



Ricerca di Sistema elettrico

Analisi della struttura e della stabilità delle interfacce polimero/Sodio metallico da calcoli ab initio

D. Corona, O. Pulci, P.P. Proisini, M. Celino, F. Buonocore

Analisi della struttura e della stabilità delle interfacce polimero/Sodio metallico da calcoli ab initio

D. Corona¹, O. Pulci¹, P.P. Prosini², M. Celino², F. Buonocore²

¹University of Rome Tor Vergata, ²ENEA

Dicembre 2021

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Piano Triennale di Realizzazione 2019-2021 - III annualità

Obiettivo: *Tecnologie*

Progetto: 1.2 *“Sistemi di accumulo, compresi elettrochimico e power to gas, e relative interfacce con le reti”*

Work package: *“WP1 - Accumulo elettrochimico”*

Linea di attività: LA71 - *Calcoli teorici su materiali elettrodici e loro interfaccia con l'elettrolita 3*

Responsabile del Progetto: Giulia Monteleone

Responsabile del Work package: Pier Paolo Prosini

Il presente documento descrive le attività di ricerca svolte all'interno dell'Accordo di collaborazione *“Calcoli teorici su materiali elettrodici e loro interfaccia con l'elettrolita”*

Responsabile scientifico ENEA: Francesco Buonocore ENEA

Responsabile scientifico Tor Vergata: Prof.ssa Olivia Pulci

Indice

Sommario	4
INTRODUZIONE	4
DESCRIZIONE DELLE ATTIVITÀ SVOLTE E RISULTATI	6
METODI	6
RISULTATI	7
CONCLUSIONI	18
RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI	19
ABBREVIAZIONI ED ACRONIMI	19

1. Sommario

Gli elettroliti polimerici solidi (Solid Polymer Electrolytes, SPE) sono candidati promettenti per applicazioni di batterie basate sullo ione Sodio, ma l'interfaccia tra polimero ed elettrodo metallico per questa tecnologia post-lithium è stata finora poco studiata. Una migliore comprensione dei fenomeni interfacciali, principalmente la degradazione dei polimeri, è essenziale per migliorare le prestazioni della batteria. Lo scopo di questo studio è di ottenere informazioni sull'interazione atomistica della superficie e sulle prime fasi della formazione dell'interfase di elettroliti solidi (Solid Electrolyte Interphase, SEI) tra i polimeri ionicamente conduttivi e l'elettrodo metallico Na. Abbiamo studiato gli oligomeri di due polimeri candidati, considerati di maggiore interesse, ovvero polieteri e poliesteri (poly(ethylene oxide)) (PEO) e poly(3-caprolactone) (PCL). Abbiamo eseguito calcoli basati sulla teoria del funzionale densità (DFT) per studiare la stabilità e la struttura elettronica delle interfacce polimero/Na. L'assorbimento è stato calcolato sia nel vuoto come caso limite che includendo l'effetto di solvatazione in acetonitrile. Diversi siti di assorbimento sono stati testati per cercare le configurazioni di assorbimento del polimero sul metallo energeticamente favorite. Le energie di adsorbimento indicano che l'adesione al sodio metallico dei due polimeri è comparabile.

1 Introduzione

La crescente domanda del mercato di veicoli elettrici alimentati a batteria e di stoccaggio di energia su larga scala, ha fornito un'opportunità per la rinascita delle batterie agli ioni di sodio. Negli anni '90 questa tecnologia ha perso la concorrenza con la sua rivale al litio a causa della migliore scelta di materiali di intercalazione per gli ioni di litio. Tuttavia, per far fronte alla necessità di prodotti a basso costo, il sodio è stato riconosciuto come l'alternativa più promettente per la prossima generazione di fonti di alimentazione, in quanto possiede proprietà chimiche analoghe a quelle del litio ed ha una distribuzione geografica di sali molto maggiore.

Per ora, la commercializzazione delle batterie agli ioni di sodio è ancora limitata a causa della:

- 1) mancanza di materiali per ottenere un'intercalazione efficiente e reversibile di ioni sodio;
- 2) necessità di elettroliti e additivi adatti per la conduzione ionica in ambiente aprotico.

La necessità descritta al punto 2), si articola in due subphyla principali: la scelta dell'elettrolita e lo studio dell'interfaccia elettrodo/elettrolita. Per quanto riguarda la scelta dell'elettrolita, una classe di materiali risultata promettente è quella dei *solid polymer electrolytes* (SPEs). I vantaggi di questi ultimi, rispetto alla loro convenzionale controparte liquida, risiedono nella maggior sicurezza della batteria e nelle interessanti proprietà meccaniche; mentre limitano per ora il loro utilizzo, la mobilità ionica a temperatura ambiente e la compatibilità chimica ed elettrochimica con gli elettrodi. All'interno dei SPEs, polieteri (es. PEO) e poliesteri (es. PCL) risultano essere i candidati migliori, e dagli anni '70 numerosi studi sperimentali e computazionali hanno investigato l'applicabilità di PEO per la tecnologia agli ioni di litio. Generalmente la complessazione degli ioni alcalini all'interno della macromolecola viene studiata con calcoli DFT, mentre le proprietà di trasporto del polimero, vengono investigate tramite simulazioni di dinamica molecolare. Tuttavia, la caratterizzazione *ex situ* delle proprietà dei SPEs come elettroliti, essendoci forte adesione tra elettrodo e polimero e reazioni di decomposizione dello stesso all'interfaccia tra i due, richiede una comprensione profonda su scala atomica della SEI.

È evidente quindi, che uno dei più grandi ostacoli al miglioramento delle prestazioni elettrochimiche delle batterie al sodio è l'interfaccia elettrodo/elettrolita, ulteriormente complicata dalla presenza tra di loro, della Solid Electrolyte Interface (SEI): uno strato di passivazione elettronicamente isolante e ionicamente conduttivo che si comporta, come dice il nome, da elettrolita solido. Scoperta nel 1979, e dovuta ad un mismatch tra le funzioni lavoro degli elettrodi e la finestra di stabilità elettrochimica dell'elettrolita, la SEI è ad oggi il costituente più importante e meno compreso delle batterie secondarie. È perciò di fondamentale importanza studiare la composizione e la crescita della SEI, in quanto: da un lato, avere una SEI densa ed intatta impedisce l'electron tunneling che causa la riduzione dell'elettrolita, prolungando così la durata al ciclaggio e la sicurezza della batteria; dall'altro lato, una sua formazione non controllata consuma i materiali attivi della cella causando una diminuzione in capacità e potenza specifica. Rispetto a quella presente sul catodo, la SEI presente sull'anodo è più instabile a causa delle sue espansioni volumiche durante l'intercalazione degli ioni alcalini ed in quanto esso stesso è il sito di una reazione di riduzione. La complessa struttura a mosaico e le proprietà di questo film all'interfaccia evolvono in tempi del picosecondo, rendendone difficoltosa la caratterizzazione sperimentale; fortunatamente modelli predittivi computazionali compensano queste limitazioni specialmente per quanto riguarda le proprietà cinetiche e termodinamiche. Per questo motivo nell'ultimo decennio c'è stata un'intensa attività di ricerca per quanto riguarda il design della SEI per le batterie agli ioni di litio, con metodi *ab-initio* e fenomenologici; è arrivato il momento di estendere questo studio alla tecnologia basata sugli ioni di sodio.

