

Esempio 2

a) Ambito scientifico/tecnologico

Computational material design & Tribologia

b) Elenco delle competenze e Strumentazione

Sviluppo e applicazione di software per:

- simulazioni multiscala del comportamento di materiali. Esperimenti *in silico* e comprensione dei meccanismi chimico/fisici che regolano il funzionamento di materiali in diverse applicazioni tecnologiche, tra cui catalisi, nanotecnologie e tribologia (adesione, attrito).
- screening high-throughput e creazione di database per proprietà elettroniche, strutturali e meccaniche dei materiali solidi, in particolare superfici ed interfacce.

c) Elenco di possibili stakeholders

Industrie interessate a migliorare le performances dei materiali mediante la comprensione dei meccanismi microscopici che ne regolano il comportamento. Collaborazioni in corso nei settori dell'elettronica, automotive, petrolchimico/energia.

d) Responsabile scientifico ed eventuale sito web

M. Clelia Righi www.tribchem.it

e) Highlight

L'intervallo di tempo che mediamente intercorre dall'individuazione di un materiale per una determinata applicazione al suo utilizzo su larga scala è circa di 20 anni. La strategia indicata da agenzie governative per ridurre i tempi e costi di questo processo consiste nell'affiancare gli esperimenti in laboratorio con esperimenti computazionali. Oggi più che mai questo risulta possibile grazie alla potenza raggiunta dai supercomputers, allo sviluppo di algoritmi in grado di simulare in modo realistico il comportamento dei materiali e catalogarne le proprietà in database accessibili a livello globale.

Il gruppo Materials Modeling & Tribology del DIFA sviluppa ed applica strumenti computazionali per lo studio dei materiali e collabora con diverse industrie multinazionali per sviluppare materiali più performanti e rispettosi dell'ambiente. Il gruppo è particolarmente attivo nell'ambito della Tribologia, la scienza a cavallo tra fisica, chimica ed ingegneria, che studia i fenomeni di attrito, adesione ed usura. Esempi di studi effettuati riguardano simulazioni di dinamica molecolare *ab initio*, basate sulle leggi della meccanica quantistica, utilizzate per disegnare nuovi additivi lubrificanti in collaborazione con TOTAL e ricoprimenti superficiali in collaborazione con TOYOTA CENTRALS R&D LABS per ridurre la perdita di energia per attrito e le emissioni di CO₂.

