



**UPO** UNIVERSITÀ DEL PIEMONTE ORIENTALE  
DIPARTIMENTO DI SCIENZE E INNOVAZIONE TECNOLOGICA

## EVENTI DiSIT

Seminario | Seminar

15-11-2023

11:00-12:45

Aula 104

# Le proprietà dell'AlOOH sotto pressione: le capacità predittive della DFT al livello GGA messe alla prova

[Prof. Pietro Cortona](#)

---

CentraleSupélec Paris





L'AIOOH esiste in almeno tre polimorfi la cui realizzazione dipende dalle condizioni termodinamiche e dalle modalità secondo le quali queste sono state applicate. Le tre fasi (diaspora, boehmite e fase delta) sono caratterizzate da legami idrogeno che possono avere un ruolo più o meno determinante a seconda della struttura. Proprio l'esistenza di questi legami fa di questi sistemi un test assai duro da superare per approssimazioni (come le usuali GGA) che incontrano notoriamente gravi difficoltà nella descrizione di legami deboli.

Inoltre, per certe proprietà dell'AIOOH, la situazione sperimentale è particolarmente confusa. Nel caso del bulk modulus, ad esempio, si trovano in letteratura valori estremamente diversi fra loro. Similmente la pressione alla quale si realizza la simmetrizzazione del legame idrogeno nella fase delta è stata oggetto di ampio dibattito, senza tuttavia che questo abbia portato ad una conclusione convincente. In questo seminario verranno discusse le performances di alcuni funzionali della classe GGA nella descrizione delle proprietà dell'AIOOH e verrà mostrato come l'attenta analisi dei risultati teorici permetta di chiarire l'origine delle difficoltà incontrate nei lavori sperimentali e sia d'aiuto nel trarre da questi ultimi conclusioni definitive.

EVENTO APERTO A:

Docenti | Teachers, Borsisti | Research Fellows, Assegnisti | Postdoctoral researcher, Dottorandi | PhD students, Studenti | Students

SEMINARIO IN LINGUA: ITALIANO | ITALIAN

