



Substrates for
Electronic Displays



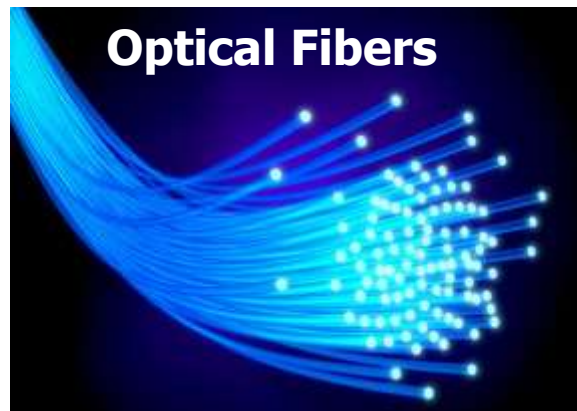
Electrolytes and
Sealants for
Electrochemical
devices



Laboratory and Kitchen Glassware



Beverage containers



Optical Fibers



Architecture & Buildings



Aerospace & High-performance composites



orthopaedic and dental



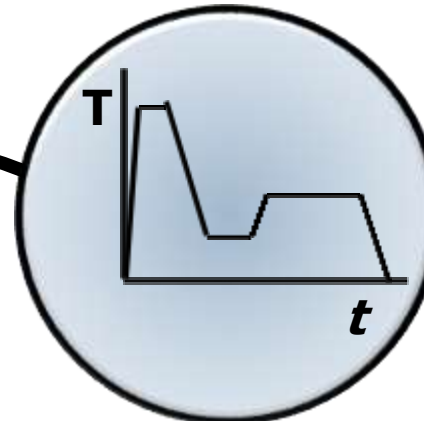
Nuclear waste confinement



Composition



Processing



Processing

- Melting Temp
- Quenching rates
- Annealing
- Strengthening
- Etc...

