

Proposte di TESI: Gruppo di Chimica Teorica

Sviluppo, Implementazione e Applicazione di Metodologie Quantistiche per lo Studio dei Materiali (CRYSTAL Software)

Il Software CRYSTAL

Alessandro Erba, Jacques Desmarais, Silvia Casassa, Bartolomeo Civalleri

Il Gruppo di Chimica Teorica del Dipartimento di Chimica si occupa da oltre 40 anni di sviluppare un software (CRYSTAL) per simulazioni quanto-meccaniche dei solidi:



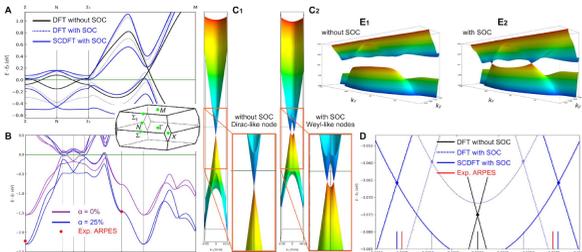
Il programma (usato da centinaia di ricercatori nel mondo) permette di fare calcoli "da principi primi" utilizzando la Teoria del Funzionale della Densità (DFT). Il continuo lavoro di sviluppo lo ha portato ad avere funzionalità per la simulazione di proprietà elettroniche, strutturali, elastiche, ottiche (lineari e non), spettroscopiche, termodinamiche, piezoelettriche, etc.

Il programma permette lo studio di fenomeni di adsorbimento (su superfici e cavità), di catalisi, di formazione di difetti, della formazione di nano-strutture, di caratterizzazione del legame chimico (anche attraverso analisi topologica della densità elettronica), e di molti altri processi fondamentali in chimica dello stato solido.

Interazione Spin-Orbita

Alessandro Erba, Jacques Desmarais

Uno degli sviluppi più recenti di CRYSTAL è dato dalla trattazione dell'accoppiamento spin-orbita (effetto relativistico), un cosiddetto "piccolo termine" dell'Hamiltoniano alla base di molti dei fenomeni fisici della **spintronica**.



Figura

Effetto dell'accoppiamento spin-orbita sulla struttura di bande (rappresentazione 2D e 3D) del TaAs (fase tetragonale): un semi-metallo di Weyl.

Le Correnti di Spin

L'accoppiamento spin-orbita induce delle correnti di spin nei materiali. Una corretta descrizione di queste correnti risulta cruciale per simulazioni affidabili di sistemi quali **isolanti topologici**. Stiamo studiando diverse versioni della cosiddetta **spin current density functional theory (SCDFT)**.

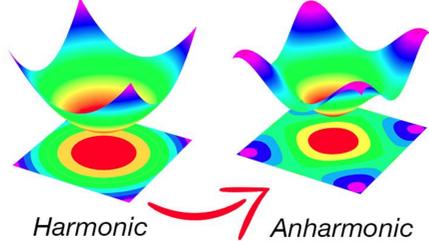
Effetto sulle Forze

Stiamo sviluppando il calcolo dei gradienti analitici (forze) dell'operatore di accoppiamento spin-orbita sia rispetto alle posizioni degli atomi nel solido che rispetto ai parametri della cella reticolare. Questo sviluppo permetterà di estendere gli algoritmi di: Ottimizzazione di geometria; Calcolo dell'equazione di stato (effetto della pressione sulla struttura); Calcolo di frequenze vibrazionali armoniche (spettri IR e Raman); Calcolo di proprietà termodinamiche (a livello armonico e quasi-armonico); Calcolo di proprietà elastiche.

Anarmonicità Vibrazionale

Alessandro Erba, Jacques Desmarais

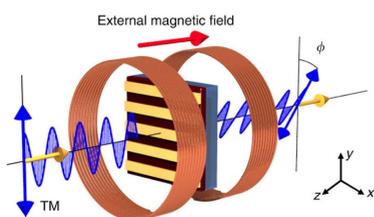
Uno sviluppo in corso riguarda la descrizione di vari effetti anarmonici nella descrizione degli stati vibrazionali dei materiali. In particolare, lo studio delle risonanze di Fermi, lo sviluppo di tecniche computazionali efficaci di diagonalizzazione delle matrici VCI (vibrational configuration interaction), lo sviluppo di un metodo VQDPT2 (vibrational quasi-degenerate perturbation theory, 2nd order).



