

Superfici ed interface: calcoli ab-initio per lo studio dei materiali e la progettazione di dispositivi.

Le proprietà elettroniche, ottiche e di trasporto connesse con superfici isolate e con superfici di separazione tra due diversi materiali sono essenzialmente determinate dagli stati elettronici attorno al livello di Fermi del sistema complessivo. La natura e il controllo di tali stati richiede una accurata descrizione microscopica che può essere affrontata teoricamente in termini di sofisticati calcoli da principi primi.

Vengono qui riportati risultati relativi a tre situazioni importanti: un'interfaccia tra due materiali inorganici, tra un materiale organico ed uno inorganico, e tra due materiali organici.

Per ciascuno di essi viene presentata l'analisi delle proprietà strutturali, elettroniche e di trasporto che sono alla base del funzionamento di dispositivi realistici basati sulla fisica di tali interfacce.

Primary author: Dr MENICHETTI, Guido (Dipartimento di Fisica, Pisa)

Co-authors: Prof. GROSSO, Giuseppe (Dipartimento di Fisica, Pisa); Prof. COLLE, Renato (DICAM, Università di Bologna)

Presenter: Dr MENICHETTI, Guido (Dipartimento di Fisica, Pisa)