

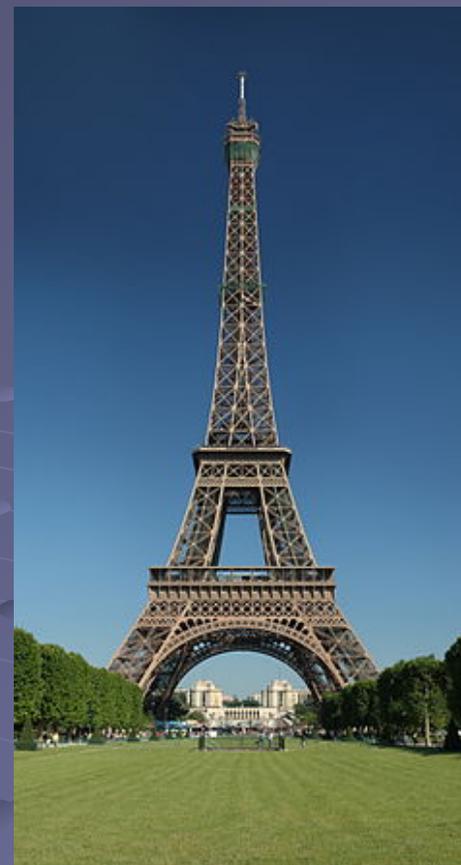
# Fisica dei materiali: simulazioni al computer di materiali per l'energia solare e per le batterie

Nicola Seriani



The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics,  
Strada Costiera 11, 34151 Trieste, Italy

# Ricerca sui materiali



# Ricerca sui materiali: nanotecnologia



DynaTAC 8000X (1973-1983)

# Evoluzione dei materiali

1973

2013



Circuiti elettronici, schermo, batterie

# Energia

La maggior parte della nostra energia viene da combustibili fossili,  
esauribili

Inoltre responsabili per i cambiamenti climatici



# Energia

Servola - Elettra GLT (gas) – 170 MW

Monfalcone (carbone e gasolio) – 900 MW

Krško (nucleare) – 700 MW



# Energia: un problema globale

"Houston, abbiamo un problema"

# Energia: un problema globale

"Houston, abbiamo un problema"

Houston: "Anche noi!"

# Energie rinnovabili: solare

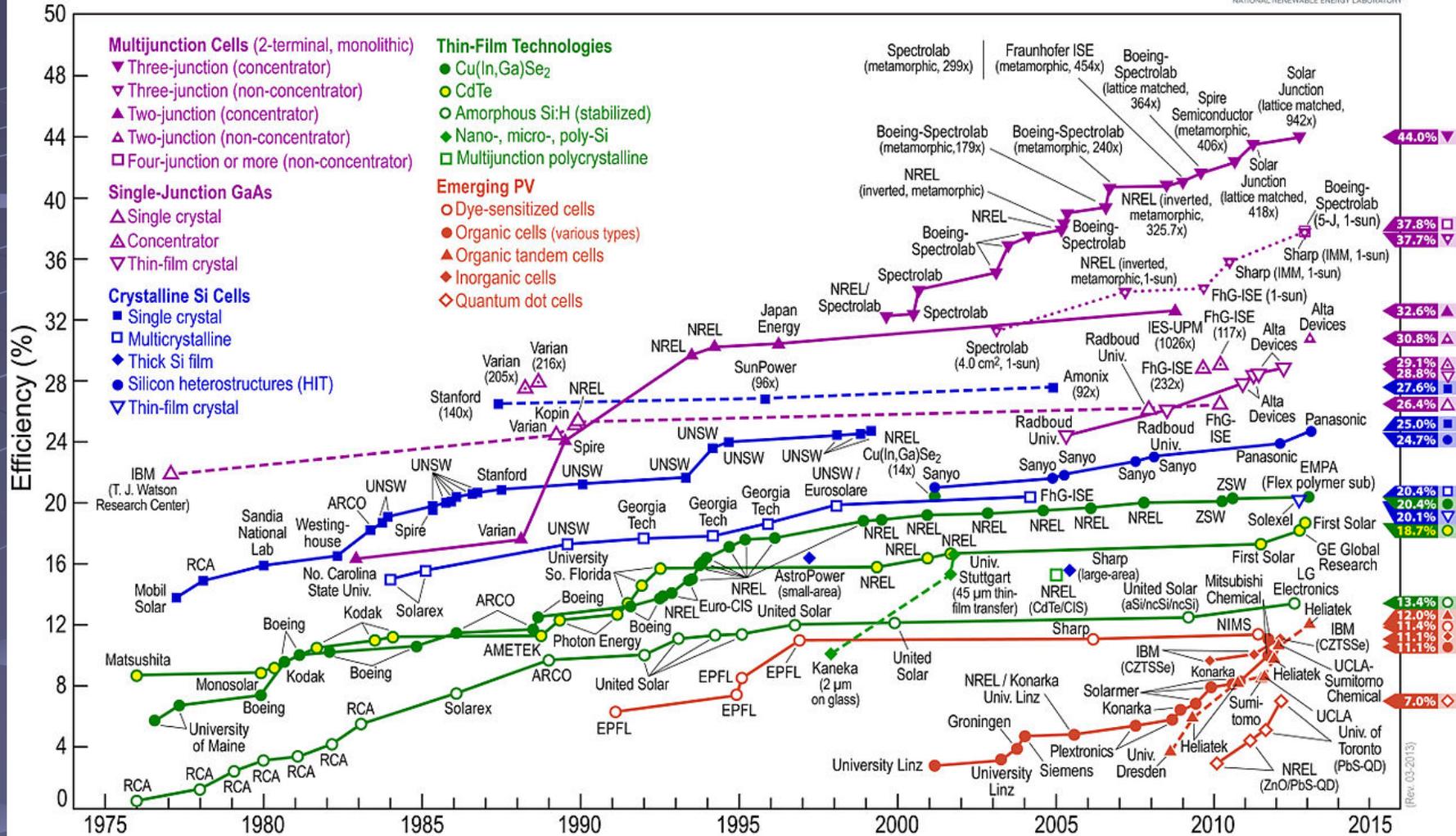
Grande quantità di energia proviene dal Sole

