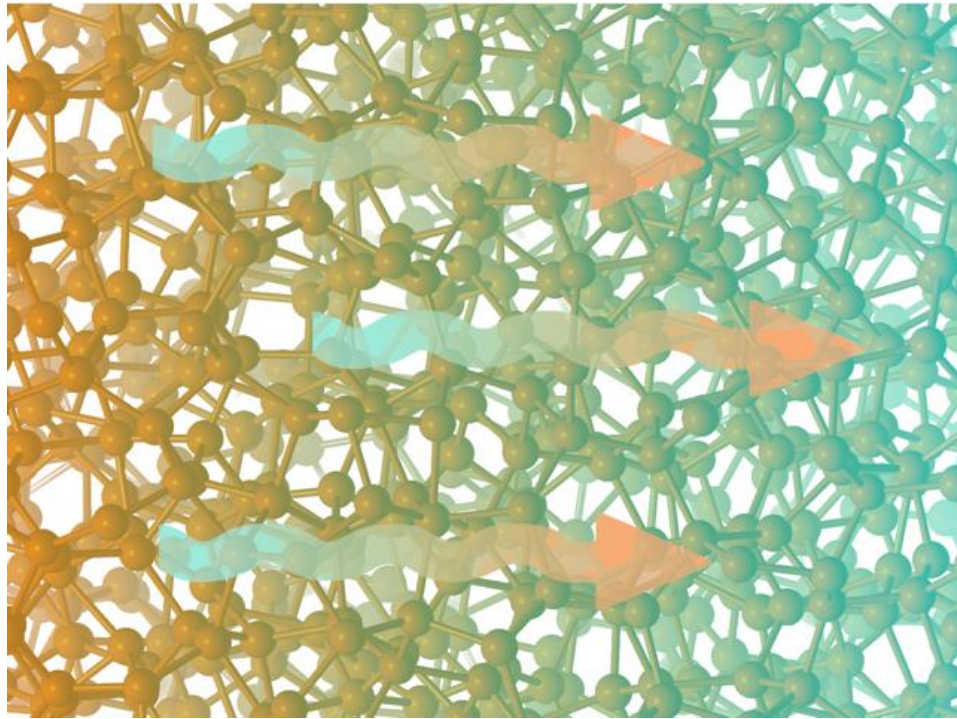


COMUNICATO STAMPA

Dal vetro al cristallo: una nuova teoria per il trasporto di calore

Da SISSA e UC Davis un nuovo approccio per lo studio e la simulazione numerica del trasporto di calore nei solidi che apre la strada ad applicazioni nel settore energetico e nelle scienze planetarie. La ricerca è stata pubblicata su *Nature Communications*.



Trieste, 26 agosto 2019

Una teoria unificata per la trasmissione di calore nei solidi non metallici, come cristalli, vetri, ceramiche e leghe. È questo il risultato chiave di uno studio condotto dalla SISSA e dall'Università della California - Davis, pubblicato su *Nature Communications*. La ricerca apre la strada alla simulazione delle proprietà termiche di un'ampia classe di materiali fondamentali per le scienze planetarie e per lo sviluppo di tecnologie d'impiego nel settore energetico, con applicazioni che vanno dai processi di conversione e stoccaggio dell'energia allo sviluppo di dissipatori e schermi di calore.

Il calore passa dal caldo al freddo così come il tempo scorre dal passato al futuro. In un certo senso, il flusso di calore è il processo che più di ogni altro definisce la freccia del tempo. Eppure, nonostante l'importanza fondamentale del fenomeno, nel 1961 il padre fondatore della teoria moderna del trasporto di calore, Sir Rudolph Peierls, scriveva: "Sembra che nella fisica moderna non ci siano problemi con altrettante false partenze, e teorie che trascurano altrettanti aspetti fondamentali, come quelli della conduzione termica nei cristalli non metallici". Da allora è passato mezzo secolo, ma ancora oggi il trasporto di calore è uno dei capitoli più sfuggenti della scienza dei materiali. Di fatto, **fino ad oggi non esisteva un approccio comune per trattare cristalli e solidi (parzialmente) disordinati e questo ha reso impossibile a generazioni di scienziati simulare con la stessa precisione materiali diversi, o stati diversi di uno stesso materiale, presenti in uno stesso sistema fisico o in uno stesso dispositivo.**

Questo ostacolo è stato finalmente superato grazie al lavoro di un gruppo di ricercatori della SISSA e di UC Davis, guidato da Stefano Baroni e Davide Donadio nell'ambito del Centro Europeo MAX (Materials design at the Exascale), che **ha sviluppato un nuovo metodo basato sulla teoria della linearità di risposta di Green-Kubo e i concetti di dinamica reticolare, unendo in modo originale i diversi approcci fin qui utilizzati nello studio dei cristalli e dei vetri.** La nuova metodologia tiene anche conto in modo semplice e naturale degli effetti quantistici, permettendo così la simulazione della trasmissione di calore in materiali complessi e disordinati anche a basse temperature, cosa fino ad oggi impossibile con le tecniche a disposizione.

Questo risultato consentirà a ricercatori e ingegneri di studiare e progettare il trasporto di calore in materiali e dispositivi molto diversi. Una bassa conduttività termica è ad esempio essenziale per la realizzazione di efficienti dispositivi termoelettrici di raffreddamento o di raccolta di energia o di barriere e rivestimenti per l'isolamento e lo schermo termico. Viceversa un'alta conduttività è fondamentale per la gestione del calore nei dispositivi elettronici ad alta potenza, nelle batterie e nel fotovoltaico. Tutti i materiali utilizzati in questi contesti sono strutturati alla scala nanometrica e possono essere policristallini, altamente difettosi o addirittura vetrosi: finalmente potranno essere studiati con precisione, con un metodo unico ed utilizzabile in pratica nella simulazione numerica.

ARTICOLO

<https://doi.org/10.1038/s41467-019-11572-4>

IMMAGINE

“Trasporto di calore nel vetro”. Il calore fluisce dalle regioni più calde a quelle più fredde del silicio amorfo. Crediti: Leyla Isaeva

CONTATTI SISSA

Nico Pitrelli
→ pitrelli@sissa.it
T +39 040 3787462
M +39 339 1337950

Chiara Saviane
→ saviane@sissa.it
T +39 040 3787230
M +39 333 7675962

CONTATTI UCDavis

Andy Fell
→ ahfell@ucdavis.edu
T +1 530-752-4533