

Francesco Faglioni

(francesco.faglioni@unimore.it)

COSA: CALCOLI

- Meccanica quantistica
(molecole, solidi regolari, superfici)
- Dinamica molecolare
(liquidi, interfacce, solidi amorfi)
- Reti Neurali
(energie, proprietà')

COME

- Calcoli numerici (programmi gia' fatti)
- Sviluppo teorico
- Programmazione (python, perl, C++, ...)

PERCHE'

(1) Batterie al Li

- Migrazione/diffusione di specie in solidi/liquidi
- trasferimento elettronico
- degradazione elettrodi ed elettroliti

(2) Proprieta' molecolari

- risposta ottica/magnetica
- solvatazione, reazioni chimiche

(3) Vetri

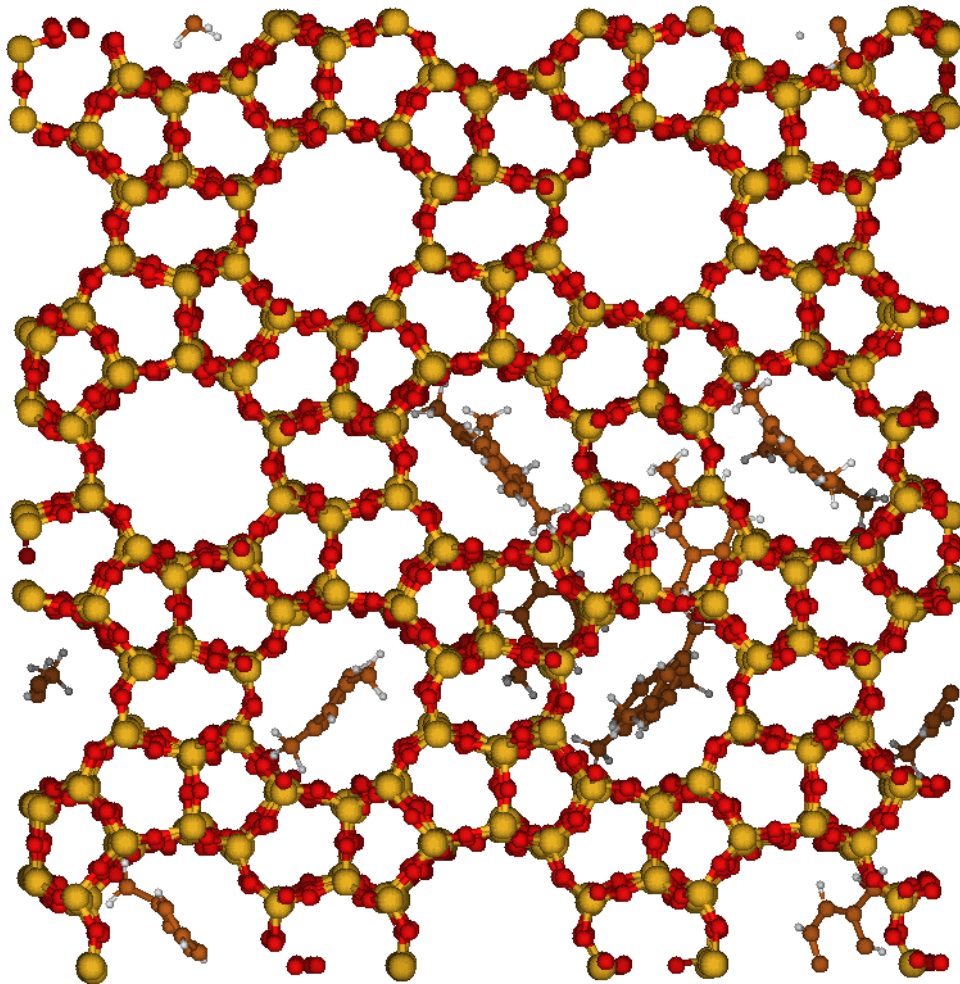
- proprieta' meccaniche, magnetiche, di trasporto

TIROCINIO

- Capire il problema, studio bibliografia (1/6)
- Familiarizzarsi coi codici (1/6)
- Pianificare progetto; primi risultati (1/6)
- Rimodulare progetto; altri risultati (2/6)
- Scrittura (1/6)

