Studio dell'adesione dell'acido acrilico su superfici metalliche ed ossidate attraverso una sinergia fra simulazioni ab initio ed esperimenti di pull-off.

L'adesione vernice/substrato è un elemento chiave nel determinare le prestazioni complessive dei rivestimenti. Tuttavia, i meccanismi atomici che la determinano sono complessi e non del tutto compresi, ostacolando la progettazione razionale di sistemi vernicianti.
Per affrontare questa sfida, è stato sviluppato un approccio che combina simulazioni basate sulla teoria del funzionale della densità (DFT) a test sperimentali di adesione. I calcoli DFT consentono di valutare l'energia di adsorbimento di molecole rappresentative, come l'acido acrilico, su superfici metalliche e ossidate, identificando le configurazioni più stabili e le interazioni responsabili dell'adesione.
I risultati teorici, confrontati con esperimenti di pull-off macroscopici su vernici acriliche, mostrano un'eccellente concordanza tra valori previsti e misurati. Questa correlazione conferma la validità dell'approccio proposto, fornendo uno strumento predittivo per progettare nuovi sistemi vernice–substrato ottimizzati.

Laboratory	ISTITUTO GIORDANO
Specialization Area	Edilizia e Costruzioni, Meccatronica e Materiali
Contacts	Manuel Montebelli
Keyword	Adesione della vernice, Adsorbimento molecolare, Sistemi rivestimento-substrato, Progettazione nuove vernici

"Sviluppo di un metodo computazionale per la previsione della capacità di adesione delle vernici."

