



## TITOLO E ABSTRACT TEMA DI RICERCA ASSEGNISTI

**Inizio attività: 2025**

**Lera Mario**

**Tema di Ricerca:**

Modellizzazione e progettazione di circuiti ottici integrati.

**Abstract:**

L'attività di ricerca sarà incentrata sulla modellizzazione multifisica e sulla progettazione di dispositivi ottici integrati basati sulla tecnologia silicon photonics. L'attività prevede sia l'utilizzo di software commerciale che lo sviluppo di codici ad-hoc per la modellizzazione dei fenomeni fisici alla base dei dispositivi e l'ottimizzazione dei circuiti ottici. L'assegnista collaborerà con fonderie esterne per la fabbricazione dei dispositivi e circuiti ottici e si occuperà anche della realizzazione del layout delle maschere litografiche per i run di fabbricazione multi-project-wafer.

The research activity will focus on multiphysics modeling and the design of integrated optical devices based on silicon photonics technology. This activity involves both the use of commercial software and the development of customized codes for the modeling the physical phenomena underlying optical devices and the optimization of the optical circuits. The fellow will collaborate with external foundries for the device and circuit fabrication and will be also responsible of the mask layout for multi-project wafer fabrication run.

**Gutierrez Diego Martinez**

**Tema di Ricerca:**

Progettazione e Sviluppo di un Potenziale Interatomico per Metal-Organic Frameworks Tramite Tecniche di Machine Learning.

**Abstract:**

L'assegnato di ricerca è parte integrante del progetto MOF2D-TED, finanziato nell'ambito del programma PNRR-HPC. Il progetto si propone di sviluppare una suite di strumenti computazionali per la caratterizzazione delle proprietà termoelettriche di Metal-Organic Frameworks bidimensionali (MOF-2D). Nello specifico, l'attività di ricerca sarà focalizzata sulla progettazione e sviluppo di un modello di potenziale interatomico per MOF-2D, basato su tecniche avanzate di machine learning. Il potenziale sviluppato verrà successivamente validato e impiegato per studiare e caratterizzare le proprietà fononiche e il trasporto termico nei MOF-2D, contribuendo così a una comprensione dei fenomeni fisici alla base delle loro performance termoelettriche.



The research grant is part of the MOF2D-TED project, funded under the PNRR-HPC program. The project aims to develop a suite of computational tools to characterize the thermoelectric properties of two-dimensional Metal Organic Frameworks (MOF-2D). Specifically, the research activities will focus on the design and development of an interatomic potential model for MOF-2D, leveraging advanced machine learning techniques. The developed potential will subsequently be validated and used to study and characterize the phononic properties and thermal transport in MOF-2D, contributing to a deeper understanding of the physical phenomena underlying their thermoelectric performance.

## Sestu Nicola

### Tema di Ricerca:

Crescita e Caratterizzazione Spettroscopica di Cristalli ed Eterostrutture di Perovskiti Ibride

### Abstract:

Questo progetto si concentrerà sullo sviluppo di metodi riproducibili per la crescita di cristalli di perovskiti ibride di alta qualità e sullo studio delle loro proprietà strutturali, ottiche ed elettroniche. Il progetto prevede l'ottimizzazione delle tecniche per la crescita controllata di cristalli singoli e film sottili, studiando l'impatto dei parametri di sintesi sulla qualità del materiale. Verranno utilizzate metodologie spettroscopiche avanzate, tra cui UV-Vis, fotoluminescenza e spettroscopia risolta in tempo, per caratterizzare le proprietà ottiche ed elettroniche. Particolare attenzione sarà dedicata allo studio delle interfacce tra diverse fasi di perovskite, al fine di comprendere i meccanismi di trasporto di carica, ricombinazione e la stabilità in diverse condizioni ambientali.

This project will focus on developing reproducible methods for the growth of high-quality hybrid perovskite crystals and investigating their structural, optical, and electronic properties. The project will involve the optimization of techniques for the controlled growth of single crystals and thin films, exploring the impact of synthesis parameters on material quality.

