



Gruppo Materiali Metallici

Prof. M. Baricco, Prof. A. Castellero*

Prof. M. Palumbo, Prof.ssa P. Rizzi, Dr. F. Scaglione



*e-mail: alberto.castellero@unito.it

<https://www.chimica.unito.it/do/gruppi.pl/Show?id=cpcf>

Argomenti di tesi

Additive manufacturing

Metalli nanoporosi

Modellizzazione

Economia circolare

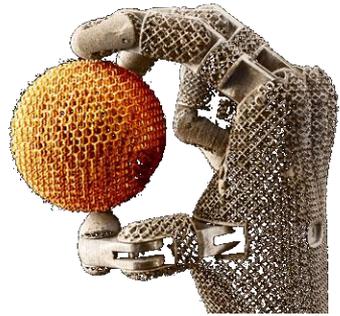
Immagazzinamento e recupero di energia

**Immagazzinamento da fonti
rinnovabili**

**Materiali termoelettrici per il
recupero di calore disperso**

Additive manufacturing (AM)

Contatti: A. Castellero, M. Baricco



DESCRIZIONE: la stampa 3D di materiali metallici è un processo innovativo che permette di realizzare produzioni ad hoc, ridurre le scorte di magazzino e minimizzare il peso dei componenti.

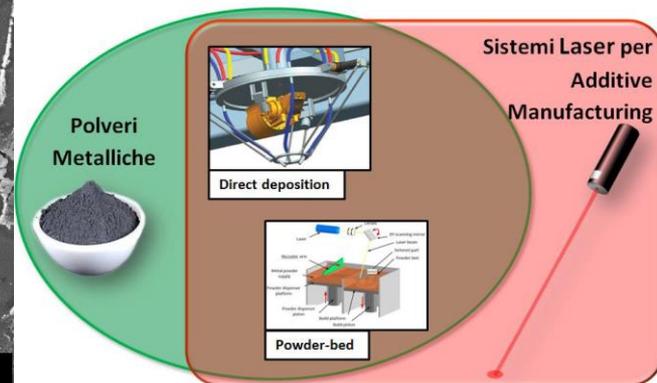
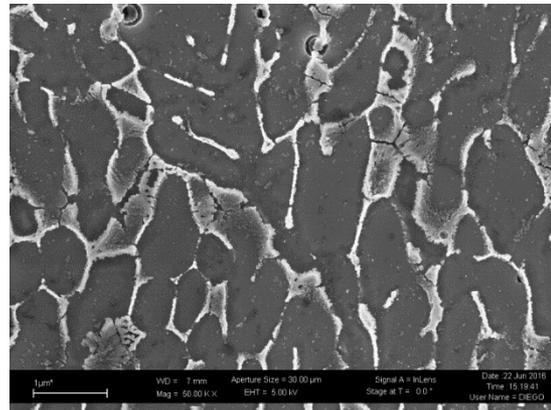
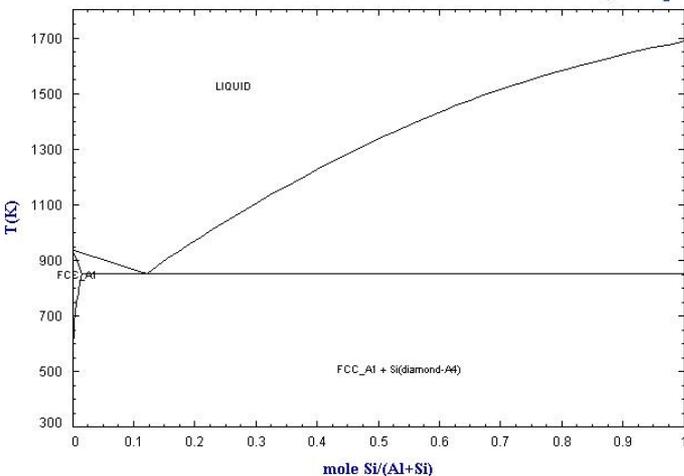
OBIETTIVI: studio della correlazione tra i parametri di processo e **1)** selezione delle fasi (calcoli dei diagrammi di stato metastabili), **2)** microstruttura, **3)** proprietà meccaniche.

