

PROPOSTE DI TESI DI LAUREA AA2425

Le proposte sono per la tesi di laurea (triennale) ma possono essere estese per la tesi magistrale.

- 1) Uso del metodo TD-BSE per il calcolo delle proprietà ottiche non lineari in piccole molecole:sviluppo/ implementazione del metodo e dimostrazione
- 2) Derivazione analitica del metodo GW e/o BSE. Lo studente svolgerà esplicitamente tutti i calcoli che permettono di derivare le equazioni per esprimere le energie di quasi-particella e le energie di eccitazione.
- 3) Simulazione Car-Parrinello di una molecola in solvente esplicito: analisi dell'oscillazione dei livelli elettronici.
- 4) Uso di software basati su algoritmi genetici per trovare le configurazioni cristalline stabili ad altissima pressione
- 5) Studio DFT delle proprietà di base delle fasi cristalline del ghiaccio
- 6) Effetto fotogalvanico in LiNbO_3
- 7) Calcolo dei livelli elettronici di difetti, anche carichi, applicazione a perovskiti per celle solari: prima si imparano le basi di DFT e del calcolo delle energie dei difetti
- 8) Implementazione del metodo a campo D finito in conti con PBC: applicazioni ad un materiale ferroelettrico. Attualmente i calcoli DFT con PBC supportano E scelto, vogliamo scegliere D
- 9) Defect energy barriers in perovskiti per celle solari uso NEB: vogliamo trovare le barriere energetiche che regolano la migrazione (diffusione) di difetti
- 10) Calcolo di offsets dei livelli elettronici in interfacce tra perovskiti miste organiche ed inorganiche e HTL o ETL con DFT e GW per applicazioni in celle solari
- 18) Implementazione di 2D PBC nel codice GW e calcolo dei livelli elettronici in materiali 2D semiconduttori

19)Conducibilità termica di un vetro con force-fields da machine-learning applicazione a Ta₂O₅

20)Costruzione di force-field ML da dati ab-initio per aTa₂O₅ dopata con Ti

21)Addestramento di chatbot per programmazione in Quantum-Espresso

22)Uso di software per elementi finiti per studio effetto pyro- piezo- e foto-galvanico in LiNbO₃

