

Francesco Faglioni

(francesco.faglioni@unimore.it)

COSA: CALCOLI

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

COME

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

PERCHÉ

(1) Batterie al Li

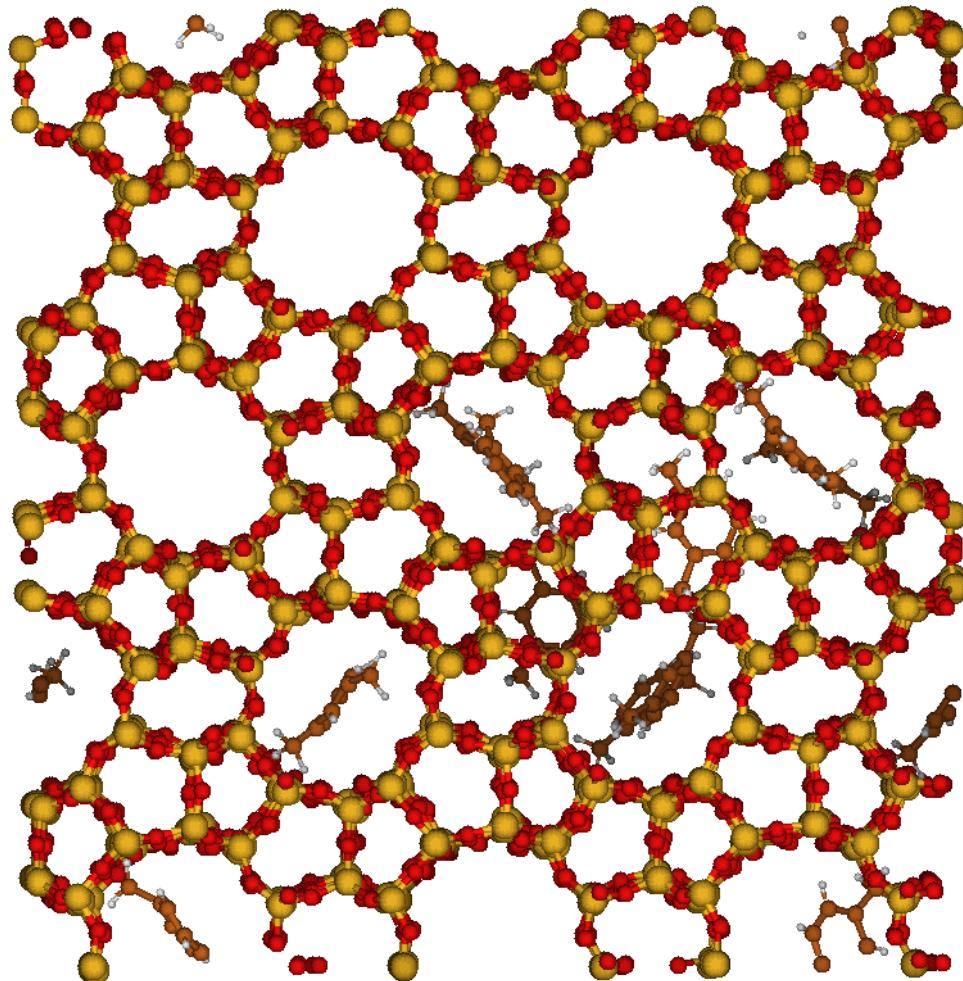
- Migrazione/diffusione di specie in solidi/liquidi
- trasferimento elettronico
- degradazione elettrodi ed elettroliti

