

Assegno di Ricerca

Titolo: Modellazione molecolare di polimeri semi-cristallini per applicazioni relative al trasporto e stoccaggio di idrogeno ad alta pressione (12 mesi)

L'assegnò di ricerca è bandito nell'ambito del Progetto "MuMPol - Modelling and Design of Multiphase Polymeric Materials for High Performance Applications Across Multiple Scales" finanziato dal Dutch Polymer Institute (DPI). Il lavoro da svolgere figura come un'estensione dell'attività di modellazione molecolare di trasporto di idrogeno in polimeri semi-cristallini, già avviata per il caso del Polietilene ad alta densità (HDPE), alla classe sperimentalmente più performante in termini di proprietà barriera e resistenza meccanica, ossia, poliammidi e poliaramidi. A tal proposito l'inizio dell'attività sarà dedicato alla scelta di un force field appropriato per tali sistemi complessi e alla sua validazione tramite un confronto con dati sperimentali ricavati da letteratura o ottenuti tramite una attività sperimentale dedicata.

La modellazione molecolare sarà poi rivolta al calcolo delle proprietà di trasporto di idrogeno ad alta pressione: solubilità, diffusività, e permeabilità. Il fine è di stimare le potenzialità dei diversi materiali per le applicazioni di interesse del progetto (trasporto/stoccaggio). In tal senso, verrà analizzata con particolare attenzione la dipendenza di tali proprietà dalla struttura chimica della poliammide in esame e dal grado di cristallinità della stessa. Lo scopo finale del progetto è infatti quello di ottenere delle correlazioni proprietà-struttura in grado di fornire delle linee guida utili all'ottimizzazione di tali materiali per lo stoccaggio e la distribuzione di idrogeno.

Un maggior dettaglio delle attività in cui sarà strutturato l'assegnò è riportato nel piano di attività sottostante.

Lo studio si svolgerà sotto la supervisione del professor Marco Giacinti Baschetti del Dipartimento di Ingegneria Civile, Chimica, Ambientale e dei Materiali.

PIANO di ATTIVITA'

Il piano delle attività previste durante il periodo dell'assegnò viene riportato di sotto completo di una definizione temporale delle attività e degli obiettivi intermedi. Resta inteso che l'assegnista dovrà comunque presentare un breve report mensile che renda conto dei progressi fatti e dei problemi incontrati durante lo sviluppo delle attività. Possibili modifiche al piano saranno possibili in relazione ad eventuali problemi o imprevisti incontrati nell'ambito dello sviluppo del progetto.

A. STATO dell'ARTE (mesi 1-2)

Analisi degli studi esistenti e redazione di un breve resoconto contenente lo stato dell'arte relativo alla modellazione molecolare di poliammidi/poliaramidi e dati sul trasporto di idrogeno in tali sistemi.

B. SELEZIONE e VALIDAZIONE force field (mesi 1-4)

Confronto tra i diversi force-fields in termini di capacità previsionale/sforzo computazionale richiesto tramite confronto di dati PVT disponibili per i polimeri di interesse. Selezione del force field ottimale (all-atom, united atom, hybrid) e validazione dello stesso tramite il confronto con un più ampio set di dati sperimentali.