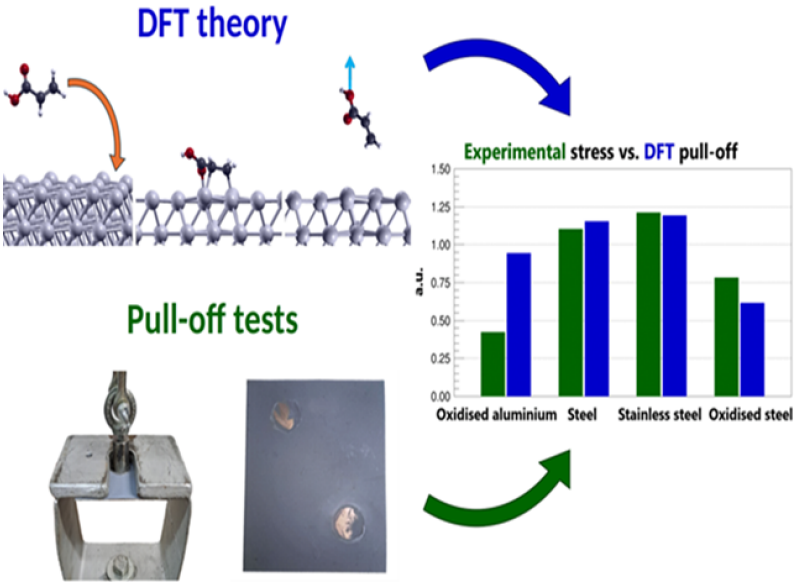


Fig. 1: Abstract grafico dell'attività

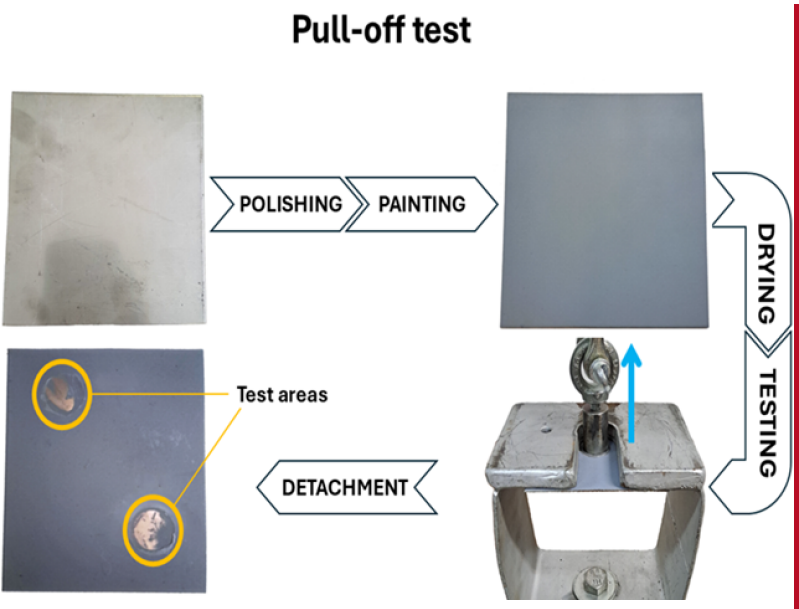


Fig. 2: Rappresentazione Test Eseguiti

Description

Il primo passaggio del processo di modellazione dell'adesione della vernice al substrato è il calcolo dell'energia di assorbimento di una molecola di *binder* della vernice (l'acido acrilico, nel caso specifico del progetto in esame) sulle superfici di interesse. In particolare, nel progetto in esame sono state utilizzate superfici metalliche e ossidate: alluminio, ossido di alluminio, ferro, ematite, goethite e superfici rappresentative dell'acciaio e acciaio inossidabile (ovvero superfici di ferro con il dopaggio/sostituzione di un atomo di carbonio, cromo o nichel). Il calcolo dell'energia di assorbimento è effettuato tramite l'utilizzo del software *Xsorb*, sviluppato dal gruppo di ricerca della Prof.ssa Righi dell'Università di Bologna, il quale identifica automaticamente la configurazione ottimale di assorbimento. Il secondo passaggio del processo di modellazione consiste nella simulazione software di un esperimento di pull-off a partire dalla configurazione ottimale di assorbimento. Durante la simulazione, la molecola viene tirata dal substrato applicando uno sforzo tensile, fino al distacco della molecola. Al termine della simulazione, si ottiene la forza di pull-off massima, ossia quella necessaria al distacco della molecola. Se si eseguono simulazioni con diverse molecole e substrati, è possibile predire la combinazione dei due per cui si ha una maggiore adesione, prima di condurre prove empiriche.

Innovative aspects

La sinergia tra simulazioni computazionali e sperimentazione rappresenta, oggi, uno strumento strategico in numerosi ambiti della ricerca applicata, come la catalisi o la tribologia. L'integrazione di questi approcci consente di chiarire i meccanismi atomistici che determinano il comportamento macroscopico dei materiali, facilitando l'ottimizzazione dei processi produttivi e lo sviluppo mirato di nuovi additivi nei settori citati, con un risparmio di tempo e risorse utilizzate.
Nel settore delle vernici, tuttavia, tale approccio non era ancora stato utilizzato. Il progetto ha quindi mirato a colmare questo vuoto, introducendo l'utilizzo combinato di simulazioni quantomeccaniche e prove sperimentali per analizzare e prevedere il comportamento adesivo dei sistemi vernice–substrato.
Questa innovazione apre la strada a un nuovo paradigma di progettazione basato sulla comprensione atomistica dei fenomeni di adesione.

Potential applications

L'approccio testato e definito nell'ambito di questo studio consente di progettare sistemi di rivestimento-substrato su misura, con la possibilità di valutarne e determinarne le caratteristiche desiderate, come protezione e durata del substrato, in funzione dell'applicazione che tale sistema dovrà avere.