Interazione Materia - Campi Magnetici

Jacques Desmarais, Alessandro Erba

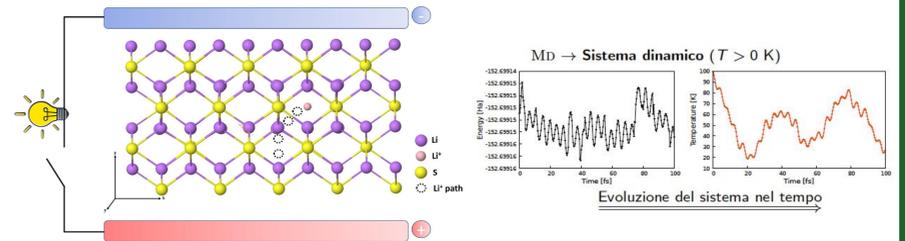
Uno sviluppo in corso riguarda la derivazione formale (in ambito quantistico) delle equazioni e la loro implementazione per la descrizione dell'interazione della materia con campi magnetici, per il calcolo del optical rotatory power, dicroismo circolare e shift NMR.



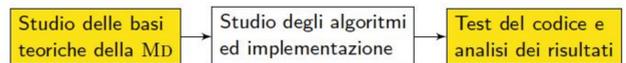
Dinamica Molecolare

Silvia Casassa, Chiara Ribaldone, Naiara Marana

La dinamica molecolare (DM) quantistica *ab initio* coniuga una descrizione quantistica degli elettroni con una classica del moto dei nuclei, e si prefigge di studiare la dinamica di evoluzione di un sistema fisico a livello atomico. Dall'analisi del risultato di simulazioni DM si possono ricavare molteplici proprietà (spettri IR e Raman, coefficiente di diffusione) e simulare reazioni e transizioni di fase. La DM inserisce il tempo e la temperatura nelle simulazioni *ab initio*!



In CRYSTAL stiamo implementando un modulo di DM. La proposta è quella di studiare le basi teoriche della DM e collaborare all'implementazione di nuovi algoritmi e proprietà (linguaggio Fortran).



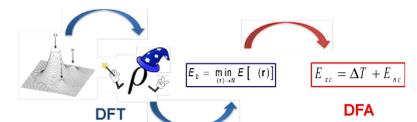
Interazioni deboli nei solidi:

dai cristalli molecolari ai materiali porosi

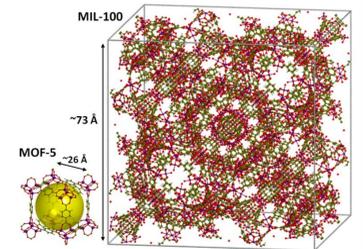
Bartolomeo Civalleri, Lorenzo Donà

In questo ambito, l'interesse generale riguarda l'implementazione (in CRYSTAL) e la validazione di metodi basati sulla teoria del funzionale della densità (DFT) per la descrizione di interazioni deboli nei solidi con rilevanza per applicazioni riguardanti lo studio di cristalli molecolari e l'adsorbimento su superfici e in materiali microporosi.

- In particolare, sviluppo di metodi di metodi compositi HF/DFT a basso costo per il calcolo delle proprietà di sistemi allo stato solido (sol-3c)



- Implementazione di correzioni dispersive dipendenti dal sistema (es. D4, TS, XDM, MBD, ...) da combinare con funzionali ibridi



- I metodi sviluppati verranno applicati allo studio di materiali microporosi come i metal-organic framework (MOF). I MOF hanno siti metallici accessibili che possono servire come siti di adsorbimento o siti catalitici.

Le applicazioni vanno dall'interazione di piccole molecole (es. screening computazionale per ottimizzare la cattura di CO₂) a molecole più grandi (es. rilascio controllato di farmaci, rimozione di molecole inquinanti).

CRYSTAL@HPC

Alessandro Erba, Bartolomeo Civalleri, Lorenzo Donà

Uno sviluppo in corso riguarda l'estensione di alcuni algoritmi del codice a logiche avanzate di calcolo parallelo per l'esecuzione del programma su risorse di High Performance Computing (HPC): in particolare il *porting* del codice su GPU.



Ulteriori Applicazioni

Queste ed altre funzionalità di CRYSTAL e di altri software di chimica computazionale vengono applicate allo studio di materiali e nano-strutture.

Fate riferimento all'altro poster del Gruppo di Chimica Teorica per una panoramica di alcune tematiche attuali.