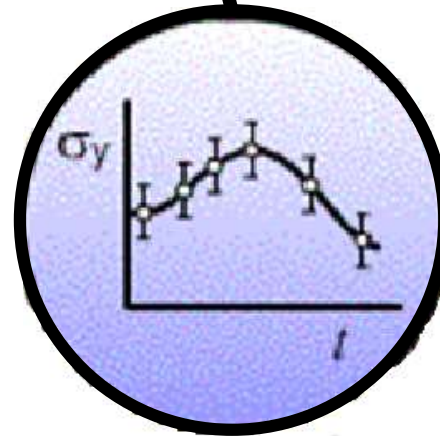
Experiments

Atomistic Simulations

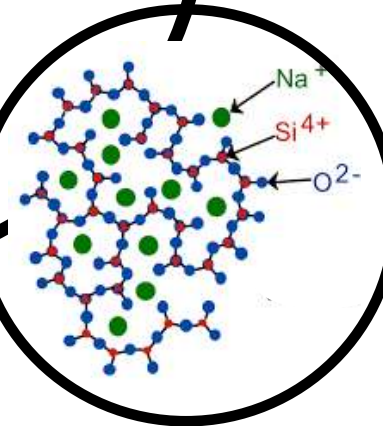
Data-driven approaches

Properties

- Hardness
- Tensile Strength
- Elasticity
- Chemical Durability
- Conductivity



Properties



Structure

Structure

- Connectivity
- Rings statistics
- Coordination numbers
- Cations intermixing

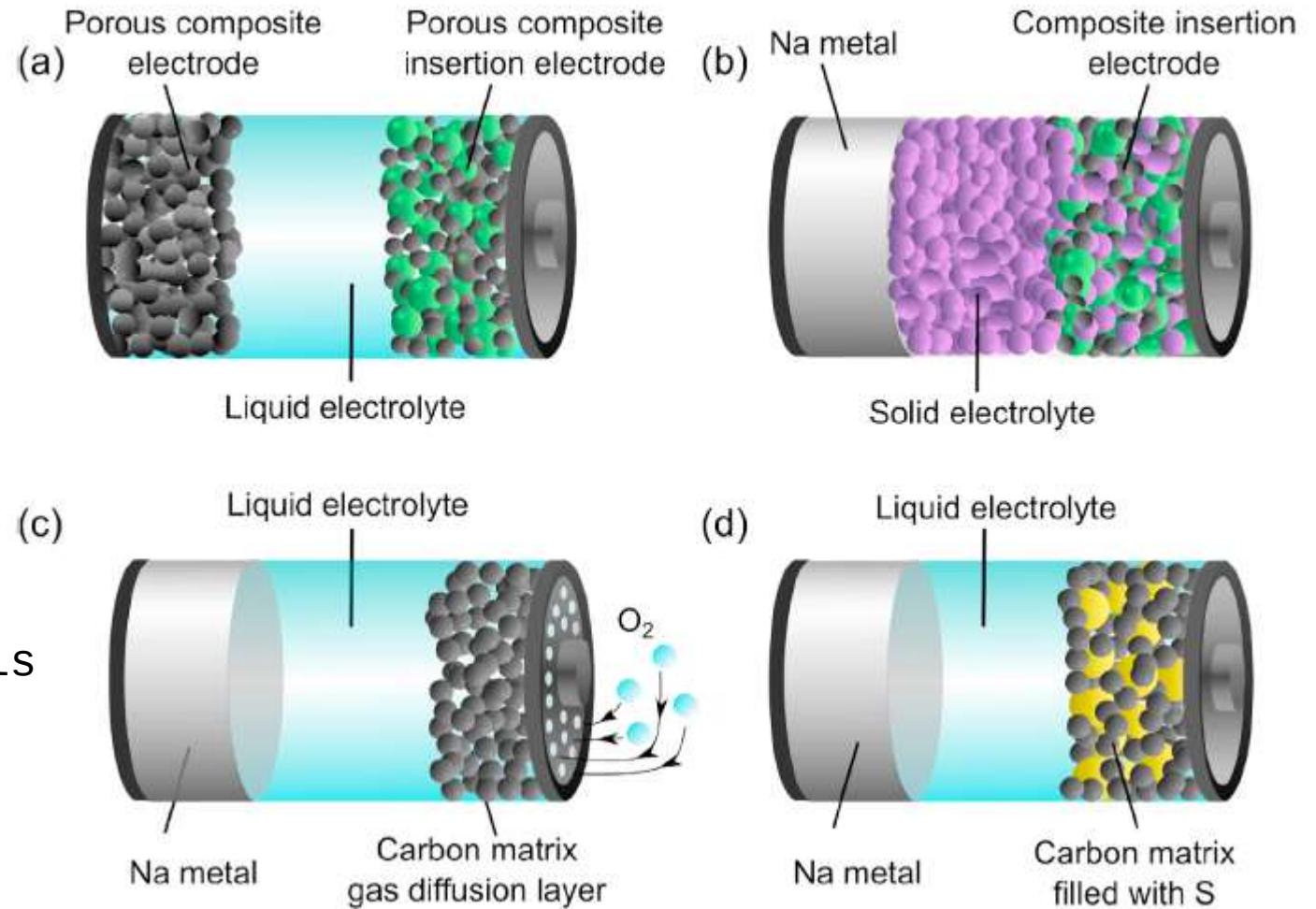
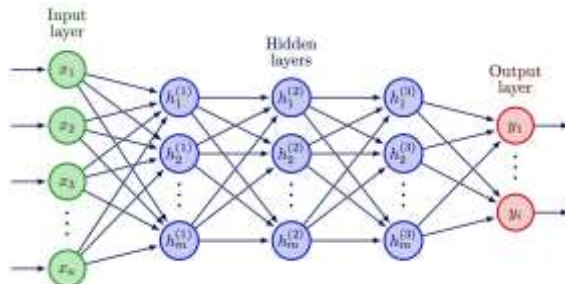
Studio Relazione composizione-struttura-proprietà di elettroliti solidi per batteria a stato solido a base di sodio.