Come raccoglierla e stoccarla?



# Energia solare: fotovoltaico

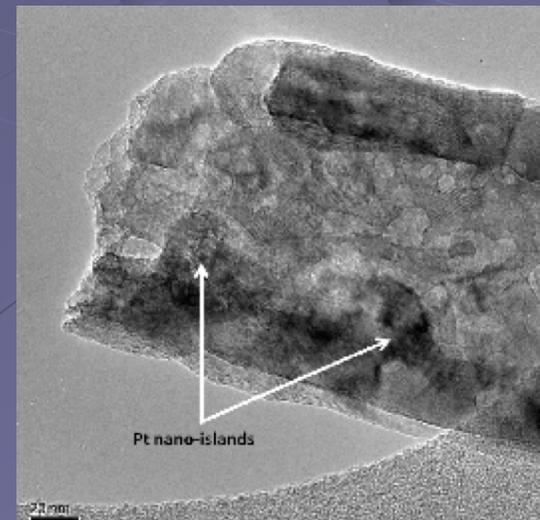
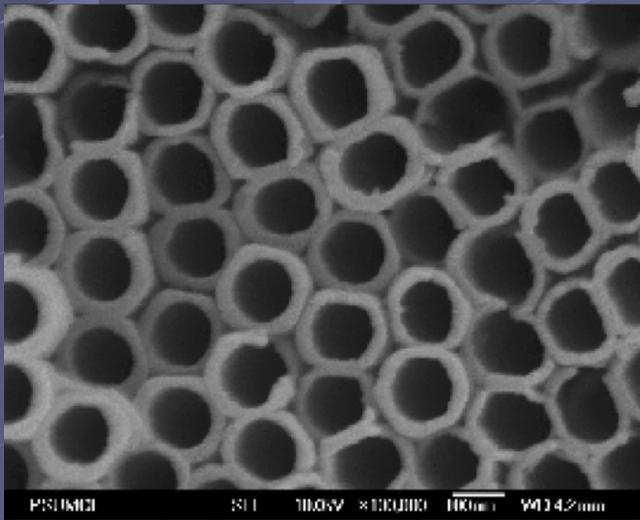
## Best Research-Cell Efficiencies



# Energia solare: fotovoltaico

Tecnologia basata sul controllo dei materiali quasi a livello atomico (nanotecnologia: 1 nanometro =  $10^{-9}$  metri)

Spesso difficile capire cosa succede a quelle scale (ci sono microscopi, ma non risolvono tutti i problemi)

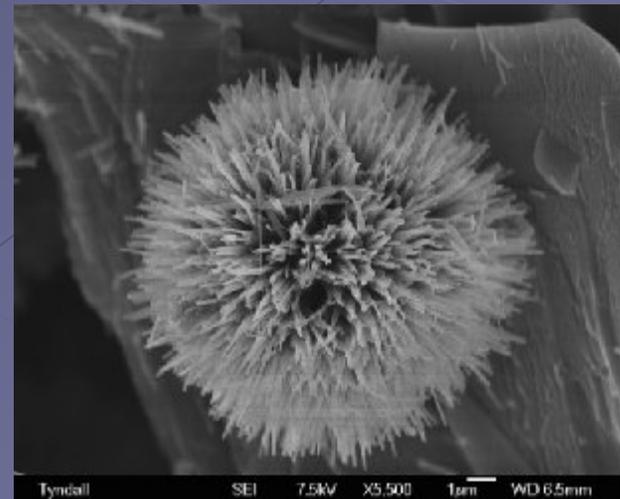


# Energia solare: fotovoltaico

Questo accresce l'importanza dello studio teorico: capire, spiegare, predire e controllare

Cerchiamo di capire, spiegare e predire le proprietà dei materiali partendo solo dalle leggi fondamentali della fisica

Lo scopo è essere capaci di disegnare (progettare) materiali con determinate caratteristiche



# Energia solare: fotovoltaico

*Ambiente*  
(pressione, temperatura, pH,...)