2 Descrizione delle attività svolte e risultati

2.1 Metodi

L'indagine teorica è stata condotta con calcoli basati sulla teoria del funzionale della densità (DFT) all'interno dell'approssimazione del gradiente generalizzato (GGA) con il funzionale di scambio e correlazione di Perdew, Burke e Ernzerhof (PBE) [1-2]. I nostri calcoli sono stati eseguiti utilizzando il programma DMol3 [3-4] disponibile come parte del software Materials Studio [5]. Le funzioni d'onda elettroniche sono espresse in funzioni di base centrate sull'atomo definite su una fitta griglia numerica. Il set di base scelto è DNP (numerico doppio più polarizzazione) in cui ciascuna funzione di base è limitata a un raggio di cut-off globale di 4.5 Å. Tutte le ottimizzazioni della geometria sono state eseguite utilizzando uno schema basato su coordinate interne delocalizzate. Impostiamo le soglie di convergenza dell'ottimizzazione della geometria per il cambiamento di energia, la forza massima e lo spostamento massimo su 10^{-5} Hartree, 0,002 Hartree/Å e 0,001 Å, rispettivamente. Abbiamo modellato la superficie dell'anodo di sodio metallico come uno slab periodico di spessore pari a 5 strati nella direzione <110> del sodio bulk (mostrata in Figura 1). Le dimensioni della cella in tutti i rilassamenti geometrici i due strati inferiori sono tenuti fissi nelle posizioni bulk per simulare la rigidità del cristallo. Le caratteristiche della supercella in cui le molecole sono adsorbite, mostrata in Figura 1, sono le seguenti: $a = b = 14.863$ Å; $c = 41.2374$; $a = b = 90^\circ$; $c = 70.5288^\circ$. L'ampiezza del vuoto nella direzione perpendicolare al piano della superficie è tale che le interazioni tra le immagini periodiche del sistema sono trascurabili. Abbiamo verificato che anche le interazioni tra le molecole e le proprie immagini periodiche siano trascurabili. Abbiamo tenuto conto implicitamente del solvente usando il modello COSMO (COnductor-like Screening Model) [6]. COSMO è un modello di solvatazione continuo in cui la molecola di soluto forma una cavità all'interno del continuum dielettrico con costante dielettrica, ϵ , che rappresenta il solvente. I calcoli sono stati eseguiti sul cluster di calcolo CRESCO6 della infrastruttura ENEAGRID di ENEA.

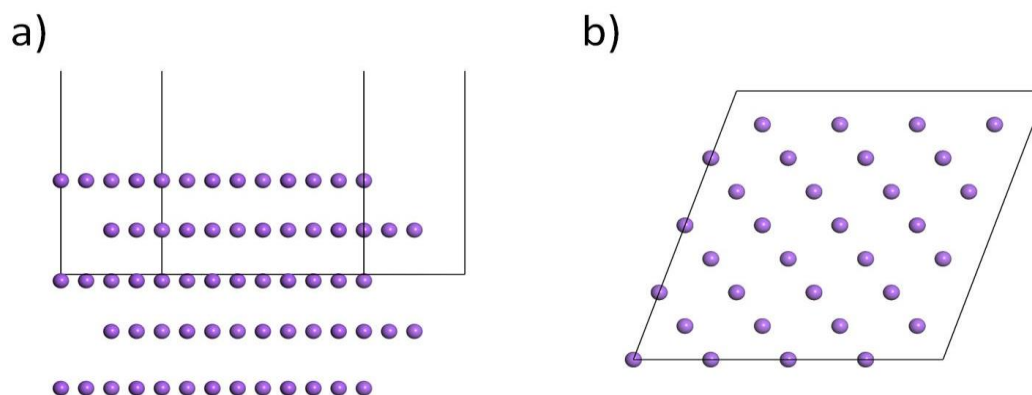


Figura 1. Vista laterale a) e vista dall'alto b) della superficie di Sodio Na(110), che rappresenta l'anodo.

2.2 Risultati

Abbiamo studiato l'adsorbimento su anodo di sodio degli oligomeri di due polimeri candidati, considerati di maggiore interesse, ovvero il polietere poly(ethylene oxide) (PEO) e il poliesteri poly(3-caprolactone) (PCL). Lo scopo è studiare la stabilità e la struttura elettronica delle interfacce polimero/Na. L'adsorbimento è stato calcolato sia nel vuoto ($\epsilon=1$) come caso limite che includendo l'effetto di solvatazione in acetonitrile ($\epsilon=37.5$). Diversi siti di assorbimento sono stati testati per cercare le configurazioni di assorbimento del polimero sul metallo energeticamente favorite.

L'energia di assorbimento E_{ads} è stata calcolata come:

$$E_{ads} = E_{Total\ system} - E_{slab} - E_{Mol} \quad (a)$$

dove $E_{Total\ system}$ è l'energia totale della configurazione di adsorbimento dopo il rilassamento della geometria, E_{slab} e E_{Mol} sono, rispettivamente, le energie totali dello slab e della molecola isolati dopo il rilassamento delle geometrie.

I possibili siti di adsorbimento, individuati dalla posizione dell'ossigeno, sono mostrati in Figura 2. Essi sono il sito top, situato al di sopra di un atomo del primo layer, il sito bridge, collocato tra due atomi del primo layer, ed il sito hollow, individuato al di sopra di un atomo del secondo layer. Sono stati considerati due oligomeri di PEO di lunghezza pari a due (PEO-2) e tre unità (PEO-3) ripetitive del polimero (Figure 3a e 3b) e l'oligomero di PCL pari ad una sola unità ripetitiva del polimero (PCL-1) in quanto è l'unico caso trattabile con la supercella adottata (Figura 3c). Si è scelto l'Ossigeno per individuare il sito di adsorbimento in quanto è più

elettronegativo di Carbonio ed Idrogeno, ed è atteso interagire più fortemente con il metallo, che è elettropositivo. A conferma di ciò, in Figura 4 è mostrata la funzione di Fukui elettrofilica per il PEO-2 e il PCL-1 proiettata su una isosuperficie della densità di carica che ha massimo proprio sull'Ossigeno.

