

First principles calculation of friction and wear in tribological interfaces

Il design dei materiali lubrificanti è impegnativa perché le loro prestazioni sono regolate da processi a livello molecolare che si verificano nell'interfaccia sepolta, che sono estremamente difficili da monitorare mediante esperimenti. In questo caso le simulazioni possono svolgere un ruolo decisivo, in particolare quelle basate sulla meccanica quantistica, essenziale per descrivere accuratamente le interazioni materiali in condizioni di maggiore reattività come quelle imposte dalle sollecitazioni meccaniche applicate. L'obiettivo principale del presente progetto, **che potrà essere eseguito in remoto**, è sviluppare e applicare simulazioni multiscala basate sulla meccanica quantistica per monitorare i processi chimici che avvengono alle interfacce di scorrimento. 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.

Designing lubricant materials is challenging because their performances are ruled by molecular-level processes that occur at the buried interface, which are extremely difficult to monitor by experiments. Simulations can play a decisive role here, in particular those based on quantum mechanics, which is essential to accurately describe material interactions in conditions of enhanced reactivity as those imposed by the mechanical stresses applied. The main goal of the present project, **which can be executed remotely**, is to 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 and environmental friendly lubricant materials. Moreover, they will provide fundamental understanding on chemical reactions activated by mechanical forces.

