

PROGETTO E PIANO DELLE ATTIVITÀ

❑ TITOLO DEL PROGETTO DI RICERCA:

❑ Interazioni H₂-minerali tramite simulazioni atomistiche

❑ TUTOR PROPONENTE:

Prof. Alberto VITALE BROVARONE, BiGeA

❑ BASE DI PARTENZA SCIENTIFICA ED OBIETTIVI

L'idrogeno molecolare è una soluzione energetica sostenibile per il futuro della società moderna. Dal punto di vista fisico-chimico, una parte sostanziale della ricerca e dell'innovazione sull'idrogeno in campo energetico trova un importante punto di incontro con le Geoscienze. L'idrogeno molecolare di origine industriale ha necessità di stoccaggio in reservoir geologici, e l'idrogeno naturale si forma e si accumula all'interno di rocce costituenti la crosta terrestre. La reattività tra idrogeno molecolare e minerali diventa quindi cruciale, sia dal punto di vista chimico (conversione dell'idrogeno in altre molecole, come metano, acqua, o composti dello zolfo), che dal punto di vista meccanico all'interno della crosta e dei singoli reservoirs (instabilità meccaniche legate a trasformazioni roccia-fluido). Il progetto FARE *Unconventional water forms from DRY hydrogeN and rocks* (DRYNK) ha lo scopo di investigare i processi di interazione tra idrogeno molecolare e minerali, al fine di comprendere la formazione di acqua e altri composti da reagenti anidri all'interno di contesti naturali.

Questo progetto nasce dalla collaborazione tra competenze geologiche (Prof. Vitale Brovarone, BiGeA) e fisiche (Prof.ssa Righi, DIFA) relative all'idrogeno molecolare, con lo scopo di investigare le sue interazioni o reazioni con diversi substrati minerali da un punto di vista fisico, chimico, mineralogico e meccanico. Lo studio beneficerà delle tecniche computazionali sviluppate dal gruppo della prof. Righi che permettono di simulare in modo realistico le reazioni chimiche che avvengono all'interfaccia tra due materiali a contatto in presenza di stress meccanici. Questo approccio permetterebbe di raggiungere risultati teorici quantitativi molto importanti per la comprensione dei processi investigati dal processo FARE "DRYNK".

❑ ARTICOLAZIONE DEL PROGETTO E TEMPI DI REALIZZAZIONE

L'attività di ricerca proposta ha una durata di 12 mesi. L'inizio dell'assegno è previsto entro dicembre 2025. In una prima parte, il lavoro prevede la costruzione di modelli atomistici realistici del sistema costituito dalle rocce interagenti con l'idrogeno, l'addestramento di potenziali machine learning con dati ab initio e l'esecuzione di simulazioni di dinamica molecolare nelle condizioni di pressione e temperatura presenti nella crosta terrestre.

In una seconda parte, i risultati ottenuti dovranno essere interpretati e preparati per la pubblicazione in articoli scientifici su riviste internazionali.

❑ PROGRAMMA FORMATIVO (O PIANO DI ATTIVITÀ) DELL'ASSEGNISTA

L'assegnista dovrà svolgere attività di ricerca computazionale basate sulla modellizzazione dei processi atomistici che accadono all'interfaccia tra due materiali a contatto in condizioni estreme, quali quelle presenti tra le rocce della crosta terrestre. L'esecuzione di questa attività multidisciplinare prevede l'apprendimento e utilizzo di conoscenze di geofisica, fisica, chimica, informatica e scienza dei materiali. Parte di queste attività verranno svolte presso i locali del Dipartimento di Fisica e Astronomia (DIFA) dell'Università di Bologna.

❑ TITLE OF THE RESEARCH PROJECT:

❑ **Atomistic simulations of H₂-mineral interactions**

❑ TUTOR:

Prof. Alberto VITALE BROVARONE, BiGeA

❑ BACKGROUND AND OBJECTIVES

Molecular hydrogen is a sustainable energy solution for the future of modern society. From a physicochemical perspective, a substantial part of hydrogen energy research and innovation finds an important intersection with the Geosciences. Molecular hydrogen of industrial origin needs storage in geological reservoirs, and natural hydrogen forms and accumulates within rocks constituting the Earth's crust. Thus, the reactivity between molecular hydrogen and minerals becomes crucial, both chemically (conversion of hydrogen to other molecules, such as methane, water, or sulfur compounds) and mechanically within the crust and individual reservoirs (mechanical instabilities related to rock-fluid transformations). The FARE Unconventional water forms from DRY hydrogen and rocks (DRYNK) project aims to investigate the interaction processes between molecular hydrogen and minerals in order to understand the formation of water and other compounds from anhydrous reactants within natural settings.

This project stems from the collaboration between geological (Prof. Vitale Brovarone, BiGeA) and physical (Prof. Righi, DIFA) scientific research related to molecular hydrogen, with the aim of investigating its interactions or reactions with different mineral substrates from a physical, chemical, mineralogical and mechanical point of view. The study will benefit from computational techniques developed by the group of the

❑ WORKPLAN

The proposed research activity has a duration of 12 months. The start of the grant is expected by December 2025. In a first part, the work involves building realistic atomistic models of the system consisting of hydrogen-interacting rocks, training potential machine learning with ab initio data, and performing molecular dynamics simulations under the pressure and temperature conditions present in the Earth's crust.

In a second part, the results obtained are to be interpreted and prepared for publication in scientific papers in international journals.

❑ PLAN OF THE ACTIVITIES

The fellow will be expected to perform computational research based on modeling the atomistic processes that occur at the interface between two materials in contact under extreme conditions, such as those found between rocks in the Earth's crust. Performing this multidisciplinary activity involves learning and using knowledge from geophysics, physics, chemistry, computer science and materials science. Part of these activities will be carried out at the Department of Physics and Astronomy (DIFA) of the University of Bologna.