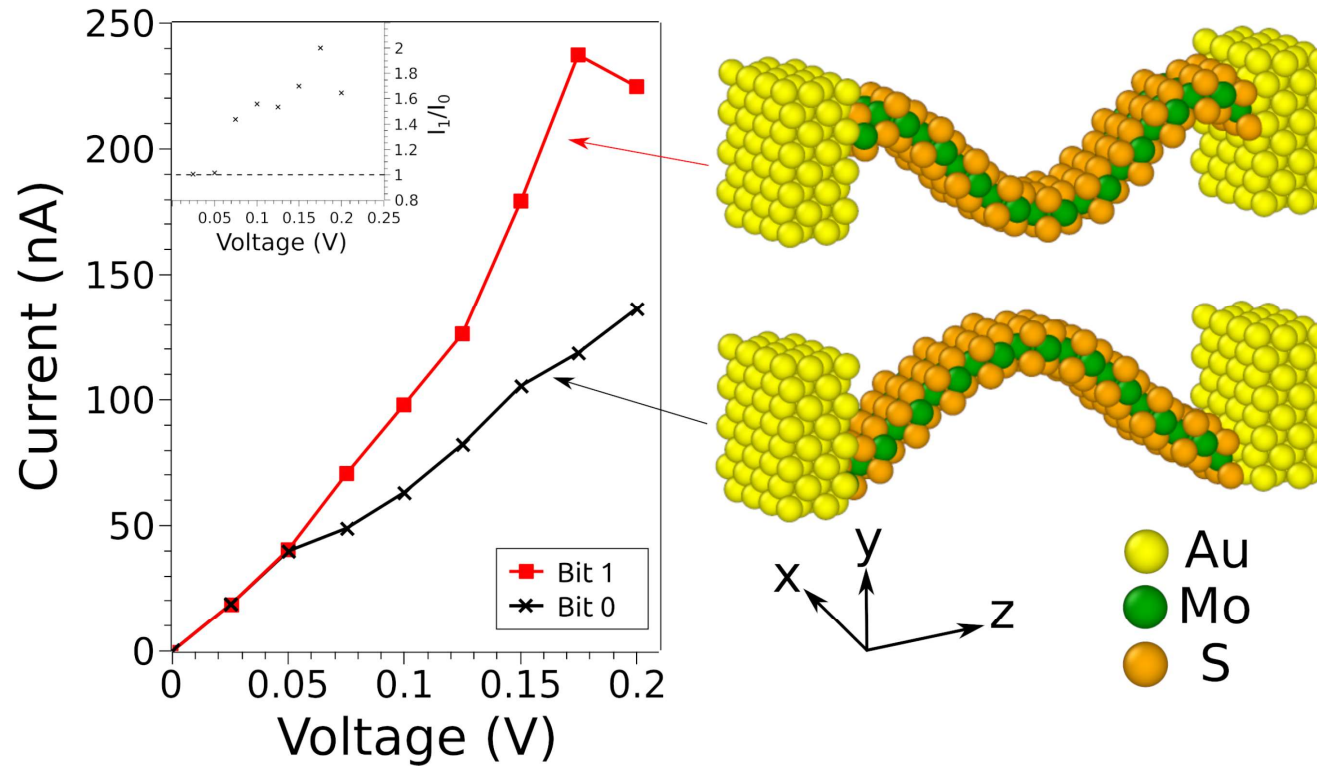
Band gap engineering of MoS<sub>2</sub> upon compression M López-Suárez, I Neri, R Rurali, *Journal of Applied Physics* 119 (16), 165105 (2016)

