

# Bio-inspired PhotoElectroCatalytic NanoArchitectures for Energy Conversion and Storage

Il presente programma di ricerca è svolto nell'ambito del progetto "Bio-inspired PhotoElectroCatalytic NanoArchitectures for Energy Conversion and Storage - NANOARC", settore PE5, codice proposta 20228YFRNL - CUP J53D23008600006. NANOARC mira a combinare la riduzione della CO<sub>2</sub> e l'ossidazione dell'acqua con alte rese e utilizzando materiali a vita lunga e poco costosi.

L'obiettivo ultimo del progetto è sviluppare modelli e dispositivi elettrochimici altamente efficienti ed integrati per accoppiare la riduzione della CO<sub>2</sub> e l'ossidazione dell'acqua, in altre parole per la fotosintesi artificiale. L'innovazione tecnologica e scientifica del progetto è la progettazione e fabbricazione di una cella elettrolitica. La cella elettrolitica fabbricata garantirà l'evoluzione parallela di ossigeno all'anodo e la riduzione di CO<sub>2</sub> (assieme all'eventuale evoluzione di idrogeno) al catodo. Il Ricercatore avrà quindi l'obiettivo di realizzare tale dispositivo attraverso l'organizzazione in modo sinergico dei diversi componenti funzionali messi a disposizione all'interno del network. A tal scopo, il Ricercatore studierà dal punto di vista computazionale i sistemi complessi elettrocatalitici e inoltre verranno utilizzate tecniche sperimentali disponibili presso il Gruppo proponente o presso altri Laboratori coinvolti nel Progetto nazionale o ad esso esterni, attraverso opportune convenzioni di ricerca.

## Piano di formazione

Il piano di formazione prevede la realizzazione del suddetto dispositivo attraverso l'organizzazione in modo sinergico dei diversi componenti funzionali messi a disposizione all'interno del network. L'attività verrà sviluppata lungo due vie sperimentali principali strettamente interconnesse che avranno i seguenti obiettivi principali:

- 1) comprensione dei meccanismi del processo di "proton-coupled electron transfer" (PCET) relativo alla rottura del legame C-O e alla formazione dei legami C-C e C-H; modellizzazione dei catalizzatori e correlazione tra comportamento dei sistemi modello con i catalizzatori nanostrutturati reali;
- 2) studio del comportamento elettrochimico di catalizzatori in particolare per quanto riguarda nanoparticelle di ossidi metallici;
- 3) fabbricazione e caratterizzazione degli elettrodi;
- 4) sviluppo di strumenti analitici avanzati, da utilizzare in situ in condizioni elettrochimiche reali, finalizzati all'identificazione degli intermedi di reazione principali e al chiarimento dei meccanismi di reazione;
- 5) progettazione e costruzione delle celle elettrocatalitiche.

A tal scopo, il Ricercatore realizzerà la caratterizzazione elettrochimica dei vari componenti utilizzando le tecniche sperimentali disponibili presso il Gruppo proponente o presso altri Laboratori coinvolti nel Progetto nazionale o ad esso esterni, attraverso opportune convenzioni di ricerca.

## Obiettivi:

- 1) indagine dei catalizzatori in fase omogenea (mesi 1-6): l'assegnista utilizzerà procedure già in uso presso il Laboratorio di Elettrochimica per realizzare specifiche sonde per lo studio dell'efficienza catalitica con la determinazione di TON e TOF; verrà indagato il meccanismo di azione del catalizzatore nonché la sua stabilità;
- 2) fabbricazione di superfici elettrocatalitiche (mesi 4-6): In tale fase verranno realizzati i nanomateriali e i substrati nanostrutturati per la costruzione di prototipi di catalizzatori eterogenei. In particolare, l'attenzione verrà rivolta principalmente verso un approccio elettrochimico, con la costruzione di sensori amperometrici e basati sulla luminescenza elettrogenata per la caratterizzazione dei materiali elettrodici.

3) sviluppo di sistemi avanzati dotati di maggiore efficienza elettrocatalitica (mesi 6-12). Sulla base dei risultati delle precedenti fasi, realizzate nell'ambito del progetto e in linea con gli obiettivi in esso delineati, l'assegnista procederà a progettare e sviluppare la ricerca verso obiettivi di interesse applicativo.