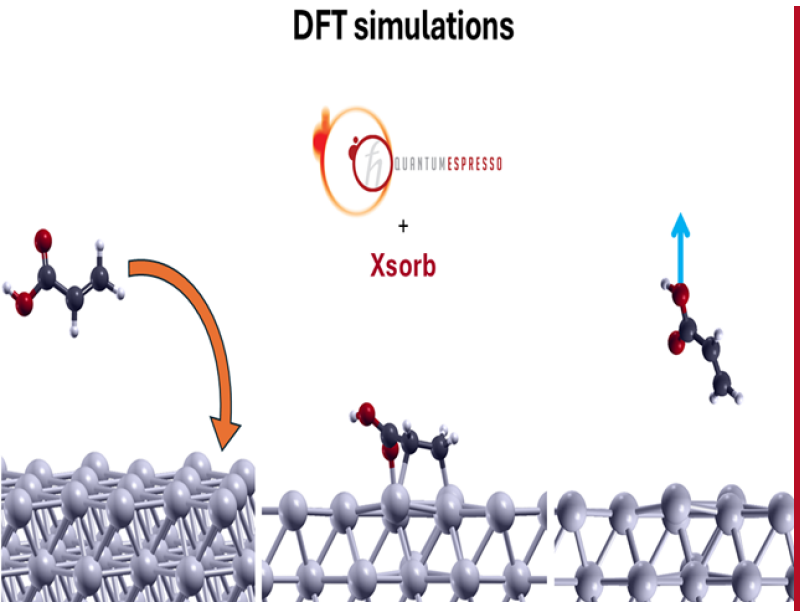


Fig. 3: Rappresentazione della simulazione software

Involved partners	Alma Mater Studiorum - Università di Bologna
Implementation Time	3 mesi/persona
Technology Readiness Level	TRL 8 - sistema completo e validato
Exploitation	Istituto Giordano ha contribuito allo sviluppo di un metodo computazionale, per predire l'adesione di componenti di vernici su diversi substrati, fornendo il suo know-how, le attrezzature ed il personale per la validazione sperimentale del metodo.

Application example

Studio dell'adesione di una vernice acrilica commerciale

È stata studiata l'adesione di una vernice acrilica commerciale su superfici di alluminio, acciaio, acciaio inox e ferro ossidato. Le simulazioni software hanno modellizzato la vernice come molecola di acido acrilico e i substrati come lastre costituite da piani atomici paralleli, con composizione chimica dei materiali reali. I calcoli hanno previsto la massima adesione sull'acciaio inox, seguita da acciaio, Al e Fe ossidato. Prove sperimentali di pull-off su provini verniciati hanno confermato lo stesso ordinamento, dimostrando il buon potere predittivo dell'approccio computazionale adottato.
Il risultato del progetto è stato quello di aver messo a punto un metodo computazionale per predire l'adesione di componenti di vernici su diversi substrati.

ISTITUTO GIORDANO

Fondato nel 1959, Istituto Giordano è un Ente Tecnico all'avanguardia nel testing di prodotto, nella ricerca e nella certificazione; grazie ai suoi 15 laboratori di prova, alle apparecchiature di cui dispone e alla competenza del proprio personale, è in grado di supportare le aziende nello svolgimento di attività di ricerca e sviluppo, in particolare nel settore dei prodotti da costruzione.
Riportiamo di seguito alcune delle attività che possono essere realizzate per lo sviluppo/ottimizzazione di nuovi prodotti:
• prove di durabilità, mediante opportuni processi di invecchiamento accelerato (es. cicli termici con o senza controllo dell'umidità, irraggiamento solare e UV, nebbia salina, vibrazioni, tenuta all'acqua e alle polveri, ecc.);
• prove di resistenza e di reazione al fuoco;
• prove di isolamento e di assorbimento acustico;
• determinazione della conduttività termica di materiali isolanti;
• verifica del rilascio di sostanze pericolose (es. COV: Composti Organici Volatili) e abbatti-mento degli inquinanti;
• prove di sicurezza elettrica e di compatibilità elettromagnetica;
• misura del rendimento termico di corpi scaldanti, stufe e caminetti a legna/pellet;
• progettazione e costruzione di prototipi in scala di laboratorio;
• caratterizzazione di prodotti di rivestimento (es. pitture, vernici, smalti, incapsulanti per l'amianto, intonaci, ...);
• controlli non distruttivi sia in campo industriale che civile.



Website https://www.giordano.it/3c-133-ricerca.php

Director NAZARIO GIORDANO

Published on 19/02/2026