

ITA: L'oggetto dell'attività di ricerca riguarda lo sviluppo e l'applicazione di potenziali "machine learning" (ML) per descrivere le interazioni atomistiche nei sistemi tribologici. Questi ultimi sono tipicamente costituiti da un'interfaccia solida a contatto con un lubrificante liquido, all'interno del quale sono dispersi additivi lubrificanti: molecole capaci di adsorbirsi sulle superfici e reagire con esse formando film protettivi. I potenziali ML, addestrati mediante calcoli ab initio di energie e forze, verranno impiegati in simulazioni di dinamica molecolare che consentiranno di analizzare il comportamento degli additivi lubrificanti anche in condizioni operative estreme.

ENG: The research activity focuses on the development and application of machine learning potentials to describe atomistic interactions in tribological systems. These systems typically consist of a solid interface in contact with a liquid lubricant, within which lubricant additives are dispersed. Such molecules are capable of adsorbing onto the contacting surfaces and reacting with them to form protective films. The machine learning potentials, trained on ab initio calculations of energies and forces, will be employed in molecular dynamics simulations to investigate the behavior of lubricant additives even under extreme operating conditions.