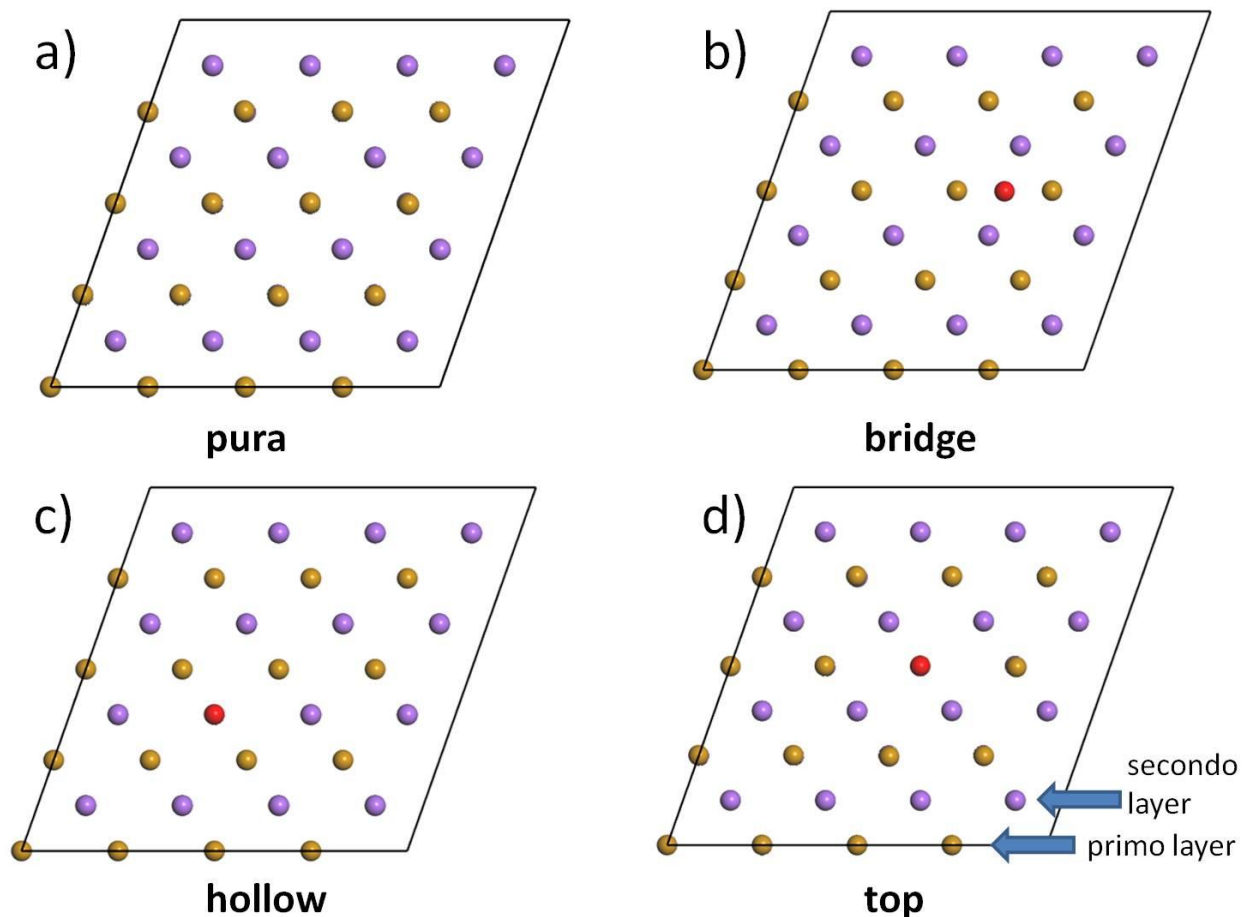


Figura 2. Vista dall'alto dell'anodo di Sodio Na(110) con i siti di ancoraggio (in rosso) studiati nel presente lavoro. In giallo sono evidenziati gli atomi di Na del primo strato, in viola quelli del secondo strato. a) superficie pura, b) sito di ancoraggio "bridge" tra due atomi di Na del primo layer, c) sito hollow (ancoraggio su un atomo di Na del secondo strato) e d) sito top (ancoraggio su un atomo di Na del primo strato).

