



RILEVAMENTO COMPETENZE INTERNE ALL'AREA DI RICERCA ROMA 1 DI MONTELIBRETTI (RM)

Attività di ricerca

Sviluppo di tool scientifici per il modelling del trasporto elettronico in nanostrutture e nano-dispositivi; calcolo di interazioni elettrone-fonone e phonontransport con applicazioni dall'elettronica molecolare; calcolo di proprietà elettroniche di materiali nanostrutturati (quantum-dots, nanofili); Fisica delle superfici e catalisi.

Area tematica

- Ambiente
- Agrobio
- Beni Culturali
- Materiali funzionali
- Salute e Benessere

Referente Attività

Amedeo Palma, ISMN c/o AdR Roma 1

Tel: 06-90672.343

Mail: amedeo.palma@ismn.cnr.it

Alessandro Pecchia, ISMN c/o AdR Roma 1

Tel: 06-90672.324 (06-72597781),

Mail: alessandro.pecchia@ismn.cnr.it

Facilities

Nessuna

Competenze

- *Calcolo di proprietà elettroniche tramite metodi DensityFunctional (DFT) e quantum chemistry;*
- *Dinamica molecolare;*
- *Sviluppo di metodi avanzati per la computazione degli stati elettronici in nanostrutture;*
- *Sviluppo di metodologie computazionali per HPC;*

- *Calcolo di proprietà di trasporto tramite funzioni di Green di non-equilibrio;*
- *Sviluppo di metodi di calcolo multiscala applicato al trasporto in sistemi complessi, quali dispositivi organici o inorganici ed ibridi con applicazioni nell'ambito del fotovoltaico, dell'optoelettronica e la bioelettronica;*

Progetti di riferimento

- *H2020 “Modelling stability of organic phosphorescent light emitting diodes – MOSTOPHOS”*
- *Pd-based membranes and nanostructured catalysts for producing ultrapure hydrogen.*

Articoli di riferimento significativi

1. *M Auf der Maur, A Pecchia, G Penazzi, W Rodrigues, A Di Carlo, Efficiency drop in green InGaN/GaN light emitting diodes: The role of random alloy fluctuations, Physical review letters 116 (2), 027401*
2. *A Pecchia, D Gentilini, D Rossi, M Auf der Maur, A Di Carlo, Role of ferroelectric nanodomains in the transport properties of perovskite solar cells, Nano letters 16 (2), 988-992*
3. *Palma and M. Satta, A New Anisotropic Charge-Equilibration Method for Self-Assembly of Organics on Metal Surface: d-Alaninol on Cu(100) J. Chem. Theory Comput., 2016, 12 (8), pp 4042–4051*

Collaborazioni principali

RICERCA

- *Bremen Center for Computational Materials Science, Università di Brema (Germany), chair of Prof. Thomas Frauenheim.*
- *Technische Universität Dresden, Dresden (Germany), chair of Prof. Gianaurelio Cuniberti*
- *Technische Universität München, München (Germany), chair of Prof. Alessio Gagliardi*
- *ENEA, Italian National Agency for New Technology Energy and Environment (Frascati-RM)*

INDUSTRIA

- *TiberLABs.r.l., Software company, info@tiberlab.com*
- *OSRAM OLED, Thomas.Wehlus@osram-oled.com*