

RELAZIONE ANNUALE DI SINTESI



RELAZIONE ANNUALE DI SINTESI*(La presente Relazione deve essere compilata e firmata dal Dottorando)***ATTIVITA' DI RICERCA RELATIVA ALLA 1 ANNUALITA'**

DOTTORANDO	MAHMOOD MUHAMMAD SAAD
CUP	J92B24001090007
CORSO DI DOTTORATO	FISICA
ANNO ACCADEMICO	XL
COORDINATORE CORSO	LONGO Francesco
CODICE BORSA	40-034-33-DOT1333595-16926

Il sottoscritto, in piena coerenza con le tematiche previste dal progetto nell'ambito del quale è stata finanziata la borsa di dottorato e nel rispetto dell'impegno assunto ad effettuare i periodi di attività previsti dal percorso di dottorato finanziato a valere del PNRR, consapevole della responsabilità penale cui può andare incontro in caso di dichiarazione falsa o comunque non corrispondente al vero (art. 76 del D.P.R. n. 445 del 28/12/2000), ai sensi del D.P.R. n. 445 del 28/12/2000 e ss.mm.ii.

ATTESTA

1. che le principali attività svolte nella 1 annualità sono di seguito riassunte:

ATTIVITÀ SVOLTE
During the first semester, bulk Cu (FCC) convergence and Cu(111) slab models were developed within a DFT workflow, including convergence tests and post-processing for interlayer distances and layer-resolved DOS/PDOS. During the second semester, the study was extended to the high-Miller-index Cu(513) surface to assess whether surface periodicity is preserved after phosphorus adsorption: single-P and two-P adsorption models and a commensurate Cu(513)/phosphorene supercell (average mismatch <5%) were optimized, consistently preserving the Cu(513) (1×1) periodicity. As part of the HPC for Materials Simulations course assessment, a weak-scaling study of Quantum ESPRESSO on Cu(100) slabs (≈192–1200 atoms) was carried out on the Leonardo Booster partition using the AiiDA-PwBaseWorkChain, quantifying scaling efficiency and identifying communication overhead (parallel FFT) as the dominant limitation at large node counts. Training activities included participation in the PISACMS summer school (DFT, molecular dynamics, and machine-learning interatomic potentials). A research mobility at CFM (UPV/EHU, Spain) under Dr. Frederik Michael Schiller is ongoing (3 of 6 months completed) and includes DFT benchmarking of hBN adsorption on vicinal Pt facets (Pt(111), Pt(221), Pt(110)) with systematic convergence tests and comparison with literature trends.

PERIODO SOSPENSIONE ATTIVITA'	
DAL	AL

2. che le sopra descritte attività:

- a. non arrecano danno significativo a nessuno dei sei obiettivi ambientali indicati all'art. 17 del Reg. (UE) 2020/852, e di seguito richiamati:
 - i. Mitigazione dei cambiamenti climatici,
 - ii. Adattamento ai cambiamenti climatici;
 - iii. Uso sostenibile e protezione delle risorse idriche e marine;
 - iv. Transizione verso l'economia circolare, con riferimento anche a riduzione e riciclo dei rifiuti;
 - v. Prevenzione e riduzione dell'inquinamento dell'aria, dell'acqua o del suolo;
 - vi. Protezione e ripristino della biodiversità e degli ecosistemi.
- b. non ricadono tra le seguenti attività di ricerca cosiddetta "brown" in conformità alla Comunicazione della Commissione UE 2021/C 58/01 "Orientamenti tecnici sull'applicazione del principio DNSH";
 - i. attività connesse ai combustibili fossili, compreso l'uso a valle;
 - ii. attività nell'ambito del sistema di scambio di quote di emissione dell'UE (ETS) che generano emissioni di gas a effetto serra previste non inferiori ai pertinenti parametri di riferimento;
 - iii. attività connesse alle discariche di rifiuti agli inceneritori e agli impianti di trattamento meccanico biologico;
 - iv. attività nel cui ambito lo smaltimento a lungo termine dei rifiuti potrebbe causare un danno all'ambiente.
- c. sono conformi alla pertinente normativa ambientale dell'UE e nazionale

Data 7/1/2026

Firma