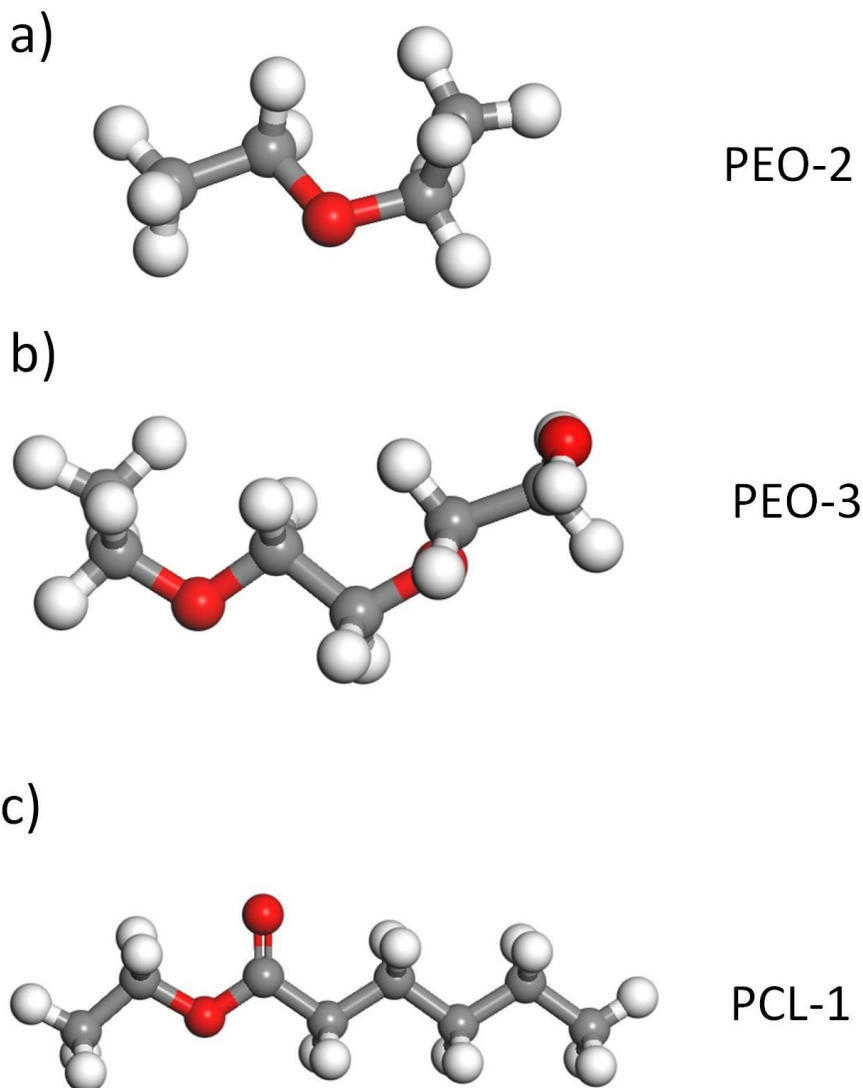


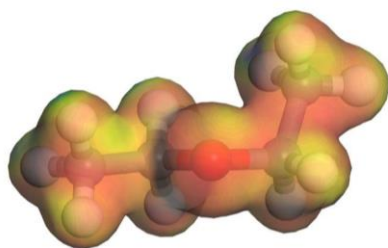
Figura 3. Geometrie degli oligomeri studiati. Gli atomi di Ossigeno sono rappresentati in rosso, il Carbonio in grigio, e l'Idrogeno in bianco. a) PEO-2: oligomero di PEO di lunghezza pari a due unità ripetitive del polimero; b) PEO-3: oligomero di PEO di lunghezza pari a tre unità ripetitive del polimero; c) PCL-1: oligomero di PCL di lunghezza pari a una unità ripetitiva del polimero.

Nelle Tabella 1 sono riportate le energie di adsorbimento nel vuoto, e in acetonitrile, per PEO-2 (oligomero di due unità ripetitive del polimero) al variare del sito di adsorbimento. Indipendentemente dal sito in cui è inizialmente posto l'Ossigeno, il sito di adsorbimento finale è sempre top. La geometria relativa all'adsorbimento nel sito top, risultato essere più legante, è mostrata in Figura 5 per adsorbimento nel vuoto e in Figura 6 per adsorbimento in acetonitrile. Analoga analisi per il PEO-3 (oligomero di tre unità ripetitive del polimero) mostra che la configurazione di adsorbimento più stabile è quella con i due atomi di Ossigeno sul sito di adsorbimento top (Tabella 1). Le geometrie relative sono mostrate in Figura 7 per adsorbimento nel vuoto e in Figura 8 per adsorbimento in acetonitrile.

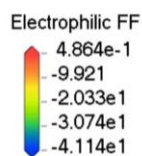
Tabella 1. Energie di adsorbimento in eV nel vuoto ($\epsilon=1$) o in acetonitrile ($\epsilon=37.5$) per l'oligomero PEO-2 consistente di due unità ripetitive e per l'oligomero PEO-3 consistente di tre unità ripetitive del polimero, al variare del sito di adsorbimento iniziale.

oligomero	sito iniziale	sito dopo rilassamento	Energia di adsorbimento [eV] ($\epsilon=1$)	Energia di adsorbimento [eV] ($\epsilon=37.5$)
PEO-2	top	top	-0.73	-1.03
PEO-2	bridge	top	-0.71	-0.68
PEO-2	hollow	top	-0.72	-0.64
PEO-3	top	top	-1.18	-0.82

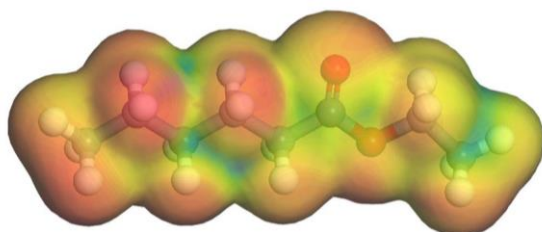
a)



PEO-2



b)



PCL-1

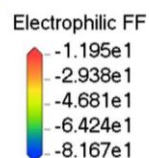
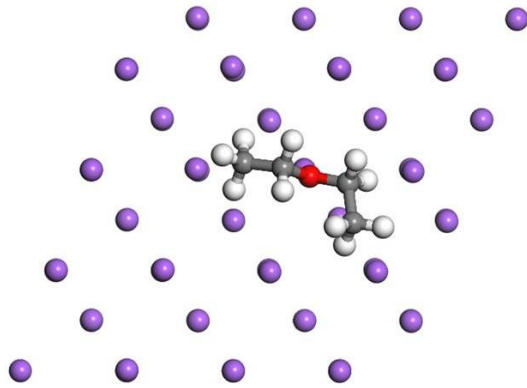
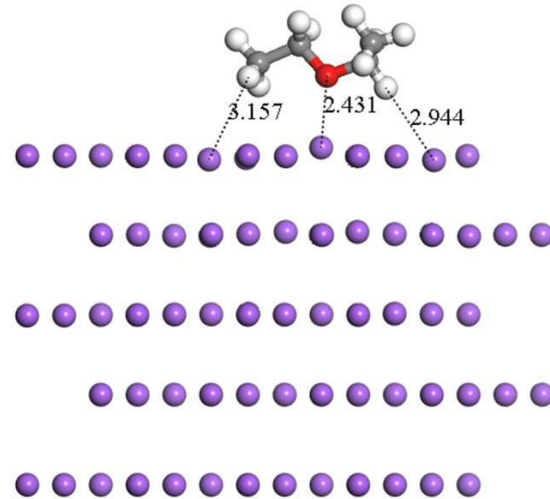


Figura 4. Funzione di Fukui elettrofilica per a) PEO-2 e b) PCL-1.

a)



b)

