

The aim of the present research activity is to develop and apply advanced computational techniques to achieve the two main objectives of the ERC-SLIDE project, namely: I) Develop and apply multiscale simulations based on quantum mechanics to monitor the chemical processes occurring at sliding interfaces. These in-silico experiments will constitute powerful tools to design efficient end environmental friendly lubricant materials. Moreover, they will provide fundamental understanding on chemical reactions activated by mechanical forces. II) Develop a workflow for high throughput screening of hundreds of solid interfaces. A database for interfacial properties such as adhesion and shear strength will be created. Such database will constitute a source of realistic parameters for macro-scale models paving the way for multiscale approaches to interface science.

Lo scopo della presente attività di ricerca è sviluppare e applicare tecniche computazionali avanzate per raggiungere i due principali obiettivi del progetto ERC-SLIDE, ovvero: I) Sviluppare e applicare simulazioni multiscala basate sulla meccanica quantistica per monitorare i processi chimici che avvengono alle interfacce tribologiche. Questi esperimenti in silico costituiranno potenti strumenti per progettare materiali lubrificanti efficienti e rispettosi dell'ambiente. Inoltre, forniranno conoscenze fondamentali sulle reazioni chimiche attivate da forze meccaniche. II) Sviluppare un work-flow per lo screening di centinaia di interfacce solide. Verrà creato un database per le proprietà interfacciali come l'adesione e lo "shear strength". Tale database costituirà una fonte di parametri realistici per modelli a macroscale, aprendo la strada ad approcci multiscala alla scienza dell'interfacce tra materiali solidi.