Dinamica Molecolare

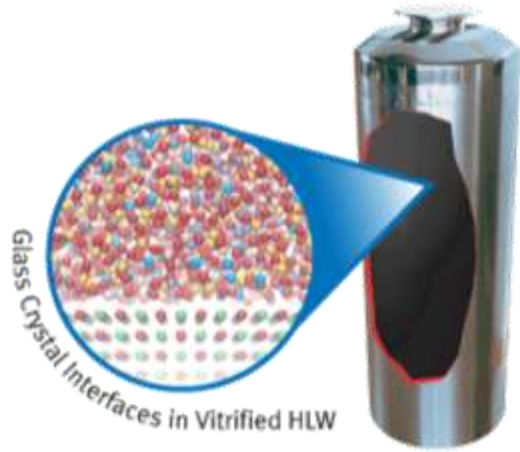
$$\frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} = -\frac{\nabla_i U(\mathbf{r})}{m_i}$$

Machine Learning Potentials



Possibili internship all'estero (Magistrali)

Nuclear waste confinement



**Atomic Energy and Alternative Energies
Commission - France**



Saclay, Parigi,
Francia



I P C M S

Institut de Physique et Chimie
des Matériaux de Strasbourg



Strasburgo
Francia

Université

de Strasbourg

Simulazione di eventi rari in catalisi

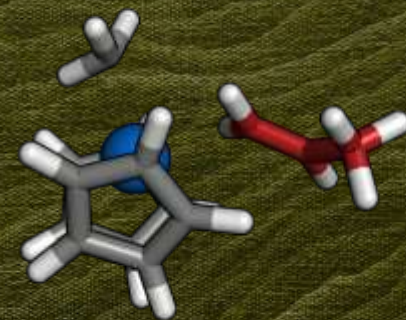
Dinamica molecolare e intelligenza artificiale

Prof. GiovanniMaria Piccini



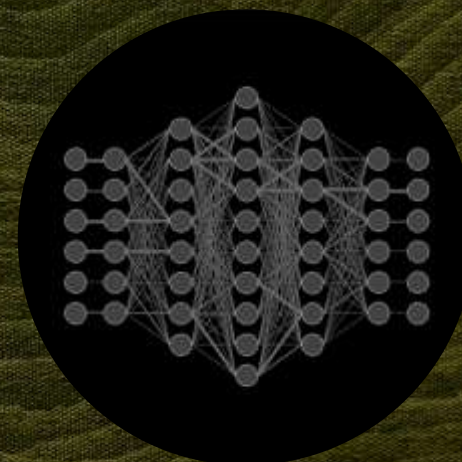
Combiniamo tecniche di simulazione avanzata:

- Dinamica molecolare ab initio
- Metadinamica
- Metodi di energia libera...



