**Deascrizione 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 che riguarda lo studio delle interfacce solide prevede lo sviluppo e applicazione di nuove unita’ da includere in un workflow prodotto dal gruppo per eseguire calcoli high throughput. Lo studio delle delle reazioni di tribochimica verra’, invece eseguito mediante calcoli di dinamica molecolare principalmente da principi primi dato che le proprieta’ elettroniche dei materiali coinvolti devono essere adeguatamente descritte in condizioni di elevata reattivita’. Verra’presa in considerazione la possibilita’ di usare machine-learning based “force fields” adeguatamente testati.

(ENG) The research activity concerning the study of solid interfaces involves the development and application of new units to be included in a workflow produced by the group to perform high throughput calculations. The study of tribochemical reactions will instead be performed through molecular dynamics calculations mainly from first principles since the electronic properties of the materials involved must be adequately described in conditions of high reactivity. The possibility of using tested machine-learning based "force fields" will be considered.