

<b>Struttura</b>	Centro H2-MORE
<b>GRITT</b>	Clean Hydrogen Applications
<b>Descrizione</b>	<p>Il gruppo si occupa di tematiche relative allo studio e sviluppo di nuovi materiali e processi e all'analisi di prodotto e processo per applicazioni nell'ambito dell'energia e dell'ambiente.</p> <p>Le competenze del team riguardano metodi statistici avanzati, analisi multivariata applicata a prodotti e processi, modellizzazione di sistemi ceramici avanzati, polimeri, materiali multifunzionali FGM (functionally graded materials), materiali bio-based (per esempio biomasse), materiali compositi e processi di fabbricazione avanzati. Vengono inoltre svolte attività di studio finalizzate alla valorizzazione dei rifiuti in ottica di economia circolare. Caratterizzazioni sperimentali e modeling numerico, dalla scala atomistica alla microscala, sono applicati per investigare le proprietà chimico fisiche, meccaniche e ottiche dei materiali. Il team, inoltre, fornisce supporto alla quantificazione degli impatti e dei benefici ambientali ed economici di materiali e processi mediante l'applicazione delle metodologie Life Cycle Assessment (LCA) e Life Cycle Costing (LCC). Viene fornito supporto agli iter di certificazione ambientale di prodotto e alle strategie di carbon neutrality.</p> <p>Viene inoltre svolta attività di ricerca computazionale basata sullo sviluppo e applicazione di metodi di calcolo a principi primi per lo studio, a livello atomistico, delle proprietà strutturali, elettroniche, ottiche e di trasporto di materiali di differente dimensionalità (in particolare elementi nanostrutturati, sistemi ibridi, sistemi vetrosi ed elettroliti) per applicazioni nel campo del fotovoltaico, della fotocatalisi (con particolare attenzione alla produzione di idrogeno verde) dell'optoelettronica e delle batterie. Tali analisi vengono combinate con l'utilizzo di metodi semiempirici, di dinamica molecolare e metodi a multiscale per prevedere le proprietà fondamentali di sistemi di dimensioni realistiche.</p> <p>Il team si occupa inoltre di efficienza energetica di processi e prodotti industriali, di sviluppo di soluzioni per la cogenerazione civile ed industriale, e per la movimentazione delle merci, analisi di rendimento, consumi e fattibilità di sistemi energetici innovativi (celle a combustibile, biomasse, celle elettrolitiche, ...). Il gruppo ha inoltre competenze nell'ambito della valutazione energetica e di impatto ambientale di impianti di produzione, stoccaggio e distribuzione dell'idrogeno, con particolare riferimento alla progettazione e sviluppo di sistemi cogenerativi basati sulla combustione di metalli in acqua. In questo contesto, le metodologie di analisi utilizzate si basano sia sulla simulazione numerica dei processi (mediante approcci CFD o a parametri concentrati e distribuiti) che sullo sviluppo di prototipi da laboratorio per la validazione concettuale dei sistemi analizzati.</p>
<b>RGRITT</b>	Prof. Ivan Marri

<b>Sito Web di riferimento</b>	<a href="https://www.h2more.unimore.it/">https://www.h2more.unimore.it/</a>
<b>Attività e Servizi</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Studio e ottimizzazione di sistemi, multifunzionali e compositi per applicazioni nel campo dell'energia e dell'ambiente con particolare riferimento alle tecnologie H2 (membrane, elettrolizzatori) con analisi dei parametri industriali che influenzano le performance dei prodotti finali e sviluppo di nuove soluzioni di fabbricazione.</li> <li>● Utilizzo di metodologie computazionali atomistiche per lo studio e progettazione di nuovi materiali con caratteristiche strutturali, elettroniche, ottiche e di trasporto ottimizzate per applicazioni specifiche, con particolare riferimento ad applicazioni legate ai processi di fotocatalisi e produzione di idrogeno verde.</li> <li>● Sviluppo di processi di lavorazione avanzati ad alta efficienza energetica.</li> <li>● Studio dell'efficienza energetica di processi e prodotti industriali, con particolare riferimento allo studio di sistemi innovativi per la produzione di energia.</li> <li>● Studio e progettazione di impianti industriali per la produzione, stoccaggio e distribuzione dell'idrogeno.</li> <li>● Utilizzo di metodologie Life Cycle Assessment e Life Cycle Costing per l'assessment di sostenibilità ambientale ed economica, con particolare riferimento allo sviluppo di modelli di business circolari e agli strumenti di certificazione ambientale (es. EPD, Carbon Footprint)</li> </ul>
<b>Strumenti</b>	<p>Strumenti computazionali:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Software matematico statistico per analisi dati e ottimizzazione di esperimenti, processi produttivi e materiali.</li> <li>● Software scientifico per lo studio e progettazione di nuovi materiali su scala atomistica (Biovia, CASTEP, LAMMPS, DLPOLY, GULP, Gaussian, DeepMD, Quantum ESPRESSO, Yambo, VASP).</li> <li>● Software di calcolo SIEMENS, Simcenter, STAR CCM+ e AMESim, ALTAIR, NanoFluidX, OpenFoam, Open Modelica, Matlab.</li> <li>● Software di DoE DX13 Six Sigma e MODDE.</li> <li>● Software di calcolo SimaPro. Banche dati: Ecoinvent, Database LCA_Unimore, Agri-footprint, ELCD, LCA foo</li> <li>● Architetture HPC locali o presso la facility di calcolo CINECA, centro di riferimento internazionale per il calcolo ad alte prestazioni.</li> </ul> <p>Attrezzature di laboratorio:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Termocamere IR</li> <li>● Strumenti per l'analisi della composizione dei gas da gassificazione/pirolisi</li> <li>● Sistema di lavorazione e processo ad impulsi ultracorti per micro- e nano-lavorazioni</li> <li>● Accesso al CIGS dell'Università di Modena e Reggio Emilia</li> </ul>