Advanced spectroscopic methods, including UV-Vis, photoluminescence and time-resolved spectroscopy, will be employed to characterize the optical and electronic properties. Special attention will be given to studying interfaces between different perovskite phases to understand charge transport, recombination mechanisms, and stability under various environmental conditions.

## Matta Selene

### Tema di Ricerca:

Crescita di cristalli singoli di perovskiti di alogenuri di metalli



## Porcu Stefania

### Tema di Ricerca:

Caratterizzazione di eterostrutture per applicazioni fotocatalitiche

### Abstract:

L'obiettivo dell'attività di ricerca è la caratterizzazione di eterostrutture composite costituite da matrici di titania porosa e OD Carbon Dots eventualmente in combinazione con eterostrutture di materiali 2D quali monocalcogenuri metallici (GaSe, GeSe, InSe, SnSe). Tali eterostrutture

possono manifestare proprietà fotocatalitiche sia per la produzione di idrogeno che di ossigeno. Le proprietà fotocatalitiche delle strutture singole (precursori) e dei compositi saranno verificate mediante tecniche di spettroscopia ottica steady-state e risolta in tempo.

The aim of the research is the characterization of composite heterostructures made of porous titania and OD-Carbon Dots, eventually in combination with heterostructures of 2D materials like metal monochalcogenides (GaSe, GeSe, InSe, SnSe). These composite heterostructures are expected to show photocatalytic properties for the production of both hydrogen and oxygen. The photocatalytic properties of the single precursor structures and of the composite will be tested by means of optical spectroscopy techniques, both steady state and time resolved.

## Kagdada Hardik Lalitkumar

### Tema di Ricerca:

Studio delle proprietà termoelettriche di Metal-Organic Framework tramite simulazioni multiscale

### Abstract:

L'assegno di ricerca si inserisce nel progetto SMOS-MOF, finanziato con fondi PNRR-MICS.

L'obiettivo principale è migliorare le proprietà termoelettriche dei Metal-Organic Framework (MOF) bidimensionali, materiali che offrono potenziali applicazioni innovative nella conversione di energia, grazie alle loro straordinarie capacità di trasporto elettrico e termico. Le attività di ricerca includono: 1. Simulazioni Teoriche e Computazionali: -Uso della teoria del funzionale della densità (DFT) per studiare le proprietà elettroniche e strutturali dei MOF bidimensionali. - Applicazione della dinamica molecolare di non equilibrio (NEMD) per analizzare i meccanismi di trasporto termico a livello atomico. 2. Ottimizzazione delle Proprietà Termoelettriche: - Identificazione e ottimizzazione dei parametri strutturali e composizionali che influenzano le proprietà termoelettriche. - Sviluppo di modelli predittivi per guidare la sintesi di MO.

The research grant is part of the SMOS-MOF project, funded by PNRR-MICS. The primary objective is to improve the thermoelectric properties of two-dimensional Metal Organic Frameworks (MOFs), materials that offer innovative potential applications in energy conversion due to their exceptional electric and thermal transport properties. The research activities include: 1. Theoretical and Computational Simulations: -Use of density functional theory (DFT) to study the electronic and structural properties of two-dimensional MOFs. -Application of non-equilibrium



molecular dynamics (NEMD) to analyze thermal transport mechanisms at the atomic level.  
2. Optimization of Thermoelectric Properties: -Identification and optimization of structural and compositional parameters that influence thermoelectric properties. -Development of predictive models to guide the synthesis of MOFs with improved thermoelectric performance.

## Inizio attività: 2024

### Mattana Francesco

#### Tema di Ricerca:

Fotofisica delle perovskiti per celle solari

#### Abstract:

La ricerca ha come obiettivo lo studio della fotofisica delle perovskiti al fine di comprendere i processi microscopici che realizzano la conversione dell'energia solare in energia elettrica nei dispositivi fotovoltaici. Titolo della ricerca (Inglese): Photophysics of perovskites for solar cells.

The research activities will aim at studying the photophysics of perovskites with the goal of understanding the microscopic processes governing the conversion of solar energy into electric energy in photovoltaic devices.