METODOLOGIA: simulazione dei processi AM mediante esperimenti di rapida solidificazione. Sintesi e modifica di leghe, caratterizzazione mediante XRD, SEM, TEM, EDS, EBSD, DSC, micro-durezza.

Al - Si

Data from SGTE alloy databases (revised 2004)

FactSage®



Au nanoporoso per sensori innovativi e catalisi

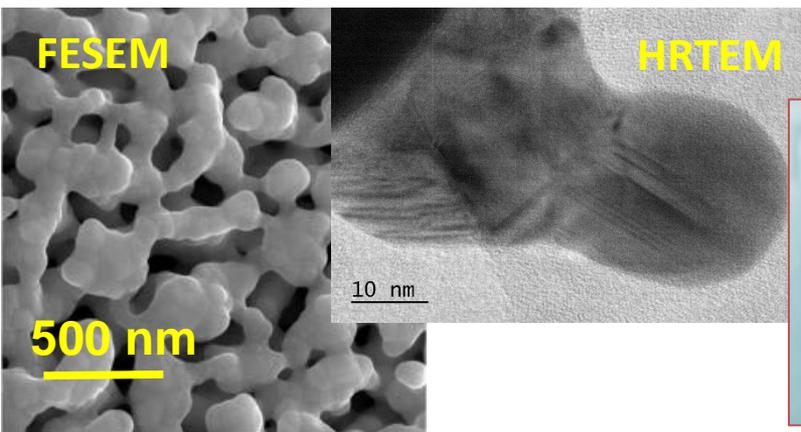
BIOREMIA H2020 Project: <https://www.bioremia.eu/>

Contatti: P. Rizzi, F. Scaglione

DESCRIZIONE: i metalli nanoporosi sono caratterizzati da un'elevata area superficiale ed esibiscono proprietà ottiche e catalitiche avanzate. Il controllo della dimensione e morfologia dei ligamenti e dei pori permette di modulare specifiche proprietà nel campo dei biosensori, della catalisi e delle applicazioni antibatteriche.

OBIETTIVI: **i)** realizzazione di Au nanoporoso a partire da precursori metastabili (Au-Fe, leghe amorfe a base Au); **ii)** studio del meccanismo e della cinetica del processo di de-alligazione, e della formazione dei ligamenti; **iii)** realizzazione di Ti o TiO₂ nanoporosi per applicazioni antibatteriche.

METODOLOGIA: sintesi di leghe, de-alligazione (corrosione, processi elettrochimici), caratterizzazione strutturale/microstrutturale (SEM, TEM, EDS, XRD, EBSD), termica (DSC, TGA), elettrochimica, spettroscopica (SERS, Raman).



BIOREMIA - European Training Network Biofilm-resistant materials for hard tissue implant applications

BIOREMIA will provide top-level multidisciplinary skills to 15 Early-Stage Researchers through an ambitious research and training programme in the area of biofilm-resistant materials for bone-related implant applications. It is a 4-year project funded by the European Commission under Horizon 2020 Marie Skłodowska Curie Actions.

[More about our research](#)