(2) Proprietà molecolari

- struttura, risposta ottica/magnetica
- solvatazione, reazioni chimiche

PROPOSTA – 1

Diffusione in matrici solide/liquide/polimeriche

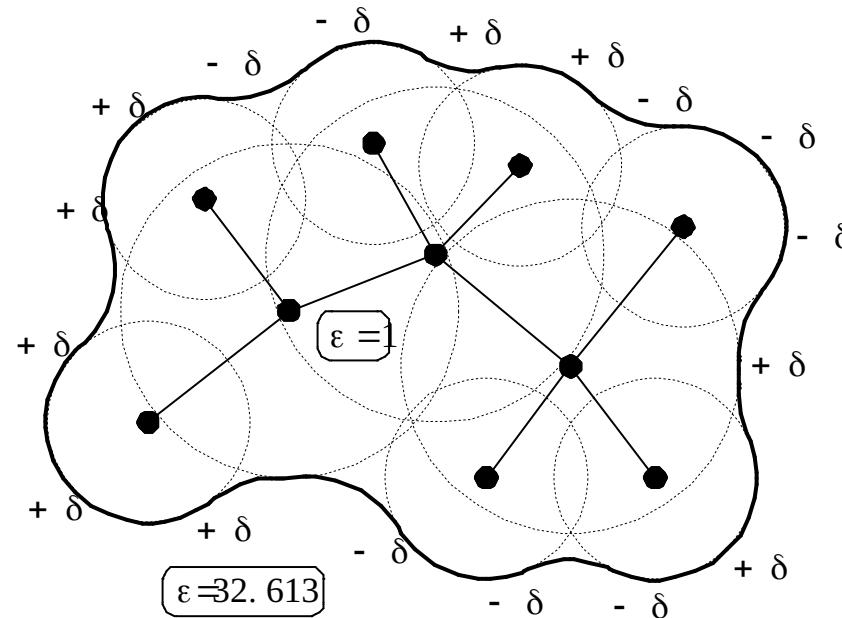


Formalismo di Einstein-Smoluchowski

- 1) Modello teorico
- 2) Dinamica molecolare

PROPOSTA - 2

Simulazioni di pKa in soluzione

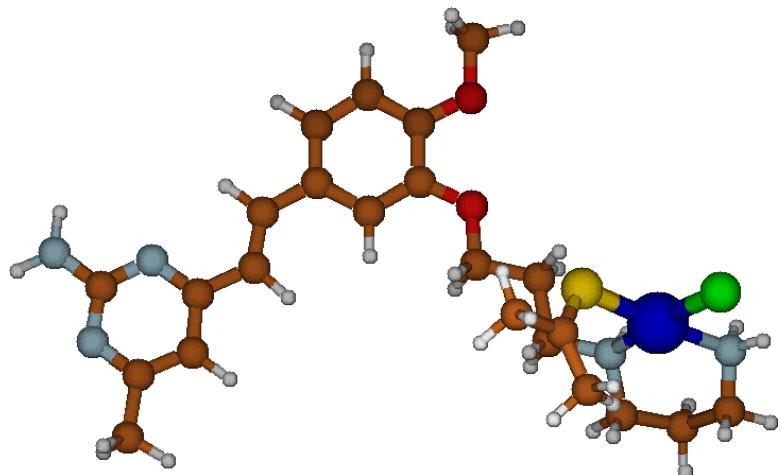


Solvente implicito:

- 1) Modello teorico
- 2) Calcoli quantomeccanici

PROPOSTA – 3

- Complessi di metallici per scopi terapeutici



- 1) MD + DFT → geometrie ed energie
- 2) Varie configurazioni e leganti
- 3) NMR → confronto con esperimenti

Disponibilità

Massimo 1-2 studenti alla volta

TESI / TIROCINIO

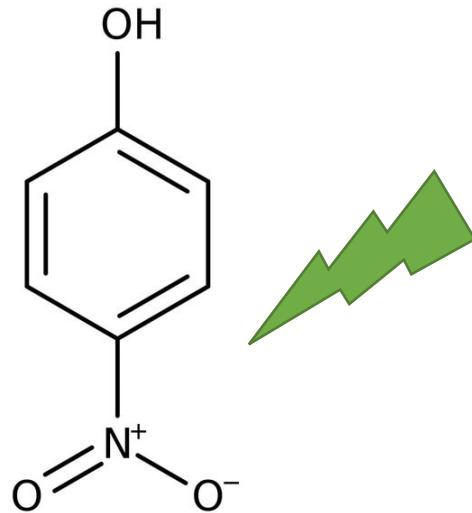
- Capire il problema, studio bibliografia (1/6)
- Familiarizzarsi coi codici (1/6)
- Pianificare progetto; primi risultati (1/6)
- Rimodulare progetto; altri risultati (2/6)
- Scrittura (1/6)

Interpretazione di spettri SERS

dr. Francesco Muniz-Miranda – francesco.munizmiranda@unimore.it

- Il SERS è una spettroscopia Raman che aumenta anche di milioni di volte certi segnali vibrazionali in prossimità di opportune superfici.

