



## TITOLO E ABSTRACT TEMA DI RICERCA BORSISTI

**Inizio attività: 2025**

### **Pili Elisa**

**Tema di Ricerca:**

Conducibilità alla nanoscala nelle perovskiti ibride

**Abstract:**

La borsa di ricerca riguarda lo studio della conducibilità elettrica delle perovskiti ibride con risoluzione nanometrica, utilizzando la microscopia a forza atomica in modalità conduttiva (C-AFM). L'obiettivo principale è analizzare il comportamento elettronico di questi materiali a livello nanometrico, esplorando come la loro struttura e composizione influenzano la conduzione elettrica. L'uso dell'AFM permetterà di mappare le proprietà locali delle superfici e ottenere una comprensione più profonda dei meccanismi di trasporto elettronico nelle perovskiti ibride, con potenziali applicazioni in dispositivi elettronici avanzati e fotovoltaici.

The research position focuses on studying the electrical conductivity of hybrid perovskites with nanometric resolution, using conductive atomic force microscopy (C-AFM). The main objective is to analyze the electronic behavior of these materials at the nanoscale, exploring how their structure and composition influence electrical conductivity. The use of AFM will allow for mapping the local properties of surfaces and gaining a deeper understanding of the electronic transport mechanisms in hybrid perovskites, with potential applications in advanced electronic and photovoltaic devices.

### **Ribeiro Da Silva Claudio**

**Tema di Ricerca:**

Studio teorico-computazionale di leghe a base di ossidi semiconduttori con ampio band gap e perovskiti organiche verdi per elettronica di potenza e celle solari.

**Abstract:**

Una delle attuali frontiere della ricerca sui semiconduttori è lo sviluppo di nuovi materiali che riducano al minimo l'impatto ambientale e soddisfino le esigenze di generazione e distribuzione dell'energia. Centrali elettriche piccole e più efficienti stanno sostituendo gli impianti su larga scala, concentrandosi sui dispositivi di conversione dell'energia solare. In questo contesto, due classi di materiali sono emerse come candidati importanti: le leghe di semiconduttori per l'elettronica di potenza e celle solari prive di metalli pesanti come alternative ai dispositivi a base di silicio. Questo



progetto teorico-computazionale vuole indagare le proprietà elettroniche e termodinamiche delle leghe di semiconduttori a banda larga e ultralarga (WBG eUWBG) -  $\text{In}_2\text{O}_3$  e  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  - per applicazioni nell'elettronica di potenza, nonché le proprietà elettroniche della perovskite  $\text{MASnI}_3$ , in cui il cesio è sostituito dal metilammonio (MA). Le leghe  $\text{In}_2\text{O}_3$ - $\text{Ga}_2\text{O}_3$  mostrano valori di band-gap che vanno da 3,1 a 4,6 eV e un'elevata modificabilità delle proprietà elettroniche ed ottiche, rendendole promettenti per l'elettronica di potenza e l'optoelettronica. Le sfide principali in questo tipo di ricerca includono le correzioni di quasi-particella per descrivere accuratamente le proprietà elettroniche. Per le leghe, una delle maggiori difficoltà risiede anche nella mancanza di metodi termodinamici rigorosi, mentre il  $\text{MASnI}_3$  soffre di elevati tassi di degradazione. Le sfide principali in questo tipo di ricerca includono correzioni di quasi-particella (self-energia) per descrivere accuratamente le proprietà elettroniche, poiché la teoria del funzionale della densità (DFT) tipicamente sottostima il band-gap. Questo progetto di studio vuole utilizzare metodi DFT-1/2, che sono meno costosi dal punto di vista computazionale rispetto ai funzionali ibridi e agli approcci GW, insieme a nuove tecniche per la termodinamica delle leghe. Verranno inoltre affrontati gli effetti eccitonici (effetti a due particelle) in differenti approssimazioni. L'obiettivo è studiare come il drogaggio di  $\text{MASnI}_3$  con  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  o  $\text{Ge}^{2+}$ , influisce sulla stabilità del composto. Allo stesso modo, per  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{O}_3$ , miriamo ad analizzare le sue proprietà elettroniche e termodinamiche per supportare strategie di ingegneria dei materiali per la stabilità strutturale.

