



# PROGETTAZIONE DI NUOVI MATERIALI PER L'ABBATTIMENTO DI INQUINANTI. COME PROTEGGERE I NOSTRI MONUMENTI

Michele Ceotto, Dario Tamascelli, Leonardo Lo Presti,  
Giuseppe Cappelletti, Luigi Falciola, Paola Fermo e Silvia Ardizzone



**Progetto Lisa 2013-2014**

**Dipartimento di Chimica**  
**Dipartimento di Informatica**



# MATGREEN: un progetto LISA interdisciplinare



Leonardo Lo Presti, RU  
Co-PI Crystal Chemist



Michele Ceotto, PI  
RU Theoretical Chemist



Silvia Aridizzone,  
PO Senior Advisor



Luigi Falciola  
RU Electrochemist



Giuseppe Cappelletti,  
RU Surface Chemist



Dario Tamascelli, Co-PI  
RU Computer Science



Paola Fermo,  
RU Analytical Chemist

Dalla teoria agli esperimenti: un connubio interdisciplinare

## MATGREEN

M. Ceotto D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Aridizzone



# Progetto LISA 2013

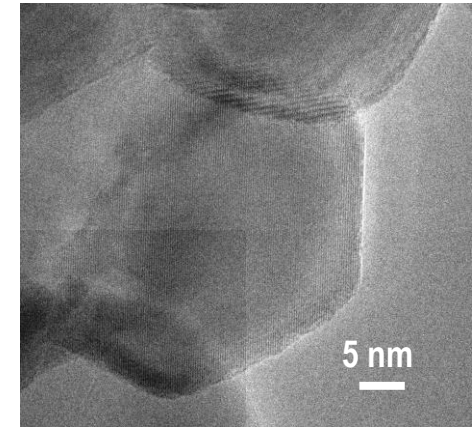
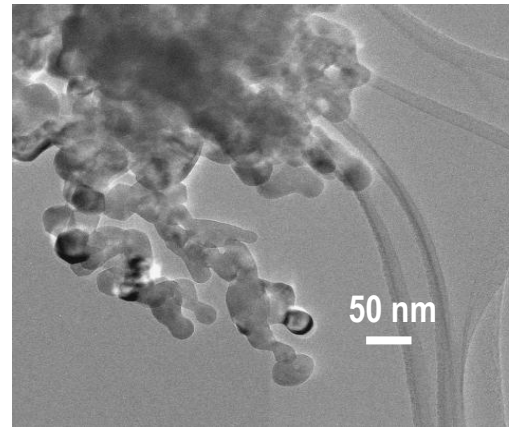
## Le simulazioni software



