

**Workshop TriLaterale  
ITAE-IC-IPCF su H2**

**Report of Contributions**

Contribution ID: 1

Type: **not specified**

## Discussion and Conclusions

*Thursday, 25 January 2024 12:20 (5 minutes)*

Speakers: Dr. Onofrio Maragò (IPCF-CNR), Dr. Antonino Aricò (ITAE-CNR) and Dr. Cinzia Giannini (IC-CNR).

Contribution ID: 2

Type: **not specified**

## Welcome and intro IC, ITAE & IPCF

*Thursday, 25 January 2024 09:30 (15 minutes)*

**Presenters:** Dr GIANNINI, Cinzia (Director IC-CNR); Dr ARICÒ, Antonino (Director ITAE-CNR); Dr MARAGÒ, Onofrio (Director IPCF-CNR)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 3

Type: **not specified**

## **Sistemi di elettrolisi a membrana (PEM/AEM) per la produzione di idrogeno “green” da fonti rinnovabili**

*Thursday, 25 January 2024 09:45 (10 minutes)*

L'elettrolisi dell'acqua ottenuta da fonti rinnovabile è da considerarsi la principale tecnologia per la produzione di idrogeno “green”. La capacità di gestire rapidamente un carico intermittente rende questa soluzione ideale per il bilanciamento della rete.

Delle varie tecnologie, gli elettrolizzatori PEM/AEM (con membrana a scambio protonico/anionico) si adattano maggiormente all'utilizzo con le rinnovabili. Per ottenere l'applicazione su larga scala di questi sistemi, è necessaria una significativa riduzione dei costi di capitale garantendo comunque alte efficienze.

Al CNR ITAE si lavora sull'identificazione di soluzioni innovative a livello di materiali e componenti per elettrolisi PEM/AEM per aumentare prestazioni e durata mantenendo limitati i consumi energetici. Si promuovono elettrocatalizzatori per elettrolisi a membrana a scambio protonico/anionico di nuova concezione con una maggiore area superficiale e con elevate velocità di reazione.

**Presenter:** Dr SIRACUSANO, Stefania (ITAE-CNR)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 8

Type: **not specified**

## Sviluppo di materiali e componenti per celle a combustibile PEMFC e AEMFC

*Thursday, 25 January 2024 10:15 (10 minutes)*

I dispositivi elettrochimici per la conversione dell'energia, quali le celle a combustibile (Fuel Cell, FC) e gli elettrolizzatori (EL) stanno diventando sempre più elementi chiave per l'utilizzo delle fonti energetiche rinnovabili su larga scala. Tuttavia, lo sviluppo di questi sistemi FC ed EL è fortemente limitato dall'utilizzo di materie prime critiche (es. Platino e metalli del gruppo del Platino, PGM), dalle caratteristiche dell'elettrolita, e dai costi di produzione degli elettrodi e dei MEA. Questi problemi potrebbero essere risolti sviluppando assemblati membrana-elettrodo (MEA) ad alte prestazioni, con elevata stabilità e con costi più contenuti. Per fare ciò è possibile agire sia sullo sviluppo di materiali innovativi più economici, sia migliorando le procedure di realizzazione dei MEA, ottimizzandone le prestazioni e riducendo i costi di realizzazione. In particolare, per le PEMFC sono stati studiati MEA con maggiore stabilità e basso carico di Pt, ottimizzando i parametri di preparazione dell'inchiostro catalitico e i parametri di formazione del MEA. Inoltre, nell'ottica di un'economia circolare, che mira al riciclo dei materiali, si stanno valutando componenti provenienti dal recupero di MEA esausti. Negli ultimi anni, un interesse crescente è stato riscontrato nei sistemi che utilizzano come elettrolita una membrana polimerica a scambio alcalino (AEMFC). Ciò ha portato alla necessità di sviluppare e ottimizzare le strutture elettrodiche e i MEA che utilizzano questa tipologia di membrane. In particolare, sono state valutate diverse configurazioni di elettrodi (GDE o CCM); è stato ottimizzato l'inchiostro catalitico considerando le caratteristiche sia dei catalizzatori che degli ionomeri utilizzati; sono state ottimizzate le procedure di condizionamento dei MEA, sia in termini di scambio anionico che di attivazione elettrochimica.

