

# IL QUANTUM CHEMISTRY LAB & LA CHIMICA COMPUTAZIONALE

---

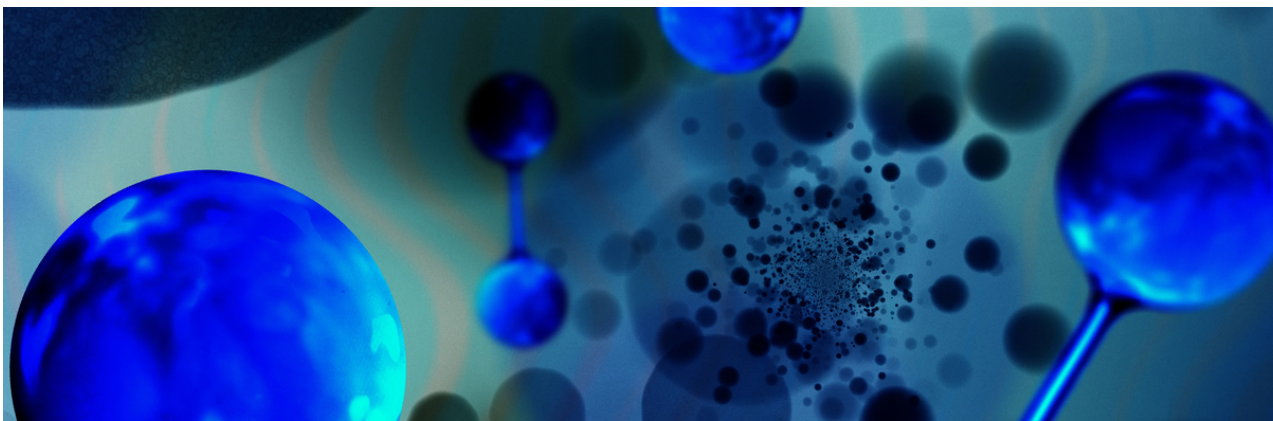
Dipartimento di Scienza dei Materiali  
Università di Milano - Bicocca

Il **Quantum Chemistry Lab** è una piattaforma che ospita le attività progettuali e di ricerca di quattro docenti e di un buon numero di collaboratori, dottorandi e studenti in tesi. Nato e cresciuto all'interno del **Dipartimento di Scienza dei Materiali**, il laboratorio porta avanti attività di simulazione da principi primi rivolte in particolare allo studio delle superfici di ossidi, interfacce estese, catalizzatori eterogenei e materiali per batterie. In particolare, le attività del laboratorio si intrecciano con la linea di ricerca di interesse dipartimentale per lo sviluppo di nuovi materiali per energia e ambiente.

Di seguito i principali temi di ricerca del Quantum Chemistry Lab.

## *STRUTTURA ELETTRONICA DI OSSIDI DIFETTIVI*

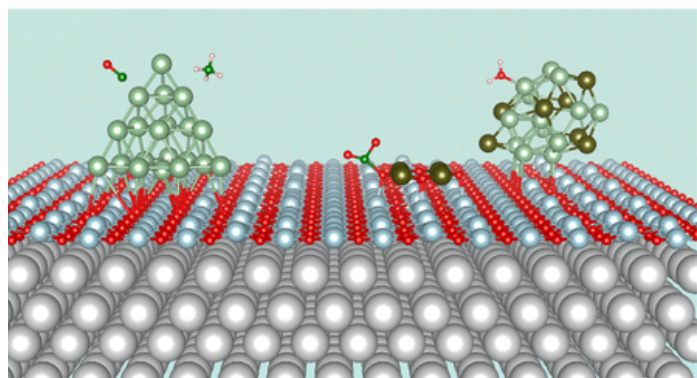
Gli ossidi metallici sono un'ampia classe di composti chimici, con proprietà fisiche e chimiche estremamente variegata. Il legame che l'ossigeno stabilisce coi metalli può essere ionico o avere carattere parzialmente covalente, il composto risultante può avere proprietà di isolante o conduttore. Alcuni ossidi mostrano anche interessanti proprietà ottiche e magnetiche. Una possibilità intrigante è quella di modulare le proprietà chimiche e fisiche degli ossidi stessi introducendo in maniera controllata piccole quantità di impurezze, che vanno a sostituire gli atomi dell'ossido nativo nei siti reticolari, o si stabilizzano negli interstizi. Il calcolo può indicare tendenze interessanti in funzione del tipo di impurezza e della concentrazione in una data matrice ossidica, contribuendo a **progettare materiali con nuove funzioni e proprietà.**



