

Accordo di Programma MiTE ENEA – Iniziativa Mission Innovation

AFFIDATARIO ENEA

Progetto IEMAP – Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per l'Energia (POA IEMAP)

Durata: 36 Mesi

Responsabile: Dott. Massimo Celino

RELAZIONE DI SINTESI ANNUALE

SAL n. 1 – Periodo attività: 12/05/2021 – 11/05/2022

Sommario

1	Introduzione	3
2	Descrizione generale delle attività	3
2.1	Linee di attività attive	3
2.2	Workpackage WP1: “IEMAP - Italian Energy Materials Acceleration Platform”	5
2.3	Workpackage WP2: “Materiali sostenibili per accumulo elettrochimico dell'energia”	6
2.4	Workpackage WP3: “Materiali per elettrolizzatori”	8
2.5	Workpackage WP4: “Materiali per fotovoltaico”	8
2.6	Attività di coordinamento tra i WP	9
3	Stato di avanzamento e livello di innovazione	10
3.1	ENEA	10
3.1.1	LA1.1	10
3.1.2	LA1.4	10
3.1.3	LA1.7	11
3.1.4	LA1.19	11
3.1.5	LA2.1	12
3.1.6	LA2.4	12
3.1.7	LA2.5	12
3.1.8	LA2.10	13

3.1.9	LA2.13	14
3.1.10	LA3.1	14
3.1.11	LA3.2	15
3.1.12	LA4.1	16
3.1.13	LA4.4	17
3.2	CNR	17
3.2.1	LA3.4	17
3.2.2	LA3.7	19
3.2.3	LA3.10	20
3.2.4	LA3.11	21
3.2.5	LA3.12	21
3.2.6	LA3.13	22
3.2.7	LA4.10	23
3.2.8	LA4.13	24
3.2.9	LA4.16	28
3.3	IIT	28
3.3.1	LA1.10	28
3.3.2	LA1.13	29
3.3.3	LA1.16	29
3.4	RSE	30
3.4.1	LA4.7	30
4	Avanzamento economico	31
5	Piano di gestione e mitigazione dei rischi	32
5.1	WP1	32
5.2	WP2	34
5.3	WP3	36
5.4	WP4	38
6	Attività di disseminazione	41
6.1	Sito web di progetto	41
6.2	Partecipazione a congressi	42
6.3	Articoli su riviste internazionali	43
6.4	Disseminazione su siti web	44
6.5	Rassegna stampa	44

7 Ulteriori risposte ai commenti degli Esperti	44
7.1 Costi di personale	44
7.2 Costi di esercizio	49
7.3 Costi infrastruttura	49
7.4 Prodotti intermedi	49
8 Prodotti finali consegnati	50
9 ALLEGATO 1: Descrizione della pertinenza e della congruità della spesa per l'acquisizione dell'infrastruttura indicata nella linea di attività L.A. 3.1	51
9.1 Pertinenza: aspetti generali dell'infrastruttura ENEA	51
9.2 Specifica tecnica hardware e software di base della infrastruttura LE-100-ENEA	52
9.3 Congruità della Spesa	53

1 Introduzione

Il presente documento si riferisce allo stato di avanzamento delle attività di ricerca del progetto “Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per l’Energia” alla conclusione del primo anno in accordo ai contenuti del POA ed alle richieste degli Esperti Valutatori riportate nel documento “Relazione di valutazione ammissibilità Progetto IEMAP” del 16.11.2021.

Nel seguito si riassumono le prescrizioni degli Esperti:

- Predisposizione di piano di gestione e mitigazione dei rischi
- Descrizione del livello di innovazione previsto per ogni LA fornendo elementi oggettivi di riferimento rispetto allo stato dell’arte, dei target e dei benchmark.
- Giustificare i costi di personale più elevati per alcune linee di attività:
 - LA 1.14 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24) e LA 1.15 (Mese inizio: 25 Mese fine: 36) – resp. IIT
 - LA 2.5 (Mese inizio: 1 Mese fine: 12) e LA 2.7 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24) – resp. ENEA
 - LA 4.5 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24) resp. ENEA
 - LA 4.6 (Mese inizio: 25 Mese fine: 36) resp. ENEA
- Giustificare a consuntivo la pertinenza e la congruità delle spese per costi di esercizio per alcune linee di attività: LA4.13.

2 Descrizione generale delle attività

2.1 Linee di attività attive

Le attività di ricerca attive nel periodo di riferimento, con avvio al mese 1, sono riportate nella tabella sottostante. Sono evidenziate in verde le LA che, come previsto nel POA, sono concluse al mese 12. Sono

evidenziate in arancione le LA per le quali è stata richiesta una proroga sulla scadenza. Le rimanenti LA sono quelle che, come previsto, sono partite al mese 1 e termineranno le attività successivamente al primo SAL.

Ente	LA	Mese inizio	Mese fine	Mese inizio variante	Mese fine variante
ENEA	LA1.1	1	12	1	12
ENEA	LA1.4	1	12	1	12
ENEA	LA1.7	1	12	1	12
ENEA	LA1.19	1	12	1	12
ENEA	LA2.1	1	12	1	13
ENEA	LA2.4	1	12	1	24
ENEA	LA2.5	1	12	1	18
ENEA	LA2.10	1	12	1	18
ENEA	LA2.13	1	12	1	18
ENEA	LA3.1	1	36	1	36
ENEA	LA3.2	1	36	1	36
ENEA	LA4.1	1	12	1	12
ENEA	LA4.4	1	12	1	14

Ente	LA	Mese inizio	Mese fine	Mese inizio variante	Mese fine variante
CNR	LA3.4	1	12	1	12
CNR	LA3.7	1	12	1	12
CNR	LA3.10	1	36	1	36
CNR	LA3.11	1	12	1	12
CNR	LA3.12	1	24	1	24
CNR	LA3.13	1	36	1	36
CNR	LA4.10	1	12	1	16
CNR	LA4.13	1	12	1	12
CNR	LA4.16	1	12	1	12

Ente	LA	Mese inizio	Mese fine	Mese inizio variante	Mese fine variante
IIT	LA1.10	1	12	1	21
IIT	LA1.13	1	12	1	21
IIT	LA1.16	1	12	1	21

Ente	LA	Mese inizio	Mese fine	Mese inizio variante	Mese fine variante
RSE	LA4.7	1	12	1	14

In totale le LA attive nel primo anno sono 26 e 21 di queste avevano previsto concludere le attività entro il mese 12. Di queste 20, 11 hanno chiesto una proroga che va da 2 mesi fino a 12 mesi.

Le attività progettuali si sono svolte secondo le quattro tematiche individuate dai quattro workpackage (WP1 piattaforma IEMAP, WP2 materiali per accumulo elettrochimico, WP3 materiali per elettrolizzatori, WP4 materiali per il fotovoltaico). L’obiettivo generale del primo anno è stato di pianificare, avviare, acquisire infrastrutture e allestire i laboratori. Nel seguito si riporta brevemente lo stato dell’arte nei diversi WP.

2.2 Workpackage WP1: “IEMAP - Italian Energy Materials Acceleration Platform”

Il WP1 è dedicato principalmente allo sviluppo degli ambienti hardware e software che saranno il motore dell’intera piattaforma IEMAP. Le attività del WP1 hanno riguardato la predisposizione dell’infrastruttura su cui si appoggerà la piattaforma e le attività necessarie per un coordinamento degli altri WP, come meglio dettagliato nella sezione di questo rapporto dedicata al coordinamento tra i WP. In particolare la linea LA1.1 ha provveduto a individuare l’hardware necessario e a predisporlo per l’utilizzo degli utenti interni ed esterni al progetto. In particolare sono stati creati account, le aree di storage ed è stato installata la prima versione del workflow per la gestione dei processi. Inoltre è stata realizzata attività di formazione specifica per l’utilizzo degli strumenti informatici.

Nelle linee LA1.4 e LA1.5 è stata fatta una ricognizione degli strumenti disponibili per la gestione integrata dei dati e sono state di conseguenza fatte scelte architettoniche e di format dei dati. In maniera innovativa sono stati scelti strumenti e tecnologie che permetteranno una gestione dei dati in maniera non strutturata e flessibile. In accordo con le scelte fatte in queste linee di attività e alla disponibilità di una prima versione di workflow, nella LA1.19 è stato sviluppato un primo modello numerico per lo studio di materiali per le batterie che potesse sfruttare le potenzialità dell’infrastruttura.

Per quanto riguarda la linea di attività LA1.10, si è lavorato sulla piattaforma QMflows per migliorarne la generalizzabilità ed estensibilità dei pacchetti di QMflows e nano-QMflows. Tra i cambi più significativi si include la distribuzione dei pacchetti attraverso il Python Packaging Index (PyPi), che permette un’installazione enormemente semplificata, per esempio attraverso il comando pip install nano-qmflows. Inoltre sono stati migliorati il controllo qualità del software e l’abilità di installare binari pre-compilati. Varie nuovi moduli sono stati anche implementati in entrambi i pacchetti per soddisfare i requisiti richiesti nell’attività LA1.16.

In accordo con le linee precedenti per poterne sfruttare le potenzialità, nella LA1.13 è stata sviluppata la parte sperimentale dei sistemi, quindi la sintesi colloidale di nanoparticelle di InAs utilizzando tris(dimethylamino)arsine come precursore di arsenico. La peculiarità della sintesi sviluppata consiste nell’utilizzo di ZnCl₂ come additivo, il quale permette non solo di avere un buon controllo sulla dimensione dei nanocristalli e sulla loro distribuzione di taglia, ma anche di passivare i nanocristalli. Inoltre, per migliorarne le proprietà ottiche e la stabilità, i cristalli sono stati rivestiti di una shell di ZnSe ottenendo sistemi con emissione a ~890nm ed efficienza del 42%, un record per questo tipo di sistemi.

E’ stata sviluppata la sintesi colloidale di nanoparticelle di Cs₃ZnCl₅ ed introduzione di cationi quali Cu⁺ e Mn²⁺ al loro interno, formando le corrispondenti leghe. I cristalli di Cs₃ZnCl₅, inizialmente non luminescenti, emettono nel blu se miscelati con ioni Cu⁺, e debolmente nel verde se miscelati con Mn²⁺. La peculiarità dei cristalli in cui sono stati inseriti sia ioni di Cu⁺ che di Mn²⁺ è che mostrano una buona luminescenza nel verde dovuta, come rivelato dai nostri studi fotofisici, ad un trasferimento di energia da Cu a Mn.

Infine nella LA1.16, è stato sviluppato un database di molecole organiche e delle loro proprietà chimico-fisiche intrinseche (descrittori) che descrivono al meglio la chimica dei leganti organici alla superficie dei

nanocristalli colloidali, ovvero che tengono conto delle interazioni dei leganti (i) con il “core” del nanocristallo; (ii) tra di loro; e (iii) con il solvente. Per calcolare questi descrittori in modo rapido, efficiente e senza perdere in accuratezza in un tempo ragionevole (pochi giorni), sono stati sviluppati una serie di workflows basati sul linguaggio di programmazione Python. E’ adesso possibile scansionare questo database alla ricerca di molecole candidato con le caratteristiche desiderate che possano essere impiegate come leganti sulla superficie dei nanocristalli sviluppati nelle attività LA1.13 basate su esperimenti.

2.3 Workpackage WP2: “Materiali sostenibili per accumulo elettrochimico dell’energia”

Per quanto riguarda la LA2.1, è in corso la definizione dei dettagli tecnici del sistema di sputtering combinatorio automatizzato integrato con il sistema di caratterizzazione elettrochimica. Questa attività ha permesso di definire il dimensionamento dei componenti e l’architettura del sistema. Lo strumento proposto in fase di scrittura di progetto è completamente innovativo non essendone disponibili altri sul mercato.

La linea di attività LA2.4 prevede la valutazione di processi automatizzabili per la sintesi eco-sostenibile di sali fusi alla temperatura ambiente (denominati liquidi ionici) da impiegare come solventi alternativi (non volatili e non infiammabili) per incrementare il livello di sicurezza e affidabilità delle batterie litio e sodio. In particolare, sono stati valutati processi che: *i*) utilizzano acqua come unico solvente di lavorazione; *ii*) possano essere eseguiti mediante un unico stadio di reazione (denominato one-pot) in tempi molto più rapidi di quelli richiesti dalle procedure standard di sintesi; *iii*) auto-sostenibili (senza necessità di riscaldamento per il procedere del processo di sintesi). Un siffatto processo comporta un minore dispendio di energia che, unitamente al basso costo del solvente (acqua), produce un marcato abbattimento dei costi di produzione. Nel corso della 1^a annualità, è stato condotto uno studio bibliografico, eseguito sulla base dei dati riportati in letteratura dai principali laboratori accademici di ricerca focalizzati sulla ricerca e sviluppo dei liquidi ionici, riguardo le caratteristiche/peculiarità delle procedure/processi di sintesi più utilizzate. L’analisi dei dati raccolti ha evidenziato la fattibilità del processo one-pot che, inoltre, può essere impiegato per la preparazione di una larga varietà di famiglie di liquidi ionici (principalmente idrofobici ma anche idrofili). Successivamente, è stata positivamente valutata la effettiva possibilità di automazione del processo one-pot. data anche la relativa semplicità di esecuzione. (LA2.6: inizio nella 2^a annualità. LA2.8: inizio nella 3^a annualità).

Nella linea di attività LA2.5 la polvere di silicio, da impiegare come materiale anodico nelle batterie a ioni di Litio, è stata ottenuta a partire da frammenti di pannelli fotovoltaici dismessi mediante un processo di pirolisi in atmosfera di Argon a 600 °C per 1 ora. La polvere così ottenuta è stata sottoposta ad un processo di lavorazione che consiste in una sequenza opportunamente studiata di macinazioni e setaccature al fine di eliminare le componenti ossidate a bassa conducibilità elettrica e ridurre la polvere a dimensioni sub-micrometriche per ottenere un’elevata superficie specifica.

La linea di attività LA2.10 prevede lo sviluppo di:

- una metodologia per la caratterizzazione chimica di polveri catodiche sintetiche di batterie al litio di tipo NMC a ridotto contenuto di cobalto;
- procedure specifiche per la preparazione dei campioni da sottoporre alle analisi strumentali;
- definizione di un protocollo analitico per le specie chimiche di interesse.

Per svolgere queste attività era stato previsto l’acquisto di strumentazione analitica denominata E39-Spettrometri. A causa della situazione pandemica, non è stato possibile individuare fornitori in grado di

garantire la consegna della strumentazione nei tempi richiesti, con il conseguente ritardo di parte delle attività programmate, per le quali è stata richiesta una proroga. Ad oggi, l'attività di ricerca è stata rivolta all'analisi della letteratura disponibile per verificare lo stato dell'arte e gli orientamenti del settore/filiera delle batterie al litio, allo sviluppo di una strategia per la definizione dei campioni rappresentativi della matrice e della corrispondente metodologia per la caratterizzazione chimica del materiale catodico sintetizzato. Lo studio bibliografico condotto ha messo in luce un comune orientamento della comunità scientifica verso la ricerca di soluzioni tecnologiche per realizzare catodi a ridotto contenuto di cobalto. Approfondendo ulteriormente l'analisi della letteratura sulle soluzioni di accumulo a basso contenuto di cobalto è emerso che le tecnologie NMC (litio-nichel-manganese-cobalto) e NCA (litio-nichel-cobalto-ossido di alluminio), già ampiamente utilizzate nel settore del trasporto elettrico, oltre al vantaggio di contenere una minore quantità di cobalto, sembrano rappresentare una soluzione anche per le future sfide del settore dei dispositivi elettronici portatili, ovvero una progressiva miniaturizzazione delle batterie, che assicuri comunque elevate capacità e potenze conformi a rigorosi standard di sicurezza. In base a tali considerazioni è stato scelto di incentrare l'attività sperimentale sui catodi NMC in quanto rappresentativi di una tendenza di mercato attuale e futura.

La scelta della tipologia di catodo ha permesso di individuare gli elementi target (litio-nichel-manganese-cobalto) e, poiché all'interno della stessa categoria delle celle NMC è in corso una riduzione progressiva del contenuto di cobalto, sono stati definiti i rapporti reciproci di tali elementi in modo da sviluppare una soluzione di caratterizzazione (e successivamente di trattamento), in grado di far fronte a necessità immediate e future di trattamento delle celle esauste, rendendo esportabili le metodologie di lavoro individuate all'intera categoria dei catodi NMC.

In base agli elementi target scelti, ovvero i metalli litio, nichel, manganese e cobalto, è stata individuata quale tecnica analitica opportuna per la fase di analisi, la *spettroscopia ad emissione*, e in virtù di tale scelta metodologica, è stata sviluppata la *procedura di preparazione dei campioni da sottoporre alle analisi strumentali*.