*Proprietà*  
(struttura atomica, stabilità,  
proprietà elettroniche,...)



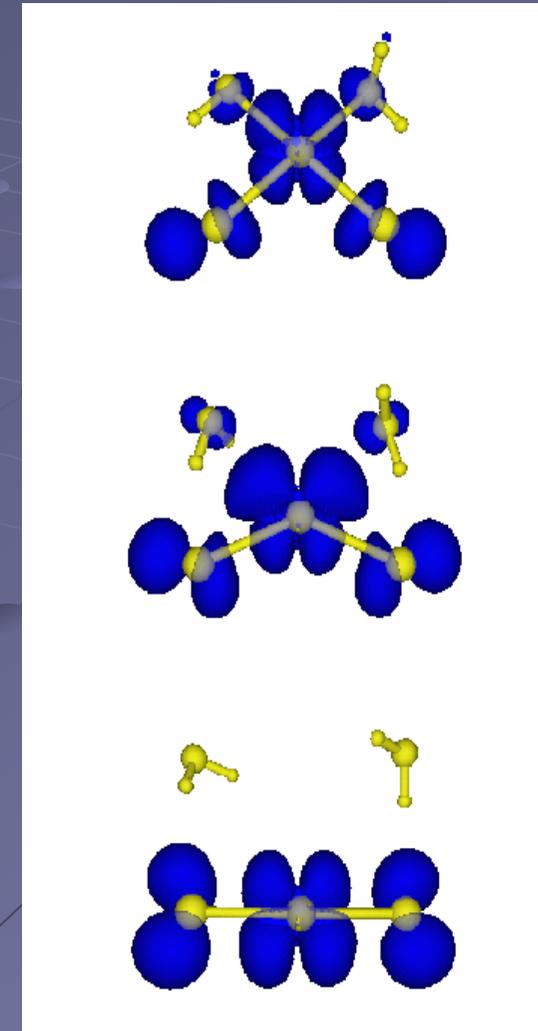
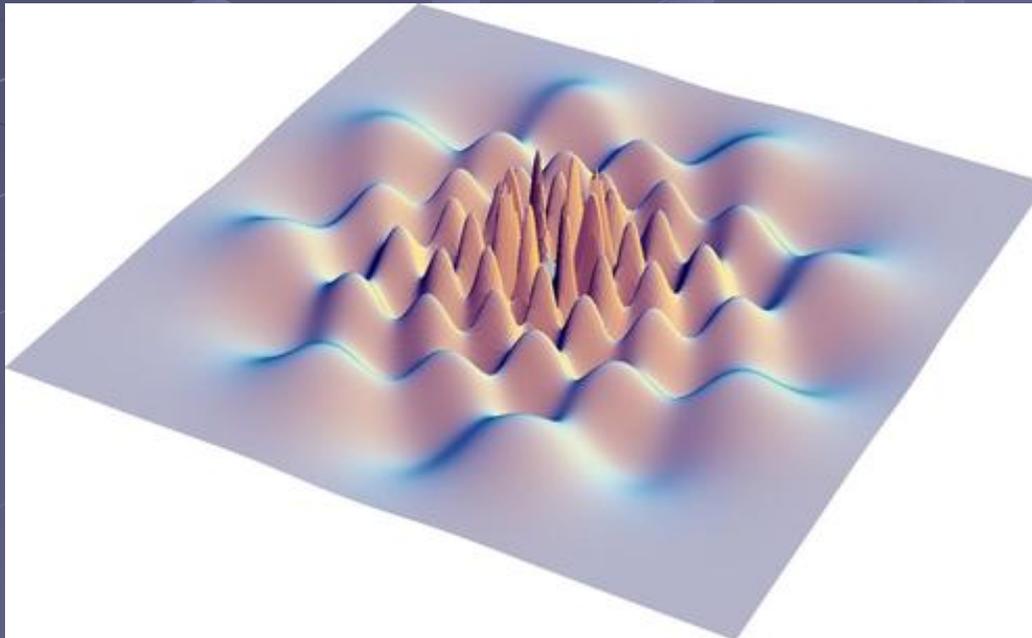
*Funzione*  
(attività fotocatalitica, capacità  
di stoccaggio del litio,...)



*Materials  
design*

## Simulazioni da principi primi

- *Simuliamo nuclei atomici ed elettroni*
- *I nuclei atomici sono particelle classiche*
- *Elettroni sono particelle quantistiche*

