

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 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.