Poiché la spettroscopia ad emissione richiede campioni in fase liquida, sono state svolte prove preliminari di lisciviazione che hanno permesso di individuare le condizioni ottimali per solubilizzare quantitativamente le matrici tenendo conto della differente speciazione chimica di alcuni elementi come il manganese.

La successiva fase di caratterizzazione chimica è strettamente legata all'acquisizione della strumentazione analitica dedicata, che ha subito ritardi conseguenti ai ritardi dei relativi stanzamenti.

Al fine di sviluppare una metodologia automatizzabile per la formulazione di inchiostri nella LA2.13 adatti alla stampa rotocalco, finalizzata alla produzione sostenibile di catodi per batterie Li-ione, sono state dapprima individuate le caratteristiche fondamentali delle formulazioni ovvero i componenti necessari, i loro intervalli di concentrazione, i materiali per le prove sperimentali, l'intervallo di concentrazione della formulazione complessiva, i possibili additivi e le loro quantità tali da non inficiare la funzionalità dello strato prodotto. Sulla base di tutte queste considerazioni, con i materiali selezionati, sono state preparate formulazioni preliminari che sono state parzialmente caratterizzate dal punto di vista chimico-fisico, raccogliendo una prima serie di dati utili allo sviluppo della metodologia oggetto di studio. Le problematiche connesse all'opportuna formulazione di inchiostri funzionali, compatibili alla stampa rotocalco, hanno anche reso necessario lo studio di opportuni protocolli di preparativa, investigando la possibilità di implementare tecniche di miscelazione e disgregazione, tenendo conto del loro effetto sui materiali coinvolti. Con alcuni degli inchiostri preparati sono state effettuate prove preliminari di stampa.

2.4 Workpackage WP3: “Materiali per elettrolizzatori”

Nelle LA3.1 e LA3.2 attraverso tecniche di sintesi di membrane per inversione di fase, sono stati realizzati materiali composti a base di strutture porose impregnate con ionomero anionico e confrontate con prodotti commerciali. Le problematiche di sintesi hanno fornito spunti interessanti per la valutazione e l’implementazione delle strutture per l’elettrofilatura. Le linee di attività ed i deliverable sono stati condizionati da ritardi nell’individuazione dei fornitori e nella consegna dei materiali che hanno rallentato il processo di sviluppo delle attività. Sono state comunque messe a punto diverse tecniche di analisi per la caratterizzazione delle tipologie di materiali in corso di produzione.

Per quanto riguarda il CNR, le attività relative alla LA3.4 hanno riguardato lo sviluppo di elettrocatalizzatori avanzati per elettrolizzatori di tipo PEM. Lo scopo è quello di migliorare la stabilità, ridurre il costo e aumentare le prestazioni dell’elettrolizzatore PEM. Le attività relative alla LA3.7 hanno riguardato l’integrazione in un unico dispositivo delle configurazioni fuel cell ed elettrolizzatore. Per tale scopo è necessario individuare elettro-catalizzatori che siano in grado di lavorare reversibilmente in condizioni stabili al pH e al potenziale di lavoro. La linea LA3.10 è iniziata con l’identificazione, la sintesi e la caratterizzazione di alcune composizioni perovskitiche considerate promettenti come elettrodi per l’elettroriduzione della CO₂, tra cui La_{0.5}Sr_{0.4}Fe_{0.4}Co_{0.2}Cu_{0.1}O_{3-δ} e La_{0.5}Sr_{0.4}Fe_{0.7}Co_{0.2}Cu_{0.1}O_{3-δ}.

Le attività delle linee LA3.11-LA3.13 hanno visto lo sviluppo di materiali per elettrolizzatori ceramici e lo sviluppo di metodi rapidi di sinterizzazione per ridurre tempi e costi di processing di formatura delle celle. A questo scopo sono iniziate le sintesi dei materiali e i primi test.

2.5 Workpackage WP4: “Materiali per fotovoltaico”

Nella LA4.1 si è dato avvio allo sviluppo di materiali appartenenti alla classe delle perovskiti ad alogenuri metallici e di processi realizzativi di celle solari planari di nuova generazione a base di tali materiali che risultino interessanti in ottica industriale. Parallelamente nella LA4.4 si è provveduto alla stesura delle specifiche tecniche del prototipo e degli altri strumenti da acquisire. Questo ha comportato un’indagine sia tecnico-scientifica che di mercato. Quest’indagine si è svolta sia attraverso esame documentale della letteratura tecnico-scientifica disponibile, sia tramite interviste con operatori del settore.

Nella LA4.7 è stato creato un database preliminare di parametri chimico fisici degli elementi III-IV-V della tavola periodica e loro leghe (D4.8). Sviluppo di un programma di calcolo in VBA per calcolare i relativi parametri chimico fisici dei diversi materiali in base alla loro composizione stechiometrica.

Per quanto riguarda il CNR, le attività svolte fino ad ora all’interno della LA4.10 hanno riguardato principalmente la realizzazione con diverse tecniche di film a base di semiconduttori ossidici da utilizzare all’elettrodo foto-ricaricabile. Differenti materiali a base di TiO₂, SnO₂ e WO₃ sono stati preparati e caratterizzati per questo scopo, determinandone fase cristallina, microstruttura e proprietà ottiche. Nell’ambito della LA4.13 sono stati sviluppati e caratterizzati diversi materiali che riguardano sia la parte di fotovoltaico di III generazione (perovskite alogena e organico) sia la parte di accumulo (supercapacitorie e batterie) che poi compongono un sistema fotovoltaico-accumulo a 3 terminali.

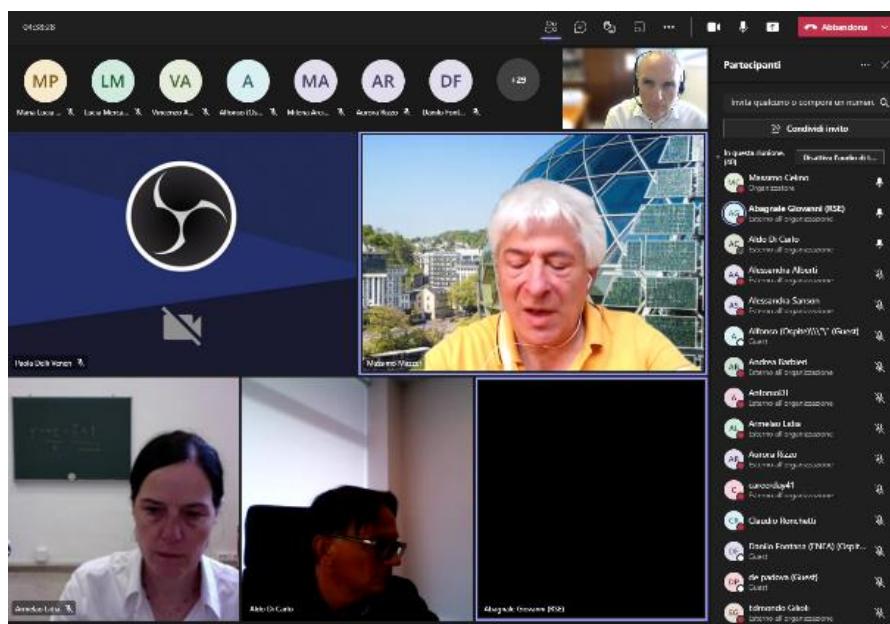
Nell'ambito della LA4.16 sono stati utilizzati strumenti per la modellizzazione top-down del funzionamento di un potenziale dispositivo ibrido ottenuto integrando una cella fotovoltaica ed un accumulatore in modo che abbiano terminali elettrici in comune.

2.6 Attività di coordinamento tra i WP

- **Workshop di coordinamento laboratori (14.09.2021)**

Giornata di presentazione dei laboratori coinvolti in IEMAP. Il workshop si è tenuto online e ha visto la partecipazione di 35 persone. Gli oratori sono stati 15 in rappresentanza dei diversi laboratori presenti nel progetto. Obiettivi del workshop:

- presentazione dei laboratori e delle loro attività
- prima discussione sulla gestione dei dati nei laboratori.



- **Workshop gestione dati (22.11.2021)**

Workshop finalizzato alla discussione sulla gestione dei dati nei diversi enti. Erano presenti alla riunione in rappresentanza dei loro rispettivi enti:

- CNR: Alberto Ferrario e Francesco Filippone
- IIT: Ivan Infante e Milena Arciniegas
- RSE: Giovanni Abagnale
- ENEA: Filippo Palombi, Claudio Ronchetti, Marco Puccini, Simone Giusepponi, Massimo Celino

Risultati del workshop: descrizione delle best practice di gestione dei dati sia nei laboratori sperimentali e computazionali. E' emerso che solo pochi laboratori sono in linea con le recenti prescrizioni sugli open data e l'adesione ai principi FAIR. Pianificazione delle attività successive.

- **Workshop di coordinamento tra gli enti (02.12.2021)**

Workshop di coordinamento tra gli enti per l'accesso all'infrastruttura di calcolo ENEA. ENEA ha presentato l'infrastruttura di calcolo e storage messa a disposizione per i laboratori del progetto IEMAP. Inoltre sono state presentate una serie di possibili modalità di accesso e di utilizzo dell'infrastruttura. Sono state esaminate le diverse modalità di lavoro dei partecipanti al progetto.

- **Repository dei documenti: enea.workplace.garr.it**

Per facilitare lo scambio delle informazioni all'interno del progetto, è stato attivato un archivio all'indirizzo enea.workplace.garr.it. In questo archivio sono presenti i documenti di progetto, articoli di letteratura e informazioni riguardanti i partecipanti al progetto. Ogni ente ha la possibilità di creare una propria area di lavoro per conservare dati e documenti. All'interno dell'archivio i documenti sono editabili ed è permessa la loro modifica in modalità condivisa e simultanea.

3 Stato di avanzamento e livello di innovazione

3.1 ENEA

3.1.1 LA1.1

Stato di avanzamento:

E' stata realizzata una analisi della possibile utenza all'interno del progetto e sono stati realizzati adeguati ambienti di programmazione, calcolo e storage. Sono stati resi disponibili accessi individuali ed è stato dato supporto e formazione agli utenti.

Livello di innovazione:

L'ambiente predisposto per il progetto non è un ambiente standard di programmazione e sottomissione dei codici di calcolo su infrastruttura di calcolo ad alte prestazioni ma deve tener conto della possibilità di accesso ad ambienti di storage dedicati sia su supporto HPC che DB. Inoltre devono essere a disposizione istanze per il setting di workflow, codici di modellistica numerica e di machine learning.

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D1.1 - Rapporto tecnico: "Istruzioni per accesso, l'autenticazione e utilizzo dell'infrastruttura CRESCO".

3.1.2 LA1.4

Stato di avanzamento:

Dopo una analisi dei possibili database disponibili sul mercato, è stata scelta la soluzione che permette di raccogliere, conservare e rendere disponibili i dati in maniera non strutturata. È stato realizzata una implementazione che contempla due diverse soluzioni. La prima si appoggia sul software mongoDB, la seconda sullo storage AFS/GPFS dell'infrastruttura CRESCO. La prima servirà a catalogare i dati, la seconda a conservare i dati che richiedono un grande spazio disco.

Livello di innovazione:

L'ambiente predisposto è caratterizzato dall'essere flessibile, non strutturato e organizzato su due livelli. La gestione complessiva e la sincronizzazione dei sistemi richiede soluzioni non standard e ancora oggi in fase di sperimentazione.

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D1.4 - Rapporto tecnico: "Descrizione dell'architettura del DB".

3.1.3 LA1.7

Stato di avanzamento:

È stata realizzata una analisi dello stato dell'arte nella gestione dei dati sia in progetti italiani che europei. A valle di questo si è realizzato un survey all'interno del progetto che ha permesso di comprendere quali sono i laboratori più attivi nel settore dati e quali sono le tipologie di dati più frequenti. L'elaborazione di queste informazioni ha reso possibile definire un format trasversale dei dati che verrà proposto nella seconda annualità a tutti i partecipanti al progetto.

Livello di innovazione:

Per il momento si stanno seguendo le procedure standard per la definizione di una gestione integrata dei dati all'interno dell'intero progetto.

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D1.7 - Rapporto tecnico: "Stato dell'arte nel settore dati per la scienza dei materiali".

3.1.4 LA1.19

Stato di avanzamento:

Sviluppo di un modello numerico atomistico per la simulazione dei materiali per le batterie. È stata realizzata una serie di simulazioni estremamente accurate per definire parametri e tecnologie di simulazione. È stato realizzato un workflow di simulazione per verificare la stabilità degli ambienti di programmazione e di gestione dati sviluppati nelle precedenti LA. Il modello numerico atomistico è stato utilizzato per la simulazione accurata di materiali innovativi per le batterie e il calcolo di grandezze chimico-fisiche di interesse.

Livello di innovazione:

Il modello numerico atomistico è innovativo rispetto a quanto disponibile in letteratura e permette il calcolo accurato di grandezze chimico-fisiche di interesse. È in corso la preparazione di un articolo scientifico che verrà presto sottomesso.

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D1.22 - Rapporto tecnico: "Modelli periodici di materiali catodici basati su ossidi metallici e definizione del protocollo di calcolo ab initio delle proprietà dei materiali catodici degli accumulatori".

3.1.5 LA2.1

Stato di avanzamento:

E' in corso la progettazione fine e la definizione dei dettagli tecnici del sistema di sputtering combinatorio automatizzato integrato con il sistema di caratterizzazione elettrochimica. Sono state prese decisioni sul dimensionamento dei componenti e sulla architettura del sistema

Livello di innovazione:

Il livello di innovazione è elevato dato che non esiste nella letteratura scientifica né risulta presente in commercio alcun riferimento a sistemi analoghi con caratteristiche simili.

3.1.6 LA2.4

Stato di avanzamento:

L'indagine bibliografica e l'analisi dei dati raccolti hanno evidenziato la fattibilità e la possibilità di automazione del processo one-pot.

Livello di innovazione:

Il processo di sintesi sviluppato presenta indubbi vantaggi da un punto di vista della sostenibilità poiché utilizza acqua come unico solvente (anziché composti organici volatili e infiammabili, comunemente impiegati). Inoltre, può essere eseguito mediante un unico stadio di reazione e in tempi molto più rapidi di quelli richiesti dalle procedure standard di sintesi. Infine, non necessita di riscaldamento per il procedere della reazione, comportando un minore dispendio di energia che, unitamente al basso costo del solvente (acqua), produce un marcato abbattimento dei costi di produzione.

3.1.7 LA2.5

Stato di avanzamento

Obiettivo della linea LA 2.5 è quello di recuperare polvere di silicio dai "solar chips", ovvero da frammenti di pannelli fotovoltaici forniti da ERION (ex-ECODOM), consorzio italiano leader nel trattamento dei rifiuti, ottenuti da un processo di pre-trattamento (*hammer milling*) di pannelli fotovoltaici a fine vita. Tale processo consiste nella macinazione dei pannelli una volta che il telaio in alluminio, i cavi e la scatola di giunzione sono stati rimossi. In questo modo, vengono ottenute tre diverse frazioni di materiali: frammenti vetrosi, agglomerati di EVA e una terza frazione, non vettrosa, formata da schegge contenenti il materiale otticamente attivo (silicio) incorporato in strati polimerici ("solar chips"). Nell'ambito della LA2.5, i solar chips sono stati sottoposti a due differenti processi di trattamento termico per allontanare la parte organica: carbonizzazione in aria e pirolisi in argon. La polvere così ottenuta è stata processata al fine di ottenere una polvere idonea ad essere utilizzata come materiale anodico. Il processo, consistente in una sequenza opportunamente studiata di macinazioni e setacciature, mira ad eliminare le componenti ossidate a bassa conducibilità elettrica e a ridurre la polvere a dimensioni sub-micrometriche per ottenere un'elevata superficie specifica. Parallelamente, al fine di ridurre gli scarti produttivi, è stata valutata la possibilità di utilizzare le frazioni di polveri di silicio, aventi granulometria non conforme all'utilizzo per la produzione di anodi, per differenti

applicazioni. In particolare sono stati fatti dei test preliminari di infiltrazione di preforme porose in SiC utilizzando direttamente il prodotto ottenuto dopo pirolisi dei solar chips.