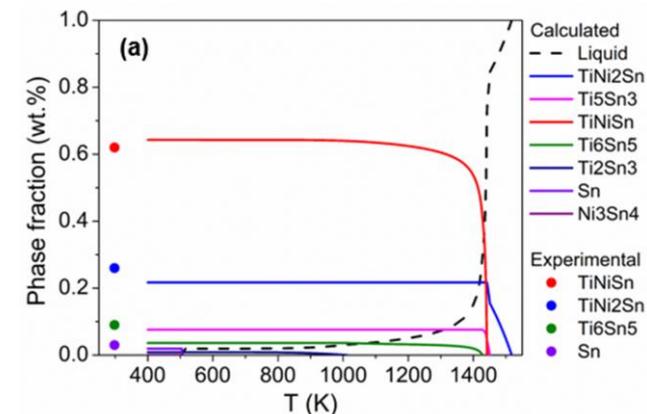
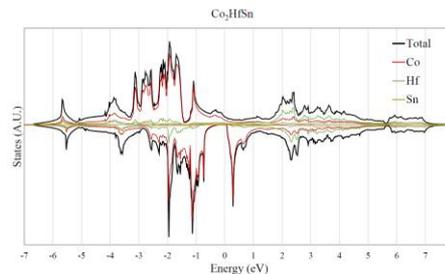
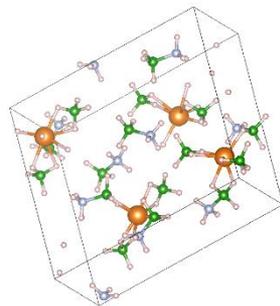
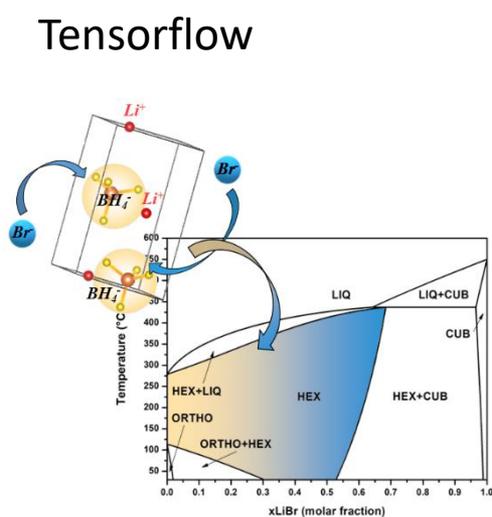
Modellizzazione di materiali metallici e per l'energia

Contatti: M. Palumbo

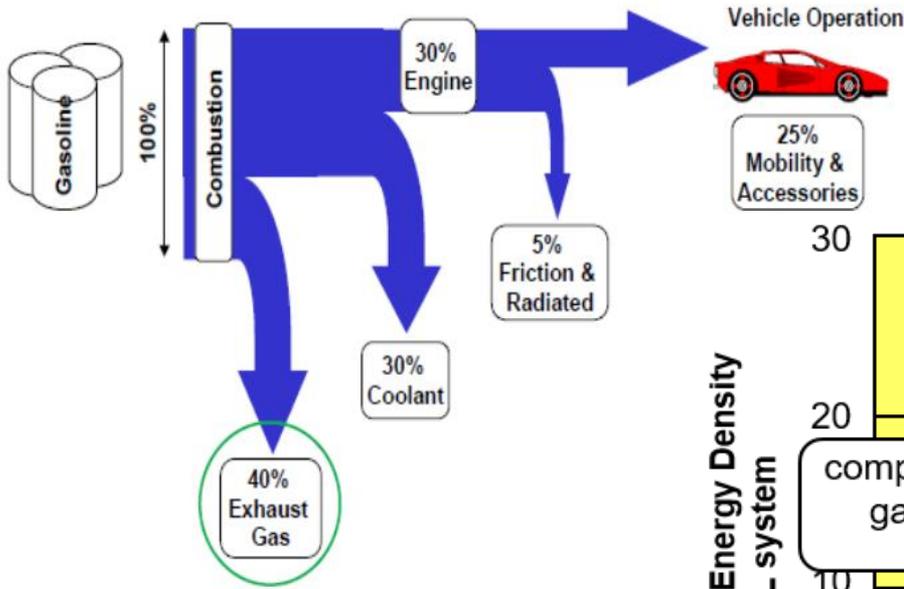
DESCRIZIONE: la modellizzazione dei materiali è diventata uno strumento essenziale non solo per la comprensione e previsione di caratteristiche e proprietà dei materiali, ma anche per sviluppare in tempi più brevi e minori costi nuovi materiali e processi. In un'ottica «multiscale» la modellizzazione può avvenire partendo da modelli fondamentali su scale atomica per poi scalare fino a sistemi e proprietà macroscopici.