### Liscia Silvia

#### Tema di Ricerca:

Nuove Perovskiti per Applicazioni Optoelettroniche.

#### Abstract:

Le ricerche associate a questa richiesta riguardano lo studio di nuove perovskiti 3D/2D con applicazioni in optoelettronica. In particolare l'assegnista sarà impegnato nella sintesi mediante tecniche di spin coating e crescita da soluzione di cristalli singoli e film sottili. Inoltre l'assegnista dovrà occuparsi dello studio delle proprietà strutturali e delle proprietà ottiche anche nelle interfacce 3D/2D. Saranno considerate caratterizzanti le conoscenze su tecniche NMR, XRD e spettroscopia ottica.

The research associated with this request concerns the study of new 3D/2D perovskites with applications in optoelectronics. In particular, the grant holder will be involved in the fabrication of single crystals and thin films using spin-coating and solution growth techniques. Furthermore, the grant holder will deal with the study of structural properties and optical properties also in 3D/2D interfaces. Knowledge of NMR, XRD and optical spectroscopy will be considered characterizing.



## Simbula Angelica

### Tema di Ricerca:

Spettroscopia ottica su materiali per l'energia

### Abstract:

La ricerca ha come obiettivo la realizzazione di esperimenti di spettroscopia ottica ultraveloce al femtosecondo, particolarmente fotoluminescenza risolta in tempo ed assorbimento ottico transiente, per lo studio della fotofisica di nuovi materiali per l'energia.

The research activities will consist in realizing ultrafast, femtosecond optical spectroscopy experiments, particularly time-resolved photoluminescence and transient absorption, to study the photophysics of material for energy.

## Anitra Alessio

### Tema di Ricerca:

Sviluppo Software e Ricerca in Astrofisica ad Alta Energia per la Missione HERMES Pathfinder

### Abstract:

La responsabilità principale del ricercatore sarà quella di testare attivamente e sviluppare software per simulare e analizzare i dati raccolti in volo da HERMES Pathfinder, una costellazione di nano-satelliti per l'astronomia X-ray. Ciò comporterà il contributo allo sviluppo di strumenti esistenti, utilizzando i linguaggi C e Python, e l'implementazione di nuovi algoritmi per simulare e analizzare i dati della missione. Inoltre, il ricercatore sarà responsabile della creazione di unità di test per verificare il corretto funzionamento del software.

The primary responsibility of the research fellow will be to actively test and develop software to simulate and analyze the on-flight data collected by HERMES Pathfinder, a constellation of nano satellites for X-ray astronomy. This will involve contributing to the development of existing tools, using C and Python languages, and implementing new algorithms to simulate and analyze the mission data. Additionally, the fellow will be responsible for creating test units to verify the correct functioning of the software.

**Inizio attività: 2023**



## Barman Chanchal Kumar

### Tema di Ricerca:

Calcoli da Principi Primi di materiali topologici e 2D van der Waals

### Abstract:

Il candidato è chiamato a realizzare uno studio teorico/computazionale relativo alle proprietà fondamentali di due classi di materiali: composti ternari topologici con struttura esagonale e composti 2D di tipo van der Waals, con possibilità di applicazione in dispositivi di spintronica, di trasporto elettrico e termoelettrico. Lo studio approfondirà in particolare le proprietà elettroniche ed altre ad esse connesse, come la curvatura di Berry, gli eventuali punti di Dirac e Weyl e le cariche topologiche, ed analizzerà gli effetti che queste hanno sul magnetotrasporto e sulla conducibilità elettrica e termoelettrica. Il candidato collaborerà con gruppi sperimentali esperti in crescita, caratterizzazione di materiali e dispositivi per spintronica e spin-caloritronica. L'attività sarà svolta prevalentemente con codici di calcolo ab-initio; è previsto inoltre, quando necessario, l'utilizzo di modelli semi-analitici. Ab-initio calculations of topological and 2D van der Waals materials