## software “scritti da noi”



## Le nanostrutture



## L'applicazione sperimentale



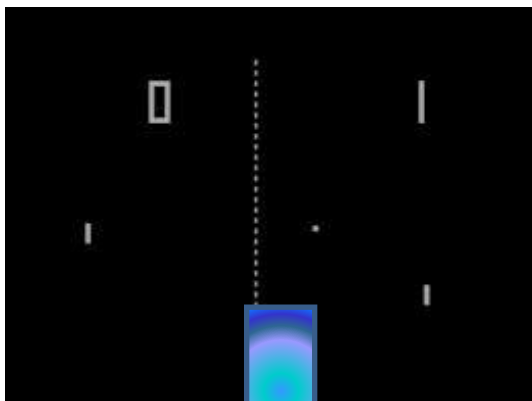
### MATGREEN

M. Ceotto, D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Ardizzone



# L'evoluzione delle schede grafiche dei PC

*Gli anni '70 ...*



*Gli anni '80 ...*



*oggi ...*



*Gli anni '90 ...*



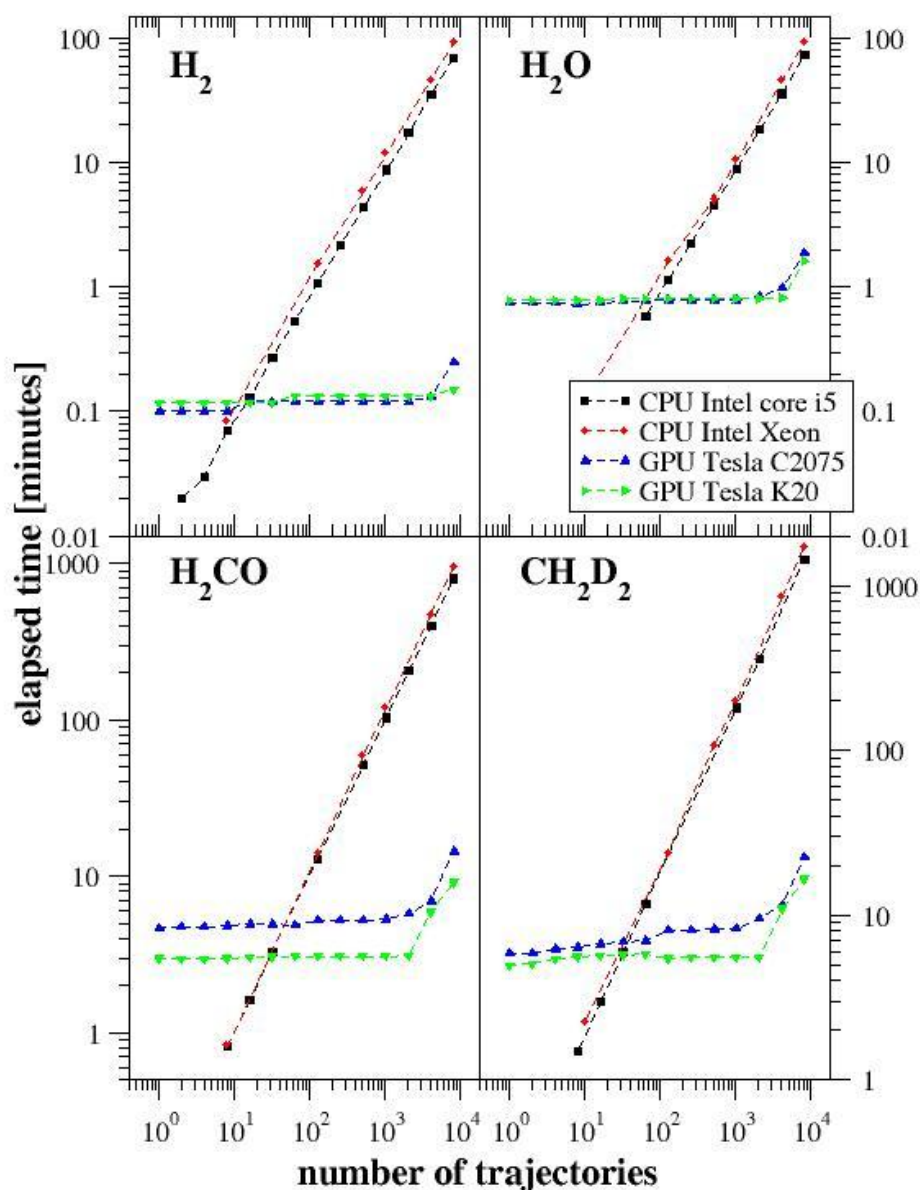
**MATGREEN**

M. Ceotto D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Ardizzone



# Accelerazione computazionale delle schede grafiche

GPU vs CPU calculation times



## Consumo energetico

GPU Watt = 2.3 CPU Watt

+

CPU seconds = 100 \* GPU seconds

GPU rispettose dell'ambiente

**MATGREEN**

M. Ceotto, D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Ardizzone

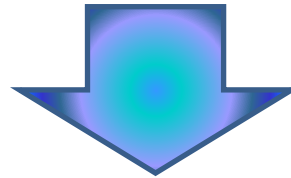
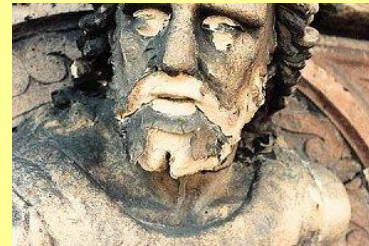


# Il problema del deterioramento dei monumenti

- **inquinamento dell'aria**

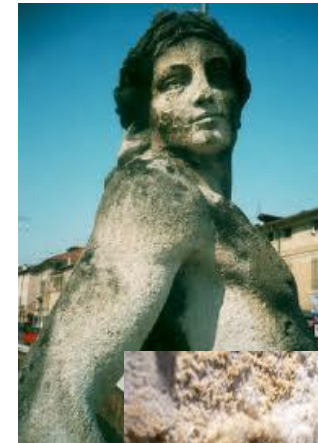
gas e particolato che portano alla cristallizzazione di sali insolubili ( $\text{CaSO}_4 \times 2\text{H}_2\text{O}$ )

- **presenza di acqua**



fattori fisici, chimici e biologici che portano ad **effetti indesiderati** quali:

- ❑ Formazioni di **croste nere** compatte non porose;
- ❑ Formazioni di **microcricche** dovute ad aumento di volume (i sali trattengono l'acqua)

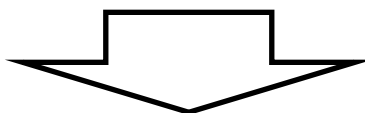


# Quali sono i possibili rimedi?

## Coating protettivi idrofobici

*Polimeri acrilici, vinilici, silossanici e fluorurati*

diminuiscono la **bagnabilità** della superficie,  
riducendo la **penetrazione dell'acqua**



### **Obiettivo:**

Strati protettivi trasparenti, duraturi, traspiranti  
con ottima efficienza idrofobizzante

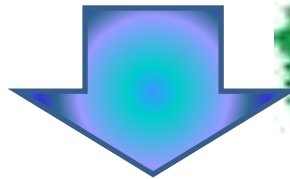


# I materiali testati



## PIETRA D'ANGERA

Roccia sedimentaria,  
 $\text{CaCO}_3$  e  $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$   
molto porosa



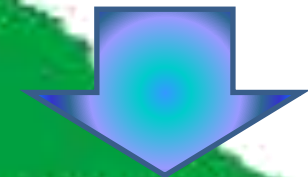
## CORTILE DEL RICHINI

Sede centrale  
Università Statale di Milano



## MARMO DI CANDOGLIA

pietra metamorfica  
 $\text{CaCO}_3$ , quartz, pirite  
bassa porosità

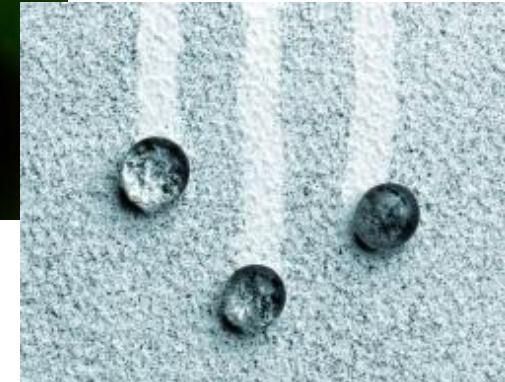
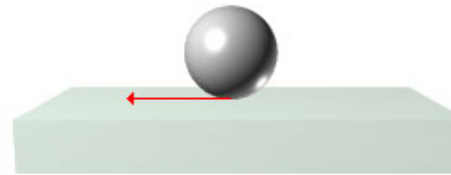