<b>Personale impegnato (inquadramento)</b>	<p>Prof. Ivan Marri, Prof.ssa Elena Degoli, Prof.ssa Alice Ruini, Prof.ssa Elisa Molinari, Prof.ssa Monia Montorsi, Prof. Luca Montorsi, Prof. Massimo Milani, Prof. Alfonso Pedone, Prof. Leonardo Orazi, Prof.ssa Anna Maria Ferrari, Prof. Roberto Rosa, Prof. Fabrizio Paltrinieri, Dr. Gabriele Discepoli, Dr. Matteo Venturelli.</p>
<b>Referenze (case history)</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Partecipazione al progetto "National Recovery and Resilience Plan - PNRR", Ecosystem For Sustainable Transition of Emilia-Romagna (ECOSISTER): CUP: E93C22001100001. Coinvolgimento nello SPOKE 2 "Clean energy production, storage and saving" e nello SPOKE 6 "Ecological transition based on HPC and Data Technology".</li> <li>-Partecipazione ai progetti Europei BIGMAP e BAT4EVER nell'ambito dell'iniziativa Battery 2030+.</li> <li>- Partecipazione al progetto "National Recovery and Resilience Plan - PNRR", Ecosystem For Sustainable Transition of Emilia-Romagna (ECOSISTER): CUP: E93C22001100001. Coinvolgimento nello SPOKE 1- WP2 "materials for agriculture and aquaculture 4.0, agrifood industry, and ecological packaging".</li> <li>-Partecipazione al progetto CoE MaX "Materials design at the exascale" HORIZON-EUROHPC-JU-2021-COE-01 (project 101093374).</li> <li>- Partecipazione all'HUB del Centro Nazionale PNRR "HPC and Quantum Computing" (Coordinamento di WP4 nello Spoke 7 "Materials and Molecular Systems").</li> <li>- Coordinamento WP1- Progetto POR FESR 2014-2020 Project Entitled CLIWAX "Phase Changing materials for Energy Harvesting in air conditioning".</li> <li>- Progetto H2020 MILEDI "Micro Quantum Dot-Light Emitting Diode and Organic Light Emitting Diode Direct Patterning".</li> <li>- Progetto MITE - MAINE -. Materiali Innovativi per Elettrolizzatori a valere sul piano nazionale di ripresa e resilienza (pnrr), missione 2 "rivoluzione verde e transizione ecologica", componente 2 "energia rinnovabile, idrogeno, rete e mobilità sostenibile", investimento 3.5 "ricerca e sviluppo sull'idrogeno", finanziato dall'unione europea – next generation eu a valere sul decreto del ministro della transizione ecologica del 23.12.2021, n. 545 articolo 1, comma 5, lettera b.</li> <li>- Progetto FIRB (prot. 2012rbfr1248ui) finanziato da mur. Titolo: nuove strategie computazionali multiscala per la progettazione di composti ibridi organico -inorganici foto e termo responsivi.</li> <li>- Progetto PRIN (prot. 2015xbz5ya_002) finanziato da mur. Titolo: toward quantum photovoltaic: ultrafast energy and charge transport in hybrid nanomaterials.</li> <li>- Progetto industriale finanziato da AGC JAPAN per lo sviluppo di metodi computazionali per lo studio di vetri ossidici per applicazioni tecnologiche.</li> <li>- Progetto industriale finanziato da schott glass per lo sviluppo di protocolli computazionali per lo studio di proprieta' termomeccaniche di vetri alluminosilicatici di interesse tecnologico.</li> <li>- Coordinamento e partecipazione a numerosi progetti di supercalcolo HPC (ad es PRACE, ISCRA@CINECA...)</li> </ul>

<b>Brevetti (se disponibile)</b>	
--------------------------------------	--