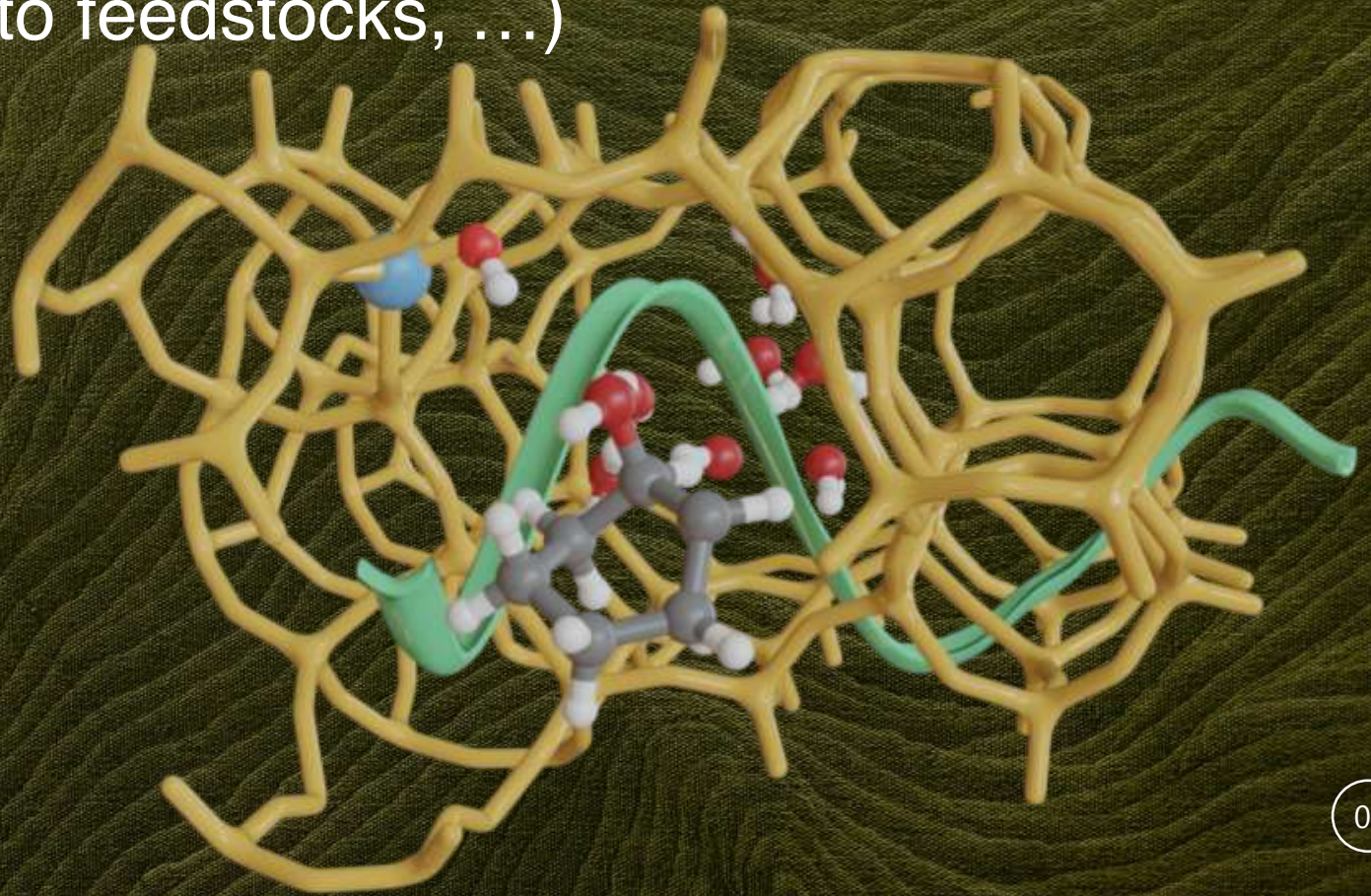
...con tecniche di machine learning:

- Potenziali interatomici ML
- Data processing di strutture chimiche
- Predizioni struttura-proprietà



