

## PROPOSTE DI TESI DI LAUREA AA2324

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
- 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) Calcolo proprietà di LiNbO<sub>3</sub> cristallino, materiali ferroelettrico, da principi-primi usando la DFT
- 7) Effetto fotogalvanico in LiNbO<sub>3</sub>
- 8) Uso di Wannier interpolation a partire da conti in supercella, poi analisi della presenza di difetti, vogliamo mappare un conto fatto su una supercella in uno sulla cella primitiva per essere poi interpolato
- 9) 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
- 10) 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
- 11) Defect energy barriers in perovskiti per celle solari uso NEB: vogliamo trovare le barriere energetiche che regolano la migrazione (diffusione) di difetti
- 12) Parallelizzazione OPENMP e/o OPENACC di un codice per studiare i campi elettrici generati da distribuzioni di temperatura e irraggiamento su di una superficie di LiNbO<sub>3</sub>

- 13) Generazione di modelli di Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> amorfa tramite tecniche di machine learning (serve GPU con min 8 GB)
- 14) Raman con bond-polarizability model a partire da dati DFT per Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>
- 15) Sviluppo di un codice per la simulazione della forma di una goccia dielettrica in aria in un campo elettrico
- 16) Sviluppo di un workflow automatico per il calcolo delle proprietà di un materiale semiconduttore (mobilità, masse efficaci, spettro di assorbimento) tramite DFT che determinano l'efficienza di un cella solare in cui viene impiegato e calcolo dell'efficienza tramite simulazione con SCAP1D
- 17) 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