**Presenter:** Dr GATTO, Irene (ITAE-CNR)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 16

Type: **not specified**

## **Sviluppo di materiali e componenti per celle fotoelettrochimiche tandem per la produzione di idrogeno**

*Thursday, 25 January 2024 09:55 (10 minutes)*

I principali ostacoli alla commercializzazione di celle fotoelettrochimiche per la produzione di idrogeno sono: bassa efficienza di conversione, materiali elettrodi costosi, rapida degradazione delle prestazioni e consumo di energia nella separazione dell'idrogeno dall'ossigeno e dal vapore acqueo nel flusso in uscita. Nell'ambito delle attività proposte, sono stati sviluppati materiali elettrodi: semiconduttore foto-anodico a base di  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  e semiconduttore foto-catodico a base di  $\text{CuOX}$ . Sono stati sviluppati co-catalizzatori, depositati sui due differenti semiconduttori, per promuovere l'evoluzione di ossigeno o idrogeno. I semiconduttori anodici sono stati sintetizzati e depositati su vetro conduttivo; quelli catodici su un supporto poroso ed idrofobico, così da permettere la produzione diretta di idrogeno secco direttamente in cella. Quest'ultimo substrato è stato individuato a seguito di diversi test di deposizione e successive misure di idrofobicità. Come elettrolita sono state utilizzate e caratterizzate membrane polimeriche a scambio anionico (Fumasep FAA3-50), che allo stesso tempo hanno permesso di separare, direttamente in cella, i prodotti di reazione (ossigeno e idrogeno). Sono stati sviluppati alcuni prototipi, per diverse aree attive, utilizzati come "housing" dell'assemblato membrana-elettrodi. La prova di funzionamento del dispositivo è stata fornita tramite caratterizzazioni elettrochimiche in cella e spettrometria di massa del prodotto di reazione foto-catodico.

**Presenter:** Dr TROCINO, Stefano (ITAE-CNR)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 18

Type: **not specified**

## Accumulo Idrogeno su matrici solide: dallo studio di nuovi materiali allo sviluppo di prototipi di tank in scala di laboratorio

*Thursday, 25 January 2024 10:05 (10 minutes)*

Uno dei principali ostacoli da superare affinché l'idrogeno possa diventare il vettore energetico del futuro è indubbiamente la possibilità di stoccarlo e trasportarlo in modo sicuro. L'obiettivo principale che si è prefissati è quello di sintetizzare un materiale abile a stoccare l'idrogeno in forma gassosa in condizioni non drastiche di temperatura e pressione. In termini di capacità di storage si tende ad arrivare almeno al 3-3.5wt% di stoccaggio H<sub>2</sub> a T<100°C e P<50bar. Le tipologie di materiali fin qui utilizzati hanno sempre apportato innovazioni in termini di costo, facile maneggevolezza, riciclabilità. Tra le tipologie sviluppate attualmente in studio presso l'ITAE ci sono materiali compositi costituiti da un ossido metallico ancorato ad una matrice polimerica aromatica funzionalizzata. In particolare, utilizzando questo materiale quale matrice assorbente, all'interno di un recente progetto PON, è stato sviluppato e caratterizzato un prototipo di bombola da 20l. Altre tipologie di materiali in studio sono: carboni attivati provenienti da scarti di origine vegetale quali alghe, legno, caffè, banana, nella quale struttura porosa finale si aggiunge un adatto catalizzatore metallico; lega bi-metallica a base di MgFe la cui presenza del Fe ha il compito di abbassare la forte energia di legame Mg-H e rendere quindi la lega utilizzabile a più moderate temperature; lega bi-metallica TiFe ottenuta da scarti da altre lavorazioni dopo purificazione; nella lega penta-metallica di tipo TiVZrHfNb, la cui elevata capacità di accumulo si scontra con l'elevato costo dei singoli metalli ed inoltre perché presenti tra i CRM, si vogliono sostituire alcuni metalli mantenendo inalterate le caratteristiche di stoccaggio; sintesi di grafene da pirolisi di PET utilizzando scarti di bottiglie in plastica; sintesi di film polimerici sottili abili a ricoprire e proteggere dalla passivazione la superficie di polveri metalliche sensibili (es. NaAlH<sub>4</sub>). Parte fondamentale di questo lavoro di ricerca è indubbiamente la caratterizzazione dei materiali dal punto di vista morfologico, cristallografico e sicuramente nella conoscenza delle capacità di accumulo e rilascio H<sub>2</sub>.