PROPOSTA – 1

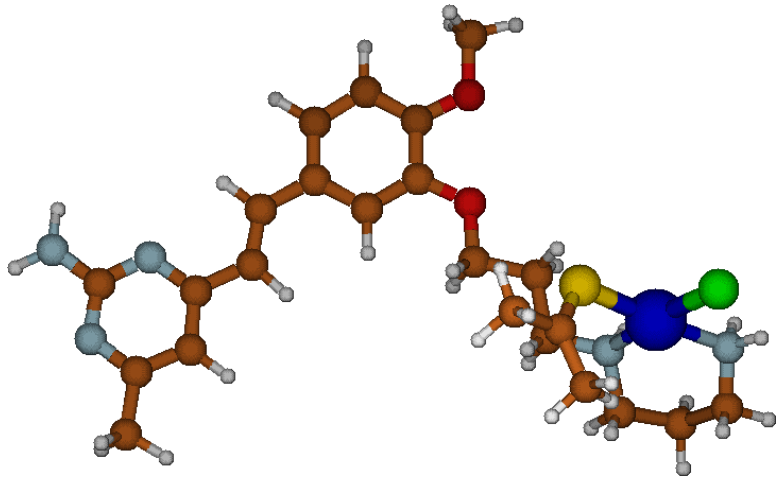
Diffusione in matrici solide/liquide/polimeriche



Formalismo di
Einstein-Smoluchowski

PROPOSTA – 2

- Complessi di Pt e Mn per scopi terapeutici



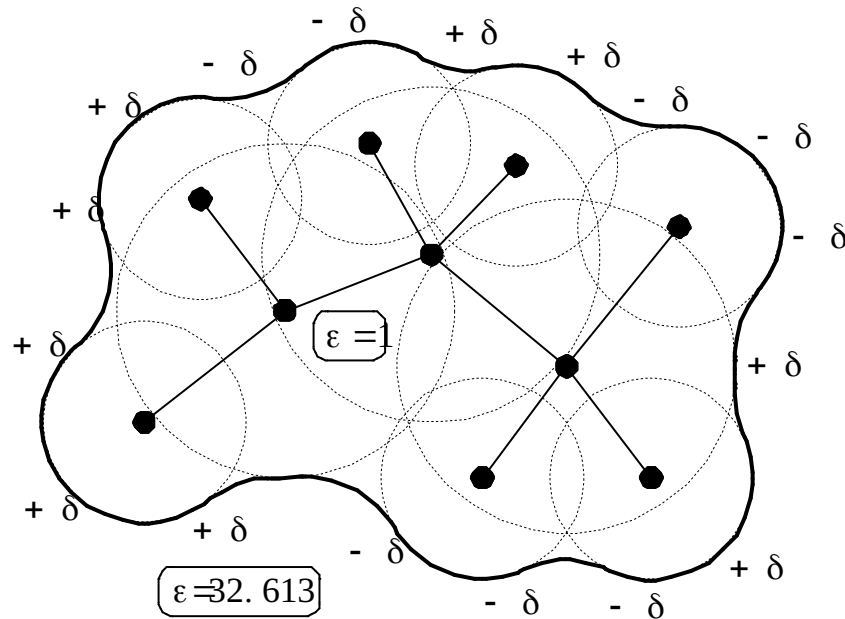
1) MD + DFT → geometrie ed energie

2) Varie configurazioni e leganti

3) NMR → confronto con esperimenti

PROPOSTA - 3

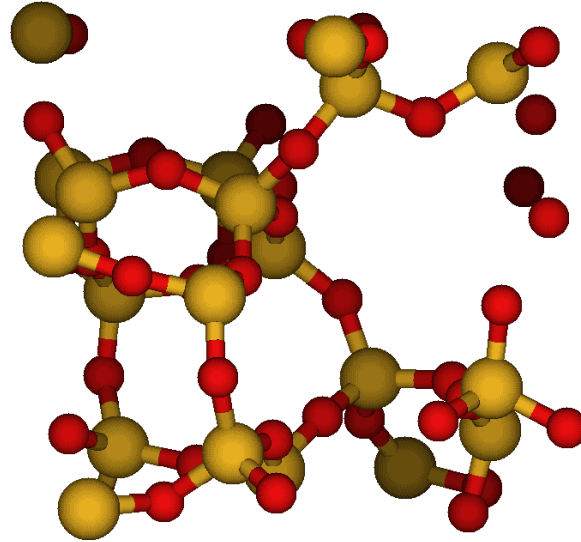
Simulazioni di pKa in soluzione



- 1) Solvente implicito / esplicito
- 2) Ottimizzazione raggi di solvatazione
- 3) Fit per valori di pKa affidabili
- 4) Verifica per energie di reazione

PROPOSTA – 4

- Reti neurali per schermo NMR in vetri



- 1) Calcoli accurati per il “Training Set”
- 2) Definizione di “intorno chimico”
- 3) Interazioni a lungo raggio

Disponibilita'

Massimo 1-2 studenti alla volta