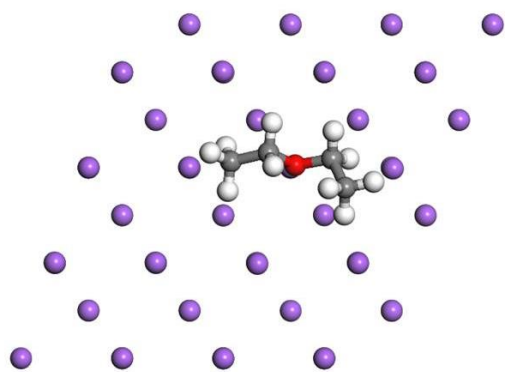


PEO-2

$\epsilon = 1$

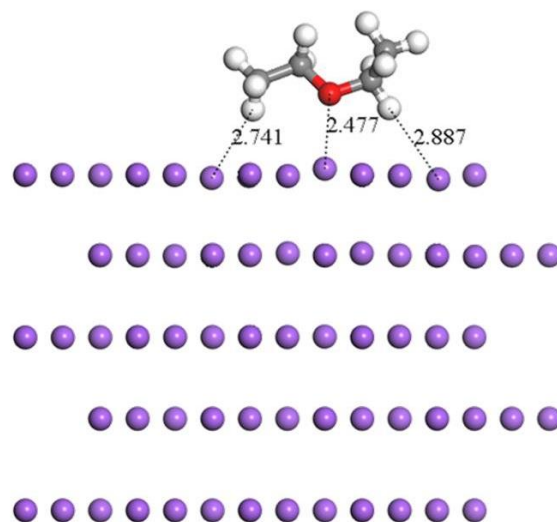
Figura 5. Configurazione di adsorbimento finale della PEO-2 su superficie di Na in assenza di solvente. La configurazione iniziale e quella finale corrispondono all'Ossigeno in TOP sulla superficie. a) vista dall'alto; b) vista laterale.

a)



PEO-2

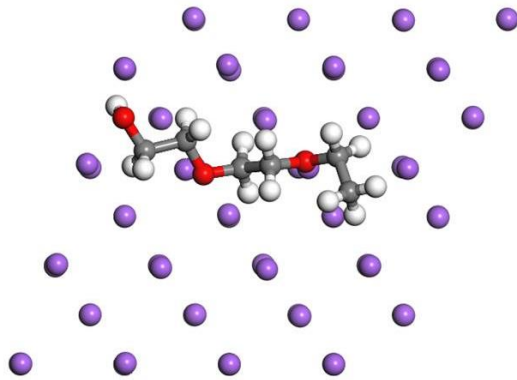
b)



$\epsilon = 37.5$

Figura 6. Configurazione di adsorbimento finale della PEO-2 su superficie di Na in presenza di solvente (acetonitrile). La configurazione iniziale e quella finale corrispondono all'Ossigeno in TOP sulla superficie. a) vista dall'alto; b) vista laterale.

a)



PEO-3

$\epsilon = 1$

b)

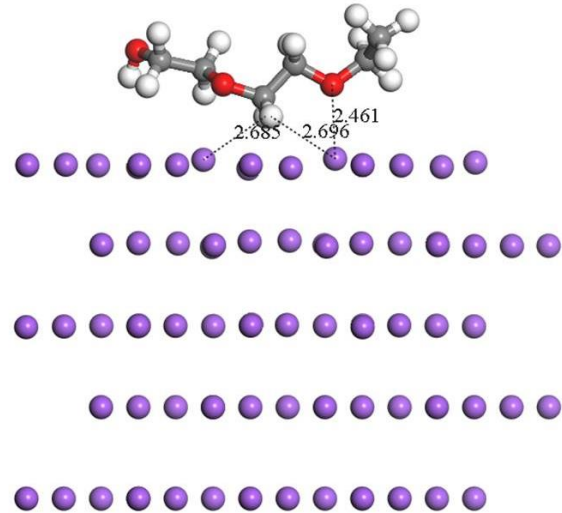


Figura 7. Configurazione di adsorbimento finale della PEO-3 su superficie di Na in assenza di solvente. La configurazione iniziale e quella finale corrispondono all'Ossigeno in TOP sulla superficie. a) vista dall'alto; b) vista laterale.

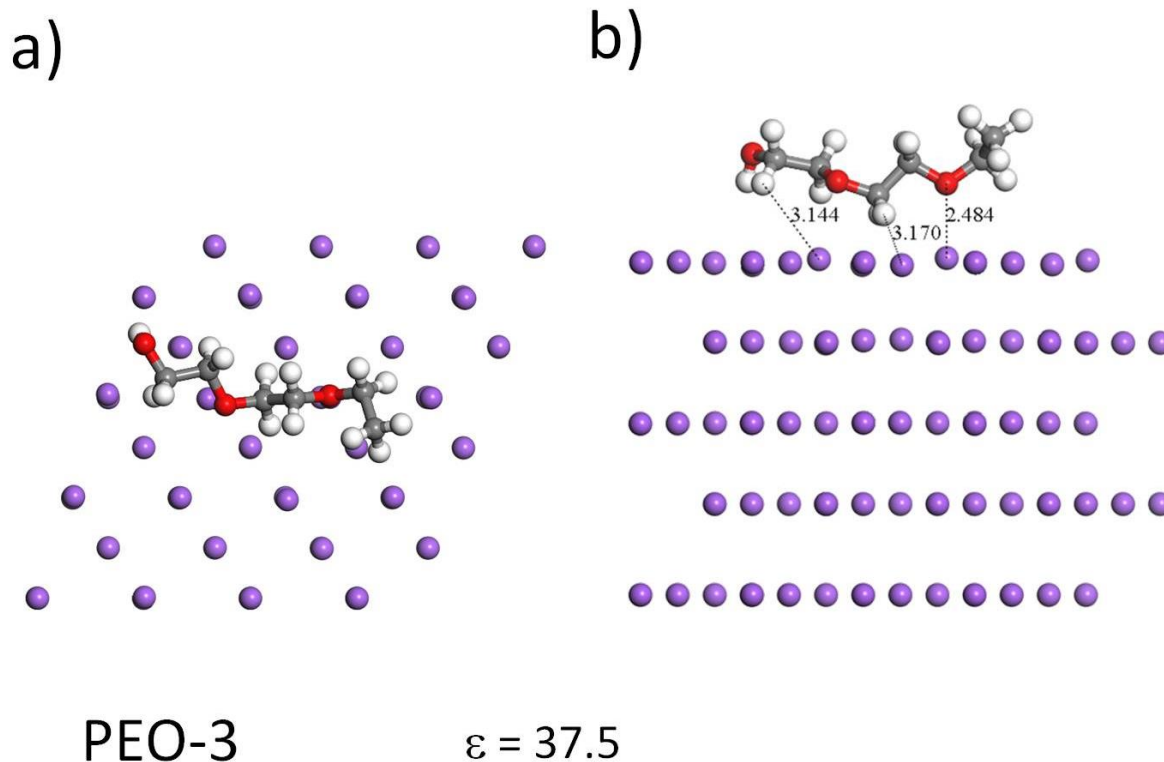


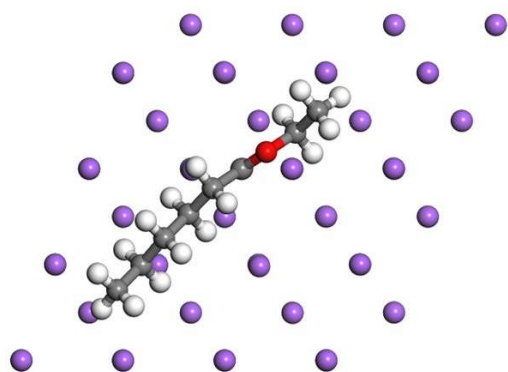
Figura 8. Configurazione di adsorbimento finale della PEO-3 su superficie di Na in presenza di solvente (acetonitrile). La configurazione iniziale e quella finale corrispondono all'Ossigeno in TOP sulla superficie. a) vista dall'alto; b) vista laterale.