## Materiali 2D: esempi applicazioni – sensore strain



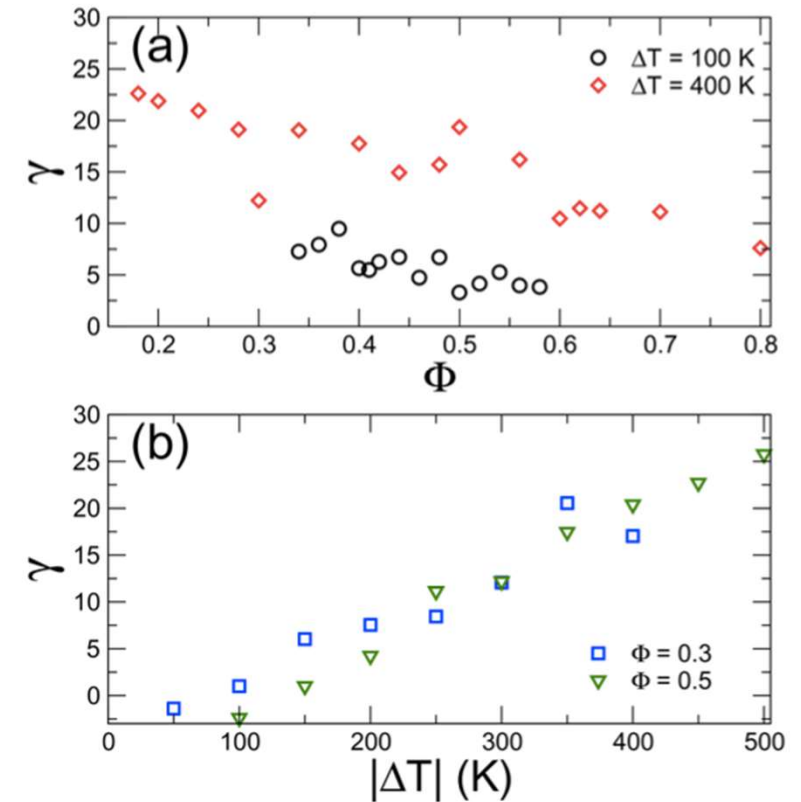
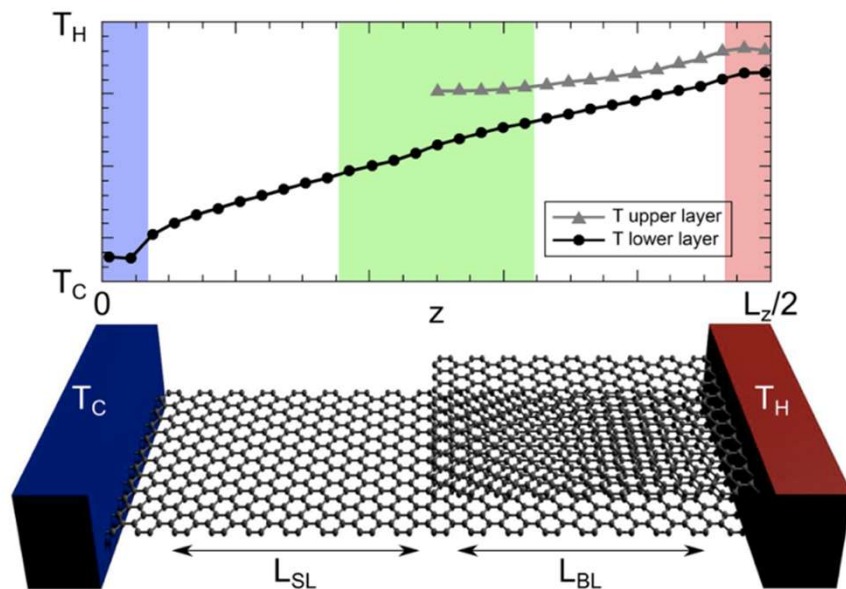
Tunable MoS2 strain sensor, I Neri, M López-Suárez, L Gammaitoni, IEEE Instrumentation & Measurement Magazine 23 (1), 30-33 (2020)  
Electronic transport modulation on suspended few-layer under strain, I Neri, M López-Suárez, Physical Review B 97 (24), 241408 (2018)