- ❖ Tecniche computazionali:
DFT per il calcolo di spettri vibrazionali
- ❖ Tuttavia ...



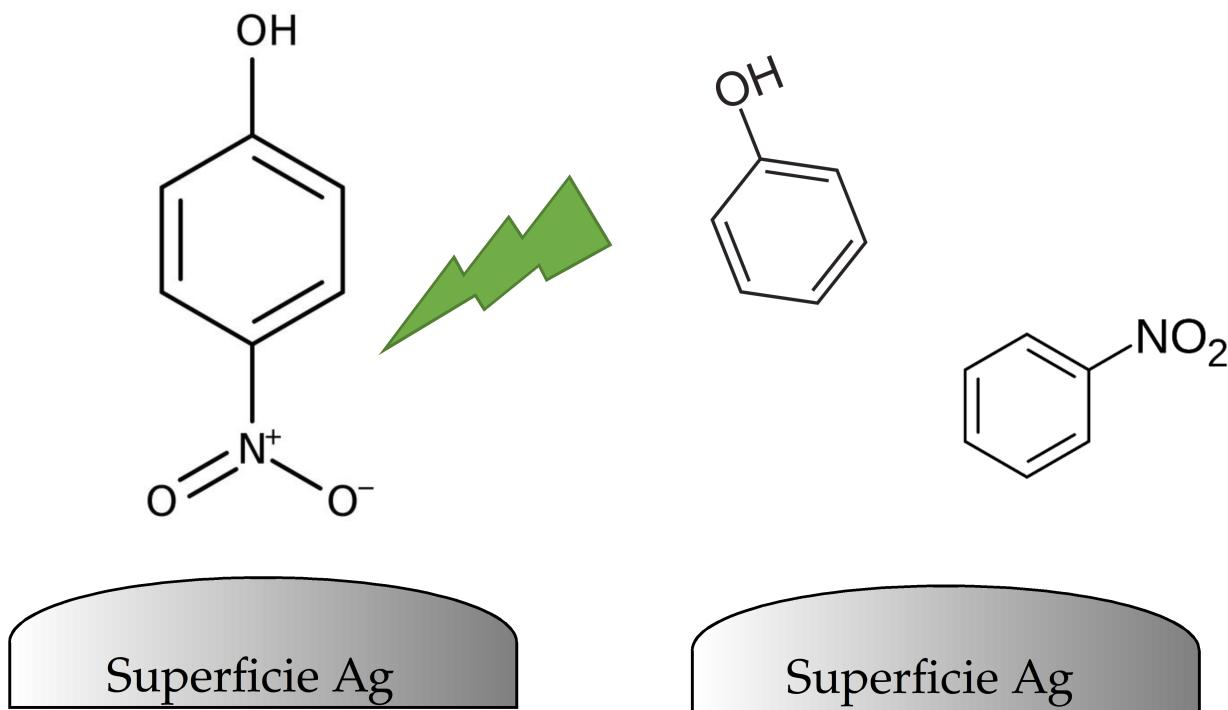
Superficie Ag

Interpretazione di spettri SERS

dr. Francesco Muniz-Miranda – francesco.munizmiranda@unimore.it

- Il SERS è una spettroscopia Raman che aumenta anche di milioni di volte certi segnali vibrazionali in prossimità di opportune superfici.

- ❖ Tecniche computazionali:
DFT per il calcolo di spettri vibrazionali
- ❖ Tuttavia, la geometria di aggancio molecola-superficie è difficile da caratterizzare sperimentalmente: per questo servono semplici calcoli di chimica quantistica



- ❖ Tecniche computazionali:
DFT e TD-DFT ... ed è il computer a fare i calcoli per noi!

Proposte di Tesi di Laurea (Tutor Prof. Alfonso Pedone)

- 1. Machine-Learning Molecular Dynamics for uncovering structural origins of ionic conductivity in amorphous electrolytes for next-generation All-Solid-State Sodium Batteries**
- 2. Molecular Dynamics Investigation of Indentation Response in Aluminosilicate Glasses for the Design of Ultrastrong Glass Materials**
- 3. Benchmarking Machine Learning Interatomic Potentials in Predicting Structural and Mechanical Properties of Oxide Glasses**

Per informazioni riguardanti i progetti e la possibilità di effettuare tesi all'estero chiedere al docente.