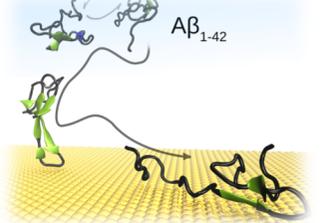
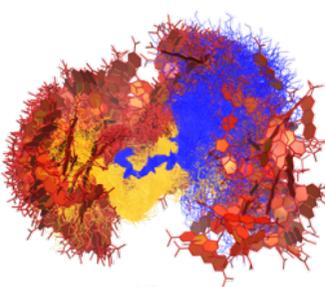
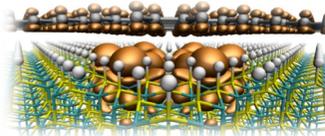
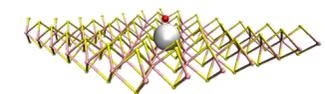
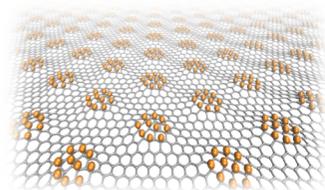


# Modellizzazione molecolare e simulazioni: Tesi disponibili



**Calcoli e simulazioni  
*ab initio* (DFT)**

Permeabilità di membrane di WS<sub>2</sub>

Proprietà elettroniche del grafene deformato disomogeneamente

Reattività del *Buffer Layer* del grafene su carburo di silicio

**Materiali 2D, supportati**

Proprietà di nuove proteine fluorescenti nel vicino infrarosso

**Sistemi biomolecolari**

**Dinamica molecolare classica atomistica**

**Materiali 2D, sospesi**

Proprietà strutturali del grafene deformato disomogeneamente

Superlubricità di WS<sub>2</sub> su grafene

Processo di formazione del grafene QFSM

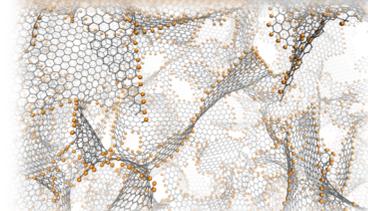
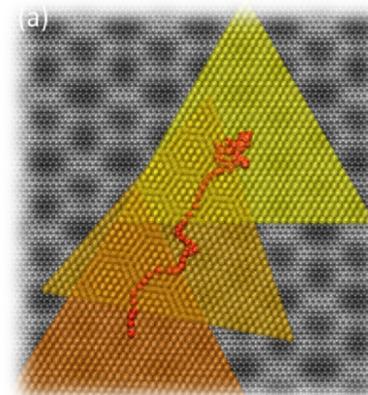
Elettroliti confinati su elettrodi

Strutture nanoporose a base di grafene

Interazione tra superfici inorganiche e biomolecole

Simulazione di una coppia FRET

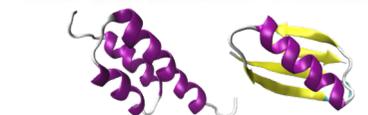
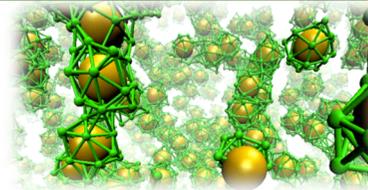
**Modelli a bassa risoluzione**



