



**Laurea Magistrale in Ingegneria delle
Nanotecnologie
Corso di Modelli e Tecniche di Simulazioni
Atomistiche
A.A. 2012/2013
Prof. Giuseppe Zollo**



**ARGOMENTI DISPONIBILI PER TESI DI LAUREA
(elenco parziale e passibile di modifica)**

LA DURATA PREVISTA PER CIASCUNA DELLE TESI DI LAUREA SOTTO-ELENcate E' DI
CIRCA 6 MESI

- 1) ***Proprietà elettroniche e strutturali di nano-particelle di diamante con superfici ricostruite, idrogenate o funzionalizzate.*** Schemi di dinamica molecolare classica e LCAO; una parte minimale dell'attività dovrà essere finalizzata all'implementazione in ambiente GPU di uno schema LCAO. Luogo di svolgimento: dipartimento SBAI-Sapienza
- 2) ***Studio dell'adsorbimento di gas per applicazioni energetiche (idrogeno e metano) in carbonio nano-strutturato.*** E' previsto l'uso di schemi Metropolis MC classici e dinamica molecolare LCAO. Luogo di svolgimento: Dipartimento SBAI-Sapienza e ENEA Casaccia.
- 3) ***Studio della funzionalizzazione superficiale di Si mediante polimeri organici per applicazioni di bio-sensing.*** Lo studio sarà affrontato principalmente mediante DFT: due mesi dei sei previsti dovranno essere dedicati all'approfondimento della DFT. Luogo di svolgimento: dipartimento SBAI-Sapienza .
- 4) ***Studio mediante dinamica molecolare classica di sistemi biologici (proteine di membrana o proteine d'interesse anti-tumorale).*** Dinamica molecolare classica. Luogo di svolgimento: dipartimento SBAI-Sapienza.
- 5) ***Studio della proprietà elettroniche strutturali di materiali semiconduttori ternari per applicazioni opto-elettroniche.*** Lo studio sarà affrontato principalmente mediante DFT: due mesi dei sei previsti

dovranno essere dedicati all'approfondimento della DFT. Luogo di svolgimento: dipartimento SBAI-Sapienza .

- 6) ***Nano-patterning di superfici solide con matrici di DNA per applicazioni di bio-sensing.*** Per questo agomento sono previste due linee di attività: 1) dinamica molecolare classica di macro-strutture biologiche (polipeptidi) in prossimità di una superficie solida; 2) modellizzazione mediante DFT dell'adesione superficiale di piccoli peptidi su superfici di ossidi di titanio o metalli: in questo caso due mesi dei sei previsti dovranno essere dedicati all'approfondimento della DFT. Luogo di svolgimento: dipartimento SBAI-Sapienza- ENEA Casaccia e eventualmente Oak-Ridge National Laboratory (USA).
- 7) ***Studio delle proprietà di grafene su substrati di SiC (Carburo di Silicio) per applicazioni di bio-sensing.*** Lo studio sarà affrontato principalmente mediante DFT: due mesi dei sei previsti dovranno essere dedicati all'approfondimento della DFT. Luogo di svolgimento: dipartimento SBAI-Sapienza.

In caso siano sensate e fattibili, è possibile anche prendere in considerazione proposte alternative da parte di studenti interessati.