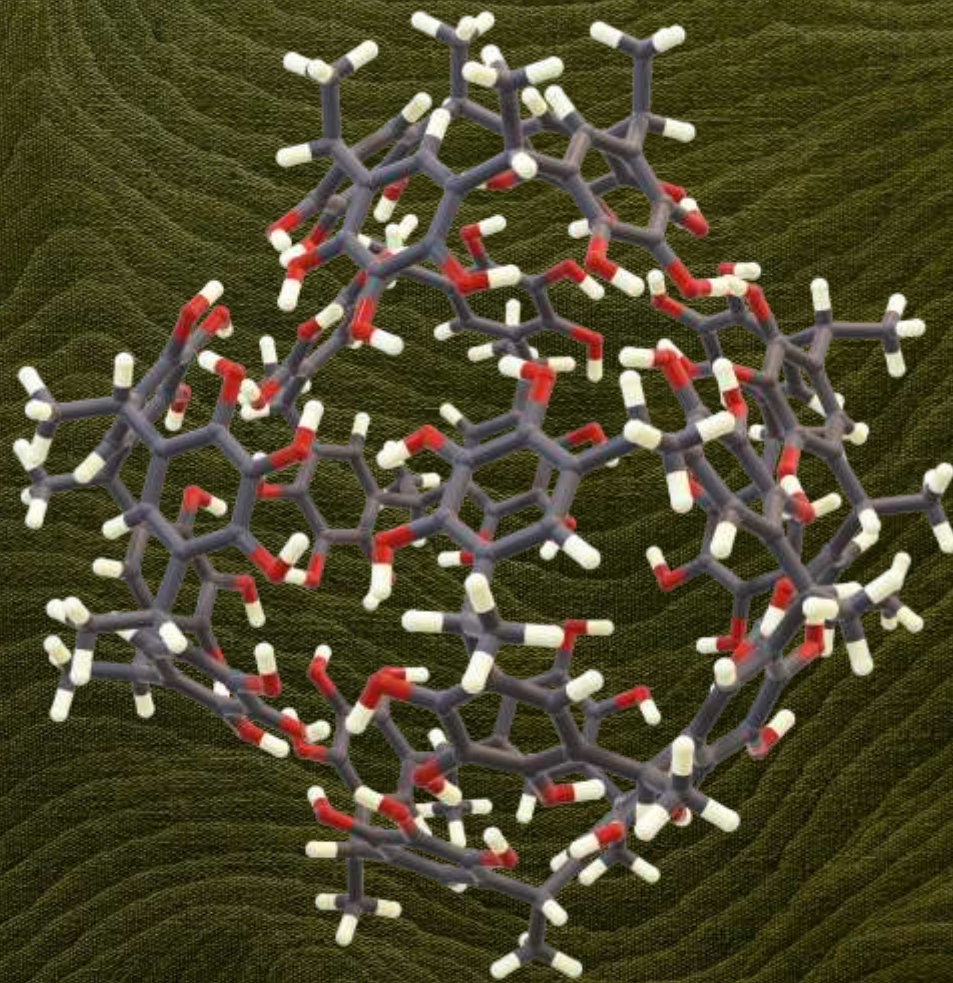
Catalisi eterogenea

- materiali nanoporosi (zeoliti, mof, cof)
- superfici metalliche e ossidi
- processi green (CO_2 to feedstocks, ...)



