

Contenuto archiviato il 2024-06-18



Crystal surface simulations

Risultati in breve

Previsione rapida della morfologia cristallina

I cristalli sono gli elementi fondanti dei materiali in settori come quello farmaceutico, elettronico, fotovoltaico e della catalisi. Gli scienziati hanno sviluppato un modello per prevederne rapidamente la morfologia per una progettazione controllata e una pianificazione ottimizzata.



© Thinkstock

Il controllo sulla morfologia cristallina è cruciale per la progettazione delle funzioni. La comparsa di morfologie indesiderate può influire negativamente sulla qualità del prodotto e sulle sue caratteristiche di gestione, addirittura causando il blocco di filtri e tubi.

Con una conoscenza sempre maggiore dei comportamenti della meccanica quantica, esistono potenzialmente molti vantaggi derivanti dalla combinazione delle classiche

teorie della crescita cristallina con moderne simulazioni meccaniche quantiche. Il progetto CRYSURFSIM (“Crystal surface simulations”), finanziato dall’UE, è stato lanciato per sviluppare un modello di unificazione per la progettazione moderna della morfologia cristallina.

Le forme incredibilmente svariate dei cristalli, anche di quelli dello stesso composto, derivano dalle diverse condizioni di crescita alle quali sono soggetti. L’energia libera

di superficie è un importante parametro trainante.

L'energia libera di superficie, detta anche tensione di superficie per i liquidi, è la differenza tra le energie degli atomi in superficie e quella all'interno del cristallo. Il modello di carenza legame-valenza può essere utilizzato per prevedere le energie libere di superficie e la morfologia dei cristalli.

CRYSURFSIM ha sfruttato il modello della carenza legame-valenza per unire le descrizioni classiche e di meccanica quantica della crescita dei cristalli. Gli scienziati hanno applicato con successo il modello per descrivere l'energia libera di superficie delle strutture cristalline metalliche comuni. I risultati sono in linea con quelli delle simulazioni meccaniche quantiche sul lattice e le strutture cristalline previste assomigliano a quelle riscontrate in natura. Il vantaggio più importante del modello della carenza legame-valenza relativo alle simulazioni sul lattice è rappresentato dalla sua velocità.

L'applicazione ai minerali (nello specifico, con tipi di struttura AX e AX₂) è stata più difficile. Sebbene il modello gestisca sia le superfici neutre che quelle con carica, le simulazioni sul lattice richiedono una "correzione" per convertire le superfici cariche a superfici neutre, il che rappresenta una difficoltà per il confronto dei risultati. Tuttavia, quando sono stati considerati alogenuri, solfuri e ossidi, il modello della carenza legame-valenza ha mostrato ancora una volta una forte corrispondenza con le simulazioni sul lattice e con le morfologie osservate in natura.

Il modello si è rivelato uno strumento rapido per la previsione accurata della morfologia dei cristalli con carico computazionale minimo, creando così un ponte efficace tra i modelli di formazione dei cristalli microscopici e meccanici quantici. Questo aiuterà i tecnici dei cristalli a realizzare rapidi progetti di nuove morfologie per funzioni specifiche in settori dalla biomedicina, alla farmacia, ai semiconduttori a film sottili, fino al fotovoltaico. A sua volta, questo avrà un impatto importante sulla competitività dell'economia UE.

Parole chiave

Morfologia cristallina, meccanica quantica, superficie cristallina, energia libera superficiale, carenza legame-valenza

Scopri altri articoli nello stesso settore di applicazione



Un banco di prova per l'innovazione aperta volto a potenziare il settore europeo della nanomedicina



Migliorare l'accesso alle nanotecnologie per fornire materiali ecologici innovativi



Un rivestimento in argento illumina la via da seguire per celle solari più sottili ed efficienti



Occhiali in tempo record dietro l'angolo grazie alla stampa in scala nanometrica



Informazioni relative al progetto

CRYSURFSIM

Finanziato da

ID dell'accordo di sovvenzione: 274571

Progetto chiuso

Data di avvio

3 Gennaio 2012

**Data di
completamento**

2 Gennaio 2014

Specific programme "People" implementing the Seventh Framework Programme of the European Community for research, technological development and demonstration activities (2007 to 2013)

Costo totale

€ 209 092,80

Contributo UE

€ 209 092,80

Coordinato da
THE CHANCELLOR MASTERS
AND SCHOLARS OF THE
UNIVERSITY OF CAMBRIDGE
 United Kingdom

Ultimo aggiornamento: 24 Marzo 2015

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/158521-fast-prediction-of-crystal-morphology/it>

European Union, 2025