UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI BARI
ALDO MORO

ALLEGATO 1

IDEA PROGETTUALE

CODICE SELEZIONE R1078/2015

DIPARTIMENTO	Dipartimento di Chimica
SSD	CHIM/03 - CHIMICA GENERALE E INORGANICA
AREA SSD	Area 03 - Scienze chimiche
NOME PROGETTO	MESH (Molecular excitation in storage of hydrogen) Eccitazione molecolare nello stoccaggio di idrogeno: cinetica e nuovi materiali di immagazzinamento
IDEA PROGETTUALE (in italiano)	L'utilizzo dell'idrogeno come combustibile per i mezzi di trasporto è un'accattivante proposta nell'ambito della cosiddetta economia dell'idrogeno. Infatti, l'emissione di CO2 sarebbe ridotta, permettendo una maggiore ecosostenibilità delle attività antropogeniche; inoltre la dipendenza per l'approvvigionamento di combustibile diminuirebbe drasticamente. Tale proposta, avanzata da qualche decennio, continua a porre interessanti sfide riguardanti la realizzazione di un serbatoio a bordo di veicoli che sia al contempo sicuro, leggero, piccolo, economico e ricaricabile in poco tempo. Nel presente progetto si propone l'analisi e la simulazione della cinetica di stoccaggio, di estrazione e di diffusione delle molecole e degli atomi di H in materiali solidi e liquidi con metodi state-of-the-art; i risultati ottenuti verranno utilizzati per valutare le migliori condizioni di impiego di materiali innovativi per lo stoccaggio dell'H. In particolare si intende implementare un modello di riferimento di simulazione al computer dell'immagazzinamento di H2 che tenga conto del ruolo di stati eccitati molecolari. Diversi materiali verranno studiati come possibili candidati (composti intermetallici, idruri, liquidi organici, nanotubi), in conformità con quanto già esistente nella pratica industriale ovvero proponendo materiali alternativi. Ci si varrà dell'esperienza del proponente nella cinetica delle specie a base di H e della simulazione di metalli nanostrutturati ingegneristici.
DENOMINAZIONE	MESH - Molecular excitation in storage of hydrogen: kinetics and innovative materials
IDEA PROGETTUALE (in inglese)	The use of hydrogen as a fuel for transport is an attractive topic in the context of the so-called " hydrogen economy". In fact, in such a scenario, CO2 emissions would be reduced, allowing for greater sustainability of anthropogenic activities; moreover, the dependence for the supply of fuel would drastically decrease. This idea has been developed since few decades but still continues to pose interesting challenges related to the design of a reservoir on board of vehicle that is both secure, lightweight, small, cheap and rechargeable in a short time. This project proposes the analysis and simulation of the kinetics of storage, extraction and diffusion of molecules and H atoms in solid and liquid materials with state-of-the-art methods, and the results will be used to evaluate the best conditions for the use of innovative materials for H storage. In particular, we intend to implement a reference model for computer simulation of storage of H2 which takes into account the role of molecular excited states. Different materials will be studied as possible candidates (intermetallic compounds, hydrides, organic liquids, nanotubes) in accordance with the existing practice in industrial applications or proposing alternative materials. The experience of the proposer in the kinetics of the species based on H and on the simulation of nanostructured metals engineering will be used.