

I risultati della ricerca sono stati pubblicati sulla rivista scientifica "Nature"

Cnr partecipa a studio su metodo Deed "Utile per scoprire dei nuovi materiali"

ROMA - Un gruppo di ricerca internazionale guidato dalla statunitense Duke University, cui hanno partecipato per l'Italia studiosi dell'Istituto nanoscienze del Consiglio nazionale delle ricerche di Modena (Cnr-Nano) e di altre università americane, ha sviluppato un metodo computazionale per individuare rapidamente una nuova classe di materiali con eccezionali tolleranze termiche e meccaniche.

Tali materiali - informa il Cnr -, noti come ceramiche ad alta entropia, potrebbero costituire la base di batterie, catalizzatori e dispositivi elettronici resistenti a temperature di migliaia di gradi o a radiazioni intense. I risultati della ricerca sono pubblicati sulla rivista "Nature".

Estremamente stabili e performanti in ambienti estremi, le ceramiche ad alta entropia hanno enormi potenzialità applicative, ma la loro scoperta è limitata da processi sperimentali lunghi e costosi. Ora centinaia di questi materiali possono essere progettati e realizzati grazie a un metodo computazionale chiamato Deed (Disordered enthalpy-entropy descriptor) capace di identificare ceramiche ad alta entropia e di prevedere se possono essere sintetizzate sperimentalmente.

Nella sua prima dimostrazione, il programma ha previsto la "sintetizzabilità" di 900 nuove formulazioni di materiali ad alte prestazioni, ceramiche realizzate utilizzando metalli di transizione, carbonitruri o diborati, 17 delle quali sono state poi prodotte e testate in laboratorio. L'algoritmo è stato ideato da un team guidato da Stefano Curtarolo della Duke University, in collaborazione con Arrigo Calzolari del Cnr-Nano e colleghi di Penn State University, Missouri University of science and technology, North Carolina State University, e state University of New York.

"Le ceramiche ad alta entropia sono leghe composte da una miscela disordinata di molti elementi chimici, con centinaia di migliaia di possibili combinazioni che influenzano la sintesi e le proprietà del materiale. Esplorare sperimentalmente tutte queste potenziali ricette diventa praticamente impossibile", spiega Arrigo Calzolari di Cnr-Nano.

"Il nostro approccio computazionale, che coniuga termodinamica, meccanica statistica e simulazioni quantistiche, accelera notevolmente la scoperta di ceramiche sintetizza-

bili da utilizzare in ambienti estremi, in cui servono eccezionali proprietà strutturali, termiche, chimiche e ottiche a temperature elevatissime. Simili materiali sono di grande interesse poiché aprono la strada allo sviluppo di dispositivi elettronici e ottici avanzati per applicazioni nelle telecomunicazioni satellitari, nell'aeronautica ad alte prestazioni e nella gestione dell'energia, inclusa l'applicazione nei reattori nucleari".

Oltre a prevedere nuove ricette per ceramiche disordinate stabili, la tecnica Deed consente di eseguire ulteriori analisi per scoprirne le proprietà intrinseche. Perfezionando i calcoli e testando il materiali fisicamente in laboratorio si potranno, così, trovare le ceramiche ottimali per una molteplicità di applicazioni ad alta prestazione, anche in condizioni di utilizzo estreme.