



UNIONE EUROPEA
Fondo Sociale Europeo



Allegato 1)

CUP: E66C18001280001
Id. proposta: AIM1804097
linea di attività: attività 1)

Area di specializzazione SNSI: ENERGIA

1 contratto ricercatore a tempo determinato Linea 1

Settore concorsuale:	02/B1 Fisica sperimentale della materia
Dipartimento (sede operativa dell'attività di ricerca)	Dipartimento di Fisica e astronomia
Lingua straniera	inglese
Specifici requisiti di ammissione	Dottorato di ricerca nell'ambito della Fisica e/o delle Scienze dei materiali
Numero massimo di pubblicazioni che ciascun candidato può presentare:	12 (dodici). In caso di superamento del numero massimo, si avverte che la commissione prenderà in considerazione esclusivamente le prime 12 pubblicazioni inserite nell' "elenco sottoscritto delle pubblicazioni"
Periodo obbligatorio fuori sede	6 mesi
Descrizione delle attività previste:	
<p>Lo scopo di questo progetto è quello di studiare le proprietà di materiali nanostrutturati da utilizzare come catalizzatori nelle reazioni di water-splitting e la loro successiva integrazione in celle foto-elettrochimiche ad alta efficienza.</p> <p>La reazione di water-splitting, come detto in precedenza, può essere suddivisa in due semi-reazioni: "oxygen evolution reaction" (da $2H_2O + hv$ a $4H^+ + O_2 + 4e^-$, OER), tipicamente al foto-anodo e di "hydrogen evolution reaction" (da $4H^+ + 4e^-$ a $2H_2$, HER) al catodo.</p> <p>I catalizzatori utilizzati per le reazioni di HER ed OER possono svolgere tre diversi ruoli chiave per migliorare sia l'attività che l'affidabilità dei foto-elettrodi:</p> <p>(i) abbassare l'energia di attivazione per singole reazioni di HER ed OER all'interfaccia con l'elettrodo. In particolare, la reazione OER è un processo di trasferimento a quattro-elettroni, accoppiato alla rimozione di quattro protoni da molecole d'acqua per formare un legame ossigeno-ossigeno. Questa semi-reazione è pertanto considerata lo step più impegnativo nell'intero processo di water-splitting.</p> <p>(ii) agevolare la separazione della carica foto-generata all'interfaccia elettrodo-catalizzatore, inibendo la ricombinazione ed aumentando l'efficienza delle reazioni di OER e HER.</p> <p>(iii) Ridurre i processi di foto-corrosione dell'elettrodo, rendendo più stabile il processo di water-splitting.</p> <p>Le attività relative a questo programma vedranno due fasi principali, all'interno delle quali si svilupperanno diversi obiettivi.</p> <p>Fase 1: Studio delle proprietà dei materiali. Questa fase sarà principalmente svolta all'interno dei laboratori del DFA e sarà focalizzata sullo studio dettagliato delle singole reazioni OER ed HER attraverso l'uso di materiali nanostrutturati depositati su elettrodi di base. Scopo della ricerca è infatti isolare le due semi-reazioni e studiarne per ognuno i fattori che influenzano maggiormente l'efficienza della reazione.</p> <p>Fase 2: Dai materiali ai dispositivi: Questa fase vedrà la selezione dei catalizzatori più efficienti studiati per le singole reazioni di HER ed OER e la loro integrazione in celle ibride PV-PEC e celle monolitiche PEC. In questa fase, particolare importanza ricopre la collaborazione e la sinergia con istituti di ricerca nazionali e internazionali e con le realtà industriali operanti, in particolar modo, nel territorio. Infatti, partner come l'istituto IMM-CNR e 3SUN (ENEL), presenti a Catania</p>	



UNIONE EUROPEA
Fondo Sociale Europeo



sono già partner in attività sul fotovoltaico (progetti regionali, nazionali e contratti di consulenza) e saranno coinvolti sin dalle fasi iniziali del progetto come collaboratori esterni e advisor industriali per il trasferimento di know-how tecnico-scientifico. Grazie agli accordi in essere, i ricercatori finanziati da questo progetto potranno inoltre svolgere attività di ricerca con accesso all'interno delle aziende e degli istituti di ricerca per lo sviluppo dei dispositivi prototipo.

All'interno delle due fasi appena descritte, si sviluppano i seguenti obiettivi principali:

Obiettivo 1: Sintesi e controllo di materiali nanostrutturati

L'attività dei catalizzatori è altamente dipendente dai metodi di sintesi utilizzati. Un aumento delle performance catalitiche è da ricercarsi innanzi tutto nella crescita ottimale di questi materiali attraverso il controllo della loro dimensione e struttura, e la scelta appropriata della giunzione all'interfaccia con l'elettrodo.

Questo obiettivo sarà perseguito principalmente durante la fase 1 del programma, utilizzando le tecniche attualmente disponibili all'interno dei laboratori del DFA di Catania, come magnetron-sputtering, atomic layer deposition, laser ablation, e chemical bath deposition. In particolare, verrà effettuata un'ampia deposizione di film sottili e compositi nanostrutturati dei materiali attualmente riconosciuti come maggiormente attivi nelle reazioni di OER (es. RuO₂, IrO₂, Ni, NiOx, NiCo, MnO) e HER (es. Pt, Pd,Cu, Cu₂O, NiS). Particolare attenzione sarà rivolta alla sintesi di materiali "heart-abundant" o leghe fra materiali nobili e materiali abbondanti, in modo da ridurre l'impatto economico dell'uso su larga scala di questi materiali.

