



**Richiesta per borsa di studio da attivare ai sensi di quanto
disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021**

Il sottoscritto Mauro Chinappi, associato in Fluidodinamica afferente al Dipartimento di Ingegneria Industriale, Interno 328 7468581 (cell) email mauro.chinappi@uniroma2.it

CHIEDE

l'attivazione di una borsa di studio di dottorato ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021. A tal fine comunica quanto segue:

La borsa sarà attivata sul seguente corso di dottorato accreditato per il XXXVII ciclo: Ingegneria Industriale

Area per la quale si presenta la richiesta (selezionare solo una delle due):

Innovazione

Green

Tipologia di cofinanziamento (pari ad euro 8000 una tantum):

Nome dell'Ente finanziatore pubblico o privato:

ELEMENTS SRL

Persona di Riferimento: Federico Thei

Telefono: +39 328 8899408

Email: fthei@elements-ic.com

Fondi di ricerca dipartimentali



Progetto di Ricerca (massimo 10.000 battute complessive spazi inclusi) che comprenda

Titolo

Analisi numerico/sperimentale del flusso di ioni in una membrana nanoporosa per la produzione di energia elettrica da gradiente salino

Descrizione del Progetto

La produzione di energia elettrica mondiale è ancora dominata dai combustibili fossili. Poiché questi combustibili sono responsabili delle emissioni di gas serra, è impellente sostituirli con fonti alternative che abbiano un impatto ridotto sull'ambiente. Una soluzione recentemente proposta è la conversione dell'energia libera di Gibbs associata al mescolamento di due fluidi con diversa salinità [1]. Tale forma di energia è disponibile ogni qual volta è presente un significativo gradiente salino, come ad esempio alla foce dei fiumi e, per questa ragione, in letteratura viene comunemente citata come una delle cosiddette "blue energies" [2].

In questa tesi di dottorato, verrà analizzata una specifica tecnologia per la produzione di energia elettrica da gradiente salino: la diffuso-osmosi attraverso nanopori [2]. Recenti sviluppi nella capacità di fabbricare in maniera controllata nanopori su membrane a stato solido (e.g. grafene, nitrato di silicio) hanno portato a realizzare in laboratorio sistemi con prestazioni molto promettenti [3]. Tuttavia, nell'ultimo anno è presente un acceso dibattito in letteratura sulla possibilità di scalare i risultati di laboratorio in sistemi reali [4].

L'obiettivo primario di questa tesi è sviluppare un sistema computazionale (validato sperimentalmente) per la rapida analisi delle prestazioni di membrane a nanoporo per diffuso-osmosi e analizzare quali parametri geometrici e chimici del nanoporo influenzino le prestazioni del sistema. Dal punto di vista modellistico, una delle sfide principali consiste nel fatto che la taglia nanometrica del sistema non giustifica l'utilizzo di strumenti computazionali usuali come, ad esempio, solutori commerciali agli elementi finiti. Difatti il diametro dei nanopori è spesso dell'ordine del nanometro, una scala alla quale la descrizione continua non risulta più appropriata. Al contempo, un approccio computazionale puramente atomistico (Dinamica Molecolare) non permetterebbe di esplorare rapidamente le varie condizioni operative. In questa tesi, si prevede di usare simulazioni atomistiche per comprendere gli aspetti fondamentali del trasporto diffuso-osmotico alla nanoscala e poi di trasferire questa conoscenza in modelli agli elementi finiti da implementare in codici in-house basati sulla libreria FEniCS [5].

La validazione di questi strumenti computazionali prevede una campagna sperimentale presso il nostro partner (Elements SRL) ed in collaborazione con



il gruppo di ricerca del Prof S. Balme (Montpellier) con il quale esiste da anni una collaborazione stabile nell'ambito dei fenomeni di trasporto in nanopori.

Obiettivi formativi

La formazione dello/a studente di dottorato verterà su quattro principali aree.

1) Modelli e simulazioni atomistiche. Saranno utilizzati codici open source largamente diffusi nella comunità scientifica (e.g. NAMD2 [6], GROMACS [7]). Tali codici richiederanno competenze di supercalcolo che lo/la studente acquisirà durante il dottorato. Tali competenze risultano utili in molti settori che vanno dalla biochimica computazionale alla nanotecnologia e quindi costituiscono un bagaglio metodologico facilmente spendibile al di fuori dello specifico settore di ricerca del presente percorso di dottorato.

2) Modelli continui e simulazioni agli elementi finiti. Lo/la studente svilupperà moduli di un codice agli elementi finiti già operativo nel gruppo di ricerca. Il codice si basa su una libreria open source (FEniCS [5]) largamente impiegata nella comunità scientifica. Dal confronto tra i risultati ottenuti con le simulazioni atomistiche e con le simulazioni al continuo, lo/la studente imparerà a valutare l'appropriatezza di un modello ridotto ed a sviluppare modelli più accurati.

3) Confronto con dati sperimentali. Nel periodo di ricerca presso i nostri partner, lo/la studente acquisirà le competenze per utilizzare gli strumenti di misura tipicamente impiegati nelle tecnologie a nanoporo. Queste tecniche sperimentali possono essere anche applicate in altri settori in cui i nanopori trovano impiego quali la desalinazione, i sistemi di analisi per biomolecole [8], il filtraggio [9].

4) Scalabilità e modelli ridotti. Lo/la studente imparerà ad utilizzare la conoscenza di base per contribuire a rispondere alle domande più attuali relative alla realizzabilità di sistemi su larga scala di sistemi di produzione di energia elettrica da gradiente salino basati su diffuso-osmosi come, ad esempio, la scalabilità su sistemi reali [4] e il trattamento delle incrostazioni (fouling).