## DUOMO DI MILANO





# L'effetto superidrofobico di coating di ultima generazione



**self-cleaning effect**

**Ricoprimenti “ibridi” trasparenti**  
(nanomateriali + resina)



## **effetto LOTUS**

micro/nano rugosità con formazione di sacche d'aria

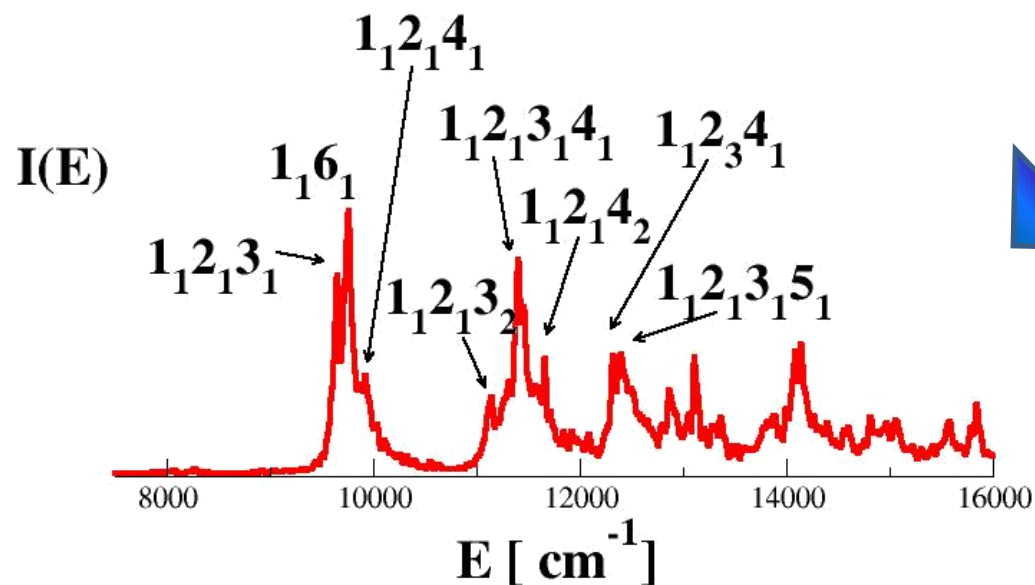
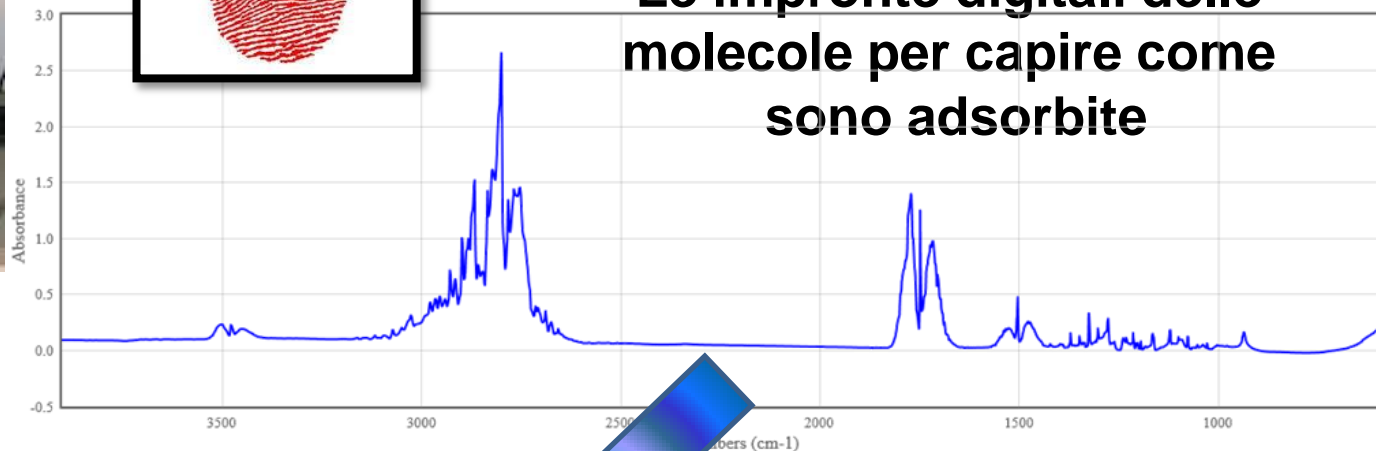
L'acqua entra solo in contatto con le asperità, rotolando via; scarsa interazione con acqua



# Come si riconoscono le molecole



**Gli spettri:**  
Le impronte digitali delle molecole per capire come sono adsorbite



La teoria  
simula e spiega  
il risultato strumentale

**MATGREEN**

M. Ceotto, D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Ardizzone

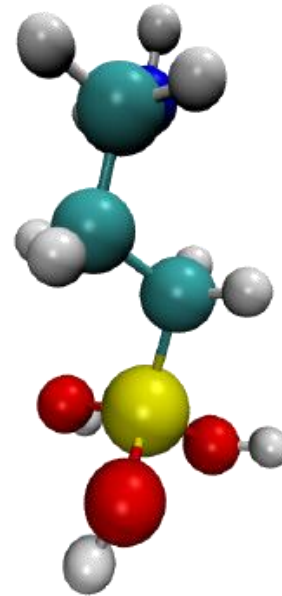
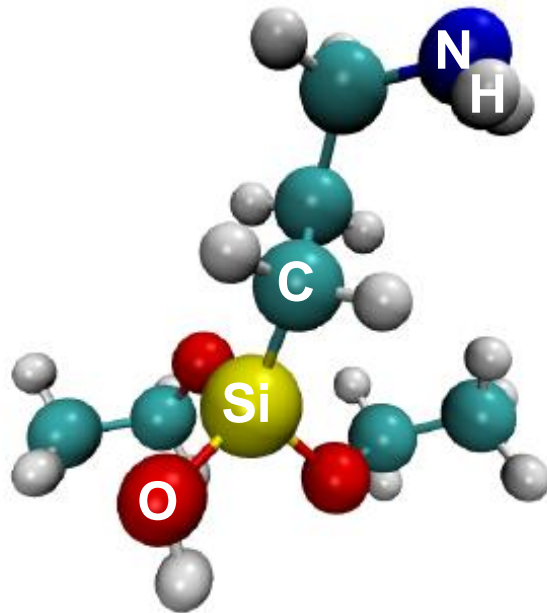
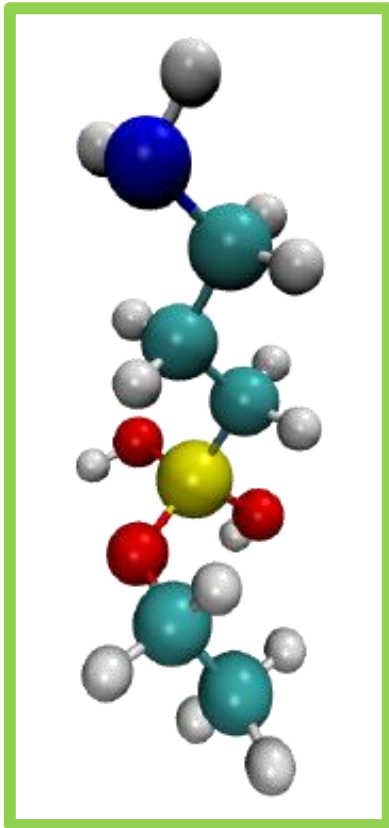