**Presenter:** Dr PEDICINI, Rolando (ITAE-CNR)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 21

Type: **not specified**

## **Biomateriali, biomasse e fotosintesi. La luce per produrre idrogeno**

*Thursday, 25 January 2024 11:20 (15 minutes)*

Batteri fotosintetici anossigenici (purple e green) sono in grado di produrre H<sub>2</sub> grazie al processo di fotofermentazione (FF) di composti organici rinvenienti da reflui e materie prime seconde dell'industria agro-alimentare e della sua filiera. Nell'ambito delle attività proposte sono state investigate hanno guardato ai parametri chimo-fisici dei terreni (soprattutto liquidi) incluso pH, salinità e conducibilità, COD, assorbimento e dimensione del materiale sospeso. La seconda indagine ha riguardato le diverse filiere relative alla provenienza dei reflui usati per la crescita microbica e in particolare quella della filiera di produzione della birra.

**Presenter:** Dr TROTTA, Massimo (CNR-IPCF)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 22

Type: **not specified**

## **Caratterizzazione strutturale di materiali per la produzione e lo stoccaggio dell'idrogeno tramite diffrazione di raggi X**

*Thursday, 25 January 2024 11:35 (15 minutes)*

Lo sviluppo di nuovi materiali non può prescindere dalla conoscenza dei meccanismi strutturali alla base delle loro funzionalità. Nel caso di catalizzatori di reazioni per la produzione di idrogeno e di materiali porosi per lo stoccaggio fisico e chimico dello stesso è di fondamentale importanza caratterizzare strutturalmente i materiali appena sintetizzati, dopo qualche mese, in condizioni operative e post-mortem. Gli esperimenti di diffrazione con i raggi X, in combinazione con approcci computazionali avanzati, consentono di ottenere informazioni circa la composizione del materiale in termini di fasi cristalline e l'ordine locale in caso di nanocristalli o quasi-amorfi. Esperimenti di caratterizzazione in situ o in operando condotti presso sorgenti di luce di sincrotrone, forniscono dati sull'evoluzione della microstruttura in funzione di stimoli esterni, fornendo evidenza diretta dei meccanismi operativi nel momento in cui si verificano. Saranno forniti esempi di applicazioni delle suddette tecniche a campioni realizzati nell'ambito dell'Accordo di Collaborazione ENEA-CNR.

**Presenter:** Dr CALIANDRO, Rocco (CNR-IC)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 23

Type: **not specified**

## **Microscopia a scansione con contrasto di scattering e assorbimento di raggi X per la caratterizzazione strutturale multiscala**

*Thursday, 25 January 2024 11:50 (15 minutes)*

La microscopia a raggi X in scansione consente l'imaging qualitativo e quantitativo sondando selettivamente proprietà differenti dei materiali in funzione del tipo di contrasto scelto. In particolare, dal punto di vista strutturale, il contrasto di scattering di raggi X a basso (SAXS) e alto (WAXS) angolo fornisce informazioni alla nanoscala e alla scala atomica, rispettivamente, ma può risentire significativamente del contributo di assorbimento degli oggetti in esame e/o della matrice in cui sono dispersi. D'altra parte, il contrasto di assorbimento consente l'imaging diretto e lo screening rapido dei campioni ma può essere spesso cieco nel caso di campioni di materia soffice con assorbimento basso o trascurabile. Entrambi i tipi di contrasto possono essere esaltati: il primo, analizzando l'intensità dei raggi X diffusi in specifici intervalli di angoli di scattering, o integrando tale intensità in specifiche regioni di interesse all'interno della microscopia acquisita sul campione; il secondo, applicando opportuni algoritmi a valle dell'acquisizione dei dati.