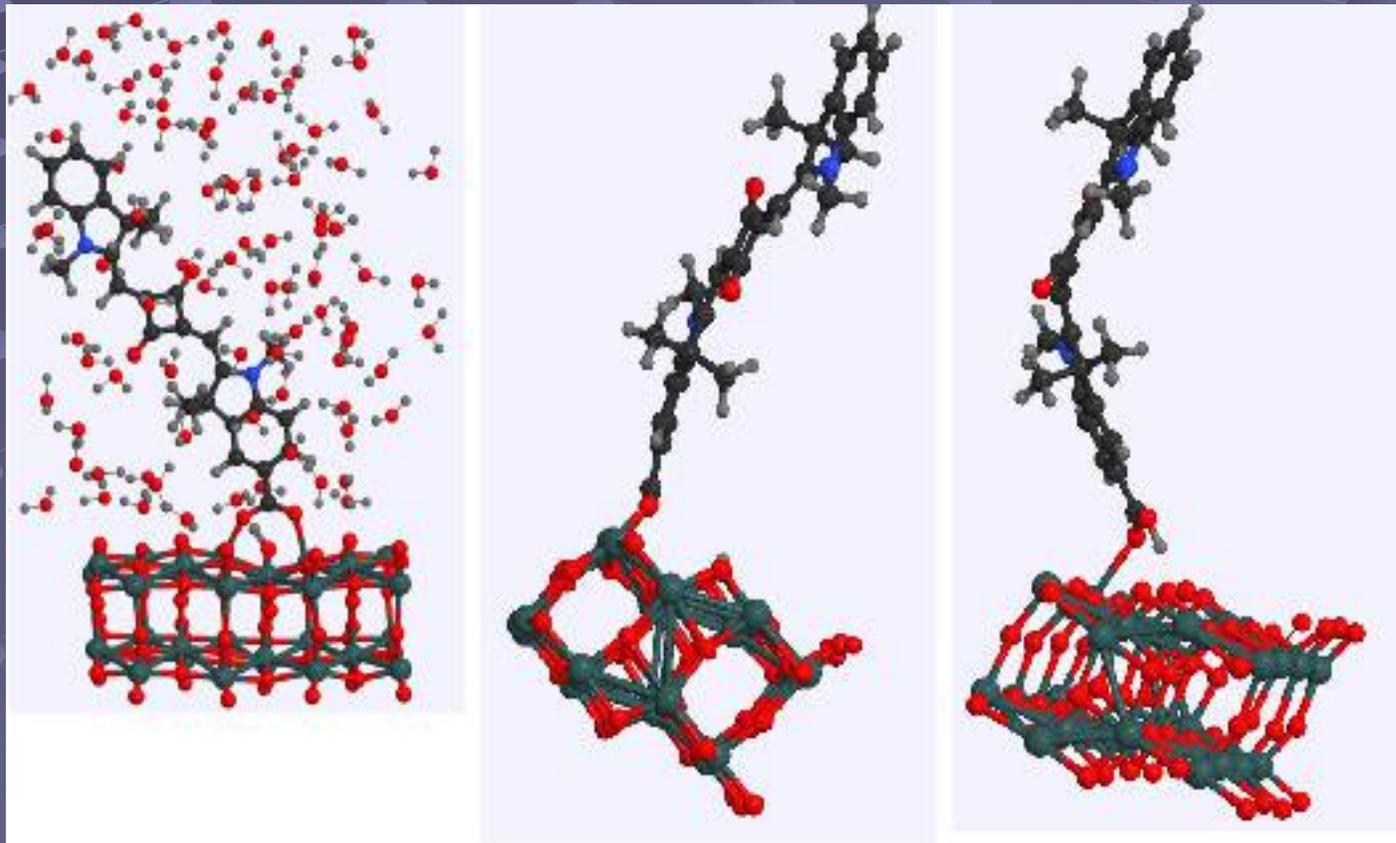


# Simulazioni da principi primi: calcolo parallelo ad alta prestazione



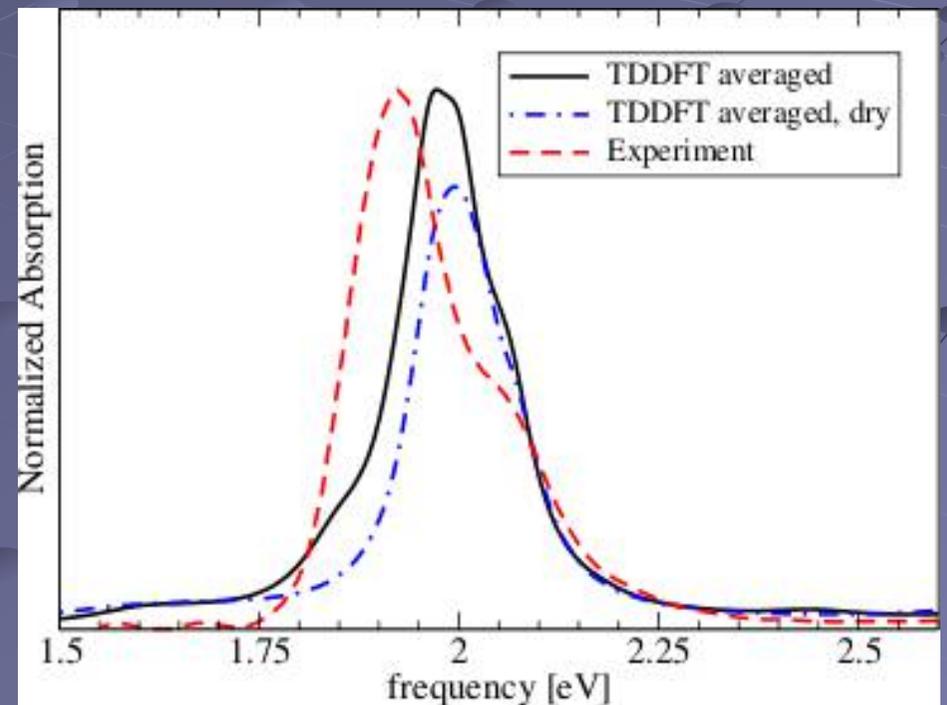