# Le molecole idrofobizzanti candidate

## Studio teorico preliminare:

importanza della geometria per la superidrofobicità

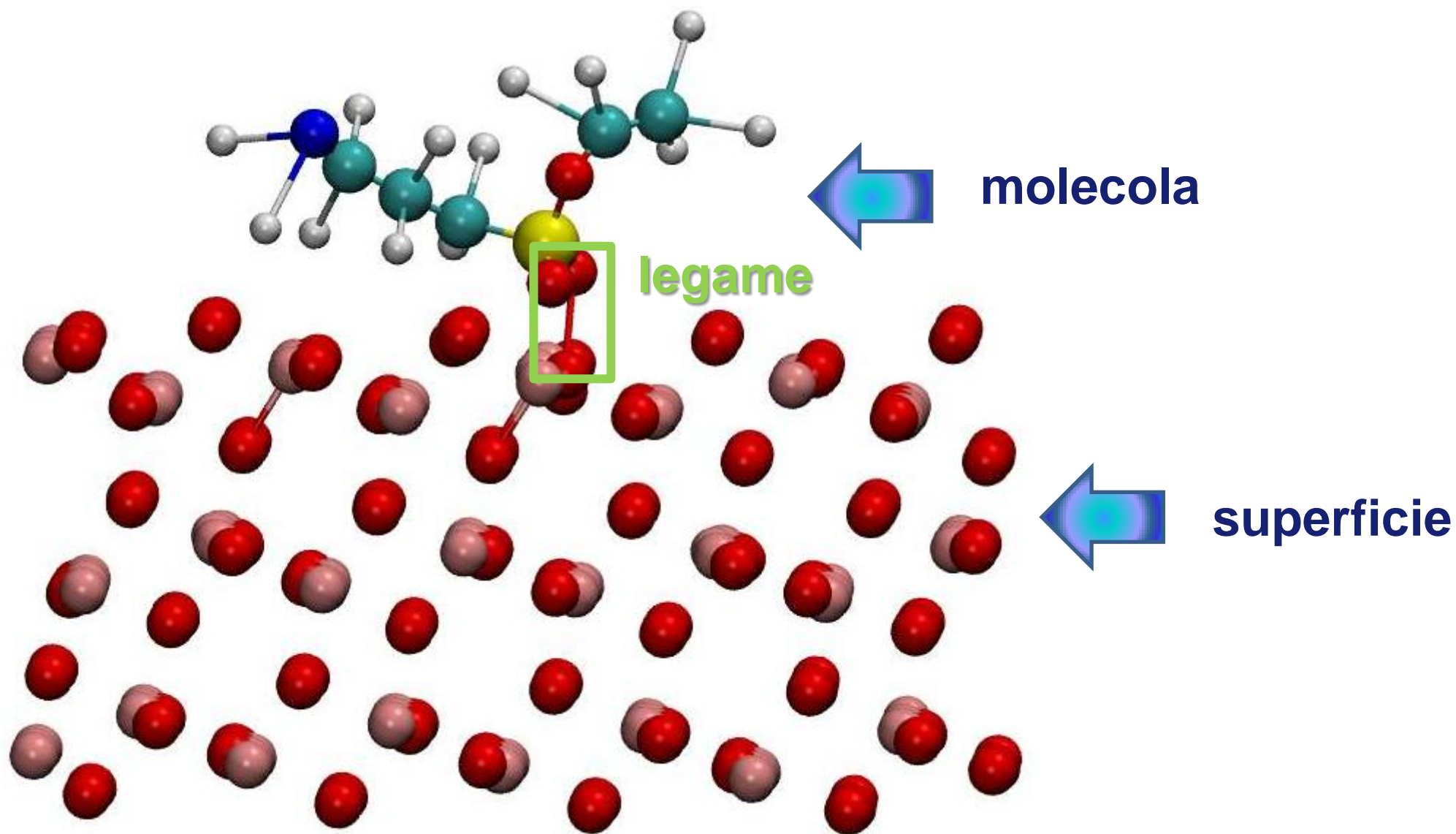
sceita della molecola ideale



