

# 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**

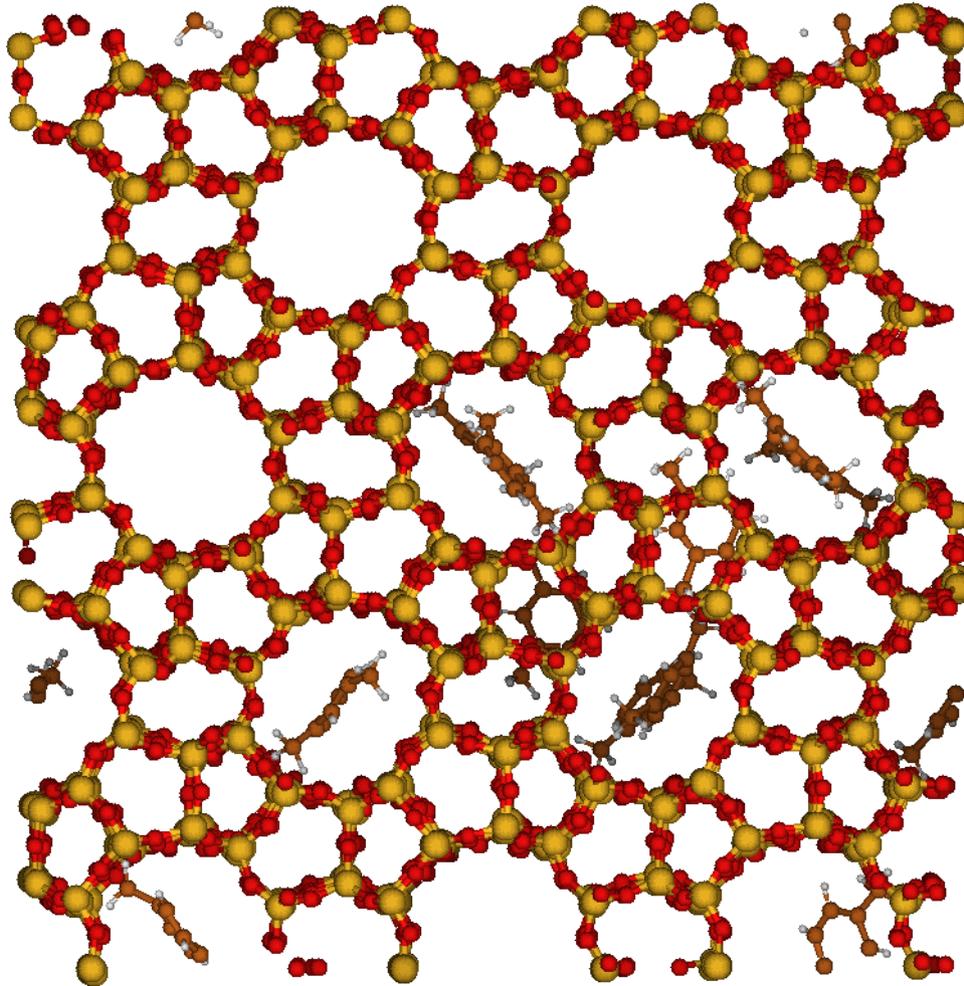
- risposta ottica/magnetica
- solvatazione, reazioni chimiche

## **(3) Vetri**

- proprieta' meccaniche, magnetiche, di trasporto

# PROPOSTA – 1

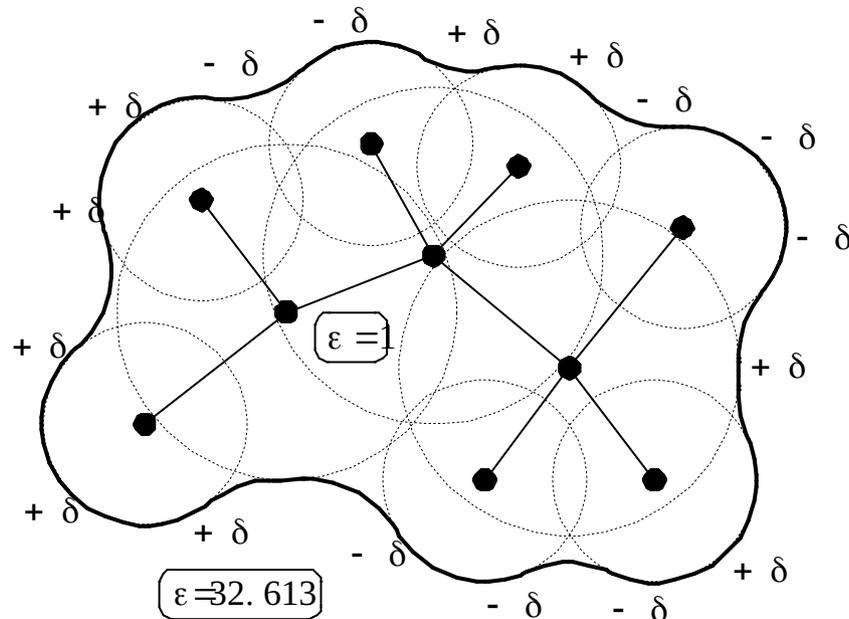
Diffusione in matrici solide/liquide/polimeriche



Formalismo di  
Einstein-Smoluchowski

# PROPOSTA - 2

## 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

# **Disponibilita'**

Massimo 1-2 studenti alla volta