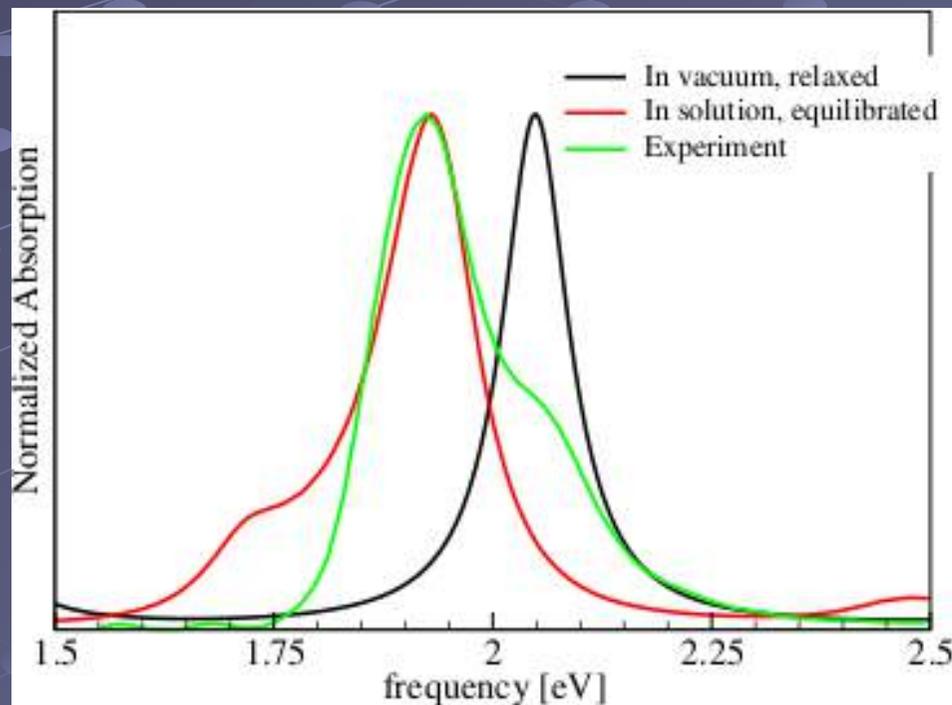
## Simulazioni da principi primi

- *Simulazione del materiale attivo di una cella solare di Grätzel con squaraina (colorante)*