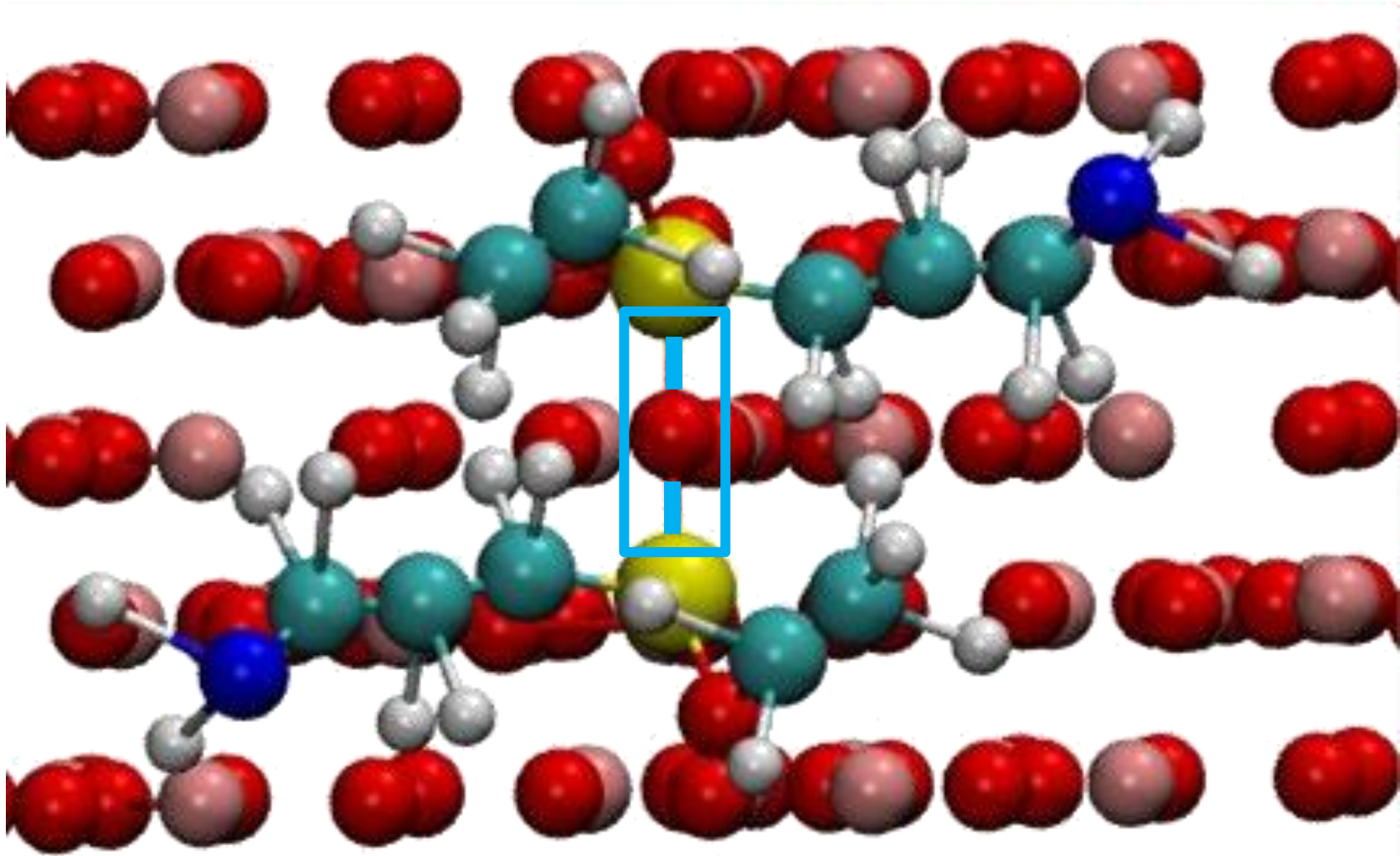
silani differentemente modificati



# Come si lega una molecola alla superficie



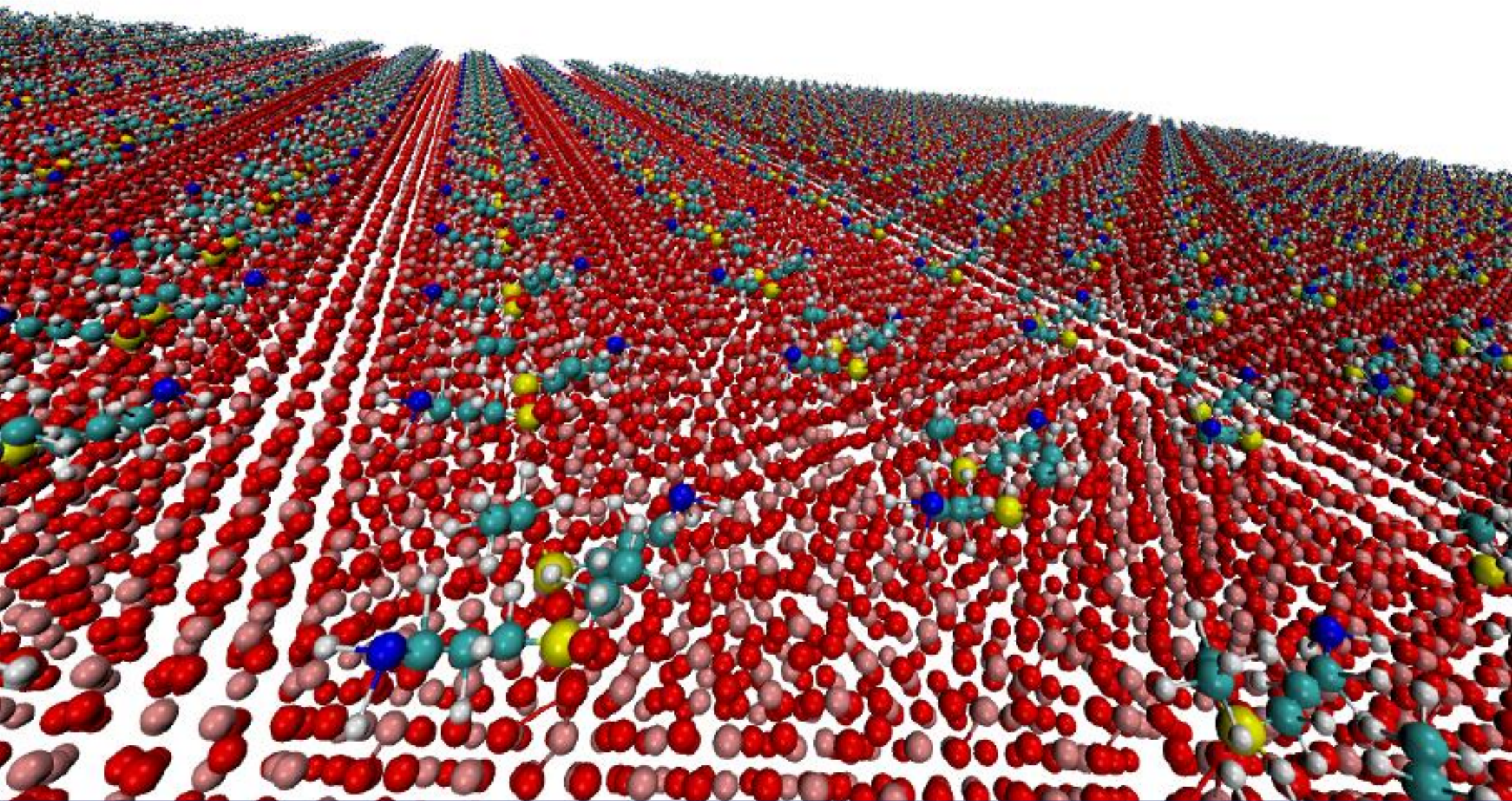
...due molecole...