The candidate is required to conduct a theoretical/computational study related to the fundamental properties of two classes of materials: topological ternary compounds with a hexagonal structure and 2D van der Waals-type compounds. These materials have potential applications in spintronics, electrical transport, and thermoelectric devices. The study will focus on electronic properties and other related attributes, such as Berry curvature, possible Dirac and Weyl points, and topological charges. It will analyze the effects of these properties on magnetotransport, electrical conductivity, and thermoelectric conductivity. The candidate will collaborate with experimental groups

## Inizio attività: 2022

## Litvinov Roman

### Tema di Ricerca:

Studi di produzione di particelle con charm in collisioni di ioni pesanti a LHCb

### Abstract:

Il/La candidato/a si interesserà della produzione di mesoni e barioni con e senza charm nelle collisioni di protone-piombo e piombo-piombo raccolte dall'esperimento LHCb al CERN di Ginevra con lo scopo di verificare la presenza del fenomeno della "strangeness enhancement" e quindi determinare la natura del processo di adronizzazione del quark charm. Il/La candidato/a si occuperà di tutti gli aspetti dell'analisi dalla simulazione dei campioni alla misura delle efficienze alla presentazione dei risultati finali. Lei/Lui sarà anche coinvolta/o nelle operazioni di presa dati all'esperimento e nel commissioning del rivelatore nella prima parte del Run 3.



The candidate will work on the production of mesons and baryons with and without charm in proton-proton and lead-proton collisions collected by the LHCb experiment at CERN in Geneva (CH) with the purpose of finding evidence of strangeness enhancement in these systems and thus shed a light on the mechanism of charm hadronization. The candidate will take care of all the aspects of the analysis from the simulation of the Monte Carlo samples to the measurement of the efficiencies and the presentation of the final results. She/he will also be involved in the data-taking operations of the LHCb experiment and in the commissioning of the detector in the first year of Run 3.

## Inizio attività: 2020

### Sarritzu Valerio

#### Tema di Ricerca:

Sviluppo e caratterizzazione di nuovi sensori a pixel monolitici per misure di alta precision di dileptoni termici e quark pesanti in futuri esperimenti con fasci di ioni pesanti ultra-relativistici

#### Abstract:

Di recente c'è stato un notevole avanzamento dei rivelatori a pixel attivi monolitici (MAPS). Lo stato dell'arte è il chip ALPIDE sviluppato per l'esperimento ALICE al CERN. Basato sul processo per imaging TowerJazz 0.18 nm, questo chip di 15x30 mm<sup>2</sup> ha pixel di 27x29 μm<sup>2</sup> e uno spessore di solo 50 μm. Muovendosi da ALPIDE, il progetto STITCHED-MAPS punta a una nuova generazione di MAPS di area molto grande, fino a di 15x15 cm<sup>2</sup> o più. STITCHED-MAPS sarà basato sullo stitching, un processo tecnologico che permette di fabbricare un sensore più grande del campo di vista dei dispositivi fotolitografici. L'attività sarà focalizzata sulla progettazione del sensore e sulla caratterizzazione di prototipi in laboratorio e con fasci di particelle. Parte del progetto sarà inoltre dedicato a studi di integrazione dei sensori in un telescopio per misure a bersaglio fisso.

Recently a great advance of monolithic active silicon pixel sensors (MAPS) has been achieved. The state of the art is the ALPIDE chip developed for the tracker of the ALICE experiment at CERN. Based on the TowerJazz 0.18 nm imaging process, this 15x30 mm<sup>2</sup> chip has a pixel size of 27x29 μm<sup>2</sup> with a thickness of just 50 μm. Moving from the successful ALPIDE design, STITCHED-MAPS is a project aiming to a new generation MAPS with very large area, up of 15x15 cm<sup>2</sup> or more. STITCHED-MAPS will be based on the stitching process, which allows an image sensor larger than the field of view of the lithographic equipment to be fabricated. The project activity will focus on the design of the sensor and on the characterization of prototypes in lab and in beam tests. Part of the project will be also devoted to an integration study of the sensors in a telescope for fixed-target measurements.