Livello di innovazione

Negli ultimi anni la grafite naturale è stata largamente impiegata per realizzare l'anodo delle batterie a ioni di litio (LIB). Recentemente, la grafite è stata tuttavia annoverata tra i Critical Raw Material e pertanto se ne raccomanda la sua parziale o totale sostituzione con materiali non critici o recuperati da prodotti a fine vita. Diversi studi in letteratura hanno riportato la possibilità di realizzare l'anodo per le LIB utilizzando materiali a base di silicio, in particolare aventi granulometria nanometrica, al fine di sostituire completamente o parzialmente la grafite. Il nanosilicio in polvere è uno dei materiali più promettenti per sostituire la grafite naturale. La recente entrata del silicio nella lista dei materiali critici rende il recupero e il riciclo di tale materiale estremamente interessante. Il principale elemento di innovazione dell'attività finora svolta è dunque la messa a punto di un processo di recupero della polvere a base silicio da pannelli fotovoltaici a fine vita.

3.1.8 LA2.10

Stato di avanzamento

Gli studi preliminari e l'analisi della letteratura relativa alla realizzazione di batterie al litio, hanno messo in luce la tendenza della comunità scientifica verso lo sviluppo di tecnologie a ridotto uso di cobalto. Approfondendo ulteriormente l'analisi bibliografica sulle soluzioni tecnologiche di accumulo a basso contenuto di cobalto è emerso che le tecnologie NMC (litio-nichel-manganese-cobalto) e NCA (litio-nichel-cobalto-ossido di alluminio), già ampiamente utilizzate nel settore del trasporto elettrico, oltre al vantaggio di contenere una minore quantità di cobalto, sembrano rappresentare una soluzione anche per le future sfide del settore dei dispositivi elettronici portatili, ovvero una progressiva miniaturizzazione delle batterie, che assicuri comunque elevate capacità e potenze conformi a rigorosi standard di sicurezza.

In base a tali considerazioni è stato scelto di incentrare l'attività sperimentale sui catodi NMC in quanto rappresentativi di una tendenza di mercato attuale e futura. La scelta della tipologia di catodo ha permesso di individuare gli elementi target (litio-nichel-manganese-cobalto) e, poiché all'interno della stessa categoria delle celle NMC è in corso una riduzione progressiva del contenuto di cobalto, sono stati definiti i rapporti reciproci di tali elementi in modo da sviluppare una soluzione di caratterizzazione (e successivamente di trattamento), in grado di far fronte a necessità immediate e future di trattamento delle celle esauste, rendendo esportabili le metodologie di lavoro individuate all'intera categoria dei catodi NMC.

In base agli elementi target scelti, ovvero i metalli litio, nichel, manganese e cobalto, è stata individuata quale tecnica analitica opportuna per la fase di analisi, la *spettroscopia ad emissione*, e in virtù di tale scelta metodologica, è stata sviluppata la *procedura di preparazione dei campioni da sottoporre alle analisi strumentali*. Poiché la spettroscopia ad emissione esige campioni allo stato liquido, sono state svolte prove preliminari di lisciviazione che hanno permesso di individuare le condizioni ottimali per solubilizzare quantitativamente le matrici tenendo conto della differente speciazione chimica di alcuni elementi come il manganese.

Le prove hanno evidenziato che il processo di solubilizzazione risulta influenzato dalla speciazione chimica degli elementi metallici target selezionati, ed in particolare del manganese Mn(II) e Mn(IV) e che le

condizioni ottimali di solubilizzazione si ottengono con l’acqua regia.

Livello di innovazione

In riferimento all’intero percorso sperimentale previsto dalla linea di attività LA2.10-12, lo sviluppo di una metodica analitica efficace in grado di caratterizzare chimicamente i materiali catodici NMC destinati al trattamento idrometallurgico, rappresenta un’attività indispensabile sia nella fase di caratterizzazione dei catodi che nella definizione delle performance di recupero dei processi che verranno testati successivamente. Il punto di forza di tale metodo di caratterizzazione risiede nell’esportabilità della metodica sviluppata anche nel più ampio settore delle celle LIB.

Ogni fase del percorso di caratterizzazione proposto è progettato tenendo conto non solo del singolo caso delle polveri catodiche NMC ma della sua applicabilità all’intera categoria dei catodi realizzati per batterie al litio. Lo studio sulla presenza del contenuto d’acqua, la verifica degli effetti delle diverse speciazioni chimiche sul processo di solubilizzazione, come anche la scelta di impiegare bulk composti da materiale solido incoerente, condizione fisica tipicamente riscontrabile in RAEE pretrattati meccanicamente con processi di comminuzione, contribuiscono allo sviluppo di un approccio metodologico replicabile anche in altri contesti applicativi.

3.1.9 LA2.13

Stato di avanzamento:

Sono state studiate le caratteristiche fondamentali delle formulazioni di inchiostri compatibili con la stampa rotocalco per la produzione di catodi per batterie litio-ione. Sono stati selezionati i materiali da sperimentare: i materiali attivi, i carboni conduttori, i leganti a base acquosa ed i solventi. Con i materiali selezionati sono state effettuate formulazioni che sono state parzialmente caratterizzate dal punto di vista chimico-fisico, raccogliendo una prima serie di dati utili allo sviluppo della metodologia oggetto di studio. Con alcuni degli inchiostri preparati sono state effettuate prove preliminari di stampa. I risultati ottenuti sono parziali, motivo per cui è stata richiesta una proroga di sei mesi.

Livello di innovazione

La stampa rotocalco è un processo altamente innovativo per la produzione di componenti in ambito energetico, ed in particolar modo per la produzione di catodi per batterie Li-ione. Per questo motivo la letteratura in merito è quasi completamente assente. Lo stato dell’arte riporta di formulazioni per la preparazione da soluzione di catodi essenzialmente mediante l’impiego di tecniche di coating; tale letteratura ha rappresentato il punto di partenza per la formulazione degli inchiostri oggetto del nostro studio, in particolar modo per l’individuazione degli intervalli di composizione. Inoltre sono stati selezionati materiali attivi ben noti in letteratura, come ad esempio gli ossidi a base di metalli di transizione, al fine di valutare l’efficacia della metodologia per la produzione degli inchiostri in via di sviluppo.

3.1.10 LA3.1

La linea di attività LA 3.1 prevedeva la modellazione di strutture composite: matrice polimerica/porosa + ionomero anionico, per elettrolizzatori AEM attraverso la creazione di due modelli. Il primo un modello (in Comsol) computazionale TOP-DOWN agli elementi finiti che dalle specifiche della membrana e del processo

ne prevede le performance. Questo modello doveva essere costruito con la collaborazione di un contratto di consulenza con l’Università di Roma non ancora finalizzato.

La linea prevedeva anche la realizzazione di un set di modelli (in MINITAB) euristico-statistici che attraverso una metodologia DOE estraggano dai risultati sperimentali le funzioni performance-parametri di processo per ogni sistema materiale considerato. Questi modelli potranno essere utilizzati anche successivamente al progetto per istruire reti neurali o informare sistemi AI per produzioni automatizzate. In questo caso è stato possibile elaborare un primo rapporto intermedio sui metodi statistici di base che si prevede di utilizzare successivamente.

La linea di attività LA3.1 prevedeva infine l’acquisizione di una infrastruttura di fabbricazione e la sintesi di strutture composite che per motivi burocratici ed amministrativi è ancora in fase di elaborazione. Questo task è parallelo alla LA3.2 e complementare ad essa.

In particolare per la LA3.1, la Commissione ha rilevato che, anche a seguito della specifica integrazione richiesta, i costi indicati per l’acquisizione dell’infrastruttura non sono adeguatamente descritti, al fine di effettuare una completa valutazione della pertinenza e della congruenza degli stessi. La Commissione ammette il costo, ma prescrive che, in occasione del 1° SAL, sia fornita una dettagliata descrizione della pertinenza e della congruità della spesa.

In allegato viene fornito un annesso parte integrante in cui è descritta l’infrastruttura da realizzare e alcuni preventivi comparativi di macchinari di elettrofilatura industriale appartenenti a questa gamma che ne giustificano il costo di acquisizione.

Livello di innovazione

Il livello di innovazione di questa linea di attività rispetto allo stato dell’arte è di sicuro interesse in quanto i prodotti commerciali esistenti sul mercato non soddisfano pienamente le specifiche necessarie per questo tipo di materiali, sono costosi e non esiste una produzione nazionale in grado di soddisfare una eventuale richiesta interna. I materiali prodotti con metodi manuali mostrano di essere competitivi con quelli commerciali ma con un grado di riproducibilità non adeguato che lascia intravedere la necessità di implementare metodi di produzione automatizzata come quelli proposti.

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D3.1 Rapporto tecnico “Prodotto software GUI per il lancio del job”

3.1.11 LA3.2

La linea 3.2 prevede la definizione di un processo di produzione accelerato multi materiale tramite un macchinario prototipale per advanced manufacturing “informato” dai modelli matematici di LA3.1. Allo stato attuale è stato possibile soltanto effettuare procedure di preparazione in modalità manuale di materiali compositi matrice polimerica/porosa + ionomero anionico. Partendo da questi materiali è stato messo a punto lo screening chimico fisico per la caratterizzazione rapida delle loro prestazioni confrontandole con prodotti di tipo commerciale.

Livello di innovazione LA3.2: Le metodiche di preparazione attuali sono poco automatizzate e questo determina una scarsa riproducibilità dei prodotti. L’implementazione di una macchina di elettrofilatura

dovrebbe migliorare notevolmente questo aspetto. I materiali prodotti con metodi manuali mostrano di essere competitivi con quelli commerciali ma con un grado di riproducibilità non adeguato che lascia intravedere la necessità di implementare metodi di produzione automatizzata come quelli proposti.

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D3.4 Rapporto tecnico “Caratterizzazione elettrochimica e chimico-fisica di membrane composite”

3.1.12 LA4.1

Stato di avanzamento

Con la presente linea, conclusa a maggio 2022, si è dato avvio al tema, da portare avanti e completare nelle annualità seguenti nell’ambito delle due LA successive, dello sviluppo di materiali appartenenti alla classe delle perovskiti ad alogenuri metallici e di processi realizzativi di celle solari planari di nuova generazione a base di tali materiali che risultino interessanti in ottica industriale, tema da sviluppare interagendo con la costituenda piattaforma di progettazione accelerata dei materiali sviluppata nel WP1, a partire dal contributo alla costituzione di un database. Le attività sono state svolte presso il laboratorio TERIN-FSD-DIN del Centro ENEA di Portici. Sono stati studiati film sottili di perovskite ibrida organica-inorganica ad alogenuri di Pb a singolo catione (MAPI) e triplo-catione (CsFAMA) con alogeno misto (I e Br), fabbricati via spin coating, con bandgap intorno a 1.6 eV, di interesse per le applicazioni in celle solari a singola giunzione e in celle tandem. Parallelamente si è lavorato su diversi film da utilizzare come possibili strati di supporto da affiancare alla perovskite nelle architetture di cella solare planare. Sono stati quindi fabbricati e caratterizzati materiali da utilizzare come trasportatori selettivi di elettroni e di lacune (ETL e HTL rispettivamente) e/o strati buffer e possibili elettrodi finestra costituiti da film di ossidi trasparenti e conduttrivi (TCO), ottenuti a seconda dei casi con metodi chimici o fisici. In dettaglio i materiali studiati sono: SnO_2 ottenuto con diversi metodi e con introduzione di elementi droganti, Spiro-OMeTAD, PTAA, LiF, MoO_x , film sottili drogati di silicio e ossido di silicio a fase mista amorfa/nanocristallina, grafene da esfoliazione chimica, ITO di diversa tipologia, AZO e IZO. Con i materiali investigati sono stati realizzati prototipi di cella solare in perovskite di tipo planare con architettura *nip* costituita dalla sequenza glass/TCO/ETL/Perovskite/HTL/metal e sono state effettuate prime valutazioni sulle potenzialità dei materiali esaminati, in particolare in riferimento a layer ETL basati su SnO_2 . Le prestazioni migliori sono state ottenute utilizzando SnO_2 da nanoparticelle in celle con assorbitore in triplo-catione e spiro-OMeTAD come HTL. Si è osservata assenza di isteresi, FF di 75 - 80 % e Voc massima di 1.1 V, mentre le prove di droggaggio dell’ SnO_2 per il momento non hanno fornito miglioramenti. Ci si è anche soffermati su problematiche specifiche che possono insorgere nella caratterizzazione di celle solari in perovskite. Dati e metadati sono stati raccolti in un file Excel disponibile per il database in allestimento in WP1, con diverse schede dedicate alle classi di materiali investigate (assorbitori, trasportatori, TCO) in cui si è provveduto a selezionare delle opportune voci utili da catalogare. Tutti gli obiettivi programmati sono dunque stati raggiunti. I dettagli sono descritti nel report D4.1.

Livello di innovazione

Le attività avviate nel campo del fotovoltaico in perovskite sono in linea con gli studi internazionali del settore che mirano alla definizione di materiali, architetture e processi rilevanti in un’ottica industriale di medio/lungo termine. L’innovazione specifica di questa LA riguarda soprattutto l’approccio verso la selezione di materiali avanzati per l’applicazione fotovoltaica basato su lavoro sperimentale integrato e condivisione di

informazioni su diverse tipologie di materiali esposte in maniera aggregata, direttamente e facilmente fruibile (catalogate in file EXCEL disponibile per il database comune).

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D4.1 Rapporto tecnico: "Sperimentazione su film sottili di perovskiti alogenate, trasportatori di carica e TCO per applicazione in celle solari"

3.1.13 LA4.4

Stato di avanzamento

Per l'attività LA 4.4, si è provveduto alla stesura delle specifiche tecniche del prototipo e degli altri strumenti da acquisire. Questo ha comportato un'indagine sia tecnico-scientifica che di mercato. Quest'indagine si è svolta sia attraverso esame documentale della letteratura tecnico-scientifica disponibile, sia tramite interviste con operatori del settore. Grazie a quest'indagine si sono potuti definire i parametri e quindi redigere le specifiche di cui sopra, e definire un costo compatibile con il budget stanziato.

È stata inoltre avviata l'attività di reperimento dei pannelli dismessi da trattare nel prototipo. Tali pannelli dovranno essere analizzati preventivamente per poter risalire alla loro struttura compositiva, da mettere in relazione con i parametri di processo da utilizzare nel prototipo per consentire la delaminazione termomeccanica. È stata effettuata una prima indagine della composizione dei pannelli sul mercato.

Livello di innovazione

Il metodo proposto per il trattamento dei pannelli fotovoltaici a fine vita, che si basa su un brevetto ENEA, presenta indubbi vantaggi rispetto ai processi termici e meccanici attualmente impiegati. Esso è infatti più economico, in quanto meno energivoro, risulta meno impattante dal punto di vista ambientale ed infine consente di recuperare altri materiali come ad esempio backsheets ed EVA, oltre a quelli contenuti nella cella fotovoltaica, in quanto non è un metodo distruttivo.

Infine il metodo proposto, per la tipologia di adduzione del calore e la tecnica di rimozione degli strati, si mostra particolarmente adatto ad un'implementazione industriale con trattamento in continuo ed elevato grado di automazione.

3.2 CNR

3.2.1 LA3.4

Stato di Avanzamento

Le attività relative alla LA3.4 hanno riguardato lo sviluppo di elettrocatalizzatori avanzati per elettrolizzatori di tipo PEM. Lo scopo è quello di migliorare la stabilità, ridurre il costo e aumentare le prestazioni dell'elettrolizzatore PEM. Per la **reazione di evoluzione dell'ossigeno (OER)** sono stati sviluppati catalizzatori a base di IrRuO_x. Gli elettrocatalizzatori sono stati preparati attraverso una sintesi di complessazione con solfito. Questa procedura di sintesi ha permesso di raggiungere una dimensione dei cristalliti al di sotto dei 10 nm con un grado ridotto di sinterizzazione e con elevata area superficiale (165 m²/g). Sono stati sviluppati

supporti a base di subossidi di titanio con una adeguata capacità di favorire la dispersione della fase attiva del metallo nobile e che possono essere utilizzati per ridurre il carico di metallo ($\leq 0.5 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$ rispetto lo stato dell'arte di $1.5 - 2 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$) ed aumentare la sua attività catalitica. Parallelamente ai catalizzatori con ridotto carico di CRM, catalizzatori metallici a base di AgO_x e Ag disperso su subossidi di Ti sono stati preparati come catalizzatori privi di CRM per OER. Sono state riportate differenti procedure di sintesi per lo sviluppo di tali catalizzatori CRM free e la loro caratterizzazione chimico-fisica mediante XRD e EDX. Per la **reazione di evoluzione di idrogeno (HER)** sono stati sviluppati catalizzatori a base di Pt/C mediante reazione carbotermica con l'utilizzo di un carbone ad elevata area superficiale ($850 \text{ m}^2/\text{g}$). Anche in questo caso sono state effettuate le caratterizzazioni chimico-fisiche e si è osservata una dimensione dei cristalli di Pt di circa 3 nm ed una buona dispersione di platino nel KB mediante immagine TEM. L'utilizzo di un supporto a base di carbone con una così elevata area superficiale consentirà di ridurre il carico di metallo nobile senza troppo interferire sulle prestazioni in cella ($\leq 0.5 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$ rispetto lo stato dell'arte di $1 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$). Lo studio di catodi privi di metalli nobili prevedeva lo sviluppo di catalizzatori a base di solfuri di Ferro. L'attività è stata svolta con una sintesi a stato solido tra FeS e un carbone ad alta area superficiale (KB).