**Legame a ponte tra le due molecole:  
stabilità del protettivo**



...da due a tante..

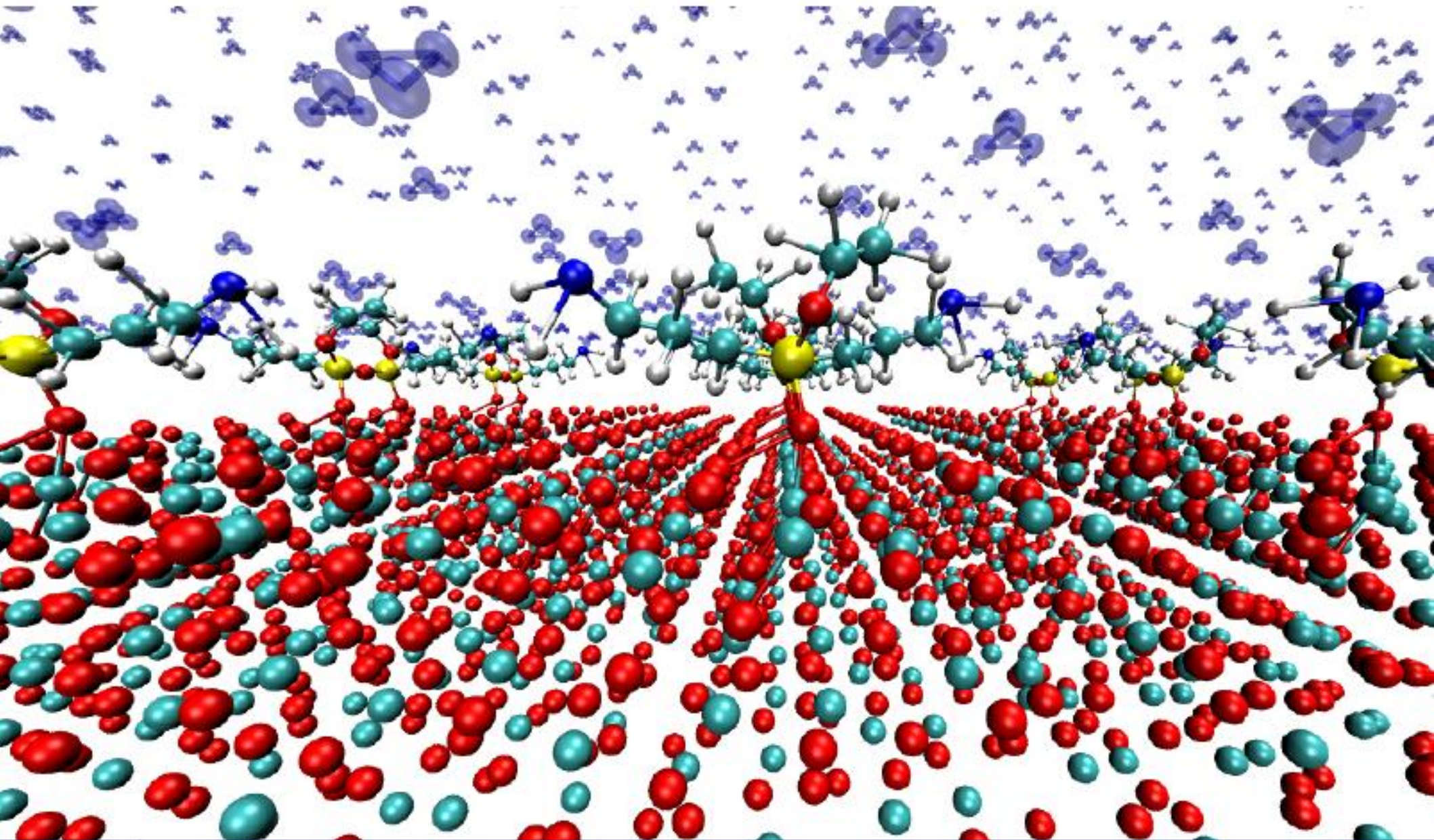


**MATGREEN**

M. Ceotto D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Ardizzone



# L'acqua non passa: la superficie non si bagna!



**MATGREEN**

M. Ceotto D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Ardizzone



# L'esperimento in laboratorio...



## **MATGREEN**

M. Ceotto D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Ardizzone

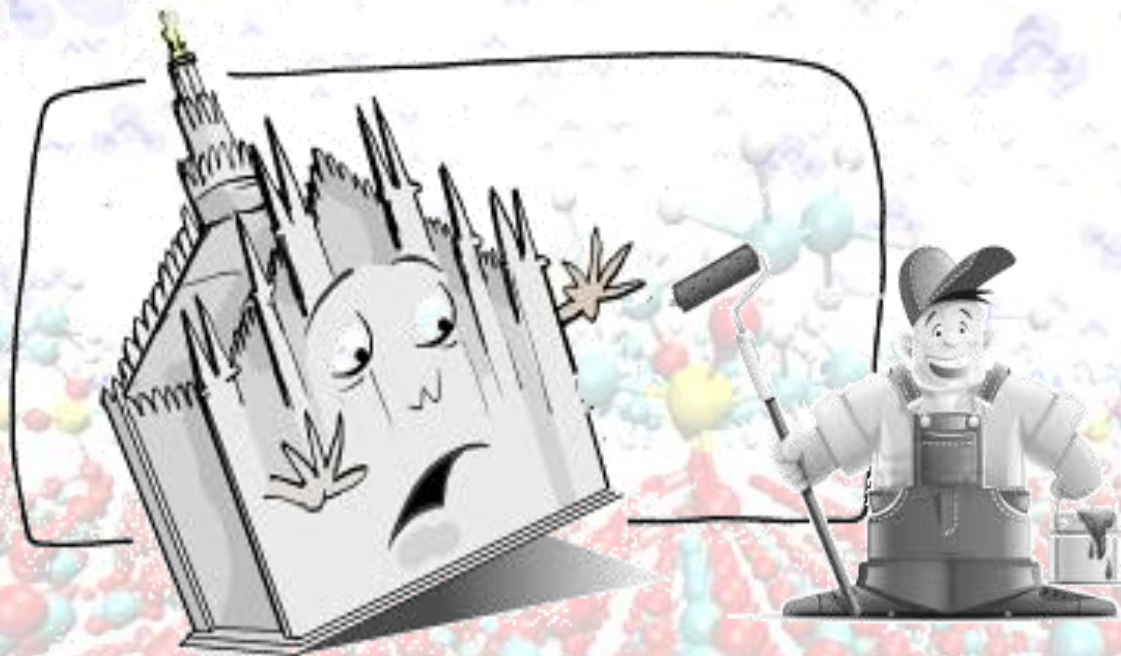




# L'esperimento sul posto...



THANKS!



Rigraziamo il **CINECA** e la **Regione Lombardia** per l'iniziativa LISA-2013, la disponibilità di macchine di calcolo ad alte prestazioni e per l'aiuto tecnico



Ringraziamo l'**Università degli Studi di Milano** per il supporto logistico



Ringraziamo **R. Bellani, C. Aieta, G. Diliberto, M. Tambato, M. Camiloni, A. Antonello, A. Orlando, V. Pifferi, D. Meroni, F. Spadavecchia, G. Soliveri** per il lavoro svolto

# Lavori pubblicati...

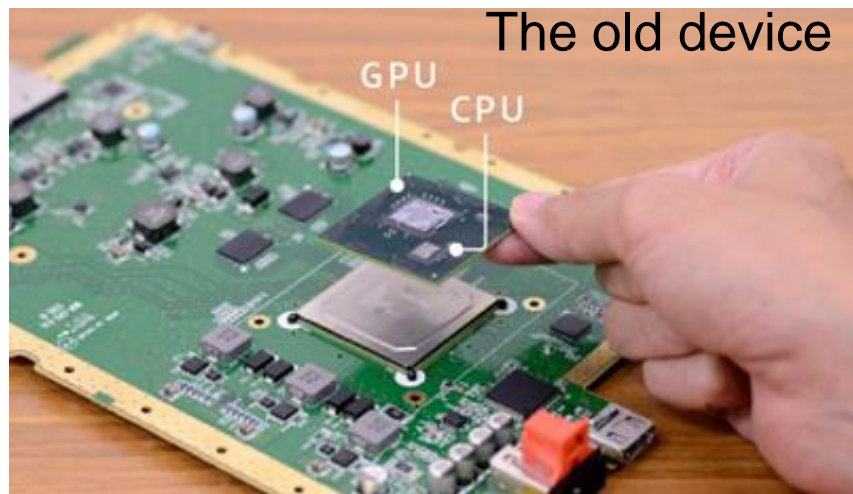
- L. Lo Presti, M. Ceotto, F. Spadavecchia, G. Cappelletti, D. Meroni, R. Acres, S. Ardizzone, *Journal of Physical Chemistry C*, (2014) in press
- P. Fermo, G. Cappelletti, N. Cozzi, G. Padeletti, S. Kaciulis, M. Brucale, M. Merlini, *J. Appl. Phys. A*, (2014) in press
- A. Antonello, G. Soliveri, D. Meroni, G. Cappelletti, S. Ardizzone, *Catalysis Today*, (2014) in press
- G. Soliveri, D. Meroni, G. Cappelletti, R. Annunziata, V. Aina, G. Cerrato, S. Ardizzone, *J. Mater. Sci*, 49(7) 2734-2744 (2014).
- G. Maino, D. Meroni, V. Pifferi, L. Falciola, G. Cappelletti, S. Ardizzone, *J. Nanoparticle Res.*, 15, 2087–2096 (2013).
- R. Conte, A. Aspuru-Guzik, M. Ceotto, *J. Phys. Chem. Lett.*, 4, 3407–3412 (2013);
- S. Mandra, S. Valteau, and M. Ceotto, *Int. J. of Quantum Chemistry*, 113 (12), 1722-1734 (2013);
- M. Ceotto, Y. Zhuang and W.L. Hase, *J. Chem. Phys.* 138, 054116 (2013);
- F. Spadavecchia, S. Ardizzone, G. Cappelletti, L. Falciola, M. Ceotto, and D. Lotti, *J. of Applied Electrochem.* 43 (2), 217-225 (2013);
- Y. Zhuang, M. R. Siebert, W.L. Hase, K.G. Kay, M. Ceotto, *J. Chem. Theory and Computation*, 9 (1), 54-64 (2013);
- G. Cappelletti, S. Ardizzone, D. Meroni, G. Soliveri, M. Ceotto, C. Biaggi, M. Benaglia, L. Raimondi, *J. of Colloid and Interface Science* 389, 284-291 (2013);