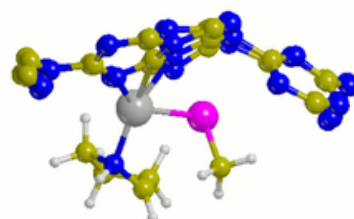
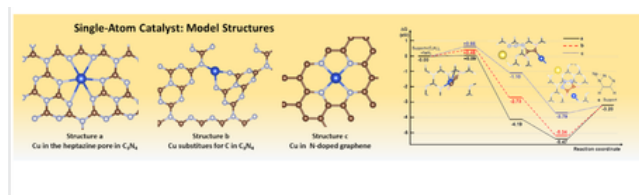
# PICCOLI AGGREGATI METALLICI E SINGOLI ATOMI ATTIVI IN CATALISI ETEROGENEA

In chimica, ogni reazione implica un iniziale dispendio di energia, impiegata per la rottura dei legami chimici tra gli atomi che formano i reagenti. Tale costo, detto **energia di attivazione**, determina, da un lato, la quantità di energia che deve affluire in un reattore affinché la trasformazione abbia inizio, e dall'altro, la velocità con cui si formeranno i prodotti. I catalizzatori sono sostanze che non partecipano direttamente alla reazione, ma aiutano a rompere i legami chimici nei reagenti, abbassando l'energia di attivazione. Una metafora, spesso usata per spiegare il ruolo di un catalizzatore, è quella di un sentiero che ci porti da un versante a un altro di una montagna, individuando il punto di valico più basso, anziché costringerci a salire fino in cima. **La sostenibilità di un processo chimico**, sia dal punto di vista energetico che economico, dipende direttamente dalla possibilità di abbattere l'energia di attivazione. La ricerca di nuovi catalizzatori è molto intensa, in un contesto segnato da grandi sfide per la chimica: rimpiazzare i combustibili fossili quali fonti di energia e di elementi cruciali come carbonio e idrogeno, recuperare efficacemente materie prime da rifiuti e reflui, o catturare e trasformare molecole climalteranti quali il metano e l'anidride carbonica.

Il tipo di catalizzatore eterogeneo più comune è costituito da una particella metallica di alcuni nanometri di diametro, ancorata alla superficie di un ossido o di un materiale carbonioso.



Si è però scoperto che particelle più piccole sono spesso cataliticamente più attive. Inoltre, gli atomi realmente efficaci nell'indebolire i legami chimici delle molecole reagenti sono solo quelli situati nelle zone di bordo della particella, specie se a contatto col supporto. Queste considerazioni, unite al costo e alla criticità di reperimento di molti metalli, hanno portato all'idea di spingersi al limite ultimo della riduzione dimensionale della particella cataliticamente attiva: ancorare un singolo atomo metallico a un supporto solido. Abbiamo studiato singoli atomi come co-catalizzatori applicati a reazioni-modello quali la produzione di idrogeno dalla scissione dell'acqua per via elettrochimica, ma anche caratterizzato il loro ruolo in processi chimici più complessi, come la produzione di molecole organiche utili in chimica farmaceutica tramite reazioni a flusso continuo. Gli atomi singoli sono anche ottimi fotocatalizzatori, cioè sono in grado di **assorbire energia dalla luce, impiegandola come propulsore di processi chimici**.



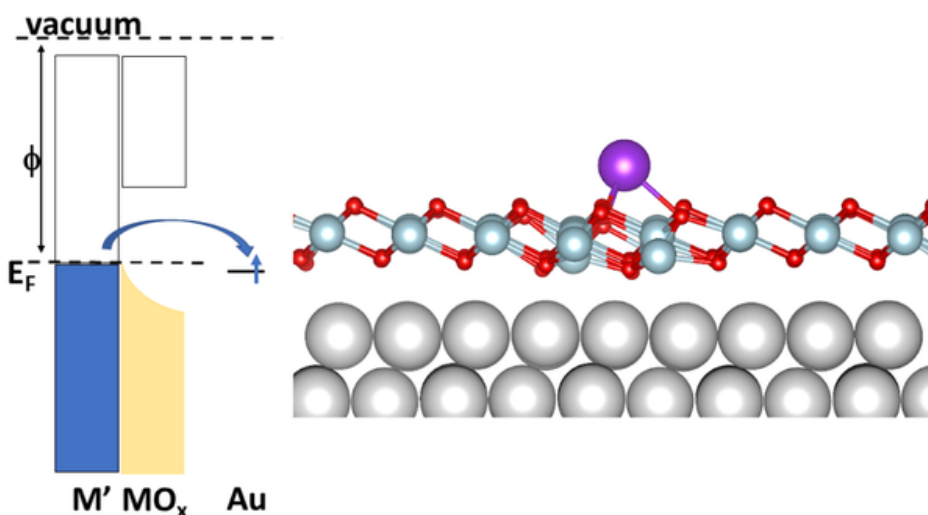
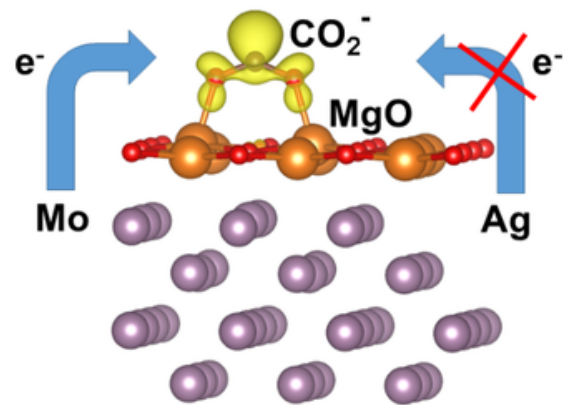
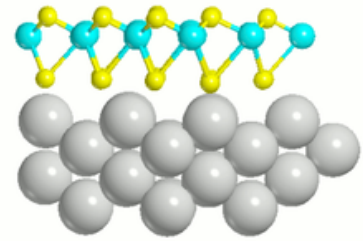
## FILM BIDIMENSIONALI SUPPORTATI SU METALLI