Livello di innovazione

Lo svantaggio principale dell'elettrolisi PEM è l'alto costo di capitale dovuto, gli elevati carichi di elettrocatalizzatori di metalli nobili, la membrana PFSA, i piatti bipolarari in titanio ed i loro coating.

Un altro svantaggio che provoca un aumento della tensione (perdita di efficienza) è la lenta reazione di evoluzione dell'ossigeno. I catalizzatori più attivi e stabili per la reazione di evoluzione dell'ossigeno (OER) negli elettrolizzatori PEM sono a base di ossidi di metalli nobili. RuO_2 è l'elettrocatalizzatore più intrinsecamente attivo ma è soggetto a dissoluzione se non legato all'interno di una soluzione solida con ossidi stabili. IrO_2 è il catalizzatore più comunemente utilizzato per l'OER grazie alla sua stabilità a lungo termine rispetto al RuO_2 puro. La stabilità di RuO_2 può essere notevolmente migliorata legandola con IrO_2 e la segregazione dell'iridio sulla superficie che è promossa da specifiche procedure di trattamenti termici del catalizzatore.

Per garantire un'ampia diffusione commerciale della tecnologia, i costi devono diminuire senza influire sulle prestazioni o sulla durata. Un ostacolo importante è la necessità di utilizzare i catalizzatori a base di metalli nobili sopra menzionati, quali Ir e Ru, ma anche il Pt che viene specificatamente utilizzato per la reazione di evoluzione di idrogeno (HER). All'interno di questa attività sono state previste due alternative pratiche: sostituire questi materiali con catalizzatori di metalli non nobili (CRM free) o ridurre il carico di metalli nobili a livelli sostenibili.

Lo scopo di questo primo anno è stato quello di sviluppare componenti di elettrolisi PEM caratterizzati da una significativa diminuzione del contenuto di metallo nobile e catalizzatori privi di metalli nobili. L'attività proseguirà con i test elettrochimici in cella singola per determinare l'attività catalitica dei differenti catalizzatori sviluppati e determinare la velocità del processo complessivo.

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D3.8 Rapporto tecnico "Sviluppo di catalizzatori e data-set delle caratteristiche chimico-fisiche"

3.2.2 LA3.7

Stato di Avanzamento

I protocolli e le procedure sviluppate hanno permesso di definire le condizioni di riferimento e le modalità di preparazione degli esperimenti necessari per lo svolgimento delle linea di attività. Questa prima fase è di particolare importanza in quanto permetterà di confrontare i risultati ottenuti in questa fase con i futuri studi scientifici.

Sono stati preparati quattro tipologie di catalizzatori con differenti quantità di carico catalitico e formulazione chimica. Gli esami strumentali (TEM e SEM) hanno evidenziato una struttura dei catalizzatori caratterizzata da particelle fini e ben disperse.

E' stata individuato un MEA con una composizione di catalizzatori capace di soddisfare i target in termini di prestazioni su piccola area (8 cm^2).

Gli studi fin qui condotti hanno inoltre permesso di selezionare una struttura del mezzo per la diffusione dei reagenti (PTL) sull'elettrodo in grado raggiungere gli obiettivi di prestazione stabiliti di $1.9 \text{ V} @ 1 \text{ A/cm}^2$ in modalità elettrolisi e $0.6 \text{ V} @ 0.2 \text{ A/cm}^2$ in modalità cella a combustibile. In dettaglio, test in cella singola hanno raggiunto $0.6 \text{ V} @ 0.5 \text{ A/cm}^2$ in modalità cella a combustibile e $1.7 \text{ V} @ 1 \text{ A/cm}^2$ in modalità elettrolisi. In termini di efficienza è stato ottenuto un miglioramento rispetto agli obiettivi del 11% in modalità elettrolisi e del 60 % in quello a cella a combustibile. L'efficienza di un ciclo completo di funzionamento (round-trip efficiency) alla corrente di 500 mA/cm^2 è stata di circa il 44%. L'efficienza è tra le più alte a queste densità di corrente rispetto allo stato dell'arte.

Livello di innovazione

Per integrare in un unico dispositivo entrambe le configurazioni (fuel cell ed elettrolizzatore) è necessario individuare elettro-catalizzatori che siano in grado di lavorare reversibilmente in condizioni stabili al pH e al potenziale di lavoro. L'attività proposta è indirizzata allo sviluppo delle formulazioni di catalizzatori (Pt/C per l'elettrodo negativo e IrRuOx per l'elettrodo positivo) con alte aree superficiali in grado di operare ad elevate densità di correnti e bassi sovra potenziali e quindi di ridurre i costi capitali.

Lo sviluppo di diffusori gas (gas diffusion layers-GDL) permetterà di assicurare una uniforme distribuzione dei reagenti e la rimozione dei prodotti di reazione sull'intera superficie elettrodica garantendo, un buon contatto elettrico tra collettore di corrente ed elettrodo.

Per l'elettrolizzatore rigenerativo sarà utilizzata una membrana polimerica perfluorosulfonica a scambio protonico come separatore dei compartimenti elettrodici. La membrana avrà un'elevata conducibilità ionica, sarà possibilmente composita per operare ad alta pressione.

La fabbricazione degli assemblati elettrodo-membrana (MEA) avverrà tramite spray-coating su membrana (CCM e hot pressing) per massimizzare l'interfaccia elettrodo-elettrolita (requisito necessario per ottenere elevate prestazioni) e facilitare l'automazione e lo scaling-up di questo componente. La tecnica spray verrà sviluppata con l'obiettivo di realizzare una efficace automazione del processo. Lo studio sarà rivolto verso l'identificazione delle proprietà che devono avere i materiali impiegati in funzione delle condizioni operative. Tale lavoro permetterà di stabilire un processo di interfacciamento con la piattaforma IEMAP sviluppata nell'ambito del progetto per ottenere un feed-back utile per ottimizzare materiali e processi. Inoltre, saranno definiti dei piani di prova caratterizzazione e validazione dei materiali sviluppati su cella singola fino a 5 cm^2 in laboratorio.

Deliverable

Vengono presentati con questo SAL i seguenti deliverable:

D3.11 Rapporto tecnico “Protocolli di prova e preparazione componenti e dispositivi (catalizzatori reversibili, membrane, assemblati elettrodi-membrane, celle singole)”

D3.12 Rapporto tecnico “Data-set delle caratteristiche elettrochimiche dei componenti sviluppati”

3.2.3 LA3.10

Stato di avanzamento

Nei primi dodici mesi del presente progetto, dopo un'attenta ricerca bibliografica, sono state individuate alcune composizioni perovskitiche del tipo $AA'BB'O_{3-\delta}$ considerate promettenti, in particolare, sono stati identificati due materiali a base di perovskite, con composizioni nominali sottostechiometriche, $La_{0.5}Sr_{0.4}Fe_{0.4}Co_{0.2}Cu_{0.1}O_{3-\delta}$ e $La_{0.5}Sr_{0.4}Fe_{0.7}Co_{0.2}Cu_{0.1}O_{3-\delta}$, che hanno caratteristiche interessanti come elettrodi per l'elettroriduzione della CO_2 . In entrambe le composizioni, la sottostechiometria del sito A favorisce la difettività di ossigeno e può favorire la conduzione ionica. Inoltre, nella prima composizione, $La_{0.5}Sr_{0.4}Fe_{0.4}Co_{0.2}Cu_{0.1}O_{3-\delta}$ il rapporto fra La, Sr e La e Fe intorno a 1 favorisce la formazione di una perovskite a strati del tipo $AA'BO_4$, dove gli strati di AO e A'O (Rock salt structure) sono alternati a strati di perovskite ABO_3 e questo potrebbe incrementare l'affinità del catodo con la CO_2 . Il rame in sostituzione di Fe al sito B ha un effetto positivo nelle proprietà elettrochimiche e catalitiche della perovskite. Per la preparazione delle polveri con queste composizioni nominali si è utilizzata la solution combustion synthesis utilizzando acido citrico, come riducente, agente chelante e stampo microstrutturale, e i nitrati dei cationi metallici come ossidanti. Inoltre, è stato preparato con il metodo Citrato-EDTA un primo catodo, con composizione base $La_{0.5}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-\delta}$ che è stato confrontato con un campione di riferimento $La_{0.5}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-\delta}$ (PRAXAIR). Tutti i materiali ottenuti sono stati caratterizzati tramite tecnica XRD ed affinamento strutturale Rietveld, inoltre, è stata effettuata una caratterizzazione morfologica preliminare di una polvere, sono state messe a punto le condizioni sperimentali per la caratterizzazione della riducibilità, dei campioni, tramite tecnica TPR. È stata sintetizzata una polvere di ossido di cerio drogato con samario con composizione $Ce0.8Sm0.2O_2$ (SDC: “Samaria doped with Ceria”), da usare come elettrolita, ed è stata preparata la prima semicella per testare le proprietà elettrochimiche di base (prove preliminari di riduzione dell'ossigeno).

E' in fase di creazione un apposito database tramite il programma "Microsoft Access" che, tramite tabelle e campi, consentirà di correlare facilmente le proprietà dei campioni, confrontando le condizioni operative e le caratterizzazioni effettuate.

Livello di innovazione: rispetto ai dati di letteratura, la sintesi di perovskiti con composizioni nominali sottostechiometriche, $La_{0.5}Sr_{0.4}Fe_{0.4}Co_{0.2}Cu_{0.1}O_{3-\delta}$ e $La_{0.5}Sr_{0.4}Fe_{0.7}Co_{0.2}Cu_{0.1}O_{3-\delta}$, per applicazioni nell'elettroriduzione della CO_2 rappresenta una soluzione innovativa in quanto, la sottostechiometria del sito A favorisce la difettività di ossigeno e può favorire la conduzione ionica. Inoltre, nella composizione $La_{0.5}Sr_{0.4}Fe_{0.4}Co_{0.2}Cu_{0.1}O_{3-\delta}$ il rapporto fra La, Sr e La e Fe intorno a 1 favorisce la formazione di una perovskite a strati del tipo $AA'BO_4$, dove gli strati di AO e A'O (Rock salt structure) sono alternati a strati di perovskite ABO_3 e questo potrebbe incrementare l'affinità del catodo con la CO_2 .

3.2.4 LA3.11

Stato di avanzamento

La linea di attività 3.11 è stata dedicata all'identificazione di materiali ceramici a conduzione protonica o mista per applicazioni in elettrolizzatori ceramici operanti a temperature intermedia (400-700°C) ed è stata strettamente interconnessa con le linee di attività 3.12 e 3.13. In particolare, una volta identificate delle classi di materiali da investigare, stata volta a studiare degli elettrodi efficienti che verranno caratterizzati nella linea 3.12, mentre in parallelo con la linea 3.13 è stata volta a sviluppare dei materiali elettrolitici ed elettrodici per le indagini di nuove tecniche rapide di sinterizzazione da sviluppare nella linea 3.13. A questo scopo in questa linea 3.11 sono stati testati anche diversi metodi di sintesi per valutare l'effetto della granulometria sull'efficacia dei metodi nuovi di processing.

Per quanto riguarda i materiali elettrolitici, per la sua ottima conducibilità protonica e stabilità in condizioni operative, si è optato per studiare il conduttore protonico $BaCe_{1-x-y}Zr_xY_yO_{3-d}$ come elettrolita. Sono state testate diverse composizioni, con due percentuali di Zr (20 e 30%), con 15% di Y come drogante e con o senza eccesso di bario. Inoltre, sono stati testati due metodi di sintesi per valutare l'effetto della granulometria della polvere sul processo di sinterizzazione: stato solido e sol-gel.

Per quanto riguarda i materiali elettrodici, l'attività si è concentrata su due tipologie di materiali, una perovskite a base di lantano, $La_{0.75}Sr_{0.25}Cr_{0.5}Mn_{0.5}O_{3-\delta}$ (LSCM), per la stabilità chimica in ambienti altamente riducenti, alle alte temperature e la tendenza a manifestare doppia conduttività ionica (H^+ e O^{2-}) in condizioni di medie temperature (300-800 °C), integrabile con una discreta conduttività elettronica a seconda dell'elemento sostituente nel sito B. Un altro materiale investigato è un ossido a tripla conduttività (H^+ , O^{2-} , e⁻) $Ba_{0.5}Gd_{0.8}La_{0.7}Co_2O_{6-\delta}$ (BGLC). LSCM è stato anche dimostrato avere una buona capacità catalitica nella conversione di CO_2/H_2O in syngas se impregnato con rutenio, aprendo la possibilità di utilizzo di queste celle anche alla conversione di CO_2 e quindi si è deciso di investigare anche questa parte.

Livello di innovazione

Gli aspetti ancora limitanti lo sviluppo di materiali per elettrolizzatori ceramici sono le ridotte efficienze e stabilità degli elettrodi e i costi dei sistemi di processing delle celle. A questo scopo altamente innovative sono le attività delle linee 3.11-3.13 che riguardano lo sviluppo di elettrodi più efficienti e al contempo lo sviluppo di metodi di sinterizzazione rapida e/o a più bassa temperatura (e il conseguente sviluppo di materiali idonei a tali metodi).

Deliverable

Viene presentato con questo SAL il seguente deliverable:

D3.17 Rapporto tecnico “Identificazione di materiali per elettrodi per PCE, scelta di materiali e dati da inviare a piattaforma IEMAP, scelta di tecniche di sintesi di elettrodi ed esiti di sintesi”.

3.2.5 LA3.12

Stato delle attività

Di concerto con le attività della LA3.11 si è proceduto alla caratterizzazione morfologica, strutturale e compositiva di elettroliti ed elettrodi sviluppati nella LA3.11.

Dato l'interesse innovativo anche nello sviluppo di elettrodi che permettano l'uso diretto di CO₂ in elettrolizzatori, e quindi la conversione di CO₂ umidificata a idrogeno e syngas, in questo primo anno è stato messo a punto un sistema di testing e i relativi protocolli di misura per la misura della conversione di CO₂ umidificata a syngas, che prevede una cella di misura che posso operare fino a 500°C, un sistema di gestione di flussi di gas e di umidificazione e un gascromatografo per l'analisi della conversione a syngas. Sono quindi in fase di misura i primi campioni realizzati nella linea 3.11. E' anche in corso la messa a punto di un sistema di misura delle conducibilità dei materiali investigati alle condizioni di esercizio.

Livello di innovazione

Gli aspetti ancora limitanti lo sviluppo di materiali per elettrolizzatori ceramici sono le ridotte efficienze e stabilità degli elettrodi e i costi dei sistemi di processing delle celle. A questo scopo altamente innovative sono le attività delle linee 3.11-3.13 che riguardano lo sviluppo di elettrodi più efficienti e al contempo lo sviluppo di metodi di sinterizzazione rapida e/o a più bassa temperatura (e il conseguente sviluppo di materiali idonei a tali metodi).

3.2.6 LA3.13

Stato delle attività

Le attività della LA 3.13 di questo primo anno hanno permesso di selezionare due tecniche di sintering per i materiali individuati nella LA 3.11. Il Cold Sintering permette il consolidamento di polveri attraverso la solubilizzazione di una minima parte delle polveri e la successiva precipitazione a bordo grano della parte in soluzione. Il processo comporta la pressatura uniaxiale in temperatura di polveri miscelate con minime percentuali di solvente, fino alla completa evaporazione di quest'ultimo. Ha permesso di sinterizzare polveri prodotte via sol-gel (nella LA3.11) di Ba_{1.1}Ce_{0.65}Zr_{0.20}Y_{0.15}O_{3-d} impiegando temperature attorno ai 200 °C e in tempi dell'ordine dei 30'. Tuttavia, delle precipitazioni di BaO hanno prodotto delle fratture nei pellet sinterizzati. Sono in corso i test di sintering di polveri prodotte senza eccesso di Ba.