One of the current frontiers in semiconductor research is the development of new materials that minimize environmental impact and meet the demands of energy generation and distribution. Small, more efficient power plants are replacing large-scale facilities, with a focus on solar energy conversion devices. In this context, two classes of materials have emerged as prominent candidates: semiconductor alloys for power electronics and heavy-metal-free solar cells as alternatives to silicon-based devices. This theoretical-computational project investigates the electronic and thermodynamic properties of wide and ultrawide bandgap (WBG and UWBG) semiconductor alloys— $\text{In}_2\text{O}_3$  and  $\text{Ga}_2\text{O}_3$ —for applications in power electronics, as well as the electronic properties of the perovskite  $\text{MASnI}_3$ , in which cesium is replaced by methylammonium (MA).  $\text{In}_2\text{O}_3$ - $\text{Ga}_2\text{O}_3$  alloys exhibit bandgaps ranging from 3.1 to 4.6 eV and high tunability of electronic and optical properties, making them promising for power electronics and optoelectronics. Meanwhile,  $\text{MASnI}_3$ , with a bandgap of 1.3 to 1.4 eV, high optical absorption, and excellent charge carrier mobility, is a strong candidate for solar cell applications. Key challenges in this type of research include quasiparticles(self-energy) corrections to accurately describe electronic properties, as density functional theory (DFT) underestimates the bandgap. For alloys, a major difficulty also lies in the lack of rigorous thermodynamic methods, while  $\text{MASnI}_3$  suffers from high degradation rates. This study employs DFT-1/2 methods, which are computationally less expensive than hybrid functionals and GW approaches, along with new the chemical techniques for alloy thermodynamics. Excitonic (two-particle effects) will be also addressed within different approximations. The objective is to investigate how doping  $\text{MASnI}_3$  with  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ , or  $\text{Ge}^{2+}$ —elements that theoretically mitigate  $\text{Sn}^{2+}$  oxidation—affects its stability. Similarly, for  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{O}_3$ , we aim to analyze its electronic and thermodynamic properties to support material engineering strategies for structural stability.

## Carboni Zaira



**Tema di Ricerca:**

Utilizzo e sviluppo di sistemi compatti per spettroscopia Raman e di Fluorescenza: un approccio congiunto teorico e sperimentale

**Abstract:**

L'attività di ricerca concerne lo studio e lo sviluppo di sistemi compatti per la determinazione delle proprietà di Fluorescenza e Raman di materiali (minerali) e di individuare le proprietà distintive delle stesse mediante spettroscopia ottica. Le proprietà di interesse saranno anche verificate mediante simulazione quanto-meccanica di sistemi modello rappresentativi dei materiali. I materiali presi in esame, di natura naturale (minerali) o eventualmente sintetizzati in laboratorio, potranno contenere elementi dopanti di specifico interesse del progetto DEXPLORE.

The research activity focuses on the study and development of compact systems for determining the fluorescence and Raman properties of materials (minerals) and identifying their distinctive characteristics through optical spectroscopy. The properties of interest will also be verified through quantum-mechanical simulations of model systems representative of the materials. The examined materials, whether naturally occurring (minerals) or synthesized in the laboratory, may contain dopant elements of specific interest to the DEXPLORE project.

## Melis Federica

**Tema di Ricerca:**

Studio delle proprietà di trasporto termico dei Metal-Organic Frameworks bidimensionali mediante dinamica molecolare classica

**Abstract:**

Il/la candidato/a si occuperà di calcolare, tramite tecniche di dinamica molecolare di non equilibrio, la conducibilità termica di Metal-Organic Frameworks (MOF) bidimensionali, utilizzando potenziali modello sviluppati attraverso tecniche di machine learning. Il lavoro si inserisce all'interno del progetto MOF2D-TED, il cui obiettivo è il calcolo delle proprietà termoelettriche di MOF bidimensionali.

The candidate will be responsible for evaluating the thermal conductivity of twodimensional Metal-Organic Frameworks (MOFs) using non-equilibrium molecular dynamics simulations and model potentials developed through machine learning techniques. This research is part of the MOF2D-TED project, which focuses on computing the thermoelectric properties of two-dimensional MOFs.

