

Francesco Faglioni

(francesco.faglioni@unimore.it)

COSA

- Meccanica quantistica
(molecole, solidi, superfici)
- Dinamica molecolare
(liquidi, interfacce)

COME

- Calcoli numerici (programmi già fatti)
- Sviluppo teorico
- Programmazione (perl, C, C++, fortran, ...)

PERCHE'

- (1) Batterie al Li
 - Interfaccia elettrodo/elettrolita
 - traferimento elettronico
 - crescita superficiale
 - degradazione elettrodi ed elettroliti

- (2) Proprieta' molecolari
 - risposta ottica/magnetica
 - nanotubi ultracorti
 - violazione di parita'

- (3) Silossani
 - sintesi innovative

TIROCINIO

- Capire il problema, studio bibliografia (4 g)
- Familiarizzarsi coi codici (4 g)
- Pianificazione progetto; primi risultati (10-15 g)
- Rimodulazione progetto; altri risultati (10-15 g)
- Scrittura (12 g)

PROPOSTE – I

- 1) Modellazione del double-layer elettrico per superfici di litio metallico: meccanismo di crescita di dendriti.
(Coll. Bosch USA/Caltech)
- 2) Degradazione di elettrodi a base di LiNiO_2 :
studio del passaggio a NiO per rimozione del Li.
(Coll. Bosch USA/Caltech)
- 3) Reazioni RedOx all'elettrodo:
 $\text{TFSI}^{(-)} \rightarrow \text{TFSI}$ su Pt; Ni; LiFePO_4 ; LiNiO_2
e degradazione dell'elettrolita
(Coll. Bosch USA/Caltech)

PROPOSTE - II

- 4) Estrazione SiO_2 da quarzi per sintesi di silossani a bassa temperatura
(Coll. Roncaglia, Lusvardi, Zanardi)
- 5) Violazione di parita' in sistemi protocarioti: influenza di forze nucleari deboli sull'omochiralita' biologica e origine della vita.
- 6) Risposta magnetica e struttura elettronica di nanotubi ultracorti: nuove forme di aromaticita'.