OBIETTIVI: i) calcolo di proprietà dei materiali tramite metodi quanto-meccanici basati sul Density Functional Theory (DFT) ii) simulazione di trasformazioni di fase iii) sviluppo di banche dati termodinamiche e calcolo di diagrammi di stato tramite metodo CALPHAD iv) sviluppo ed applicazioni di modelli di machine learning per i materiali

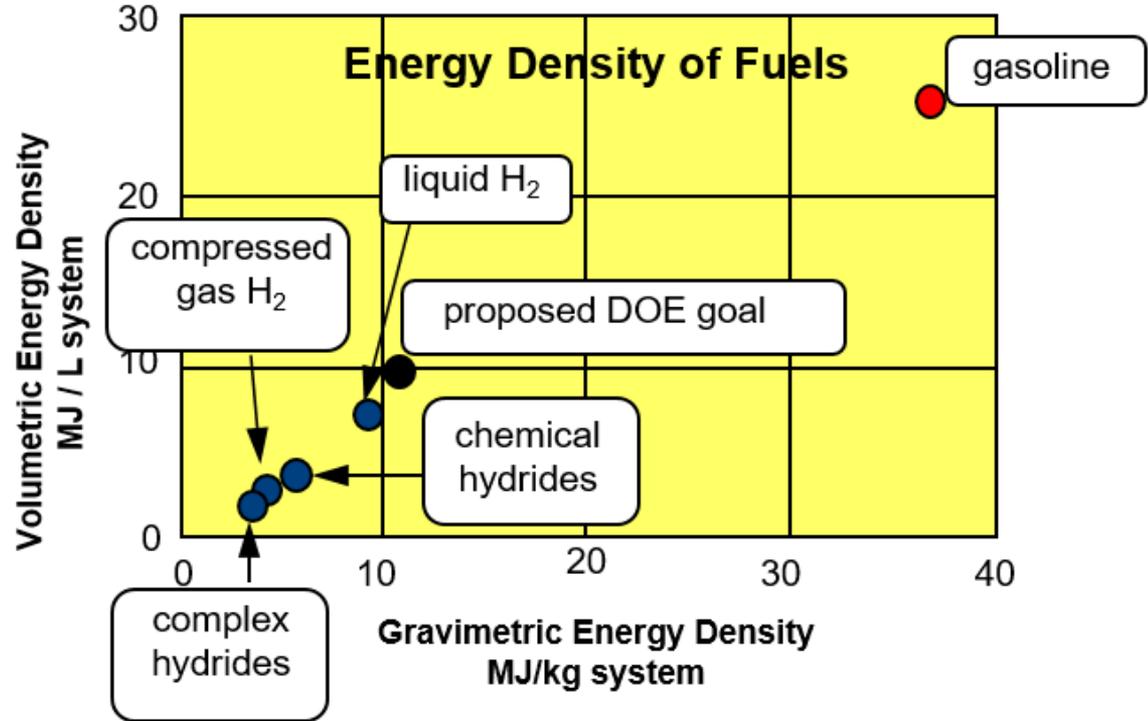
METODOLOGIA: DFT tramite codici ad onde piane (VASP, Quantum Espresso), metodo CALPHAD con software ThermoCalc e Pandat, machine learning con Python, Scikit-Learn e Tensorflow



Immagazzinamento e recupero di energia



Contatti: M. Baricco, A. Castellero, P. Rizzi



➤ **sviluppo di nuovi materiali e processi**

❖ **immagazzinamento di energia da fonti rinnovabili**

• **idrogeno**

❖ **recupero di calore disperso**

Immagazzinamento di energia da fonti rinnovabili

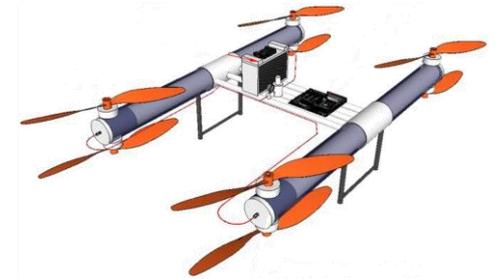
Contatti: M. Baricco, P. Rizzi

DESCRIZIONE:

Necessità di ottimizzare l'immagazzinamento dell'idrogeno come vettore energetico in applicazioni stazionarie e per la mobilità



© FABIO MARZANO



APU installata su IVECO Daily

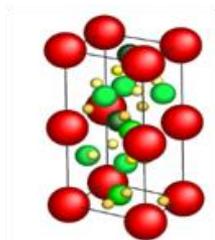


Applicazioni per la mobilità: immagazzinamento di idrogeno

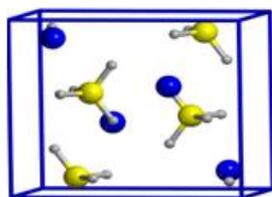
Contatti: M. Baricco, P. Rizzi

OBIETTIVI:

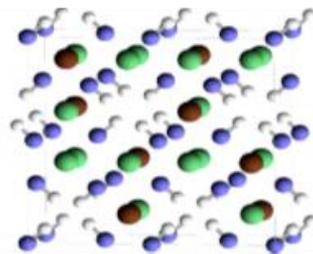
- Immagazzinamento dell'idrogeno allo stato solido
- Integrazione con celle a combustibile alimentate con idrogeno



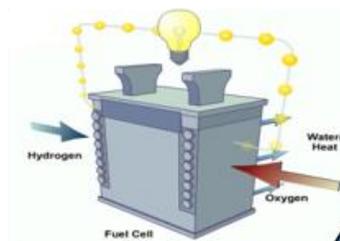
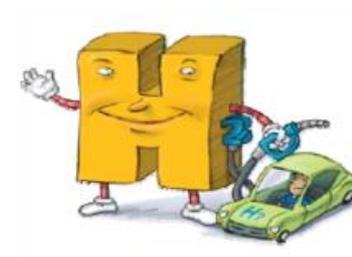
LaNi₅H₇



LiBH₄



Li₂Mg(NH)₂



Progetto della Regione Piemonte:
Fuel Cells and Hydrogen Joint
Undertaking

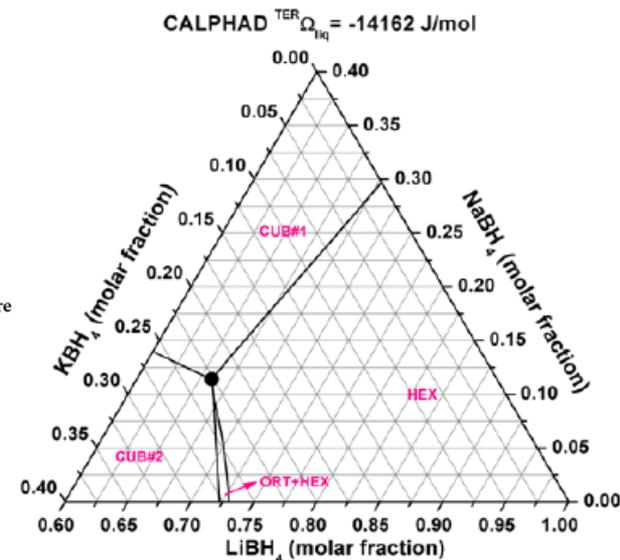
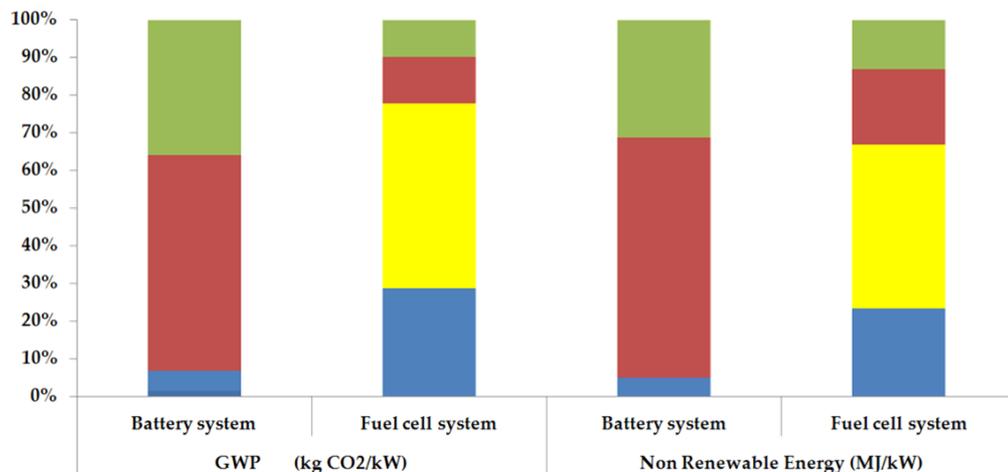
Sviluppo di materiali avanzati