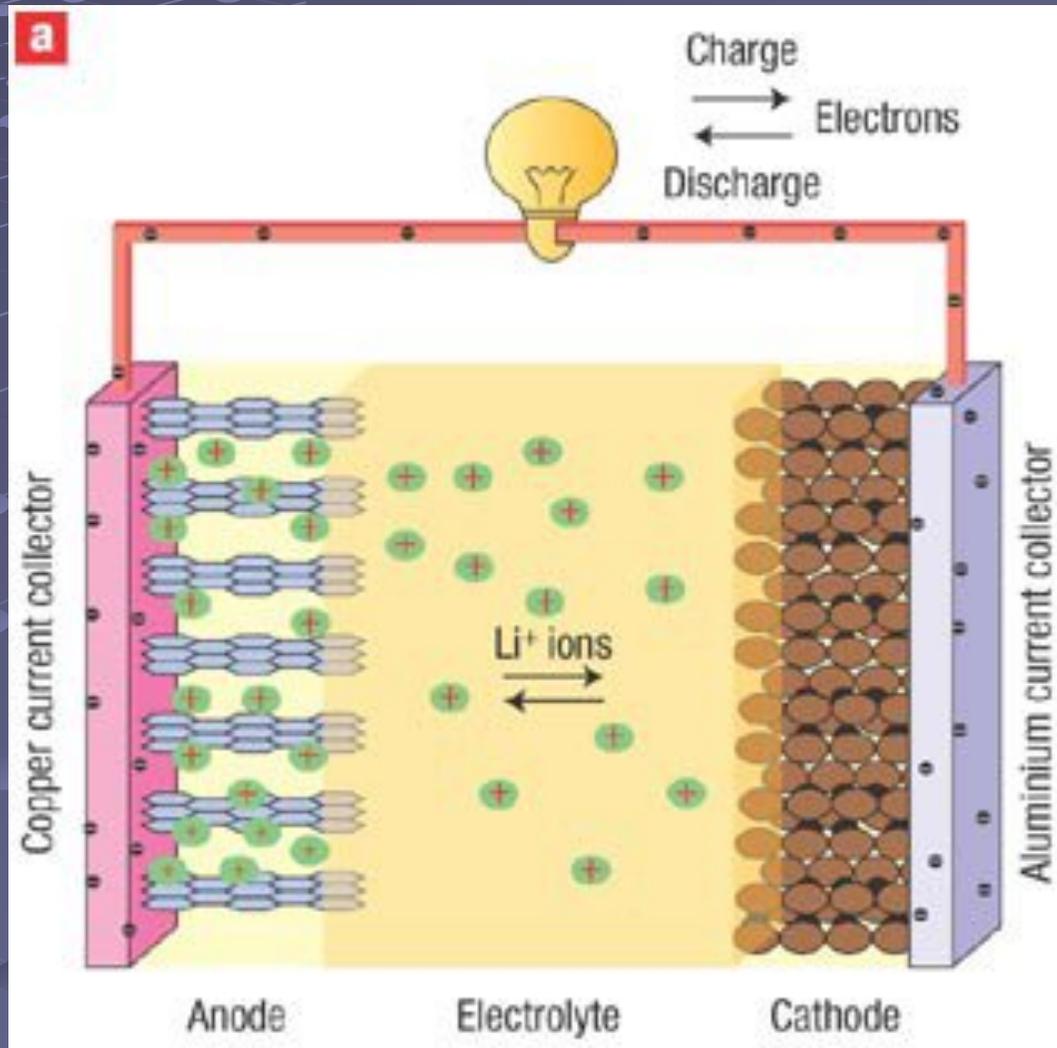


## Simulazioni da principi primi

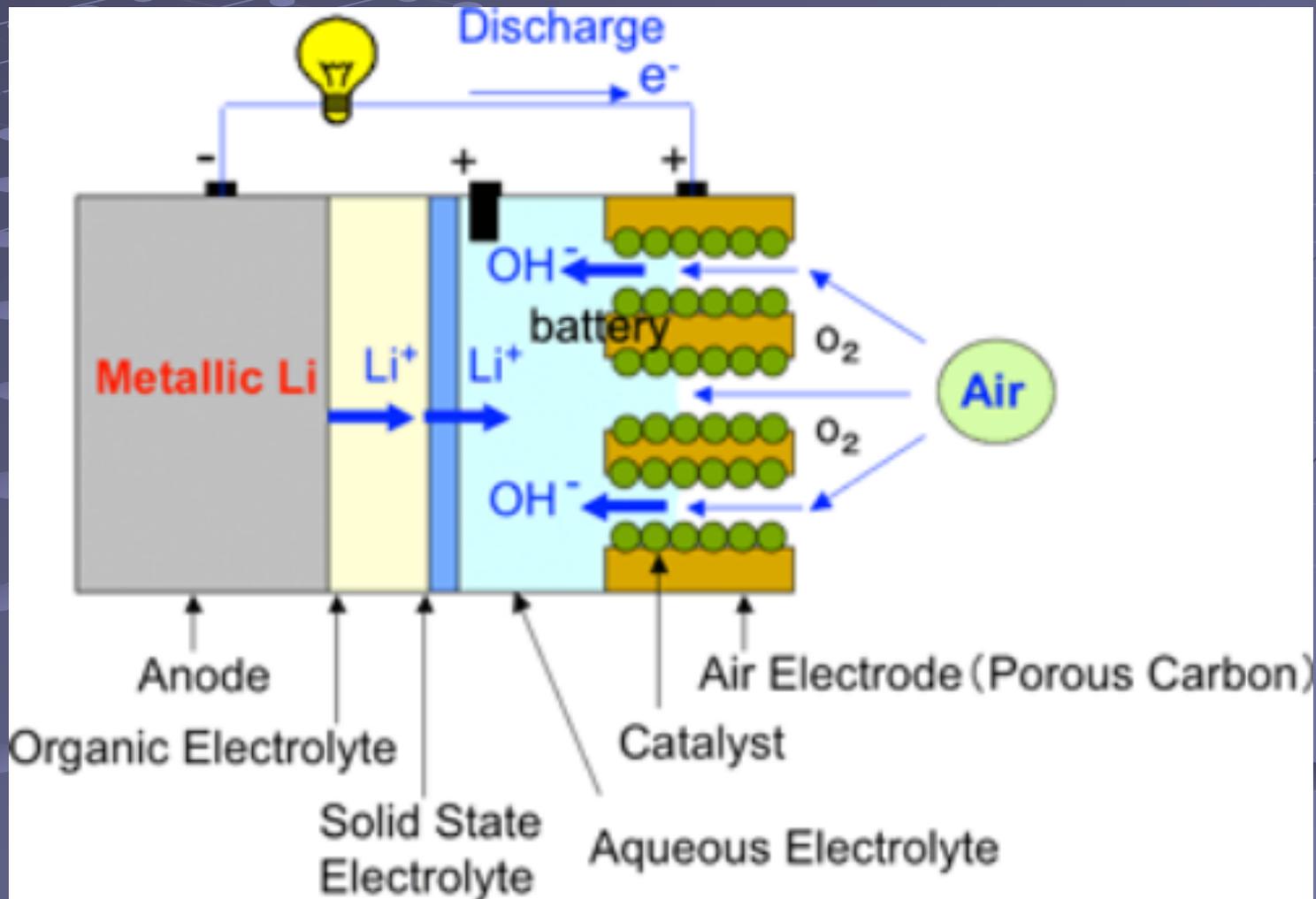
- *Simulazione del materiale attivo di una cella solare di Grätzel con squaraina (colorante)*