Per illustrare le potenzialità di tali tecniche e della strumentazione XMI-Lab con micro-sorgente ad alta brillantezza installata al CNR-IC di Bari, verrà presentato lo studio di nanocluster di CsPbBr<sub>3</sub>, e loro assemblati, mediante microscopia SAXS/WAXS con sorgente di laboratorio e PDF con sorgente di sincrotrone.

**Presenter:** Dr ALTAMURA, Davide (CNR-IC)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 24

Type: **not specified**

## Nanomateriali fotoattivi per la produzione foto(elettro)catalitica di idrogeno

*Thursday, 25 January 2024 11:05 (15 minutes)*

I nanomateriali fotocatalitici stanno ricevendo grande attenzione grazie alla loro potenziale applicazione in numerose applicazioni legata alla conversione dell'energia ed in particolare per la produzione foto(elettro)catalitica di idrogeno. Infatti, i materiali nanostrutturati sono caratterizzati da un elevato rapporto superficie-volume che porta ad un'elevata densità di siti attivi per l'adsorbimento e la catalisi e dalla possibilità di regolare il gap di banda e il potenziale redox in funzione della loro dimensione e forma. Sebbene i semiconduttori ad ampio band gap ( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{SnO}_2$ ) siano potenziali candidati per questi processi presentano il limite di poter essere attivati solo dalla luce UV, limitando così la frazione dello spettro solare utile al ~4%. Gli attuali sforzi nel campo della progettazione e sintesi di fotocatalizzatori mirano a migliorare la separazione di carica, inibire la ricombinazione dei portatori di carica e potenziare l'attività catalitica nella regione visibile. In questa presentazione verrà riportata una breve panoramica sui recenti progressi nella sintesi di nanocristalli colloidali fotoattivi e sulla loro applicazione per il risanamento ambientale e la protezione del patrimonio culturale. In particolare, nanocristalli di  $\text{TiO}_2$  (NC) sono stati preparati con controllo su dimensione, forma e chimica superficiale, anche con tecniche scalabili, e sono stati utilizzati come semi di nucleazione per promuovere la formazione di eterostrutture multifunzionali fotoattive e nanocompositi in grado di sfruttare la luce solare. Sono state anche sviluppati nanomateriali a base di  $\text{WO}_x$  e  $\text{CuS}_x$  in grado di estendere il range di lunghezze d'onda utili fino al vicino infrarosso.

**Presenter:** Dr COMPARELLI, Roberto (CNR-IPCF)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 25

Type: **not specified**

## **Celle a combustibile ad alcool diretto per applicazioni portati ed unità di potenza ausiliarie: sviluppo componentistica e valutazione delle prestazioni in cella singola e piccoli dispositivi prototipali**

*Thursday, 25 January 2024 10:25 (10 minutes)*

Tra le varie categorie di celle a combustibile, le celle a combustibile ad alcool diretto (DAFC), che lavorano a basse (ed intermedie) temperature (fino a 120-130°C) ed impiegano elettroliti protonici solidi, sono considerate dei sistemi adatti per la generazione di energia per applicazioni portatili, nonché per le unità di potenza ausiliarie (APU). Le DAFC utilizzano un combustibile liquido (la tecnologia più matura utilizza metanolo, ma si punta molto all'utilizzo di etanolo) per fornire energia continua, che le rende vantaggiose dal punto di vista dello stoccaggio e distribuzione del combustibile rispetto alle celle a combustibile alimentate ad idrogeno.

