

(ITA) L'attività di ricerca verte su due principali tematiche. La prima riguarda lo studio delle reazioni di tribochimica che coinvolgono molecole confinate all'interfaccia tra materiali solidi in presenza di stress meccanici. Lo studio di queste reazioni verrà eseguito mediante calcoli da principi primi dato che le proprietà elettroniche dei materiali coinvolti devono essere adeguatamente descritte in condizioni di elevata reattività. La seconda tematica riguarda lo studio di interfacce tra materiali solidi. In particolare, si vuole determinare l'adesione e la resistenza dallo scorrimento di diverse coppie di materiali, come ad esempio silice 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 "force fields" adeguatamente testati. (ENG) The research activity focuses on two main themes. The first 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. The second theme concerns the study of interfaces between solid materials. 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 force fields will be used in this study.