- C. Ricci, C. M. Carbonaro, A. Lehmann; F. Congiu, G. Cappelletti, B. Puxeddu, F. Spadavecchia, *Journal of Alloys and Compounds*, 561 (2013) 109–113.
- C. Pirola, C. L. Bianchi, S. Gatto, S. Ardizzone, G. Cappelletti, *Chemical Engineering Journal*, 225 (2013) 416–422.
- V. Pifferi, F. Spadavecchia, G. Cappelletti, E.A. Paoli, C.L. Bianchi, L. Falciola, *Catalysis Today*, 209 (2013) 8–12.
- A. Colombo, G. Cappelletti, S. Ardizzone, I. Biraghi, C. L. Bianchi, D. Meroni, C. Pirola, F. Spadavecchia, *Environmental Chemistry Letters*, 10 (2012) 55–60.
- D. Meroni, V. Pifferi, B. Sironi, G. Cappelletti, L. Falciola, G. Cerrato, S. Ardizzone, *Journal of Nanoparticle Research*, 14 (2012) 1086–1101.
- F. Spadavecchia, S. Ardizzone, G. Cappelletti, C. Oliva, S. Cappelli, *Journal of Nanoparticle Research*, 14 (2012) 1301–1312.
- E. L. Unger, F. Spadavecchia, K. Nonomura, P. Palmgren, G. Cappelletti, A. Hagfeldt, E. M. J. Johansson, G. Boschloo, *Applied Materials & Interfaces*, 4 (2012) 5997–6004.
- G. Soliveri, R. Annunziata, S. Ardizzone, G. Cappelletti, D. Meroni *Journal of Physical Chemistry C*, 116 (2012) 26405–26413.
- F. Spadavecchia, G. Cappelletti, S. Ardizzone, M. Ceotto, M. S. Azzola, L. Lo Presti, G. Cerrato, L. Falciola, *J. Phys. Chem C* 116 (43), 23083-23093 (2012)
- M. Ceotto, L. Lo Presti, G. Cappelletti, D. Meorni, F. Spadavecchia, R. Zecca, M. Leoni, P. Scardi, S. Ardizzone, *J. Chem. Phys. C* 116 (2), 1764-1771, (2012)
- M. Ceotto, *Mol. Phy.* 110 (9-19), Special Issue 547-559 (2011)
- M. Ceotto, G.F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik, *J. Chem. Phys.* 135 (21), 214108 (2011)
- D. Meroni, S. Ardizzone, G. Cappelletti, M. Ceotto, M. Ratti, R. Annunziata, M. Benaglia, L. Raimondi *J. Chem. Phys. C* 115 (38), 18649-18658 (2011);
- M. Ceotto, S. Valteau, G.F. Tantardini, A. Aspuru-Guzik, *J. Chem. Phys.* 134 (23), 234103 (2011);
- F. Spadavecchia, G. Cappelletti, S. Ardizzone, M. Ceotto, L. Falciola, , *J. Phys. Chem. C* 155 (14), 6381-6391 (2011);
- D. Meroni, S. Ardizzone, G. Cappelletti, C. Oliva, M. Ceotto, D. Poelman, H. Poelman, *Catalysis Today* 161 (1), 169-174 (2011);
- M. Ceotto, D. Dell'Angelo, G.F. Tantardini, *J. Chem. Phys.* 133 (5), 054701 (2010);
- M. Ceotto, S. Atahan, G. F. Tantardini, and A. Aspuru-Guzik *J. Chem. Phys.* 130, 234113 (2009)
- M. Ceotto, S. Atahan, S. Shim, G. F. Tantardini, and A. Aspuru-Guzik, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 11, 3861 (2009)