Espandibile a progetto  
Perfezionamento



Unificabili in singolo progetto  
Perfezionamento



**Strutture porose, superfici e diffusione**

Diffusione in grafene nanoporoso

Diagramma delle fasi di NP funzionalizzate

Diagramma delle fasi di interruttori evolvuzionistici

Titolo	Responsabili	Descrizione e note
Reattività del <i>Buffer Layer</i> del grafene su carburo di silicio	Valentina Tozzini Luca Bellucci	Studio della reattività dei vari diversi siti superficiali del sistema a diversi tipi di reazioni (base: adesione di H <sub>2</sub> ). Collegamento con attività sperimentale presso NEST (S Heun). Uso di sistemi HPC ad accesso locale e/o CINECA. Estendibile per dottorato allo studio della funzionalizzazione per costruzione di sistemi multi-strato
Permeabilità di membrane di WS <sub>2</sub>	Valentina Tozzini	Studio della permeabilità di membrane di WS <sub>2</sub> di dimensioni crescenti a vari gas (eg He, possibilmente confronto con membrane di grafene). Difficoltà media, rischio medio-basso, collegamento con attività sperimentale (con gruppi Univ Jena, Canberra, Bergen). Uso Sistemi HPC locali e/o CINECA.
Proprietà di nuove proteine fluorescenti nel vicino infrarosso	Riccardo Nifosì	Modellizzazione di proteine fluorescenti derivate da fotorecettori per indagare la relazione tra struttura e proprietà, con tecniche di dinamica molecolare classica ed eventualmente ibride QM/MM ( <i>quantum mech/molecular mech</i> ). Collegamenti con attività sperimentali presso NEST e con attività teorica/computazionale presso Univ Twente (NL)
Proprietà elettroniche del grafene deformato disomogeneamente	Valentina Tozzini	Studio della struttura elettronica e reattività di grafene sottoposto a campi di distorsione non isotropi e non uniformi. Collegamento con attività sperimentale presso il dip di Fisica (progetto PRIN Resp A Tredicucci). Uso sistemi HPC locali e/o CINECA.
Proprietà strutturali del grafene deformato disomogeneamente	Valentina Tozzini Luca Bellucci	Studio della struttura e dinamica di membrane di grafene sottoposto a campi di distorsione non isotropi e non uniformi. Collegamento con attività sperimentale presso dip Fisica, nell'ambito di progetto PRIN (resp Prof Tredicucci). Uso sistemi HPC ad accesso diretto. Unificabile con il precedente per progetto di Dottorato/perfezionamento
Superlubricità di WS <sub>2</sub> su grafene	Valentina Tozzini	Studio della dinamica attivata termicamente e/o da campi esterni di cristalli triangolari di WS <sub>2</sub> depositati su grafene. Studio dell'attrito tra WS <sub>2</sub> e grafene in varie condizioni. Collegamenti con attività sperimentale presso NEST (C Coletti). Uso sistemi HPC ad accesso locale.
Formazione del grafene <i>quasi-free standing</i>	V Tozzini L Bellucci R Farchioni	Studio dell'intercalazione di idrogeno al di sotto del buffer layer. Ottimizzazione dei campi per simulare l'interazione dell'idrogeno e/o uso di campi reattivi. Collegamenti con il gruppo sperimentale presso NEST (S Heun/S Veronesi). Possibile estensione per intercalazione di Litio o altri metalli in un progetto adatto per dottorato.
Elettroliti confinati su elettrodi	Luca Bellucci Valentina Tozzini	Studio della struttura e dinamica degli strati di elettroliti nei pressi della superficie di un elettrodo carico. Effetto del confinamento sulla diffusione, dinamica vibrazionale e conducibilità termica. Collegamento con attività sperimentale NEST (F Rossella). Uso di sistemi HPC ad accesso locale.
Interazione tra superfici inorganiche e sistemi biomolecolari	Luca Bellucci Valentina Tozzini	Studio dell'interazione tra biomolecole (proteine o peptidi) e superfici inorganiche o nanoparticelle, anche funzionalizzate. Esplorazione dello spazio conformazionale e dell'adsorbimento con tecniche avanzate di campionamento ( <i>Replica Exchange</i> o <i>Metadinamica</i> ). Uso di sistemi HPC ad accesso locale o CINECA.
Simulazione di una coppia FRET ( <i>Fluorescence resonant energy transfer</i> )	Riccardo Nifosì	Studio della distanza tra due proteine fluorescenti connesse con un linker peptidico, per la calibrazione della misura sperimentale delle distanze. Simulazioni atomistiche di dinamica molecolare con enhanced sampling ( <i>Replica Exchange</i> o <i>Metadinamica</i> ). Collegamenti con attività sperimentali @ NEST (B Storti, R Bizzarri).
Strutture nanoporose a base di grafene	Luca Bellucci Valentina Tozzini	Modellizzazioni di impalcature 3D a base di grafene, o ossido di grafene ridotto e/o funzionalizzate per assorbimento di gas/fluidi (per supercondensatori, batterie, idrogeno), filtraggio o catalisi. Sviluppo di codici e protocolli computazionali per costruzione e caratterizzazione di modelli. Integrabile con il seguente per dottorato
Diffusione in grafene nanoporoso	Luca Bellucci Valentina Tozzini	Studio della diffusione di elettroliti e/o altri fluidi/gas in strutture grafeniche 3D disordinate a varia porosità. Diagramma di fase di diffusione in funzione della taglia/carica delle particelle, anche rappresentate a bassa risoluzione. Algoritmi <i>machine learning</i> per l'esplorazione dello spazio dei parametri. HPC locale o CINECA.
Diagramma delle fasi di nanoparticelle (NP) funzionalizzate	Valentina Tozzini	Studio dell'aggregazione di nanoparticelle d'oro funzionalizzate con residui idrofobici in funzione della taglia, carica, concentrazione e temperatura, con modelli a bassa risoluzione. Collab con NANO-Modena, Univ Dublino. Uso di sistemi HPC ad accesso diretto.
Diagramma delle fasi di interruttori evolvuzionistici	Valentina Tozzini	Studio della transizione elica-foglietto in proteine modello basate sugli <i>switch</i> evolvuzionistici. Esplorazione del diagramma delle fasi nello spazio parametrico e sequenziale, con algoritmi genetici e <i>machine learning</i> accoppiati alla dinamica molecolare. Collab con Univ di Mosca, San Pietroburgo e CNRS Montpellier. Sistemi HPC locali.