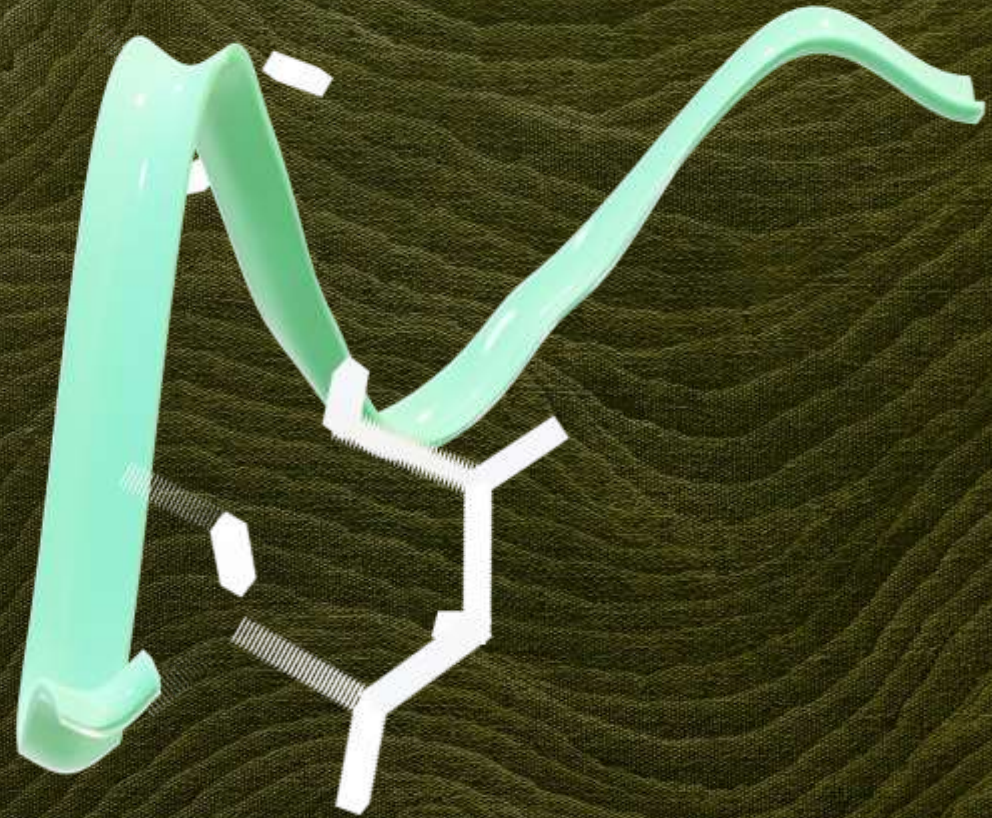
Catalisi supramolecolare

- assembly e incapsulazione
- catalisi biomimetica
- de novo design di catalizzatori supramolecolari



Sviluppo metodi

- metodi di energia libera
- enhanced sampling
- metodi perturbativi
- potenziali machine learning
- data science



Simulazioni di dinamica molecolare multiscala di enzimi degradanti materiali plastici

I progetti avranno come relatore il **prof. Francesco Muniz-Miranda** e la **prof.ssa Maria Cristina Menziani** e come correlatore il Dr. Alessandro Berselli.

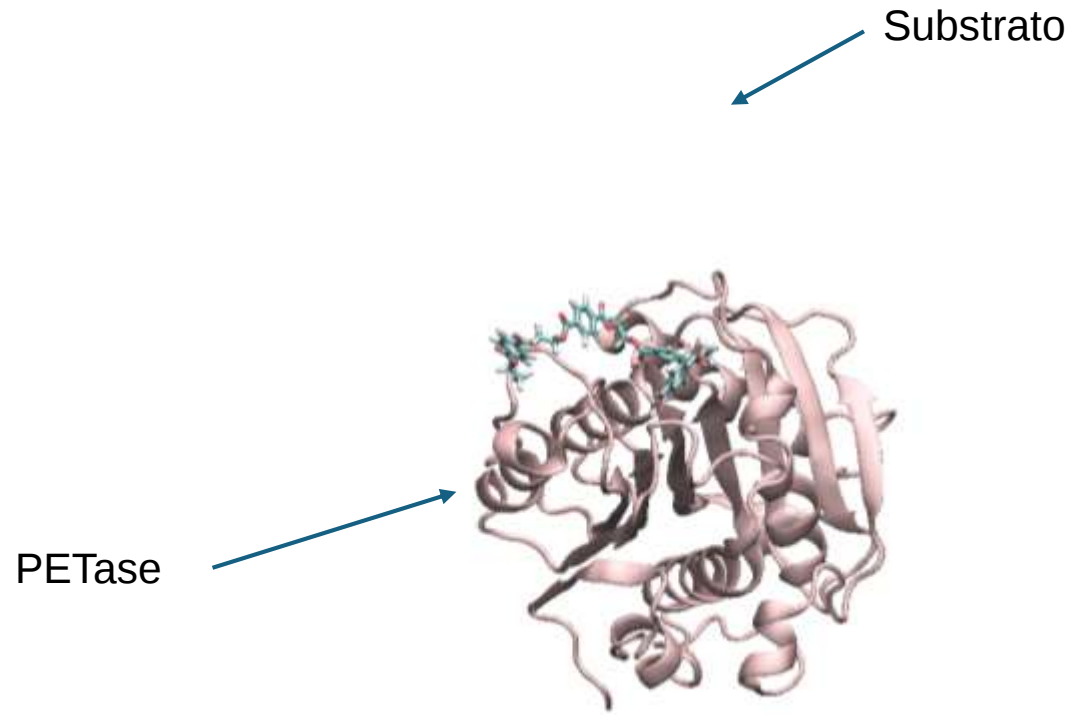
Vogliamo studiare il meccanismo attraverso il quale l'enzima PETase riesce a **legare** e, successivamente, **idrolizzare**, catene di materiale plastico polimerico.