La seconda tecnica individuata è stata l'Ultrafast High-temperature Sintering (UHS), una tecnica particolarmente rapida e pressurless che permette di sinterizzare molti materiali in tempi dell'ordine delle decine di secondi e con consumi di energia dell'ordine delle frazioni di Wh per la produzione di pellet su scala di laboratorio. Dopo un'accurata scelta dei parametri di pressatura per la produzione di pellet, basata sullo studio delle rugosità superficiali dei pellet prodotti, questi vengono inseriti in un idoneo setup per il trattamento termico. La stazione per l'UHS, sviluppata e realizzata nel corso di questo primo anno, consiste in una camera in flusso di Ar nella quale è inserito un riscaldatore costituito da due fogli di grafite che contengono il campione da sinterizzare. I due riscaldatori vengono rapidamente scaldati per effetto Joule e a loro volta scaldano il campione, principalmente per irraggiamento, con rampe di salita e di discesa della temperatura dell'ordine dei 10⁴-10⁵ °C/min. Sono state trattati pellet di diverse polveri di BCZY prodotte via sol-gel, con e senza eccesso di Ba e con differenti contenuti di Zr, ottenendo in alcuni casi pellet densi da

polveri senza eccesso di Ba con tempi di sinterizzazione dell'ordine della decina di secondi. L'ottimizzazione del processo e delle proprietà meccaniche dei ceramici densi ottenuti è in fase di sviluppo.

Livello di innovazione

Ad oggi nessuna delle due tecniche individuate e descritte sopra è stata impiegata per la produzione di questo materiale elettrolitico. L'uso di queste tecniche potrebbe ridurre sensibilmente i tempi, i costi e i consumi energetici di processi di formatura ceramica che tipicamente sono molto energivori, oltre a produrre materiali con caratteristiche funzionali all'impiego (ad esempio con nanostrutturazione).

3.2.7 LA4.10

Stato delle attività:

Le attività fino ad ora svolte all'interno della LA4.10 sono state focalizzate sullo studio di semiconduttori per la realizzazione del foto-elettrodo ricaricabile. In particolare, sono stati considerati per il momento TiO_2 , SnO_2 e WO_3 e di questi materiali sono stati realizzati film su substrati trasparenti conduttori (vetro ed FTO) tramite tecnica serigrafica. Per questo scopo sono stati utilizzati sia inchiostri commerciali sia preparati *ad-hoc* e ne sono state ottimizzate le condizioni di deposizione in modo da ottenere film con spessori paragonabili tra loro. Dopo trattamento termico di consolidamento e di ottenimento della fase desiderata, i campioni sono stati caratterizzati dal punto di vista strutturale (XRD), profilometrico, morfologico (FE-SEM) ed ottico mostrando caratteristiche idonee all'applicazione finale. Parallelamente, in questo periodo sono state avviate anche le attività relative allo studio di materiali da utilizzare per l'accumulo di cariche.

Sono stati prodotti fotoelettrodi mesoporosi di TiO_2 inglobando nella matrice nanotubi di carbonio a singola parete (SWCNT) variando la concentrazione con l'intento di migliorare il trasporto di carica. I film ottenuti sono stati caratterizzati dal punto di vista del trasporto elettrico con misure I-V di fotocondutibilità depositando due elettrodi di argento sul film mesoporoso illuminando con un simulatore solare (A.M. 1.5, 1 sole). A bassa concentrazione di SWCNT (0.04 wt%) non si apprezzano variazioni nella fotocondutibilità che invece aumenta di più di due ordini di grandezza a valori maggiori o uguali a 0.07 wt%.

Sono in corso le sintesi di ossidi nanocristallini tramite tecniche in soluzione quali sol-gel, precipitazione, approcci solvotermici e colloidali. In particolare, sono stati sintetizzati con alte rese di reazione, sia nanostrutture di TiO_2 che di SnO_2 , al variare della morfologia (nanorods o nanosfere). Inoltre, sono in progresso le attività sintetiche per la preparazione di WO_3 nanocristallino, mentre nanoparticelle di NiO in qualità di materiale capacitivo sono stati sintetizzate sia con approccio colloidale che per precipitazione. Di tali materiali sono in corso le caratterizzazioni morfologiche, ottiche e chimico-fisiche, in accordo con le attività programmate. Nei prossimi mesi di attività saranno valutate le proprietà ottiche e morfologiche di materiali composti ottenuti tramite layer by layer o tramite mixing tra nanostrutture fotoattive e ossidi capacitivi. I materiali nanostrutturati saranno a disposizione dei partner di progetto per la valutazione delle caratteristiche fotoelettrochimiche, in vista della preparazione di elettrodi fotoattivi.

Sono in fase di assemblaggio gli elettrodi composti carboniosi metal-free carbon-biopolymer con carboni attivati provenienti da scarti dell'industria alimentare e leganti biobased.

Durante il primo anno, inoltre, sulla base degli studi svolti in precedenza, è stata selezionata una serie di strutture di coloranti organici con le proprietà spettroscopiche ed elettrochimiche teoricamente più adatte per la fotosensibilizzazione di elettrodi a base di materiali semiconduttori inorganici. In particolare, sono stati selezionati i coloranti denominati **TTZ5**, **BTD-DTP1-2**, **RI114** e **BB2a**, caratterizzati dalla presenza di diverse unità eterocicliche nella loro struttura. Ove possibile, la sintesi dei coloranti è stata rielaborata grazie all'ottimizzazione di reazioni di *cross-coupling* per mezzo di arilazione diretta, allo scopo di ridurre il numero di *step* sintetici e di purificazione e massimizzare le rese dei prodotti finali, in modo da permettere la futura preparazione su larga scala del composto che mostrerà le migliori prestazioni. Le proprietà spettroscopiche ed elettrochimiche dei coloranti selezionati sono state completamente analizzate e messe a confronto tra loro, in modo da contribuire alla realizzazione di un primo database che permetta di correlare strutture, caratteristiche e performance dei materiali dedicati al progetto.

Livello di innovazione

La realizzazione di un elettrodo foto-ricaricabile (combinando insieme capacità di assorbire luce e immagazzinare cariche) rappresenta uno step fondamentale per lo sviluppo di sistemi a due terminali per l'accumulo di energia che riducono i componenti e la complessità di analoghi sistemi a 3 o 4 terminali. Un passaggio molto importante per raggiungere questo obiettivo è la realizzazione di strati di semiconduttori trasparenti e con le giuste proprietà morfologiche ed elettrochimiche. I materiali fino ad ora considerati hanno travato ampio spazio in altre tecnologie che sfruttano la luce solare ma devono ancora essere approfonditamente studiati per questo genere di applicazione.

Vista la richiesta di proroga al mese 16, verranno prodotti quindi con il prossimo SAL i seguenti deliverables:

- D4.18 Rapporto tecnico “Proprietà morfologico-funzionali dei materiali testati, in particolare: semiconduttori foto-attivi, per accumulo di cariche, elettroliti ed elettrodi di supporto”
- D4.19 Rapporto tecnico “Proprietà dei materiali utilizzati per la costruzione dell'elettrodo foto-ricaricabile”
- D4.20 Database “Sviluppo di un database con le caratteristiche e performance dei materiali foto-ricaricabili da utilizzare nei processi di machine learning della piattaforma”.

3.2.8 LA4.13

Stato delle attività

L'attività svolta durante il primo anno del progetto IEMAP per la linea di attività LA4.13 del WP4 ha riguardato l'analisi e lo screening di materiali per dispositivi fotovoltaici accoppiato a sistemi di accumulo in dispositivi a tre terminali.

Per quanto riguarda la cella fotovoltaica, il lavoro di ricerca è stato focalizzato allo studio di materiali per l'assorbitore in perovskite, all'ottimizzazione dell'architettura di cella ed allo sviluppo di materiali per il trasporto di carica, sia elettroni che lacune. Per quanto concerne il sistema di accumulo, sono stati proposti, sintetizzati e parzialmente caratterizzati materiali elettrodici per supercapacitorie e batterie.

Lo studio sull'assorbitore a perovskite è stato focalizzato alla possibilità di modulare il band-gap della perovskite mediante la sintesi di film di alogeni misti. In particolare, è stato dimostrato che aumentando il valore di x in $\text{MAPb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ si ottengono valori crescenti di band-gap fino ad 1.82 eV. Tali film ad ampio gap sono stati poi testati con successo in celle solari complete ottenendo delle prestazioni massime di cella solare PCE di circa 8%. Inoltre, sono stati proposti e studiati film di perovskite completamente inorganica a larga gap (CsPbBr_3) ed ibrida di $\text{FA}_{0.83}\text{Cs}_{0.17}\text{Pb}(\text{I}_{0.77}\text{Br}_{0.23})_3$ in dispositivi a diodo verticale multistrato, ottenendo ottimi rapporti luce/buio a diversi voltaggi e potenze.

Infine, sono state cresciuti e studiati film di perovskiti di composizione CsPbI_3 stabilizzati mediante doping con Europio. La scelta del tipo di perovskite e l'introduzione di atomi di Europio nel materiale mirano ad ottenere band gap di valore almeno di 1.7 eV ed alla stabilizzazione della fase perovskitica contro la fase delta inattiva.

Allo scopo di aumentare la trasmittanza della cella fotovoltaica sono stati studiati film di materiali compositi base di perovskite e polimero HEC, trasparente nel visibile, per incrementare la trasmittanza media del materiale attivo, al netto degli elettrodi, fino al 28% nella regione del visibile (400-800nm), ed un'efficienza massima prossima al 14%.

Per quanto riguarda i trasportatori di carica, è stato messo a punto un processo per la deposizione di strati di TiO_2 trasparente tramite sputtering reattivo di tipo gig-lox. L'impiego di processi gig-lox per la deposizione di strati di TiO_2 ha il valore aggiunto, rispetto a processi standard di tipo chimico o fisico, di consentire un controllo nanometrico dello spessore a temperatura ambiente oltre ad essere up-scalabili per applicazioni industriali. Inoltre, sono stati studiate nanoparticelle di ossidi metallici sia n- che p-type, quali ZnO e WO_x . Quest'ultimo, utilizzato in sostituzione del convenzionale MoO_x , ha mostrato una migliorata stabilità termica a fronte di analoghe prestazioni di cella.

Sono stati poi anche proposti e studiati diversi HTL basati su polimeri e molecole organiche quali PTAA, PFN, PFN-Br e PACz nella configurazione di cella solare invertita p-i-n, dei quali il più promettente è risultato essere 2PACz portando a prestazioni prossime al 20%.

Lo studio dei polimeri è stato anche esteso alle celle fotovoltaiche organiche dove un nuovo polimero coniugato (PATTD) è stato ottenuto su scala di laboratorio con procedure sintetiche relativamente poco complesse, scalabili a livello industriale e compatibili con bassi costi di produzione. Tale polimero è stato completamente caratterizzato e celle di test sono state realizzate con efficienze > 9%. L'aspetto d scalabilità delle celle organiche è stato affrontato studiando diversi metodi di deposizione con alcuni polimeri semiconduttori come ad esempio P3HT, HBG-1, PTB7 e PCE10. Particolare enfasi è stata data anche all'aspetto "green" considerando soluzioni con solventi nonclorurati e substrati biocompatibili

Nell'ambito dei sistemi di accumulo sono stati studiati materiali elettrodici sia per supercapacitorì che per batterie. Nell'ambito dei supercapacitorì sono state sintetizzate e studiate le nanostrutture di $\text{SrO}_{0.5}$: $\text{MnO}_{0.5}$ sia dal punto di vista di caratterizzazione del materiale sia da quello della determinazione delle loro proprietà elettrochimiche, con particolare attenzione al comportamento elettrochimico per la loro applicazione come elettrodi per supercondensatori ad alte prestazioni. Le tecniche di spettroscopia UV-visibile, XRD, SEM e XPS sono state applicate per investigare le nanostrutture di i $\text{SrO}_{0.5}$: $\text{MnO}_{0.5}$ i cui risultati hanno mostrato un assorbimento ottico nella regione UV (200 nm–325 nm), con gap di banda ottica di 1,74 eV; una struttura cristallina ortorombica; una morfologia con una granulometria media di ~ 80 nm e una composizione chimica con livelli di core aventi energie di legame tipiche di SrO e MnO .

Il dispositivo supercondensatore così realizzato ha mostrato una elevata capacità con valore di capacità più alto raggiunto di $392,8 \text{ F g}^{-1}$, con una elevata stabilità ciclica a lungo termine determinata dai cicli di carica-scarica. Dopo 1000 cicli le nanostrutture di SrO e MnO hanno conservato ancora il 73,4% del valore della capacità iniziale, dimostrando così un'eccellente ciclicità, stabilità e reversibilità. Inoltre, i valori di impedenza estremamente bassi hanno soddisfatto il requisito per l'applicabilità di queste nanostrutture composte da $\text{SrO}_{0,5}$: $\text{MnO}_{0,5}$ come supercondensatori ad alte prestazioni.

Inoltre, sono stati depositati mediante PLD film di pochi strati atomici di MoS_2 (<5) su substrati cristallini. Il carattere bidimensionale dei film ottenuti è stato verificato utilizzando la spettroscopia Raman confocale. Poiché il processo di deposizione ha una durata inferiore a 15-20 sec, si ritiene che possa essere suscettibile di implementazione in ambito industriale.

Nell'ambito delle batterie, sono stati studiati e caratterizzati campioni di MXene con diverse stechiometrie per il loro utilizzo come elettrodi in batterie a ioni litio e, più in generale, a ioni mono- e multi-valenti.

In particolare, sono stati sintetizzati mediante sintesi chimica campioni di MXene con le seguenti composizioni: $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$, Nb_2CT_x e $\text{Ti}_2\text{C}_{0,5}\text{N}_{0,5}\text{T}_x$.

Lo stato di avanzamento di questa LA è terminato e i risultati sono in linea con quelli attesi previsti dalla LA 4.13

Livello di innovazione

Gli elementi oggettivi rispetto allo stato dell'arte sono riassunti qui di seguito:

- E' stato utilizzato un layer di carbazolo (PACz) per perovskiti a più ampio band-gap passando da perovskiti con bandgap di 1.68 eV (Science 370, 1300, 2020) a perovskiti con band-gap di 1.76 ed 1.82 eV ottenendo delle buone efficienze di conversione solare e dimostrando la fattibilità di questa architettura per celle solari con bandgap intorno ad 1.8 eV
- E' stata incrementata la trasmittanza dei film di perovskite con polimero HEC utilizzando la tecnica del solvent dripping. (Bisconti et al Nano Energy 89, Part B, 106406, 2021)
- L'interesse per il PSC a base di carbonio è rafforzato dalla riduzione dei costi, dalla facile applicabilità e dalla possibile processabilità a bassa temperatura. L'attività è stata sviluppata per integrare CsPbI_3 in PSC mesoscopiche basate su C.
- La crescita di TiO_2 mediante deposizione fisica è preferita ai metodi chimici a vantaggio della scalabilità verso l'alto, della produzione senza solventi e dell'integrabilità industriale. Il metodo giglox utilizzato nel progetto è particolarmente utile, rispetto ad altre metodologie basate sullo sputtering fisico, per ottenere una porosità del volume fino al 50%.
- I risultati elettrochimici ottenuti con le sintetizzate nanostrutture di $\text{SrO}_{0,5}$: $\text{MnO}_{0,5}$ si inquadrano in un contesto internazionale, costituendo un eccellente esempio di supercondensatore con la più alta capacità specifica di 392.8 F/g (ad una densità di corrente di 0.1 A/g), fino ad oggi ottenuta con elettrodi nanostrutturati. Si riportano per confronto i risultati ottenuti recentemente in letteratura per elettrodi costituiti dai seguenti innovativi materiali: 1) SrO/PANI (226.36 F/g) [Ref.1]; 2)]SrO drogato Sn (56.49 F/g) [Ref.2]; 3) SrO/PANI/Graphene (296 F/g) [Ref. 3]; 4) rGO/MnO₂ hybrid (288 F/g) [Ref. 4]; Graphene-CNTs-MnO₂ (209 F/g) [Ref.5] e ibrido MnO₂-graphene (315 F/g) [Ref.6].

