

## **Descrizione Progetto:**

(ITA) L'obiettivo del progetto è portare il paradigma di materials design basato su First Principles Material Discovery nel campo della tribologia attraverso lo sviluppo e le applicazioni di i) un protocollo per sfruttare le reazioni tribochimiche per ridurre l'attrito dell'interfaccia. Il progetto si concentrerà, in particolare, sullo sviluppo di alternative rispettose dell'ambiente agli additivi commerciali utilizzati negli oli motore; ii) un work flow per lo screening high throughput di interfacce solide. Verrà creato un database pubblico per l'adesione e la resistenza allo scorrimento di un ampio numero di coppie di materiali. Tale database costituirà una fonte di parametri realistici per i modelli continui, aprendo la strada ad approcci multiscala alla tribologia, dalla scala elettronica a quella macro. Inoltre, con l'ausilio di algoritmi di apprendimento automatico, verranno identificate le tendenze generali e verranno individuate modalità razionali per modificare chimicamente le interfacce per applicazioni avanzate.

The goal of the project is to port the material design paradigm based on First Principles Material Discovery to the field of Tribology by the development and applications of i) a protocol for harnessing tribochemical reactions to reduce interface friction. The project will focus, in particular, in the development of environmental- friendly alternatives to commercial additives used in engine oils; ii) a workflow for high throughput screening of solid interfaces. A public database for the intrinsic adhesion and shear strength of a wide number of materials pairs will be created. Such database will constitute a source of realistic parameters for continuum models, paving the way for *serial* multiscale approaches to tribology, from the electronic- to the macro scale. Moreover, with the aid of machine learning algorithms, general trends will be identified and rational ways to chemically modify interfaces for advanced applications will be identified.

## **Descrizione Attivita':**

(ITA) L' attivita' di ricerca riguarda lo studio delle reazioni di tribochimica che coinvolgono molecole confinate all'interfaccia tra materiali solidi in presenza di stresses meccanici. Lo studio di queste reazioni verra' eseguito mediante calcoli da principi primi dato che le proprieta' elettroniche dei materiali coinvolti devono essere adeguatamente descritte in condizioni di elevata reattivita'. Si vuole determinare l'adesione e la resistenza dallo scorrimento di diverse coppie di materiali, come ad esempio silica a contatto con diamante o materiali a base di carbonio sulla superficie del ferro. In questo studio verranno utilizzati sia calcoli da principi primi che machine-learning based "force fields" adeguatamente testati. L'attivita' potra' essere svolta sia in remoto che in presenza dato che consistera' principalmente nello svolgimento di simulazioni al calcolatore.

(ENG) The research activity concerns the study of tribochemical reactions involving molecules confined at the interface between solid materials in the presence of mechanical stresses. The study of these reactions will be performed using first principles calculations since the electronic properties of the materials involved must be adequately described in conditions of high reactivity. In particular, we want to determine the adhesion and resistance to sliding of different pairs of materials, such as silica in contact with diamond or carbon-based materials on the surface of iron. Both first principles calculations and properly tested machine-learnig based force fields will be used in this study. The activity can be carried out both remotely and in person since it will mainly consist in carrying out computer simulations.