È stato poi investigato l'oligomero PCL-1 (Figura 3c). La funzione di Fukui elettrofilica proiettata su una isosuperficie della densità di carica ha massimi su entrambi gli atomi di Ossigeno (Figura 3b). In realtà, abbiamo trovato che le configurazioni di adsorbimento con il gruppo acilico C=O del poliestere orientato verso la superficie sono le più stabili. Ad esempio, il gruppo C=O è 0.35 eV più stabile quando il suo ossigeno è sul sito bridge rispetto a quando l'Ossigeno etero (C-O-C) è sopra lo stesso sito. La situazione è simile sugli altri siti di adsorbimento. In ogni caso, l'oligomero considerato è sufficiente per esaminare le principali caratteristiche della interazione con la superficie. Nella Tabella 2 sono riportate le energie di adsorbimento nel vuoto o in acetonitrile al variare del sito di adsorbimento. Il sito bridge è risultato essere il più legante, e le geometrie sono mostrate nelle Figure 9 e 10 per adsorbimento nel vuoto e in acetonitrile, rispettivamente.

Tabella 2. Energie di adsorbimento in eV nel vuoto ($\epsilon=1$) o in acetonitrile ($\epsilon=37.5$) per l'oligomero PCL-1 consistente di una unità ripetitiva del polimero, al variare del sito di adsorbimento.

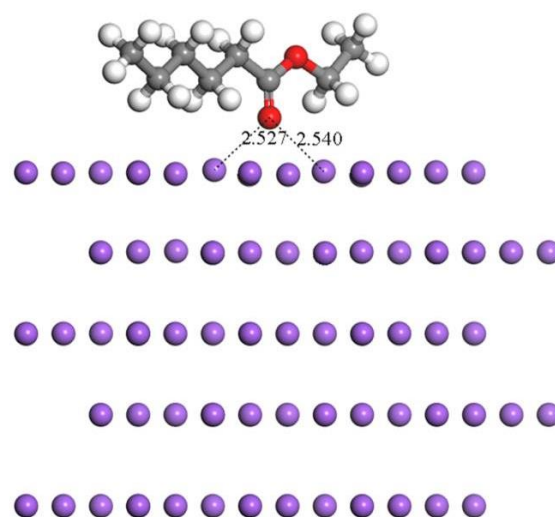
oligomero	sito iniziale	sito dopo rilassamento	Energia di adsorbimento [eV] ($\epsilon=1$)	Energia di adsorbimento [eV] ($\epsilon=37.5$)
PCL-1	top	top	-1.00	-0.78
PCL-1	bridge	bridge	-1.11	-0.85
PCL-1	hollow	hollow	-1.04	-0.77

a)



PCL-1

b)



$\epsilon = 1$

Figura 9. Configurazione di adsorbimento finale della PCL-1 su superficie di Na in assenza di solvente. La configurazione iniziale e quella finale corrispondono all'Ossigeno in TOP sulla superficie. a) vista dall'alto; b) vista laterale.

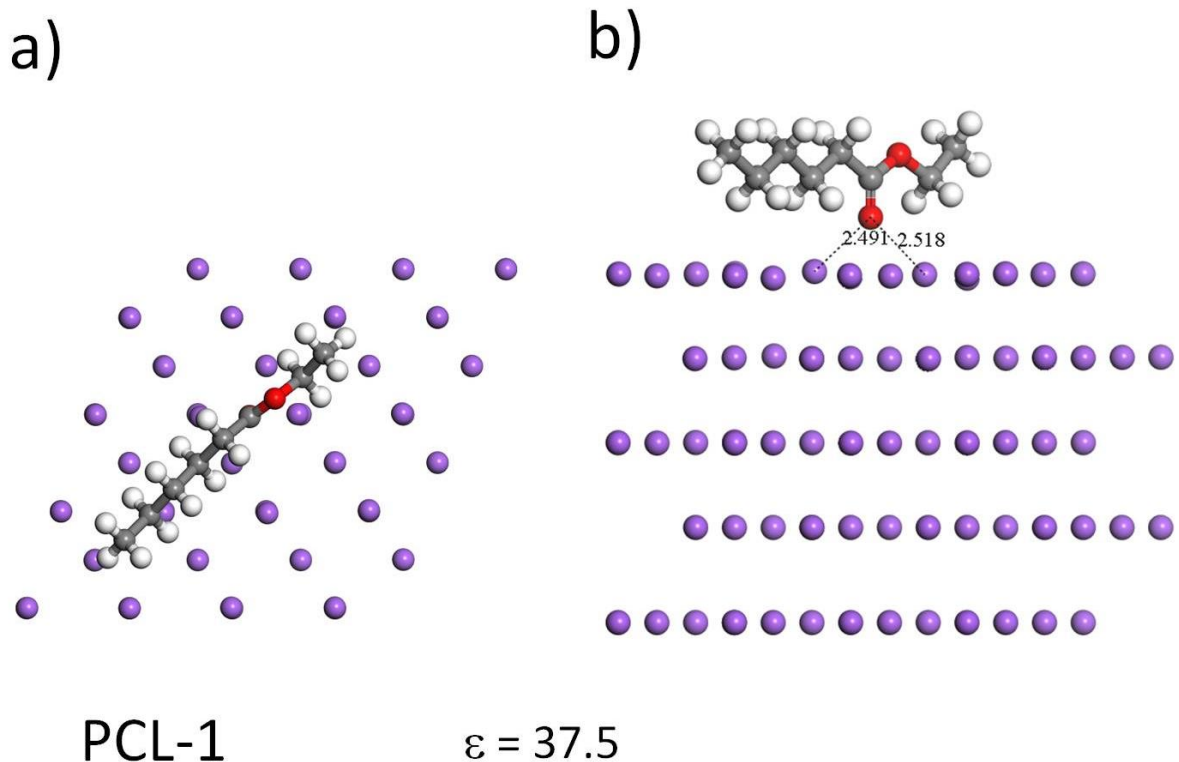
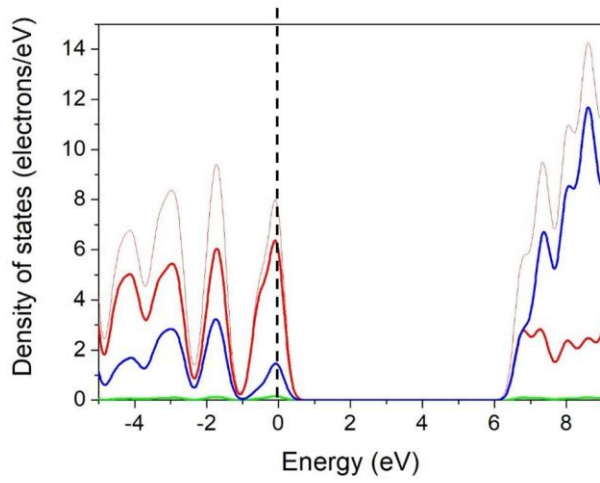