- [1] Iqbal MZ, Alam S, Afzal AM, et al. Binary composites of Strontium oxide/polyaniline for high performance supercapattery devices. *Solid State Ionics* 2020; 347: 115276.
 - [2] Samuel AJ, Deepi AS, Srikesh Get al. One pot synthesis and characterisation of two dimensional tin doped strontium oxide nanostructured electrode materials for electrochemical supercapacitor applications. *Mater Technology* 2020; 37:150–160.
 - [3] Iqbal MZ, Faisal MM, Sulman M, et al. Facile synthesis of strontium oxide/polyaniline/graphene composite for the high performance supercapattery devices. *J Electroanalytical Chem* 2020; 879: 114812.
 - [4] Zhao Z, Shen T, Liu Z, et al. Facile fabrication of binder-free reduced graphene oxide/MnO₂/Ni foam hybrid electrode for high-performance supercapacitors. *J Alloys Compounds* 2020; 812: 152124.
 - [5] Rogier C, Pognon G, Bondavalli P, et al. Electrodeposition of MnO₂ on spray-coated nanostructured carbon framework as high performance material for energy storage. *Surf Coat Technology* 2020; 384: 125310.
 - [6] Liu Y, Yan D, Zhuo R, et al. Design, hydrothermal synthesis and electrochemical properties of porous birnessite-type manganese dioxide nanosheets on graphene as a hybrid material for supercapacitors. *J Power Sourc* 2013; 242: 78–85.
- La crescita di strati 2D di MoS₂ rientra nelle strategie allo stato dell'arte per la realizzazione di SC per applicazioni sostenibili. [Int J Energy Res. 2021;45;12665]. In tale contesto, la tecnica di crescita via PLD presenta un carattere innovativo in quanto consente di ottenere strati bidimensionali in tempi dell'ordine di decine di secondi, con importanti ricadute dal punto di vista delle applicazioni industriali.
 - Screening e studio di materiali semiconduttori fotoattivi e trasportatori di carica, al fine di trovare il miglior compromesso tra prestazioni fotovoltaiche, tecniche/condizioni di processo processi e stabilità del dispositivo risultante.
 - Ottimizzazione di Assorbitori a Perovskite a band-gap variabile mediante integrazione in diodi verticali multistrato e conseguente studio delle caratteristiche optoelettroniche correlate alla performance
 - L'utilizzo di MXeni come Ti₂C_{0.5}N_{0.5}T_x e Nb₂CT_x come materiali elettrodici sia in accumulatori a ioni litio che, più in generale, in accumulatori a ioni monovalenti e polivalenti rappresenta lo stato dell'arte della ricerca in questo settore

Deliverable

Con questo SAL vengono presentati i seguenti deliverables:

D4.30 - Rapporto tecnico: “Analisi dei materiali investigati e dei relativi metodi di caratterizzazione per assorbitori e trasportatori di carica in sistemi fotovoltaico-accumulo a tre terminali”.

D4.31 - Database: “Database contenente le informazioni circa materiali, caratterizzazione e performance a livello di dispositivo di test per la piattaforma IEMAP”.

3.2.9 LA4.16

Stato delle attività

In questa attività sono stati utilizzati strumenti per la modellizzazione top-down del funzionamento di un potenziale dispositivo ibrido ottenuto integrando una cella fotovoltaica ed un accumulatore in modo che abbiano terminali elettrici in comune.

A tale proposito sono stati messi a punto dei codici Matlab che a partire da un modello circuitale e da una configurazione specifica del convertitore sia in grado di determinare con notevole precisione le performance del sistema. L'attività si è conclusa nei tempi e nei costi preventivati. Sono stati prodotti dei codici per Matlab (D4.37) che permettono di determinare, per approssimazioni successive, i parametri di input ottimali in funzione dei target di prestazione del dispositivo ibrido. E' stato prodotto un rapporto tecnico (D4.38) che descrive i modelli teorici dai quali sono stati derivati i codici.

Livello di innovazione

La simulazione circuitale dei sistemi fotovoltaici per la valutazione del corretto funzionamento dei sistemi di conversione/accumulo richiede una serie di accorgimenti e lo sviluppo di algoritmi specifici. Rispetto alla letteratura, i codici di modelling sviluppati in questa linea accoppiano per la prima volta l'approssimazione a "cinque parametri" dell'equazione del diodo reale con un elemento di accumulo/conversione dell'energia.

Deliverable

Con questo SAL vengono presentati i seguenti deliverables:

D4.37 Software: "Strumenti di modelling complessivo dei dispositivi ibridi fotovoltaico+accumulo"

D4.38 Rapporto tecnico: "Strumenti di modelling per l'integrazione con la piattaforma IEMAP" in cui saranno descritti anche il piano di integrazione dei dati delle simulazioni, nella piattaforma IEMAP e la loro gestione"

3.3 IIT

3.3.1 LA1.10

Stato delle attività:

Per soddisfare le necessità pratiche svolte nella linea di attività LA1.16, sono state implementati diversi moduli all'interno di QMflows e nano-QMflows. Per esempio, la possibilità di calcolare proprietà macroscopiche di materiali inorganici allo stato solido da paragonare direttamente con quelle misurate sperimentalmente. Inoltre, è stato implementata una rigorosa gestione e validazione degli input basati sul software quanto-meccanico CP2k per fare in modo da facilitare la preparazione di workflows e la loro sottomissione sui supercalcolatori.

Livello di innovazione

Tra i vari miglioramenti sviluppati per CP2K rispetto allo stato dell'arte c'è la possibilità di scegliere i set di base con facilità e la possibilità di preparare in modo automatizzato anche i calcoli open-shell. Una visione omnicomprensiva di questi cambi si trova nel CHANGELOG.md che sono inclusi nei repository di GitHub.

D1.10 - Rapporto tecnico: "Implementazione della piattaforma QMflows per l'automatizzazione di calcoli di chimica computazionale".

D1.11 - Software: Il software QMflows è mantenuto all'interno di GitHub in formato open source alla pagine web: <https://github.com/SCM-NV/qmflows> e <https://github.com/SCM-NV/nano-qmflows>. E' al momento documentato e distribuito professionalmente agli utenti del codice.

3.3.2 LA1.13

Stato delle attività:

Nell'ambito di questa attività abbiamo sviluppato la sintesi colloidale di nanoparticelle di InAs utilizzando tris(dimethylamino)arsine come precursore di arsenico. La peculiarità della sintesi sviluppata consiste nell'utilizzo di ZnCl₂ come additivo, il quale permette non solo di avere un buon controllo sulla dimensione dei nanocristalli e sulla loro distribuzione di taglia, ma anche di passivare i nanocristalli. Inoltre, per migliorarne le proprietà ottiche e la stabilità, i cristalli sono stati rivestiti di una shell di ZnSe ottenendo sistemi con emissione a ~890nm ed efficienza del 42%, un record per questo tipo di sistemi. Stiamo anche lavorando a modificare, post-sintesi, il ricoprimento di leganti organici sulla superficie dei nanocristalli per migliorare le proprietà di trasporto di carica. A questo proposito, abbiamo iniziato lo studio di processi di post-sintesi implementando un protocollo di purificazione dei nanocristalli. Il passaggio di purificazione rimuove i leganti organici in eccesso presenti in soluzione, permettendo così la fabbricazione di film di nanocristalli InAs/ZnSe tramite "spin-coating". I film così ottenuti sono stati utilizzati per la fabbricazione di diodi emettitori di luce con un record di efficienza quantistica esterna di 1.5% e emissione a 930 nm. Il prossimo passo, da completare nei prossimi mesi, è quello di effettuare misure di foto-trasporto e poi implementare questi nanocristalli in un prototipo di cella solare.

Livello di innovazione

In questa attività l'innovazione rispetto allo stato dell'arte riguarda l'ottimizzazione della sintesi di nanocristalli di InAs per ottenere un controllo maggiore sulla taglia (e quindi sulle proprietà ottiche) utilizzando precursori meno tossici e costosi di quelli convenzionalmente usati (trimethylsilyl arsine). Inoltre la sintesi sviluppata permette di ottenere eterostrutture InAs@ZnSe dalle proprietà ottiche mai raggiunte prima con efficienza record del 42%, rispetto allo stato dell'arte che è del 10%.

D1.14 - Rapporto tecnico: "Procedure di sintesi e caratterizzazione di un set iniziale di nanocristalli con caratteristiche promettenti per applicazioni PV".

3.3.3 LA1.16

Stato delle attività:

Per lo screening di leganti organici si è scelto di cominciare dal database di PubChem, un database pubblico che contiene sostanze chimiche disponibili sia commercialmente che già esistenti dalla letteratura scientifica. Per rendere conto delle interazioni legante-nanocristallo (III-V e perovskita), sono state selezionate solo molecole contenenti un singolo gruppo funzionale, scelto tra i noti gruppi di ancoraggio dei leganti (acido carbossilico, immina, tiolo, acido solfonico, acido fosfonico, ammine), tramite il dedicato workflow di Flamingo[<https://github.com/nlesc-nano/flamingo>]. Per stimare le interazioni steriche tra leganti sulla

superficie del nanocristallo, è stato calcolato l'angolo di cono di una decina di migliaia di molecole utilizzando il dedicato workflow di CAT[<https://github.com/nlesc-nano/CAT>]. Questi dati sono destinati a essere utilizzati come training set per istruire algoritmi di machine learning, consentendo di stimare l'angolo di cono dei milioni di molecole del database senza dovere effettuare esplicitamente le lunghe procedure di linearizzazione e ottimizzazione di geometria richieste. Infine, l'energia di solvatazione e i coefficienti di attività in vari solventi organici come anche il loro logP sono stati selezionati come descrittori delle interazioni ligando-solvente. Queste proprietà termodinamiche macroscopiche sono state ottenute sfruttando il COSMO-RS (CONductor-like Screening MOdel for Realistic Solvents). Con l'ausilio del dedicato workflow di nano-CAT[<https://github.com/nlesc-nano/nano-CAT>], è così stato possibile ottenere rapidamente le proprietà di solvatazione dell'intero database di molecole. Il database e relativa pubblicazione saranno presto disponibili.

Livello di innovazione

In questa attività l'innovazione rispetto allo stato dell'arte riguarda due aspetti:

- L'implementazione di una serie di workflows, mai sviluppati prima, che permettono di filtrare leganti organici dal database PUBCHEM in base a caratteristiche dei leganti stessi, attraverso: la presenza di un solo gruppo di ancoraggio sulla superficie di nanocristalli; il calcolo della forza di legame con la superficie dei nanocristalli usando la teoria del funzionale della densità; interazione sterica tra leganti superficiali; interazione legante-solvente. I workflows sono pubblicati nelle pagine Github sopraindicate.
- riguarda la possibilità di salvare il database (ancora non completato) in formati CSV facilmente gestibili dai server di ENEA. Il database e relativa pubblicazione saranno presto disponibili sui repository GitHub ed anche ENEA.

3.4 RSE

3.4.1 LA4.7

Stato delle attività:

Le attività svolte relative alla linea 4.7 (LA4.7) hanno riguardato la creazione di un database preliminare di parametri chimico fisici degli elementi III-IV-V della tavola periodica e loro leghe inserito in un programma di calcolo sviluppato in VBA che attraverso un interfaccia utente creato con una programmazione ad oggetti permette di calcolare i relativi parametri chimico fisici dei diversi materiali tenendo conto della loro composizione stechiometrica. Tale database costituisce la base per le successive simulazioni delle ipotetiche strutture buffer necessarie alla realizzazione di celle fotovoltaiche in InGaP su Si. La parte sperimentale che prevedeva, come da programma, la caratterizzazione preliminare di strutture buffer per le celle InGaP/Si e la correlazione tra i parametri chimico-fisici dei materiali e lo stress, deformazioni e difetti nelle strutture(D4.9), allo stato attuale è in una fase preliminare a causa dei forti ritardi accumulati per il COVID Sars-2 nella fornitura dei materiali necessari per lo svolgimento di questa parte dell'attività. Si prevede di recuperare parte del ritardo nel corso dei prossimi mesi e, a tal fine, si è fatta richiesta di una variazione sulla data di chiusura della LA4.7 prorogandola di 2 mesi circa e gestendo la sovrapposizione con la LA4.8 dell'anno in corso. Per le ragioni sopra descritte si è anche richiesto una variazione sul budget previsto per i costi d'esercizio delle linee LA4.7 e LA4.8 in accordo con la variante POA.1 al Programma Operativo delle Azioni.

Livello di innovazione

Nell'ambito dello sviluppo di tecnologie fotovoltaiche per applicazioni di BIPV (Building Integration Photovoltaic), allo stato attuale, vengono utilizzate celle a silicio, con un'efficienza di conversione limitata dalle proprietà fisico-chimiche del materiale stesso; queste sono combinate con pannelli a concentratori luminescenti (LSCs), ossia materiali polimerici trasparenti fluorescenti, capaci di assorbire la luce solare ed emetterla con alta efficienza. Al fine di superare questi limiti, il progetto proposto nel WP4 di IEMAP prevede di sviluppare una tecnologia fotovoltaica basata su materiali III/V integrati monoliticamente su substrati di Silicio con lo scopo di aumentare l'efficienza (tendente al 100%) delle celle solari e ridurne i costi economici ed ambientali. L'utilizzo di celle solari a base di materiali III/V permetterebbe di avere dispositivi solari con un band gap a match con le lunghezze d'onda prodotte dai pannelli fluorescenti aumentando così l'efficienza di conversione dell'energia solare ad elettrica. L'innovazione di tale approccio risiede nel realizzare dispositivi III/V cresciuti epitassialmente per mezzo di strutture buffer metamorfiche integrate monoliticamente sul substrato a differenza dello stato dell'arte che, attualmente, prevede strutture "stacked", cioè l'incollaggio delle celle III/V su substrati di Silicio. L'approccio proposto nel progetto è sintetizzato sopra, permetterebbe di evitare gli step di processo previsti nella tecnologia stacked (recupero del substrato, incollaggio delle celle III/V, rifinitura del substrato, etc.) riducendo i costi di produzione rispetto a questa tecnologia ed evitando l'utilizzo di substrati di Arseniuro di Gallio molto più dispendiosi rispetto ai substrati di Silicio nonché più impattanti per l'ambiente.

4 Avanzamento economico

Partner	WP	LA	Somma di A	Somma di B	Somma di C	Somma di D	Somma di E	Somma di F	Somma di		
			Personale	Attrezzature	Esercizio	Consulenze	Infrastrutture	Costi	Costo		
1 - ENEA	WP1	LA1.1	10.956,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3.286,80	14.242,80		
		LA1.19	13.244,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3.973,20	17.217,20		
		LA1.4	11.550,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3.465,00	15.015,00		
		LA1.7	16.775,50	0,00	0,00	0,00	0,00	5.032,65	21.808,15		
	WP4	LA4.1	137.075,00	0,00	11.232,05	0,00	0,00	44.492,12	192.799,17		
1 - ENEA			189.600,50	0,00	11.232,05	0,00	0,00	60.249,77	261.082,32		
Totale											
2 - CNR	WP3	LA3.11	35.983,00	0,00	1.440,94	0,00	0,00	11.227,18	48.651,12		
		LA3.4	46.457,00	0,00	4.840,40	0,00	0,00	15.389,22	66.686,62		
		LA3.7	31.084,00	0,00	3.088,36	0,00	0,00	10.251,71	44.424,07		
	WP4	LA4.13	184.514,00	0,00	10.147,48	0,00	0,00	58.398,44	253.059,92		
		LA4.16	15.215,00	0,00	10.423,90	0,00	0,00	7.691,67	33.330,57		
2 - CNR			313.253,00	0,00	29.941,08	0,00	0,00	102.958,22	446.152,30		
Totale											
Totale complessivo			502.853,50	0,00	41.173,13	0,00	0,00	163.207,99	707.234,62		

I costi riportati fanno riferimento alle linee di attività concluse entro la data fine di questo stato avanzamento lavori.

Il dettaglio delle spese sostenute è riportato in allegato alle dichiarazioni sostitutive di atto notorio rese dai legali rappresentanti di ciascuno dei soggetti coinvolti in questo stato avanzamento lavori.

Si precisa che i costi rendicontati per le LA3.4 e 3.7 sono coerenti con la variazione proposta dal co-beneficiario e non correttamente rilevata in fase di emissione della variante POA.1.

5 Piano di gestione e mitigazione dei rischi

La gestione del rischio è un processo continuo per tutta la durata di un progetto. La gestione riguarda la pianificazione, l'identificazione, l'analisi, il monitoraggio e il controllo del rischio. Questa sezione delinea le procedure per l'identificazione e la gestione delle cause non comuni di deviazione del progetto che possono comprometterne gli obiettivi. La valutazione dei rischi sarà aggiornata durante tutto il ciclo di vita del progetto, poiché in qualsiasi momento possono essere identificate fonti di rischio impreviste. L'obiettivo del piano di gestione del rischio è ridurre la probabilità e l'impatto di eventi avversi al progetto. Al contrario, qualsiasi evento che possa avere un impatto positivo deve essere sfruttato.