Obiettivo 2: Caratterizzazione delle proprietà strutturali

Contemporaneamente alla sintesi dei materiali, un'altra attività portante sarà la caratterizzazione strutturale e delle proprietà chimico-fisiche.

Anche per questa attività, il DFA è dotato di numerosi laboratori con attrezzature all'avanguardia per la microscopia elettronica, spettroscopia Raman, diffrazione a raggi X, spettroscopia RBS, misure ottiche (foto ed elettroluminescenza, assorbimento) ed elettriche di varia natura. Ciò permetterà di ottenere una correlazione completa con i differenti processi e parametri di sintesi utilizzati ed ottimizzare la scelta dei materiali ed i processi di fabbricazione.

Obiettivo 3: Studio dei parametri che influenzano le performance di OER e HER

Un obiettivo fondamentale da conseguire durante le fasi 1 e 2 di questo progetto è lo studio di base del ruolo delle proprietà fisico-chimiche dei materiali nanostrutturati nelle reazioni di water-splitting. Per questo motivo sarà inizialmente effettuato un dettagliato studio sulle singole reazioni di OER e di HER, in modo da individuare i parametri che maggiormente influenzano le cinetiche delle due reazioni. Particolare attenzione sarà rivolta ai processi di ottimizzazione dello scambio di carica foto-generata e modifica delle proprietà all'interfaccia con l'elettrodo di supporto. A tale scopo saranno molto utili le conoscenze acquisite nell'ambito dell'energia solare grazie alle collaborazioni con i partner industriali e potranno essere utilizzati elettrodi nanostrutturati in grado di offrire sia una maggiore area superficiale su cui depositare i catalizzatori, che elevate efficienze di foto-assorbimento e centri di scambio di carica durante le cinetiche di OER ed HER.

Obiettivo 4: Modeling e simulazione

Una sistematica interpretazione teorica e simulazione su scala nanometrica delle reazioni di water-splitting rappresenta un passo indispensabile per lo sviluppo e l'integrazione dei materiali nanostrutturati in celle PEC su larga scala. A partire dall'interpretazione dei risultati sperimentali, ci si

avvarrà di un modello fisico, basato su simulazioni "finite element analysis", che possa riprodurre i fenomeni di foto-assorbimento e generazione di carica, nonché le cinetiche di passaggio di carica all'interfaccia tra nanostrutture ed elettrodo durante i processi di OER ed HER. Tale modello diventerebbe la piattaforma su cui validare i risultati ottenuti sulle singole reazioni di OER ed HER e su cui basare il successivo design ed ingegnerizzazione dei catalizzatori nanostrutturati ottimali per le reazioni di water-splitting in celle PEC.

Obiettivo 5: Design ed integrazione in celle PEC

Lo sviluppo di celle monolitiche per la produzione di combustibile solare è da considerarsi l'obiettivo finale di questo progetto e vedrà la piena collaborazione con gli enti di ricerca e partner industriali nel settore energetico. Nel dettaglio, attraverso il conseguimento dei precedenti obiettivi, saranno considerati i materiali che fungano da catalizzatori ottimali per le reazioni di HER ed OER. Tali materiali saranno inizialmente testati in celle ibride PV-PEC per testare l'efficienza totale di conversione di energia solare in idrogeno. Il successivo design di celle PEC monolitiche prototipo sarà



UNIONE EUROPEA
Fondo Sociale Europeo



valutato con i partner di ricerca ed industriali alla luce dei risultati conseguiti, cercando di gestire la moltitudine di processi simultanei relativi all'illuminazione e all'assorbimento della luce; separazione delle cariche fotogenerate; conduzione elettrica; trasporto molecolare; alimentazione e recupero del prodotto di reazione. Va sottolineato che il progetto perseguirà i principi orizzontali sia nella selezione degli eventuali ricercatori assegnati, che nella sostenibilità delle attività proposte.

Declaratoria 02/B1: FISICA SPERIMENTALE DELLA MATERIA

Il settore si interessa all'attività scientifica e didattico - formativa nel campo dello studio sperimentale dei fenomeni dinamici e termodinamici della materia in tutti gli stati di aggregazione, in condizioni normali ed estreme, e comprende le competenze atte alla trattazione delle proprietà di propagazione e interazione dei fotoni con i campi e con la materia. Comprende inoltre le competenze necessarie per investigare i principi di funzionamento della strumentazione atta al controllo e alla rivelazione dei fenomeni, alla produzione e alla rivelazione delle radiazioni, alla metrologia e alla trattazione dei dati sperimentali. Comprende le competenze necessarie allo sviluppo e al trasferimento delle conoscenze per le tecnologie innovative. Le competenze di questo settore riguardano anche la ricerca sperimentale nei campi della fisica atomica e molecolare, degli stati liquidi e solidi, degli stati diluiti e dei plasmi, della materia soffice, dei sistemi complessi, della scienza dei materiali e relativa tecnologia dal livello nanoscopico a quello macroscopico, nonché della fotonica, dell'ottica, dell'optoelettronica, dell'elettronica quantistica e dell'informazione quantistica. Il settore comprende anche le competenze necessarie allo studio della storia della fisica e allo sviluppo delle metodiche di insegnamento e di apprendimento della fisica. Le competenze didattiche di questo settore riguardano anche tutti gli aspetti istituzionali della fisica di base.