# Stoccaggio dell'energia

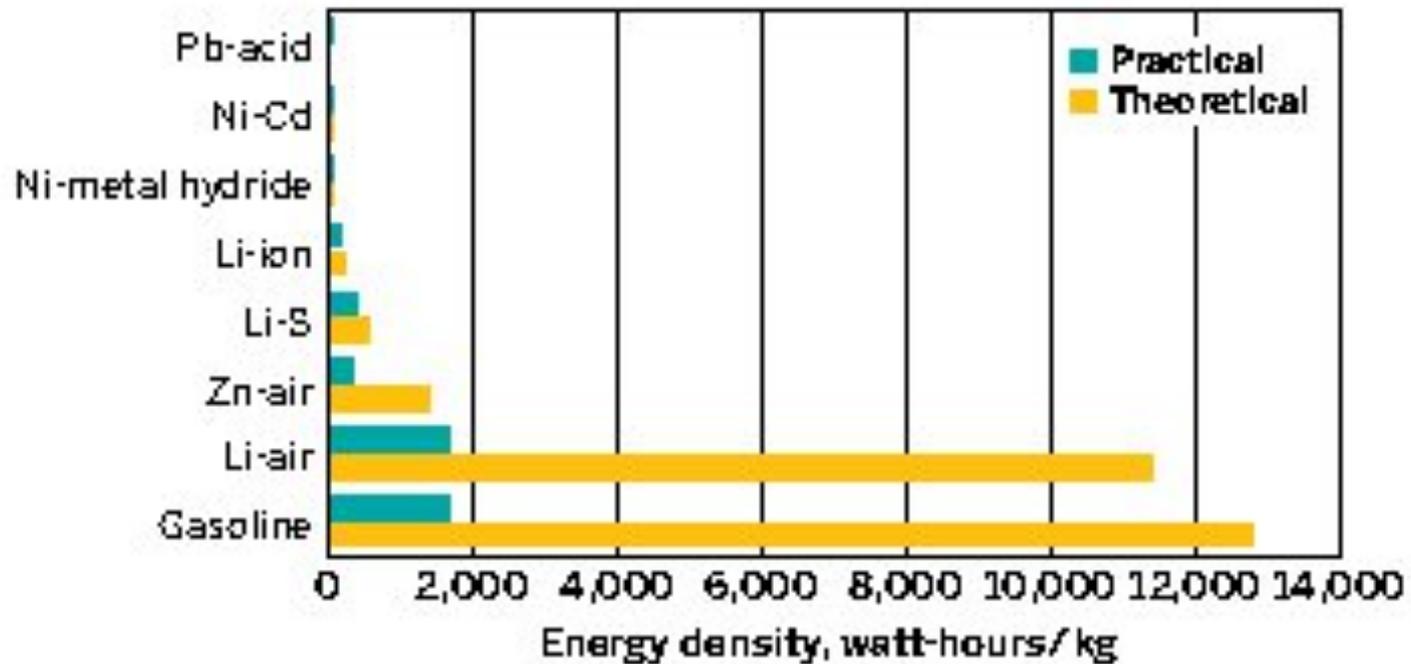


# Stoccaggio dell'energia



# Stoccaggio dell'energia

**ENERGY-PACKED** On a per-weight basis, lithium-air batteries' energy density soars over that of other battery types and even rivals that of gasoline.