## Pensè Schone Jgor

**Tema di Ricerca:**

Interfaccia software per la dinamica molecolare accelerata con variabili collettive da algoritmi di intelligenza artificiale di perovskiti ibride chirali di interesse magneto ottico

**Abstract:**



L'attività di ricerca è finalizzata alla realizzazione di una interfaccia software per l'utilizzo del potenziale interatomico MYP nelle dinamiche accelerate di perovskiti ibride con molecole chirali basate sui software LAMMPS e PLUMED con variabili collettive ottenute da metodi di intelligenza artificiale.

The research activity is aimed at the realization of a software interface for the use of MYP interatomic potential in the accelerated dynamics of hybrid perovskites with chiral molecules based on LAMMPS and PLUMED software with collective variables obtained from artificial intelligence methods.

## Feuillard Victor Jose Gaston

### Tema di Ricerca:

Misure di adroni heavy-flavour in collisioni ultra-relativistiche al Large Hadron Collider con il rivelatore ALICE

### Abstract:

Studio delle proprietà ottiche e strutturali di nuovi fosfori per stampe 3D" ha come obiettivo Gli adroni heavy-flavours, contenenti quarks charm e beauty, sono sonde eccellenti del quark gluon plasma (QGP), uno stato della materia nucleare ad alta densità di energia che si forma in collisioni di ioni pesanti ad energie ultra-relativistiche. La loro produzione in sistemi di collisione più piccoli, come protone-protone e protone-nucleo, è cruciale per comprendere aspetti fondamentali della cromodinamica quantistica, e per fornire una referenza per le misure in collisioni tra ioni pesanti. La collaborazione ALICE ha delle capacità uniche ad LHC per quanto riguarda la ricostruzione di adroni open heavy-flavour e quarkonia, fino ad impulsi trasversi molto bassi ed in una larga finestra di rapidità. L'attività di ricerca sarà focalizzata sulle misure di adroni heavy-flavour in collisioni piombo-piombo e protone-protone raccolte dall'esperimento ALICE durante il Run 3 di LHC..

Heavy-flavour hadrons, containing charm and beauty quarks, are excellent probes of the quark gluon plasma (QGP), a high energy-density state of strongly interacting matter formed in ultra relativistic heavy-ion collisions. Their production in smaller collision systems, such as proton-proton and proton-nucleus, is crucial to understand the fundamental aspects of quantum chromodynamic as well as to provide a reference for heavy-ion measurements. The ALICE Collaboration has unique capabilities at the LHC for measuring both open heavy flavour and quarkonia down to very low momentum and in a wide rapidity range. The research activity will be focused on heavy-flavour hadron measurements based on lead-lead and proton-proton collisions collected by the ALICE detector during the Run 3 of LHC.



## Inizio attività: 2024

### Pili Matteo

#### Tema di Ricerca:

Modellizzazione e progettazione di un amplificatore ottico integrato in guide d'onda drogata con erbio per sistemi di trasmissione ottica

#### Abstract:

L'oggetto dell'attività di ricerca è la modellazione numerica di amplificatori ottici in guida d'onda realizzati in nitruro di silicio drogato con erbio. L'attività prevede sia l'utilizzo di software commerciale che lo sviluppo di codici ad-hoc per l'ottimizzazione della guida d'onda e della concentrazione dell'erbio. Le equazioni che descrivono la propagazione della potenza ottica in guida d'onda (comprendenti pompa, segnale ed emissione spontanea amplificata) verranno accoppiate alle rate equations degli ioni di erbio, incorporando parametri realistici quali le sezioni d'urto di emissione e assorbimento nella matrice di nitruro di silicio, la conversione verso l'alto, l'assorbimento dallo stato eccitato e le durate dei livelli energetici. L'obiettivo finale del progetto è ottimizzare la struttura per ottenere il massimo guadagno ottico, riducendo la soglia di potenza della pompa e valutando la cifra di rumore.

The research activity focuses on the numerical modeling of erbium-doped waveguide amplifiers in an ultra-lowloss silicon nitride platform. The task will involve using both commercial software and in-house developed tools to optimize the waveguide design and erbium concentration. The equations describing the optical power propagating in the waveguide (pump, signal, and amplified spontaneous emission) are coupled with the rate equations of erbium ions, incorporating realistic parameters such as emission and absorption cross-sections in the silicon nitride matrix, up-conversion, excited-state absorption, and energy level lifetimes. The project ultimate goal is to optimize the structure to achieve maximum optical gain, reduce the pump power threshold, and evaluate the noise figure.