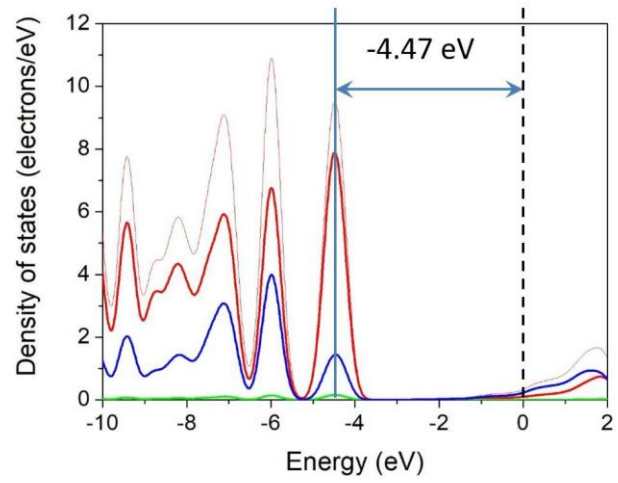
Figura 10. Configurazione di adsorbimento finale della PCL-1 su superficie di Na in presenza di solvente (acetonitrile). La configurazione iniziale e quella finale corrispondono all'Ossigeno in TOP sulla superficie. a) vista dall'alto; b) vista laterale.

La densità degli stati parziale (PDOS) della molecola isolata e adsorbita sulla superficie del Sodio è mostrata in Figura 11 per il PEO-3 ed in Figura 12 per il PCL-1. Essa evidenzia che il livello HOMO è situato 4.47 eV sotto il livello di Fermi dell'anodo per il PEO-3 e 5.11 eV sotto il livello di Fermi dell'anodo per il PCL-1. Questi valori caratterizzano la finestra elettrochimica dell'elettrolita solido. Affinché l'elettrolita risulti stabile, il suo HOMO deve essere più basso in energia del livello di Fermi del catodo, mentre il suo LUMO deve essere più in alto del livello di Fermi dell'anodo. Nel presente lavoro abbiamo considerato solo l'anodo. Come risulta dalle figure 11 e 12, il LUMO dell'elettrolita risulta più in alto in energia del livello di Fermi dell'anodo di Sodio, confermando quindi la stabilità dell'elettrolita solido.

a)

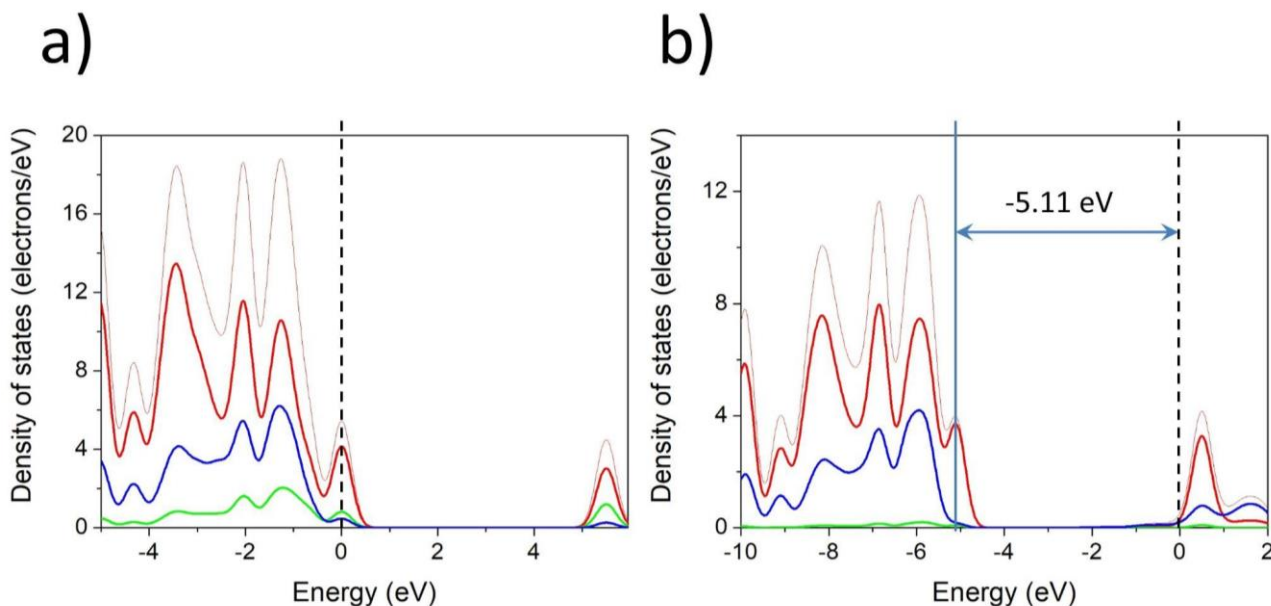


b)



PEO-3

Figura 11. Densità degli stati proiettata di a) PEO-3 isolato; b) PEO-3 adsorbito su anodo di sodio. Solo gli stati di PEO-3 sono mostrati. Le densità degli stati s, p e d sono rappresentate dalle curve doppie blu, rosse e verde, la densità degli stati totale dalla curva sottile rosa chiaro. La linea nera tratteggiata è il livello di Fermi.