Contatti: M. Baricco, P. Rizzi

METODOLOGIA:

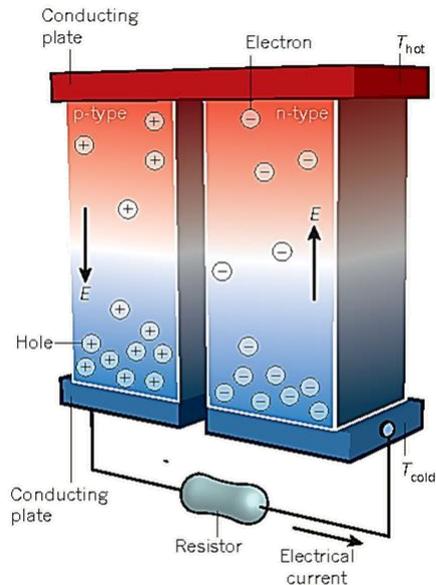
Idruri complessi e composti intermetallici con elevate densità gravimetriche di idrogeno:

- Studio delle trasformazioni di fase
- Calcolo dei diagrammi di stato metastabili
- Life Cycle Analysis (LCA)



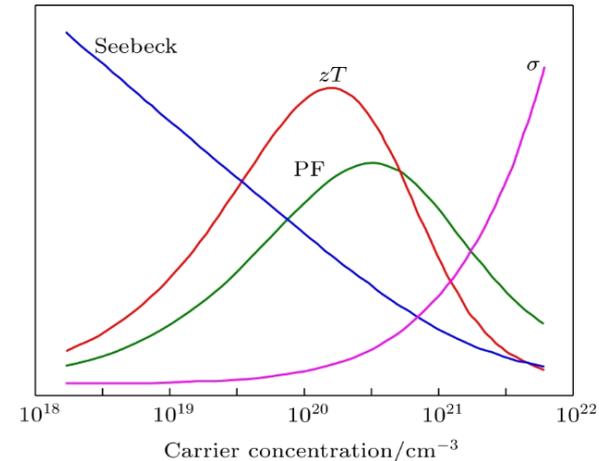
Materiali termoelettrici per il recupero di calore disperso

Contatto: A. Castellero



DESCRIZIONE Il calore disperso in ambito industriale, automotive, domestic, etc. può essere convertito in energia elettrica mediante l'effetto Seebeck. I generatori termoelettrici (TEG) sono costituiti da semiconduttori con elevate figura di merito

$$ZT = \frac{\alpha^2 \sigma T}{K_{el} + K_{ph}}$$



OBIETTIVI

- Controllo della concentrazione dei portatori di carica nei semiconduttori mediante drogaggio => ottimizzazione del fattore di potenza ($\alpha^2 \sigma$).
- Disaccoppiamento dello scattering elettronico e fononico mediante controllo della microstruttura => riduzione di κ_{ph}

METODOLOGIE

- Utilizzo di processi metallurgici di non equilibrio (rapida solidificazione ed alligazione meccanica) per il controllo della microstruttura.
- Correlazione tra parametri di processo e proprietà strutturali, microstrutturali e di trasporto.