La trasparenza e una efficace comunicazione tra i gruppi di ricerca coinvolti nel progetto, i leader dei Work Package (WP) e i membri del progetto sono fondamentali per evitare problemi e conflitti prima che insorgano. Una buona strategia di comunicazione favorirà la coesione tra i partecipanti, dando al contempo un'immagine positiva del progetto all'esterno. Alcuni dei principali rischi percepiti relativi al piano di lavoro del progetto sono elencati nella tabella seguente. La tabella verrà aggiornata ad ogni SAL.

L'obiettivo di questa sezione è di consentire al gruppo di gestione di cercare accuratamente e di evitare tempestivamente i rischi indesiderati e, se necessario, di intervenire per mitigare o applicare misure correttive per controllare i potenziali effetti negativi sul progetto.

5.1 WP1

LA	Responsabile	Descrizione del rischio (per esempio ritardi, costi, prestazioni)	Azioni per mitigare il rischio
LA1.1, LA1.2, LA1.3	Filippo Palombi	LA1.1: Ritardi nel coordinarsi con tutti i partner impegnati nelle attività loro di laboratorio. LA1.2: Aumento dei costi dell'hardware e bassa disponibilità dei device. LA1.3: La piattaforma non sostiene le richieste di calcolo e di memoria	LA1.1: Rendere subito disponibile un primo set di strumenti per dare tempo ai partner di organizzare i primi accessi all'infrastruttura. LA1.2: Ottimizzazione dell'utilizzo dell'hardware disponibile e anticipare per quanto possibile gli acquisti. In caso di difficoltà si aggiungeranno alla piattaforma altre risorse disponibili in ENEA.

			LA1.3: Ottimizzazione degli accessi e delle risorse con i partner.
LA1.4, LA1.5, LA1.6	Marialuisa Mongelli	<p>LA1.4: I laboratori hanno delle loro procedure interne.</p> <p>LA1.5: difficoltà a I laboratori non hanno intenzione di condividere i dati e di utilizzare un nuovo database esterno.</p> <p>LA1.6: il database non viene arricchito dei dati di progetto</p>	<p>LA1.4: Selezionare una sola tipologia di esperimento e strumentazione per i laboratori maggiormente disponibili.</p> <p>LA1.5: Aumentare le opportunità di lavorare insieme e di condivisione degli obiettivi. Revisione delle procedure di raccolta dei dati e adeguamento delle stesse alle pratiche di laboratorio.</p> <p>LA1.6: Avvio di meeting e workshop con i partner di progetto.</p>
LA1.7, LA1.8, LA1.9	Massimo Celino	<p>LA1.7: Non ottimale comunicazione con i gruppi che partecipano al progetto.</p> <p>LA1.8: Grande differenza nei laboratori sulla natura e gestione dei dati prodotti da esperimenti e dal calcolo</p> <p>LA1.9: Ostacoli ad assumere una gestione uniforme dei dati trasversalmente ai laboratori.</p>	<p>LA1.7: Realizzare una panoramica della situazione internazionale e dei benefici di una gestione completa dei dati.</p> <p>LA1.8: Creare opportunità di comunicazione tra i gruppi e trovare incentivi per la condivisione dei dati.</p> <p>LA1.9: Facilitare la gestione dei dati dei laboratori e selezionare le principali caratteristiche che rendano comunque i dati open e ad un adeguato livello di fairness.</p>
LA1.10, LA1.11, LA1.12	Ivan Infante	La data di inizio del postdoc assegnato a queste linee di attività è ritardata a settembre 2022.	Parte dell'attività verranno portate avanti da staff collaboratore già presente all'interno di IIT e/o attraverso collaborazioni.
LA1.13, LA1.14, LA1.15	Liberato Manna	Ritardato hiring dei postdoc, a causa delle procedure burocratiche associate al processo di rilascio del visto	L'IIT ha aperto il prima possibile le call e completato le procedure di selezione e al momento sta seguendo e sollecitando i vari uffici affinché per i ricercatori extracomunitari i visti vengano rilasciati il più presto possibile. A causa di questi ritardi, le attività verranno portate avanti da staff collaboratore già presente all'interno di IIT.

LA1.16, LA1.17, LA1.18	Ivan Infante	La data di inizio di uno dei postdoc assegnati a queste linee di attività è ritardata a novembre 2022.	Parte dell'attività verranno portate avanti da staff collaboratore già presente all'interno di IIT e/o attraverso collaborazioni.
LA1.19, LA1.20, LA1.21	Francesco Buonocore	<p>LA1.19: Sviluppo di un modello che non si presta all'integrazione con la piattaforma.</p> <p>LA1.20: Diversa velocità di creazione dell'ambiente di sviluppo tra laboratori sperimentali e computazionali.</p> <p>LA1.21: Abbandono delle funzionalità di modeling all'interno della piattaforma.</p>	<p>LA1.19: Calibrazione della piattaforma sul caso d'uso.</p> <p>LA1.20: Sviluppo di modalità asincrona per la raccolta e l'analisi dei dati.</p> <p>LA1.21: creazione di test cases a beneficio degli utenti interni ed esterni.</p>

5.2 WP2

LA	Responsabile	Descrizione del rischio (per esempio ritardi, costi, prestazioni)	Azioni per mitigare il rischio
LA2.1, LA2.2, LA2.3	Moreno, Lisi	Ritardi per la gestione, aumento dei costi di attrezzature e materiali.	Ci si è concentrati sul disegno e sulla progettazione (CAD) complessiva del sistema automatizzato che integra la sintesi e la caratterizzazione elettrochimica in situ. Rispetto alla previsione iniziale di procedere sequenzialmente attraverso la sintesi e la successiva caratterizzazione dei materiali.
LA2.4, LA2.6, LA2.8	Giovanni Appetecchi	<p>LA2.4: ritardo inizio attività dovuto ritardo approvvigionamento.</p> <p>LA2.6: ritardo inizio attività dovuto ritardo approvvigionamento.</p> <p>Caratteristiche/proprietà liquido ionico non corrispondenti a quelle aspettate.</p> <p>LA2.8: fornitura dati (riguardo il processo automatizzabile) alla piattaforma IEMAP non soddisfacenti</p>	<p>LA2.4: Ritardo consegna Deliverable 2.4 (3 mesi) e D2.5 (6 mesi)</p> <p>LA2.6: Ritardo consegna Deliverable 2.7 (6 mesi). Continua verifica dell'intero processo e confronto con il liquido ionico impiegato come benchmark.</p> <p>LA2.8: maggiore interazione del laboratorio/testing automatizzabile con la piattaforma computazionale</p>

LA2.5, LA2.7, LA2.9	Maria Lucia Protopapa	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ritardo nell'acquisto di strumentazione e/o materiale consumabile. 2. Malfunzionamento di strumenti analitici e/o apparecchiature . 3. Ritardo nel conseguimento dei risultati sperimentali 4. Variabilità dei risultati conseguiti (granulometria e composizione della polvere a base silicio) a seconda della particolare struttura compositonale del pannello fotovoltaico di partenza. 5. Scarsa stabilità meccanica o efficienza dell'anodo realizzato con la polvere a base silicio recuperata dai pannelli fotovoltaici a fine vita. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Richiesta di proroga (6 mesi) per provvedere all'acquisizione di quanto previsto; esecuzione di test sperimentali e relative analisi mediante tecniche complementari. 2. Attivazione di collaborazioni interne per condividere temporaneamente la strumentazione necessaria. 3. Organizzazione di riunioni periodiche al fine di garantire che i risultati siano conseguiti per tempo, anche attraverso l'impiego di approcci e soluzioni differenti, e finalizzate all'aggiornamento dei rischi che emergono nel corso del progetto. 4. Messa a punto di soluzioni per la standardizzazione della composizione e granulometria della polvere di silicio partendo da pannelli fotovoltaici aventi differente struttura compositonale. 5. Ottimizzazione della composizione del materiale anodico.
LA2.10, LA2.11, LA2.12	Danilo Fontana	<ol style="list-style-type: none"> 6. Ritardo nell'acquisto di strumentazione e/o materiale. 7. Malfunzionamento di strumenti analitici e/o apparecchiature. 8. Ritardo nel conseguimento dei risultati sperimentali. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Richiesta di proroga (6 mesi) per provvedere all'acquisizione di quanto previsto; esecuzione di test sperimentali e relative analisi mediante tecniche complementari da utilizzare durante il periodo di proroga richiesto 2. Attivazione di collaborazioni interne per condividere temporaneamente la strumentazione necessaria 3. Organizzazione di riunioni periodiche al fine di garantire che i risultati siano conseguiti per

			tempo, anche attraverso l'impiego di approcci differenti, e finalizzate all'aggiornamento dei rischi che emergono nel corso del progetto
LA2.13, LA2.14, LA2.15	Maria Montanino	<ol style="list-style-type: none"> 1) Ritardi nella dotazione di strumentazioni da laboratorio necessarie alla completa caratterizzazione, soprattutto reologica, degli inchiostri oggetto di studio. 2) Malfunzionamento di strumenti analitici e/o apparecchiature. 3) Scambio di dati con la piattaforma IEMAP inefficiente/incompleto. 	<ol style="list-style-type: none"> 1) È stata effettuata una richiesta di proroga pari a mesi sei al fine di dotarsi della strumentazione necessaria prevista da progetto e completare le attività programmate. 2) Attivazione di collaborazioni interne per condividere temporaneamente la strumentazione necessaria ovvero utilizzo di strumentazioni/analisi alternative. 3) Maggiori interazioni anche attraverso riunioni con la piattaforma computazionale mirate all'efficientamento del flusso di dati.

5.3 WP3

LA	Responsabile	Descrizione del rischio (per esempio ritardi, costi, prestazioni)	Azioni per mitigare il rischio
LA3.1, LA3.2, LA3.3	Alfonso Pozio	Ritardi elaborazione contratti (Nanofaber e La Sapienza).	Il deliverable D3.1 viene modificato. Il D3.3 viene spostato al mese 16.
LA3.4, LA3.5, LA3.6	Siracusano Stefania	<p>Nella LA3.4 ritardi negli acquisti.</p> <p>Nella LA3.5 i rischi più rilevanti possono essere cattive prestazioni e bassa efficienza in cella singola per l'uso di catalizzatori a base di metalli non nobili.</p> <p>Nella LA3.6 i rischi più rilevanti possono essere cattive stabilità per gli assemblati (MEAs) per</p>	<p>LA3.4. Le attività sono state eseguite anche con minori costi di esercizio ed è stato investito su più personale per cui sono stati spostati alcuni costi di esercizio su personale.</p> <p>LA3.5. Questo rischio potrà essere mitigato con l'utilizzo di catalizzatori a basso carico di metallo nobile.</p>

		<p>l'uso di catalizzatori a base di metalli non nobili o a basso contenuto di metalli nobili.</p>	<p>LA3.6. Questo rischio potrà essere mitigato con l'utilizzo di carichi leggermente superiori di metallo nobile cercando di rimanere sempre al di sotto dello stato dell'arte.</p>
LA3.7, LA3.8, LA3.9	Briguglio Nicola	<p>LA3.7. Ritardi negli acquisti</p> <p>LA 3.8. Eventuali ritardi nell'acquisizione di componenti per i test su cella singola.</p> <p>LA 3.8. Raggiungere gli obiettivi di performance, efficienza e stabilità su MEA di larga area.</p> <p>LA3.9. Eventuali ritardi nell'acquisizione di componenti per lo stack.</p> <p>LA3.9. Implementazioni di soluzioni sui componenti dello stack reversibile per raggiungere gli obiettivi progettuali;</p> <p>LA 3.9. Ottenere un comportamento ciclico efficiente nel tempo.</p>	<p>LA3.7. Le attività sono state eseguite anche con minori costi di esercizio ed è stato investito su più personale per cui sono stati spostati alcuni costi di esercizio su personale.</p> <p>LA 3.8. Ordinare i componenti il prima possibile.</p> <p>LA 3.8. Questo rischio sarà mitigato dal fatto che questi obiettivi sono già raggiunti parzialmente su piccolo MEA sotto certe condizioni operative.</p> <p>LA 3.9. Ordinare i componenti il prima possibile.</p> <p>LA 3.9. Questo aspetto sarà mitigato dalla possibilità di sfruttare diversi percorsi per lo sviluppo dei componenti che hanno già dato buone indicazioni e dall'esperienza acquista nello stack design.</p> <p>LA 3.9. Test in laboratorio su short stack usando profili simulati sui componenti per valutare il comportamento dinamico ed individuare le criticità.</p>
LA3.10	Liotta Leonarda F.	<p>Eventuali ritardi nella realizzazione di semicelle catodo-elettrolita e nell'effettuare le misure EIS in presenza di CO₂ a causa di problemi all'interfaccia elettrodo-elettrolita.</p>	<p>Verranno predisposti dei tests appositi di laboratorio al fine di ottimizzare le procedure di densificazione dei materiali elettrolitici e di deposizione delle polveri di perovskiti al fine di ottenere una semicella stabile termicamente e meccanicamente e dell'appropriata porosità per essere permeabile alla diffusione della CO₂</p>

LA3.11, LA3.12, LA3.13	Barison Simona, Boldrini Stefano	<p>LA3.11 Attività completata nei tempi previsti.</p> <p>LA3.12 e 3.13</p> <ul style="list-style-type: none"> - Eventuali ritardi nell'acquisizione di parti delle stazioni dedicate alla sinterizzazione. - Difficoltà di densificazione degli elettroliti selezionati con le tecniche proposte. - Possibili difficoltà nell'applicazione/cofiring di elettrodi e elettroliti. 	<ul style="list-style-type: none"> - Pezzi già acquistati/ordinati durante il primo anno di attività. - Nel primo anno del progetto sono state appositamente individuate due tecniche di sinterizzazione che sfruttano approcci radicalmente differenti, in modo da minimizzare il rischio che entrambe incontrino problemi di densificazione non superabili. - Uno degli elettrodi potrà essere rimpiazzato da una formulazione metallica in pasta per permettere di caratterizzare comunque il resto dei componenti della cella.
------------------------------	---	--	---

5.4 WP4

LA	Responsabile	Descrizione del rischio (per esempio ritardi, costi, prestazioni)	Azioni per mitigare il rischio
LA4.1, LA4.2, LA4.3	Lucia V. Mercaldo	<p>LA4.1. Non è stato possibile l'acquisto della nuova attrezzatura prevista nel capitolato per ritardi nella messa a disposizione del necessario finanziamento.</p> <p>LA4.2. Rallentamenti delle attività potrebbero derivare da ritardi nell'arrivo di alcuni materiali da acquistare per i test sperimentali, oppure potrebbe rendersi necessaria la manutenzione straordinaria di alcune delle attrezzature di laboratorio per malfunzionamenti. Inoltre, le proprietà dei materiali in fase di sviluppo potrebbero risultare non ottimali per l'applicazione in celle solari.</p> <p>LA4.3. Potrebbero esserci ritardi o difficoltà tecniche a lavorare in</p>	<p>LA4.1. L'uso di nuova attrezzatura fin dall'inizio era stato previsto solo in un'ultima fase del lavoro nella presente LA. Si è riprogrammata l'attività in modo da utilizzare solo attrezzatura già disponibile nei laboratori.</p> <p>LA4.2. I materiali e le soluzioni tecnologiche da sviluppare sono vari. Gli effetti di eventuali ritardi di fornitura o di qualche malfunzionamento di impianto potranno essere mitigati con un'attenta programmazione periodica dei test sperimentali in modo da ottimizzare l'utilizzo dei materiali e delle attrezzature disponibili. Lavorando con più materiali, si potrà valutare di alternarli/sostituirli in caso di difficoltà nel loro reperimento o di</p>