PCL-1

Figura 12. Densità degli stati proiettata di a) PCL-1 isolato; b) PCL-1 adsorbito su anodo di sodio. Solo gli stati di PCL-1 sono mostrati. Le densità degli stati s, p e d sono rappresentate dalle curve doppie blu, rosse e verde, la densità degli stati totale dalla curva sottile rosa chiaro. La linea nera tratteggiata è il livello di Fermi.

3 Conclusioni

Abbiamo modellizzato l'adsorbimento di oligomeri (PEO e PCL) ritenuti potenziali elettroliti a stato solido sulla superficie (1 1 0) del Sodio per comprendere il modo in cui questi interagiscono con la superficie metallica. Questo avanzamento nella simulazione dell'adsorbimento è necessario per spiegare la decomposizione dei polimeri all'anodo e la formazione della Solid Electrolyte Interface (SEI). Attraverso calcoli DFT, si è visto che l'ossigeno acilico dell'estere (in PCL) e quello etereo (in PEO) mostrano forte adesione nei confronti della superficie metallica, scegliendo preferenzialmente il sito TOP; il che lascia immaginare come sia fatta strutturalmente la parte più interna della SEI quando si considera questo tipo di elettroliti a stato solido. Le energie di adsorbimento indicano che l'adesione al sodio metallico dei due polimeri è comparabile. Inoltre, lo studio della DOS permette di confermare che questi oligomeri sono elettroliti stabili in quanto i loro LUMO sono energeticamente più in alto del livello di Fermi dell'anodo.

Studi successivi dovrebbero considerare la componente salina dell'elettrolita per una visione più realistica dell'intero sistema elettrolitico ed una correlazione dei risultati computazionali con quelli sperimentali per ipotizzare dei modelli sempre più affidabili.

4 Riferimenti bibliografici

- [1] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 1996, 77, 3865.
- [2] J. P. Perdew, M. Ernzerhof, K. Burke, J. Chem. Phys. 1996, 105, 9982.
- [3] B. Delley, J. Chem. Phys. 1990, 92, 508.
- [4] B. Delley, J. Chem. Phys. 2000, 113, 7756.
- [5] BIOVIA, Dassault Systèmes, Material Studio 2020, San Diego: Dassault Systèmes, 2019.
- [6] Delley, B., Mol. Simul., 32, 117-123 (2006).
- [7] Ebadi M. et al., J.Mater. Chem. A, 2019, 7, 8394.
- [8] Wang A. et al., npj Comput Mater, 2018, 4, 15.
- [9] Peled E., J. Electrochem. Soc., 1979, 126, 2047.
- [10] Delmas C., Adv. Energy Mater., Wiley-VCH Verlag, 2018, 8, 17.

5 Abbreviazioni ed acronimi

SPE: Solid Polymer Electrolytes

SEI: Solid Electrolyte Interface

PEO: Poly (ethylene oxide)

PCL: Poly (3-caprolactone)

DFT: Teoria del Funzionale della Densità

DOS: Densità degli stati

PBE: Funzionale di scambio e correlazione di Perdew-Burke-Ernzerhof

COSMO: CONductor-like Screening MOdel

CV Dott. Domenico Corona

ORCID: 0000-0001-9053-9744

EDUCATION AND RESEARCH EXPERIENCE: Domenico Corona was born in Rome in 1998, and in the same city he graduated from Liceo Classico Statale “Francesco Vivona”. He received his Bachelor’s degree (B.Sc.) in Chemistry from the University of Rome “La Sapienza” in 2020, with a thesis in Physical and Theoretical Chemistry supervised by Prof. Dr. Sergio Brutti. DC is earning his Master’s degree (M.Sc.) in Materials Science from the University of Rome “Tor Vergata”, where he is now working on his Master’s thesis in Theoretical Solid State Physics, supervised by Prof. Dr. Olivia Pulci. Concurrently he is obtaining a Master’s double degree (M.Eng.) in Photonics at the TH-Wildau (Germany), where he is specializing in Solid State Optics, Lasers and Optical Metrology. He is the winner of 4 merit-based scholarships as Teaching and Laboratory Assistant; and of an Erasmus+ Scholarship.

KEYWORDS: Chemical Physics; Advanced Energy Materials; Physical Chemistry.

CV Prof. Dr. Olivia Pulci

ORCID: 0000-0002-9725-487X

CURRENT PROFESSIONAL POSITION: Full Professor in Condensed Matter Physics at the Faculty of Science of the University of Rome Tor Vergata

RESEARCH EXPERIENCE: Olivia Pulci is a computational theoretical physicist. She received a Laurea Cum Laude at the University La Sapienza (Rome) in 1992, and the PhD degree at the University of Rome Tor Vergata in 1996. She is presently full professor in Condensed Matter Physics at the Department of Physics at the Faculty of Science at the University of Rome Tor Vergata. In the years 1997-2000 she worked at the Friedrich Schiller Universitaet (Jena, Germany), at the Ecole Polytechnique (Palaiseau, France) and at the Fritz Haber Institute of the Max Plank Gesellschaft (Berlin).

Since 2003 OP has taught "Theory of Solid State Physics" for the Laurea Specialistica in Material Science. Since 2012 she has taught "Quantum Theory of Solids" for the Laurea Specialistica in Physics.

EXPERTISE:

-*Surfaces:* Ground state properties: equilibrium geometry, determination of relaxation and reconstruction, study of the relative stability of surfaces under different growth conditions. Electronic band structure and optical properties of surfaces. Effect of steps.

-*Graphene and other novel 2-D systems:* study of graphene, silicene, germanene, group III-Nitrides. Topological insulators, Dirac and Weyl materials

-*Nanocrystals, nanodots:* Absorption and emission spectra of silicon nanocrystals, free standing and embedded.

-*Towards systems of biological interest:* study of water, and formamide in water; optical spectra within QM/MM+MBPT of indole in water solution; study of the photoisomerization of rhodopsin

-*Cultural heritage:* understanding the yellowing of ancient paper through the study of possible oxidation processes in cellulose.

KEYWORDS: Ab-initio, computational physics, Density Functional Theory (DFT), Time-Dependent DFT, Many-Body Perturbation Theory, ground state properties, electronic band structure calculations, optical absorption spectra, Reflectance Anisotropy, Surface Differential Reflectivity, GW approximation, excitonic effects.

PUBLICATIONS: she is coauthor of more than 140 publications.

INVITED TALKS: she was invited to give a seminar to more than 50 international conferences.

SCIENTIFIC COORDINATION: local PI for the EU HORIZON2020 project DiSeTCom (2018-2022 MSCA RISE GA823728); coordinator for the EU HORIZON2020 project CoExAN (2015-2019 MSCA RISE GA644076)