Attività previste

Il progetto di articola in due fasi. Segue un elenco per punti delle principali attività.

A) Analisi a livello di singolo nanoporo



- A1) Sviluppo di un modello atomistico per l'analisi dei flussi di acqua e ioni in un nanoporo a stato solido. Effetto della geometria e della carica superficiale.
- A2) Integrazione di nuovi modelli continui in un codice agli elementi finiti e analisi dei flussi di acqua e ioni.
- A3) Validazione sperimentale dei risultati per singolo nanoporo (partner)
- A4) Definizione delle prestazioni di un sistema a singolo nanoporo

- B) Analisi di sistemi su scala reale (membrana porosa)
 - B1) Analisi computazionale dell'interazione tra pori vicini in una membrana e definizione delle configurazioni più promettenti
 - B2) Analisi sperimentale delle configurazioni emerse al passo B1 (partner)
 - B3) Sviluppo di approcci per ridurre/trattare il "fouling"

Attinenza del progetto all'area indicata

La conversione di energia da gradiente salino in energia elettrica rappresenta una potenziale fonte di energia pulita in quanto non vengono prodotti gas tossici né anidride carbonica. Nel caso il gradiente salino sia tra mare e fiumi, la fonte è rinnovabile. Inoltre, al contrario dell'eolico e del fotovoltaico, questa fonte può produrre energia continuamente, riducendo la necessità di sistemi di accumulo. L'energia da gradiente salino può essere estratta ogni qual volta è presente un gradiente di concentrazione salina, per questo, oltre alle foci dei fiumi, possibili applicazioni riguardano le soluzioni di salamoia che costituiscono prodotti di scarto di processi antropogenici (ad esempio, le saline). Inoltre, le conoscenze di base sviluppate in questo progetto, avranno impatto anche in altre tecnologie a nanoporo quali il filtraggio [9], la desalinazione e lo sviluppo di sensori miniaturizzati e riutilizzabili [8], tali tecnologie vanno ad impattare su altri obiettivi di sviluppo sostenibile.

Risultati attesi

In corrispondenza delle attività sopra previste sono attesi i seguenti risultati.

- A1) Comprensione del ruolo della geometria e della distribuzione di carica superficiale tramite simulazioni atomistiche. I risultati saranno proposti per la pubblicazione su riviste specializzate in fluidodinamica (e.g. Microfluidics and nanofluidics, PRF)



A2-A3) Proposta di un modello continuo che tenga conto delle correzioni di nanoscala emerse nel punto A1 e sua validazione sperimentale. In funzione della loro grado di innovazione, i risultati saranno proposti per la pubblicazione su riviste ad alto impatto (e.g. PNAS, ACSNano) o su riviste di settore (e.g. PRF).

A4) Calcolo delle prestazioni energetiche per specifici sistemi a nanoporo. I risultati saranno proposti per la pubblicazione su riviste specializzate in energia (e.g. Nano energy, Journal of Power Sources).

B1-B2) Comprensione dell'effetto dell'interazione tra pori vicini in una membrana reale tramite analisi computazionale e sperimentale. I risultati saranno proposti per la pubblicazione su riviste specializzate in energia (e.g. Nano energy, Journal of Power Sources).

B3) Nelle fasi finali del progetto, le metodologie sviluppate saranno applicate allo studio di altri fenomeni che riducono le prestazioni del sistema reale rispetto alle sue controparti in laboratorio. In particolare, analizzeremo l'interazione tra particelle e membrana e la conseguente formazione di incrostazioni (fouling). Ci aspettiamo che sia possibile ridurre questi fenomeni e/o attuare strategie per la pulizia delle membrane che sfruttino le caratteristiche del flusso nei nanopori (ad esempio elettro-osmosi [10]). Questi risultati potrebbero essere destinati a un brevetto.

Azienda pubblica o privata coinvolta nazionale o straniera in cui si prevede di far svolgere il periodo obbligatorio da 6 a 12 mesi previsto dal Decreto Ministeriale

L'azienda coinvolta è la Elements SRL (<https://elements-ic.com/about-us/>). Si tratta di un'azienda privata che si occupa dello sviluppo di strumentazione elettronica per le misure elettrochimiche alle pico e nano scale. La Elements SRL è specializzata nell'analisi di sistemi a nanoporo e sviluppa soluzioni personalizzate destinate ai laboratori di ricerca accademici e non. Oltre alla Elements SRL, il progetto prevede la collaborazione del gruppo di ricerca diretto da S. Balme (Università di Montpellier) che fornirà le conoscenze sperimentali necessarie al progetto e contribuirà alla realizzazione ed alla caratterizzazione delle membrane nelle fasi A3, B2 e B3.

Referenze

- [1] Logan, B. E., & Elimelech, M. (2012). Nature, 488(7411), 313-319.
- [2] Siria, A. et al (2017). Nature Reviews Chemistry, 1(11), 1-10.



- [3] Graf, M. et al. (2019). Joule, 3(6), 1549-1564.
- [4] Wang, Z. et al. (2021). Engineering (in press <https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.02.016>).
- [5] Alnæs, M. et al (2015). Archive of Numerical Software, 3(100).
- [6] Phillips, J. C. et al (2005). Journal of computational chemistry, 26(16), 1781-1802.
- [7] Van Der Spoel, D. et al. (2005). Journal of computational chemistry, 26(16), 1701-1718.
- [8] Chinappi, M., & Cecconi, F. (2018). Journal of Physics: Condensed Matter, 30(20), 204002.
- [9] Tu, Y. M. et al. (2020). Nature materials, 19(3), 347-354.
- [10] Chinappi, M. et al. (2020). ACS nano, 14(11), 15816-15828.

Firma