La presentazione illustrerà i principali componenti di questa tecnologia focalizzando l'attenzione sulle criticità e le potenziali soluzioni. Inoltre, verrà presentato lo sviluppo di piccoli prototipi e la loro caratterizzazione elettrochimica.

**Presenter:** Dr BAGLIO, Vincenzo (ITAE-CNR)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 26

Type: **not specified**

## Catalizzatori per la trasformazione e l'accumulo di energia

*Thursday, 25 January 2024 10:35 (10 minutes)*

Attualmente, i catalizzatori più attivi e utilizzati in celle a combustibile ed elettrolizzatori sono a base di catalizzatori di nanoparticelle di platino altamente dispersi. Tuttavia, per questi catalizzatori sono presenti diversi inconvenienti, come l'abbondanza terrestre limitata e, quindi, elevato costo, bassa tolleranza alla presenza di alcoli in DAFC o contaminanti e instabilità dovuta alla dissoluzione del Pt e all'ossidazione elettrochimica del supporto carbonioso. Il riciclaggio di assemblaggi elettrodi-membrana (MEA) a fine vita e l'estrazione dei metalli preziosi è il focus di alcuni progetti finanziati dalla comunità europea.

L'oggetto di questa talk sarà focalizzato sulla sintesi e l'investigazione di catalizzatori "green" derivante da metalli non nobili (M-N-C) per cercare di superare questi ostacoli per la commercializzazione, abbassando nettamente i costi dell'intera cella a combustibile. Un'alternativa "green" ai supporti carboniosi commerciali è rappresentata dalla trasformazione e potenziamento di scarti di biomasse per l'ottenimento di catalizzatori attivi sia per le reazioni di riduzione dell'ossigeno (FC, batterie), che per l'evoluzione di idrogeno (elettrolisi).

**Presenter:** Dr LO VECCHIO, Carmelo (ITAE-CNR)

**Session Classification:** Session

Contribution ID: 27

Type: **not specified**

## Sviluppo di membrane polimeriche a scambio ionico per applicazioni in dispositivi elettrochimici

*Thursday, 25 January 2024 10:45 (10 minutes)*

In questo periodo di transizione energetica, l'idrogeno viene progressivamente utilizzato per produrre energia elettrica nei settori stazionario (domestico e industriale), portatile e automobilistico. I principali vantaggi dell'utilizzo dell'idrogeno sono la conversione altamente efficiente in elettricità e viceversa. La combustione pulita dell'idrogeno offre una soluzione per il servizio di bilanciamento della rete per convertire il surplus di energia rinnovabile. I dispositivi basati su celle a combustibile sono considerati la fonte di energia più interessante per la loro elevata efficienza e basse emissioni mentre, tra i diversi metodi per la produzione di idrogeno "verde", l'elettrolisi dell'acqua rimane il più affidabile ed efficiente. Tutte queste tecnologie richiedono un componente principale basato su una membrana polimerica a scambio ionico (IEM) e la conduzione ionica è considerata il parametro fondamentale per la buona prestazione dei dispositivi. A seconda del tipo di gruppi ionici, le IEM sono ampiamente classificate in Proton Exchange Membrane (PEM) e Anion Exchange Membrane (AEM). Le IEM sono tipicamente composte da substrati idrofobici, gruppi funzionalizzati con ioni immobilizzati e contro-ioni mobili. I principali fenomeni di trasporto che si verificano all'interno di una IEM sono il trasporto di acqua e ioni, ed i due fenomeni sono strettamente correlati. Le membrane a scambio ionico sono realizzate considerando diverse strutture polimeriche e gruppi funzionali e vengono utilizzate in diversi dispositivi elettrochimici quali celle a combustibile ad elettrolita polimerico PEMFC e AEMFC, sistemi di purificazione elettrochimica dell'idrogeno, elettrolisi alcalina e co-elettrolisi.

**Presenter:** Dr CARBONE, Alessandra (ITAE-CNR)

**Session Classification:** Session