SOURCE: *Journal of Physical Chemistry Letters*

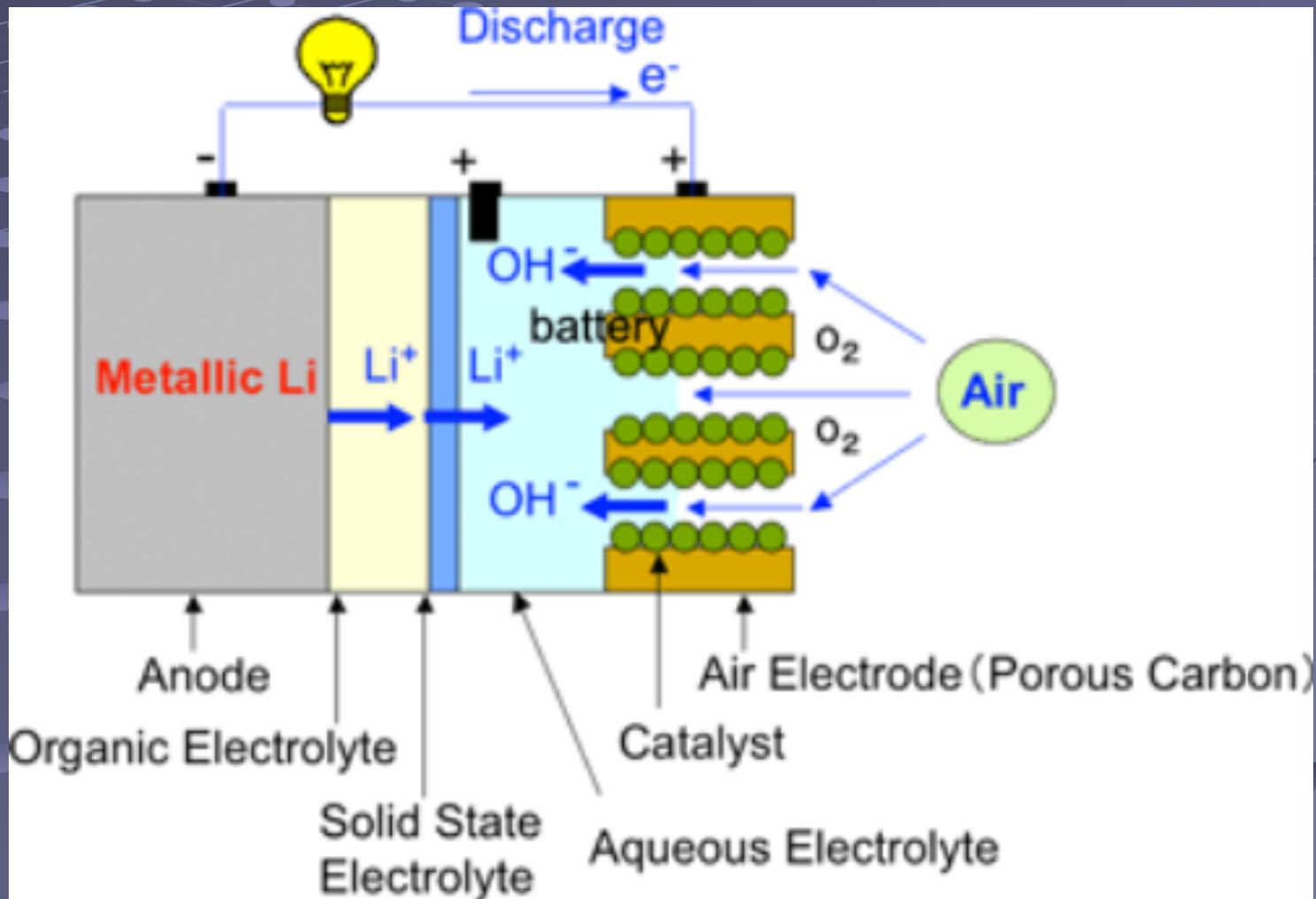
*Grazie per l'attenzione!*

## Domanda finale

Come cambierebbe la nostra vita se in futuro avessimo una minore disponibilita' di energia?

Telefono, riscaldamento, frigo, auto, banane e caffe',...

# Stoccaggio dell'energia



# Domanda finale

Come cambierebbe la vostra vita se in futuro avessimo una minore disponibilita` di energia?

Telefono, riscaldamento, frigo, auto, banane e caffe`,...

Cosa possiamo fare per avere abbastanza energia in futuro?

Cosa possiamo fare per consumare meno energia facendo le stesse Cose che facciamo oggi?

# Ricerca sui materiali

- Boeing 787 Dreamliner (2011): oltre 50% in fibra di carbonio (20% di peso in meno rispetto agli aerei precedenti in alluminio)
- Un quarto dell'aereo viene prodotto in Italia:
- Alenia Aermacchi a Foggia, Grottaglie (Taranto) e Pomigliano d'Arco



# Ricerca sui materiali

- Oggi ancora un fattore economico e di progresso: leghe metalliche, cristalli liquidi, superconduttori, materiali biocompatibili...
- Fibra di carbonio, inventata nel 1958
- Boeing 787 Dreamliner: oltre 50% in fibra di carbonio (20% di peso in meno rispetto agli aerei precedenti in alluminio)
- Primo volo commerciale nel 2011
- Un quarto dell'aereo viene prodotto in Italia:
- Alenia Aermacchi a Foggia, Grottaglie (Taranto) e Pomigliano d'Arco

# Ricerca sui materiali

- Storicamente, l'importanza dei materiali per lo sviluppo dell'umanità è riconosciuto dai nomi dati alle varie epoche: età del rame, età del bronzo, età del ferro,...
- I materiali più usati oggi sono di invenzione relativamente recente: acciaio, cemento,...
- Oggi ancora un fattore economico e di progresso: leghe metalliche, cristalli liquidi, superconduttori, materiali biocompatibili...

## Simulazioni da principi primi

- *Simuliamo nuclei atomici ed elettroni*
- *I nuclei atomici sono particelle classiche (dinamica di Newton)*
- *Elettroni sono particelle quantistiche (equazione di Schrödinger)*
- *La dinamica degli elettroni è descritta da funzioni d'onda -> probabilità*