## MATGREEN

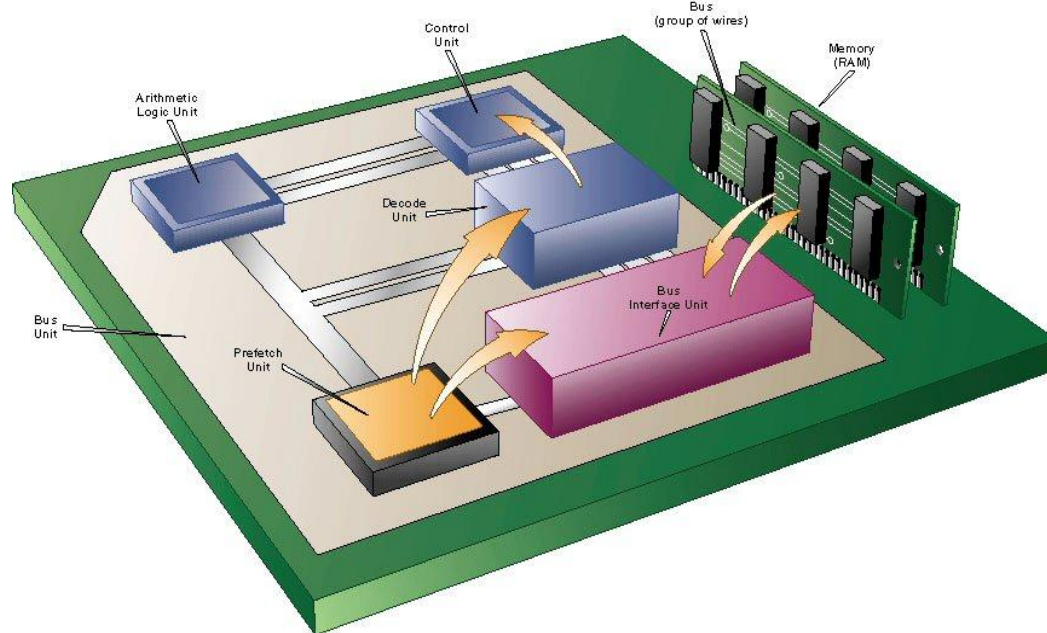
M. Ceotto D. Tamascelli, G. Cappelletti, L. Lo Presti, L. Falciola, P. Fermo, S. Ardizzone



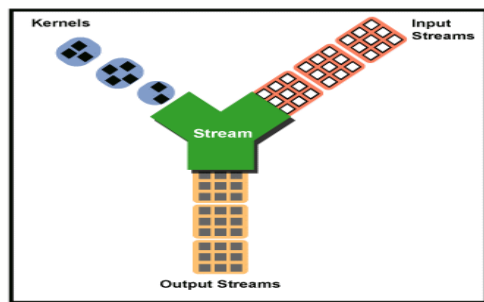
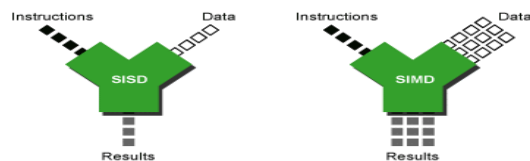
# How the CPUs work



All operations are sequential....



Single Instruction Single Data (SISD)



Few pixels can be processed at a time