Le tecnologie odierne permettono di ricoprire un materiale con strati di spessore controllato, fino al limite dello strato monoatomico. Questi film coprenti di spessore estremamente limitato (entro il nanometro) hanno proprietà uniche, che sovente li differenziano da analoghe strutture chimiche di spessore macroscopico.

In particolare, ci occupiamo di film ultrasottili di ossidi e dicalcogenuri depositati su superfici metalliche. Questi sistemi sono interessanti per molte possibili applicazioni: strati protettivi per prevenire la corrosione di metalli, microelettronica, spintronica, catalisi.

In particolare, la loro natura isolante permette di **filtrare o modulare segnali elettrici trasmessi dal metallo conduttore**, o di ancorare sistemi magnetici per memorie su scala atomica. Il loro spessore estremamente ridotto, però, permette il passaggio di elettroni tramite il cosiddetto effetto tunnel, cioè la capacità delle particelle subatomiche di permeare barriere solide di spessore ridotto.

Questo effetto è di grande interesse per **applicazioni nel campo della catalisi**, dove il flusso di elettroni da atomi molecole legate al film di ossido al metallo sottostante (o viceversa) tramite effetto tunnel può fungere da iniziatore di reazioni chimiche di interesse, quali l'attivazione dell'anidride carbonica per convertirla in prodotti chimici di valore.

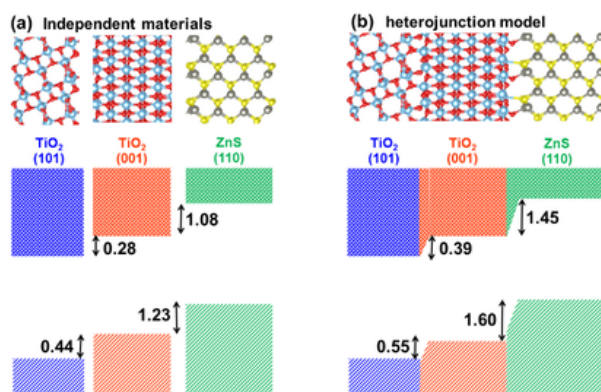


# PROPRIETÀ DELLE ETEROGIUNZIONI E DEI MATERIALI COMPOSITI

Le interfacce estese tra materiali solidi sono alla base di molti interessanti fenomeni. Nel campo della fotocatalisi, ad esempio, l'assorbimento dei fotoni della radiazione solare genera portatori di cariche elettriche, negative e positive, ad alta energia, che fluendo attraverso il materiale possono fungere da veri e propri catalizzatori. Sfortunatamente, una reazione secondaria, data dalla ricombinazione e annichilimento dei portatori di cariche opposte, tende a porre fine al processo catalitico.

I materiali compositi, cioè formati da almeno due materiali chimicamente distinti posti in contatto tramite una superficie comune, possono **prevenire i fenomeni di ricombinazione** creando canali selettivi per i portatori di una data carica attraverso la loro interfaccia.

Solo una conoscenza puntuale della struttura atomica all'interfaccia e delle proprietà chimico-fisiche dei componenti può razionalizzare il comportamento dei materiali compositi.



## MATERIALI PER BATTERIE E DISPOSITIVI DI ACCUMULO ELETTROCHIMICO

La transizione energetica in corso impone di affrontare alcuni impellenti e complessi problemi tecnologici: il superamento del motore termico come principale propulsore adibito alla mobilità di persone e merci, ad esempio, rende necessario lo sviluppo di batterie durevoli, potenti e ad alta capacità. L'integrazione di energia elettrica prodotta da fonti rinnovabili in una rete stabile e in grado di soddisfare la domanda energetica, a sua volta, richiede l'**integrazione di strumenti di stoccaggio dell'energia**, in modo da bilanciare il più possibile la natura alternante di fonti primarie quali sole o vento.

Un secondo fronte di intervento riguarda la dipendenza dell'attuale produzione industriale di batterie da risorse scarse o geopoliticamente critiche, nonché difficili da recuperare e riusare, quali il litio.

Il Quantum Chemistry Lab è impegnato in **attività di ricerca di nuovi materiali idonei per dispositivi di stoccaggio elettrochimico efficienti e sostenibili.**