# Materiali 2D: esempi applicazioni – bit di memoria/transistor



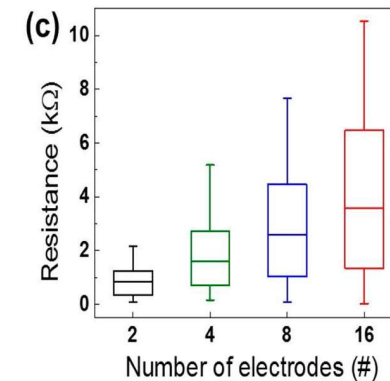
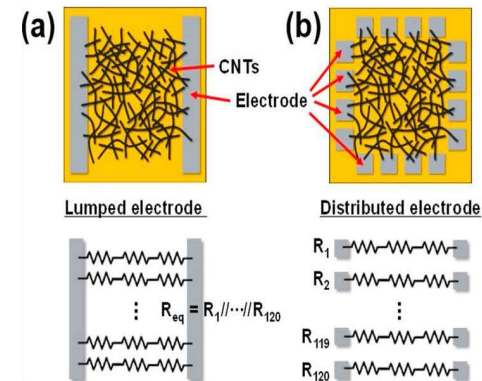
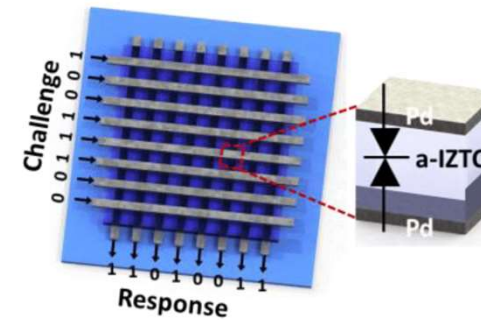
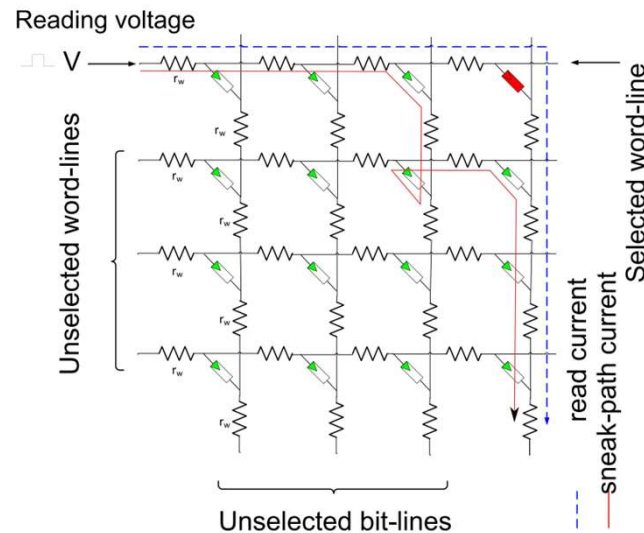
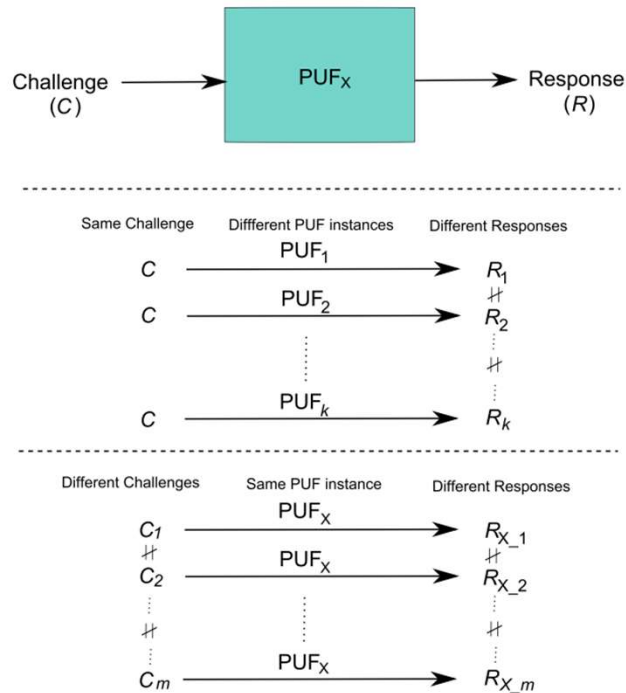
López-Suárez, M., Cottone, F., & Neri, I. (2022). Piezoresistive Memories Based on Two-Dimensional Nano-Scale Electromechanical Systems. *Crystals*, 12(7), 968.

# 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)

# Materiali 2D: esempi applicazioni – PUF



Gao, Yansong, et al. "Emerging physical unclonable functions with nanotechnology." IEEE access 4 (2016): 61-80.

Kim, N.; Jeon, S.-B.; Jang, B.C. Hardware-Intrinsic Physical Unclonable Functions by Harnessing Nonlinear Conductance Variation in Oxide Semiconductor-Based Diode. Nanomaterials 2023, 13, 675. <https://doi.org/10.3390/nano13040675>

<https://technology.nasa.gov/patent/TOP2-317>

# Proposte (esempio) 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)
- Analisi e classificazione con ML di spettri UV-VIS/Raman (I. Neri)



# Contatti



Igor Neri  
igor.neri@unipg.it



Luca Gammaitoni  
luca.gammaitoni@unipg.it



Maurizio Mattarelli  
maurizio.mattarelli@unipg.it



Alessandro Di Michele  
alessandro.dimichele@unipg.it



Francesco Cottone  
francesco.cottone@unipg.it

# 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)

# Thank you for your attention