In particolare, studieremo il polietilene tereftalato (PET) e un analogo di origine biologica polietilene furanoato (PEF).

Utilizzeremo **metodi computazionali** che richiedono diversi livelli di teoria:

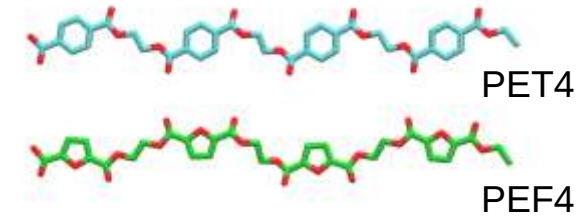
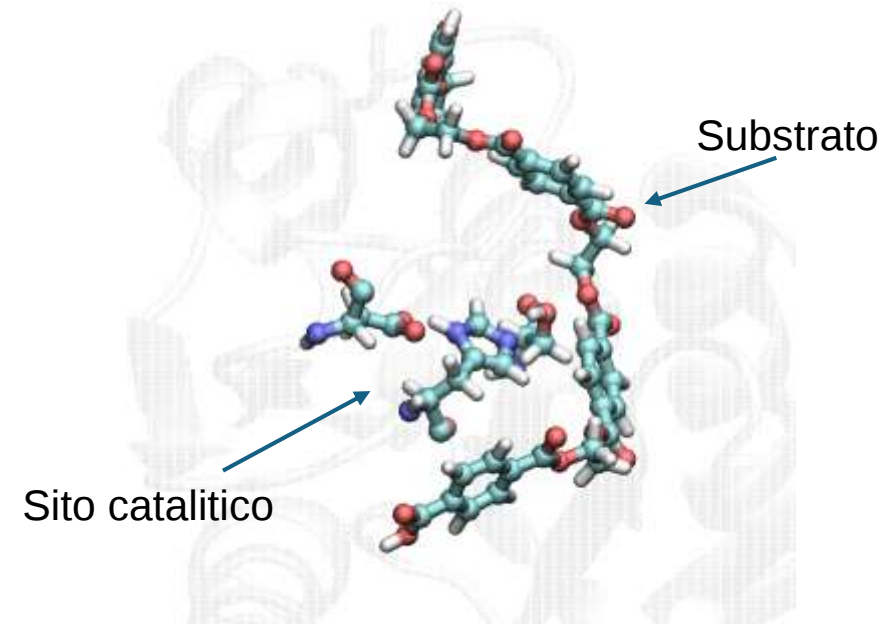
Dinamica Molecolare classica:

- Riarrangiamenti strutturali
- Stabilità della struttura terziaria
- Interazioni proteina – substrato
- Affinità di legame
- Tempo scala di simulazione del microsecondo



Simulazioni multiscala QM/MM:

- Meccanismo di reazione
- Rottura e formazione di legami covalenti
- Energia di reazione e di attivazione
- Stati di transizione
- Tempo scala di simulazione del nanosecondo



Progetto 1:
Comparazione di *PETase* con *leaf-branch cutinase* (LCC) tramite dinamica molecolare classica

- Stabilità strutturale
- Interazioni con PET e PEF
- Correlazione con dati sperimentali

Cosa imparerai a fare:

- Lavorare in ambiente Linux
- Molecular docking
- Simulazione dinamica molecolare (software NAMD)
- Analisi dati e rendering di immagini e video con VMD

Progetto 2:
Studio del meccanismo di idrolisi di *PETase* nei confronti di PET e PEF

- Energie di attivazione e reazione
- Meccanismo
- Sviluppo di coordinata di reazione ottimale

Cosa imparerai a fare:

- Lavorare in ambiente Linux
- Ottimizzazione coordinata di reazione con metodi machine learning
- Simulazione dinamica molecolare QM/MM (software AMBER e ORCA)
- Analisi dati rendering di immagini e video con VMD

Entrambi i progetti sono idonei sia per tesi triennali che magistrali.