

Modellizzazione quantomeccanica di superfici inorganiche nano-ingegnerizzate

Dr. Alessandro Motta

Lo sviluppo tecnologico a cui stiamo assistendo ai giorni d'oggi è senza precedenti. Da un lato, qualsiasi molecola che mostri proprietà di interesse applicativo nel campo dell'energia, salute e ambiente è spesso soggetta ad un processo di integrazione su superfici inorganiche con l'obiettivo di migliorare le prestazioni della superficie, o di migliorare le prestazioni della molecola adsorbita. Dall'altro lato, la corsa alla miniaturizzazione ha reso necessaria la comprensione a livello molecolare sia dei processi di integrazione e adsorbimento delle molecole sia dei meccanismi di funzionamento delle superfici nano ingegnerizzate. Questa comprensione è resa difficile dalla complessità intrinseca delle superfici. Wolfgang Pauli era solito dire "God made the bulk; the surface was invented by the devil" riferendosi proprio alla difficoltà di studiare le proprietà delle interfacce rispetto a quelle dei materiali massivi. In questo contesto, la modellizzazione teorica spesso si rivela un utile strumento con un duplice scopo. Da un lato può dare supporto alle interpretazioni sperimentali dei fenomeni studiati. Dall'altro può fornire una immagine e una spiegazione a livello molecolare dei processi coinvolti.

In questo seminario si illustreranno alcuni esempi di studio delle superfici nano ingegnerizzate attraverso un approccio combinato sperimentale/teorico focalizzando maggiormente l'attenzione sul supporto che la modellizzazione quantistica può fornire ai dati sperimentali. Più in dettaglio, si presenteranno alcuni complessi organometallici a base di elementi di transizione adsorbiti su superfici di allumina e di zirconia, e le loro proprietà catalitiche nell'ambito di processi di idrogenazione degli areni e di polimerizzazione delle olefine. Inoltre, si presenterà uno studio sul controllo delle proprietà del grafene ossido attraverso procedure chimiche ed elettrochimiche. Continuando, si presenteranno degli studi di interazione di biomolecole su interfaccia boehmite/acqua come precursore modello per lo sviluppo di materiali anticorrosione e per applicazioni biomediche. Il seminario si concluderà con degli esempi di ingegnerizzazione di superfici di silicio Si(100), come potenziali metodi di sintesi per l'integrazione diretta di proprietà molecolari su microprocessori.