		feedback con la piattaforma IEMAP sviluppata nel WP1.	proprietà che dovessero risultare non idonee. LA4.3. In caso di ritardi e/o difficoltà, si procederà in maniera tradizionale anche riferendosi alla letteratura continuando comunque a fornire supporto e dati alla piattaforma IEMAP in allestimento.
LA4.4, LA4.5, LA4.6	Marco Tammaro	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ritardo nell'acquisto del prototipo, della strumentazione e/o materiale consumabile. 2. Malfunzionamento di strumenti analitici e/o apparecchiature. 3. Ritardo nella messa a punto del prototipo. 4. Ritardo nel conseguimento dei risultati sperimentali. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Richiesta di proroga per provvedere all'acquisizione di quanto previsto. 2. Attivazione di collaborazioni interne per condividere temporaneamente la strumentazione necessaria. 3. Attivazione di collaborazioni interne e/o esterne per accelerare la messa a punto del prototipo. 4. Organizzazione di riunioni periodiche al fine di garantire che i risultati siano conseguiti per tempo e finalizzate all'aggiornamento dei rischi che emergono nel corso del progetto.
LA4.7, LA4.8, LA4.9	Giovanni Abagnale	<p>LA4.7: ritardo acquisizione di materiali e forniture previste per lo svolgimento dell'attività causa del COVID.</p> <p>LA 4.8: L'attività prevista per il secondo anno rischia ritardi se non si raggiungono gli obiettivi nella LA4.7 a cui è direttamente collegata specie per quanto riguarda la prevista attività sperimentale.</p> <p>LA4.9: Il rischio maggiore per questa linea di attività è la non realizzazione di un dispositivo che costituisce il target finale del programma di ricerca, a causa del non raggiungimento degli</p>	<p>LA4.1: prolungamento sulla data di chiusura dell'attività di 2 mesi per recuperare il ritardo limitando la sovrapposizione con la linea d'attività dell'anno successivo.</p> <p>LA 4.8: Per scongiurare il non raggiungimento degli obiettivi previsti nella linea di ricerca sarà cruciale evitare la sovrapposizione delle attività e l'utilizzo delle risorse necessarie su altri programmi di ricerca estrani al programma di MI. A tal fine una capillare pianificazione verrà sviluppata per prevenire quanto detto prima.</p> <p>LA4.9: Allo stato attuale per minimizzare il rischio qui di lato</p>

		obiettivi indicati nelle due linee precedenti.	descritto è cruciale rispettare le tempistiche previste e raggiungere gli obiettivi indicati nelle due LA precedenti.
LA4.10, LA4.11, LA4.12	Mordini Alessandro, Sanson Alessandra	<p>LA4.10: Eventuali guasti alle parti meccaniche e funzionali delle strumentazioni di processo.</p> <p>LA4.11: Cattivo assorbimento o caratteristiche non ottimali dell'interfaccia sensibilizzatore/semiconduttore; problemi di aggregazione o eccessiva ricombinazione della carica fotogenerata.</p> <p>LA4.12: Difficoltà nel valutare la stabilità dei dispositivi all'aria aperta. Proprietà spettroscopiche ed elettrochimiche dei coloranti non rispondenti alle aspettative.</p>	<p>LA4.10: Approvvigionamento dei componenti principali ed a maggiore rischio.</p> <p>LA4.11: ottimizzazione del loading dei coloranti sul semiconduttore; utilizzo di co-adsorbenti di varia natura per modificare la proprietà dell'interfaccia.</p> <p>LA4.12: Valutazione della stabilità dei dispositivi in condizioni ambientali (temperatura e umidità) simulate. Modifica delle strutture inizialmente selezionate in modo da calibrare le proprietà spettro-elettrochimiche in vista dell'applicazione desiderata.</p>
LA4.13, LA4.14, LA4.15	Di Carlo Aldo	<p>Nella LA4.13 si sono presentati dei ritardi negli acquisti</p> <p>LA 4.14: la connessione elettrica diretta presenta problemi di compatibilità dei processi di fabbricazione tra la cella fotovoltaica e il sistema di accumulo</p> <p>LA 4.15: per la realizzazione di dispositivi test, non è possibile utilizzare una sola tecnica di deposizione per i materiali individuati</p>	<p>LA4.13: Le attività sono state eseguite anche con minori costi di esercizio ed è stato investito su più personale per cui sono stati spostati alcuni costi di esercizio su personale.</p> <p>LA4.14: al fine di mitigare questo rischio verranno utilizzate due approcci alternativi. Il primo, già indicato nel progetto, sarà quello di realizzare i due sistemi indipendentemente e poi unirli meccanicamente ed elettricamente per la realizzazione del sistema a 3 terminali. Il secondo approccio riguarda la rivisitazione del processo di fabbricazione e lo sviluppo di un processo compatibile. In particolare saranno investigati processi a bassa temperatura.</p>

			LA4.15: Al fine di rendere compatibile la tecnica di deposizione con i materiali ottimali per la realizzazione dei sistemi fotovoltaico/accumulo a 3 terminali verranno investigati processi di stampa alternativi quali spin coating, blade coating a slot-die. Ad ogni materiale verrà associata la tecnica di stampa più adeguata.
LA4.16, LA4.17, LA4.18	Rampino Stefano	<p>LA4.16 – Attività completata nei tempi e nei costi previsti.</p> <p>LA4.17 -Eventuali ritardi nell'acquisizione di dispositivi di accumulo commerciali da testare a causa dell'attuale “shortage” di materie prime collegate al settore automotive.</p> <p>LA4.18 – Eventuali ritardi nella realizzazione dei dispositivi completi (PV+Accumulo) nelle LA4.13 e LA4.15 che ritarderebbero i test dei sistemi ibridi.</p>	<p>LA4.17 Ordinare i componenti a rischio ritardo il prima possibile.</p> <p>LA4.18 Verranno predisposti dei test appositi che possano integrare dispositivi non completi prodotti nelle LA4.13 e 4.15 (ad es. dispositivi PV prodotti nel progetto integrati con dispositivi di accumulo disponibili commercialmente, o viceversa).</p>

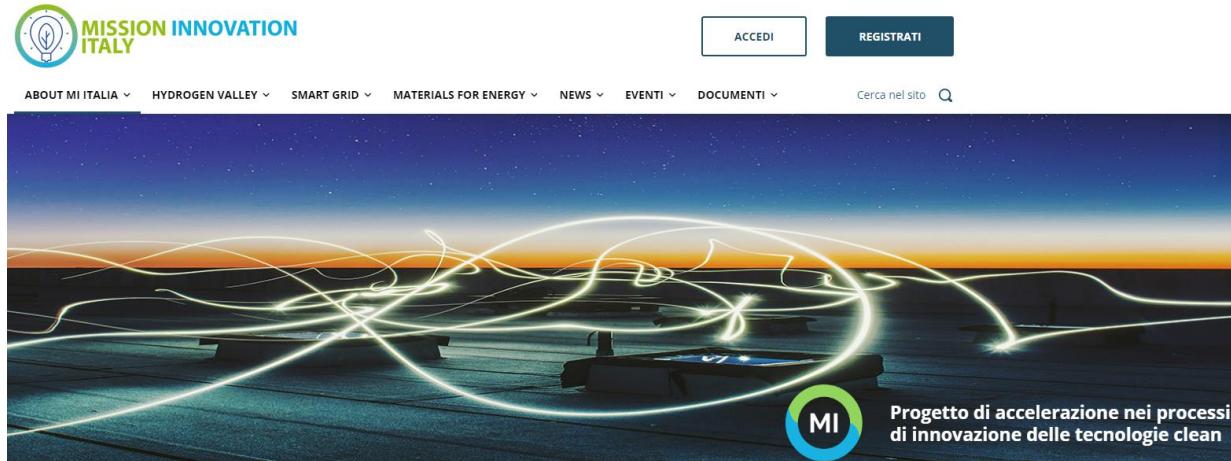
6 Attività di disseminazione

6.1 Sito web di progetto

Le attività IEMAP sono riportate nelle pagine del sito web del progetto Mission Innovation:

www.mission-innovation.it

Il sito web ospita una descrizione del progetto IEMAP e le news ad esso collegate.




L'Italia è paese membro di Mission Innovation, iniziativa di cooperazione multilaterale globale nata a Parigi nel 2015 il cui scopo primario è quello di accelerare i processi di innovazione delle tecnologie clean, sia in ambito pubblico che privato, attraverso l'impegno dei Paesi aderenti a raddoppiare la quota pubblica degli investimenti dedicati alle attività di ricerca, sviluppo e innovazione delle tecnologie per la decarbonizzazione al fine di rendere l'energia

Tramite la pagina “Contatti” è possibile inviare un messaggio al responsabile del progetto completando il form di contatto disponibile sul sito. A tal fine è stata attivata una mail di contatto: materials@mission-innovation.it

Il sito sarà utile non solo per la diffusione delle informazioni ad un pubblico ampio ma anche per rafforzare le occasioni di collaborazione all'interno del progetto. Infatti sul sito saranno disponibili documenti, deliverable e notizie su eventi e i risultati più significativi. Il sito è stato progettato per avere informazioni divulgative in primo piano in modo da essere comprensibili per un ampio spettro di utenti. Le informazioni mostrate sono pensate per poter attirare verso le pagine interne gli utenti che sono in cerca di informazioni con maggior dettaglio tecnico-scientifico.

E' in corso di definizione una pagina ad accesso riservato che sarà utilizzata dai partner di progetto per condividere i dati con il database.

6.2 Partecipazione a congressi

- M. Celino (LA1.7). Partecipazione al Congresso Nanoinnovation 2021. “ENEA computational infrastructure for materials design”. Presentazione orale.
- F. Buonocore (LA1.19). Partecipazione al Congresso Nanoinnovation 2021. “An introduction to the atomistic design of materials for electrochemical energy storage. Presentazione orale.
- M. Celino (LA1.7). Presentazione al “Forum Canada-Italy on AI and the challenge of sustainability; Sustainable energy and Circular economy web conference”. 18.11.2021.
- M. Celino (LA1.7). Presentazione al “Forum degli Enti Locali e delle Imprese del Mediterraneo” 2.12.21.
- M. Celino, F. Buonocore (LA1.19). Organizzazione di un simposio al Congresso Mission Innovation 2022 dal titolo “Towards accelerated design of materials for energy”.
- I. Infante (LA1.16). Colloidal Semiconductor Nanocrystals, Gordon Research Conference, Luglio 3-8 (2022), Les Diablerets, Svizzera. Poster, “A Universal Database of Surface Ligands for Colloidal Semiconductor Nanocrystals”.

- L. Manna (LA1.13). NanoGe, Emerging Light Emitting Materials (EMLEM), Cipro, Ottobre 3-5 (2022), Luca De Trizio, Oral/Poster, “ZnCl₂ Mediated Synthesis of InAs Nanocrystals with Aminoarsine”.
- M. L. Protopapa (LA2.5). Presentazione di un poster dal titolo “Silicon powder recovery: from end-of-Life photovoltaic panels to Si-SiC composites” al CIMTEC 2022 15th Ceramics Congress, Sessione CA-1 Advances in conventional powder processing routes, Perugia 20-24 giugno 2022.
- L. Mercaldo (LA4.1). Partecipazione con presentazione di un poster alla 38th European PV Solar Energy Conference (EUPVSEC), 6-10 September 2021, online event. Titolo poster: Monolithic perovskite/silicon-heterojunction tandem solar cells with nanocrystalline Si/SiO_x tunnel junction. Autori: Lucia V. Mercaldo, Eugenia Bobeico, Antonella De Maria, Marco Della Noce, Manuela Ferrara, Vera La Ferrara, Laura Lancellotti, Gabriella Rametta, Gennaro V. Sannino, Iurie Usatii, Paola Delli Veneri.
- A. Alberti (LA4.13), Italian quantum weeks presso la sede della scuola superiore universitaria di Catania.
- A. Mordini (LA4.10). Orale su invito alla conferenza ISyDMA'7, Poznam (PL), 12-16 Settembre 2022 (International Symposium on Dielectric Materials and Applications ISyDMA'7 (syskonf.pl)). Functional nanostructured materials for energy by wet chemistry routes. M. Striccoli, M. Giancaspro, M. Dell'Edera, A. Madonia, G. Minervini, C.N. Dibenedetto, M. Trotta, A. Panniello, C. Ingrosso, R. Comparelli, E. Fanizza, A. Agostiano, M.L. Curri.
- A. Mordini (LA4.10). Poster al XLVIII National Congress of Physical Chemistry - Physical Chemistry and the Challenges of the Ecological Transition. Biobased redox electrolytes for advanced supercapacitors. Paolo Stufano, Matteo Grattieri, Rossella Labarile, Maria Varsalona, Alberto Perrotta, Pinalysa Cosma, Gianluca M. Farinola, Massimo Trotta.
- A. Mordini (LA4.10). 11/05/2022 – Partecipazione a “StORIES First TNA-call Launch Event” e “EERA JPES ‘Word Café on JPES future’”, Energy Storage Days organizzati da EERA (European Energy Research Alliance), 10-12/05/2022 Padova.
- A. Mordini (LA4.10). 10/05/2022 – Partecipazione a “Pint of Science Festival, 9 – 11 maggio 2022”. Evento del 10/05/2022 “Dal sole alle batterie: come produrre e immagazzinare l’energia del futuro”, presentazione orale dal titolo “Batterie sostenibili made in Europe”, presso Birreria Popolare (Bologna).
- A. Mordini (LA4.10). 06/05/2022 – Visita degli Istituti CNR dell’Area della Ricerca di Bologna da parte dell’Assessore del Comune di Bologna, Prof. Raffaele Laudani, Deleghe Urbanistica ed edilizia privata, progetto “Città della conoscenza e memoria democratica”, rapporti con l’Università e i Centri di ricerca.
- A. Mordini (LA4.10). 27/10/2022 – Partecipazione al Convegno “E- Valley: la transizione all’elettrico nella terra dei motori (Parte 1)”, Key Energy 2021, Rimini.
- Liotta Leonardo (LA3.10). Presentazione abstract per partecipazione a La Notte Europea dei Ricercatori Sharper 2022, 30 Settembre 2022, Palermo.
- S. Barison (LA3.11, 12). Le attività di questa linea verranno presentate come poster al Convegno “15th International Ceramic Congress”, Perugia (Italy), 20-24 Giugno 2022

6.3 Articoli su riviste internazionali

- “**ZnCl₂ Mediated Synthesis of InAs Nanocrystals with Aminoarsine**”. Dongxu Zhu, Fulvio Bellato, Houman Bahmani Jalali, Francesco Di Stasio, Mirko Prato, Yurii P Ivanov, Giorgio Divitini, Ivan Infante, Luca De Trizio, Liberato Manna, *J. Am. Chem. Soc.*, 2022, 144, 23, 10515-10523.
- **Facile synthesis of novel SrO 0.5:MnO 0.5 bimetallic oxide nanostructure as a high performance electrode material for supercapacitors**, Vinayak Adimule, Vinay S Bhat, Basappa C Yallur, Adarsha HJ

Gowda, Paola De Padova, Gurumurthy Hegde, and Arafat Toghan, Nanomaterials and Nanotechnology, Volume 12: 1–14, <https://journals.sagepub.com/doi/full/10.1177/18479804211064028>

- **Out-of-Glovebox Integration of Recyclable Europium-Doped CsPbI₃ in Triple-Mesoscopic Carbon-Based Solar Cells Exceeding 9% Efficiency** Salvatore Valastro, Emanuele Smecca, Corrado Bongiorno, Carlo Spampinato, Giovanni Mannino, Simone Biagi, Ioannis Deretzis, Filippo Giannazzo, Ajay Kumar Jena, Tsutomu Miyasaka, Antonino La Magna, and Alessandra Alberti* Solar RRL 2022, 2200267.

6.4 Disseminazione su siti web

- Il progetto MI – IEMAP è stato inserito nei progetti attivi sul sito web del CNR ITAE al link: <http://www.itae.cnr.it/it/progetti/accordo-di-programma-mise-enea-mission-innovation/>

6.5 Rassegna stampa

RES Magazine: interviste

- [Elettrolizzatori: le alternative ai materiali critici](#), *Intervista a Simona Barison, CNR*
- [Il supercomputer Enea che scava i nuovi materiali](#), *Intervista a Massimo Celino, ENEA*
- [Fotovoltaico: migliore efficienza con le celle multigiunzione](#), *Intervista a Giovanni Abagnale*
- [L'intelligenza artificiale al servizio del nuovo fotovoltaico](#), intervista a Ivan Infante (IIT)
- [La sfida dei materiali si vince con l'intelligenza artificiale](#) intervista Ivan Infante (IIT), Massimo Celino (ENEA), Giovanni Abagnale (RSE) e Simona Barison (CNR)
- [Elettrolizzatori: le alternative ai materiali critici](#), intervista a Simona Barison (CNR)

7 Ulteriori risposte ai commenti degli Esperti

7.1 Costi di personale

Fornire dettagliata descrizione in merito alla **congruità dei valori dei costi di personale** più elevati rispetto a quelli di altre LA con contenuto tecnico-scientifico confrontabile e con quelli tipicamente previsti in progetti nazionali e internazionali su tematiche simili:

LA 1.14 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24) e LA 1.15 (Mese inizio: 25 Mese fine: 36) – resp. IIT

LA 2.5 (Mese inizio: 1 Mese fine: 12) e LA 2.7 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24) – resp. ENEA

LA 4.5 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24) – resp. ENEA

LA 4.6 (Mese inizio: 25 Mese fine: 36) – resp. ENEA

LA 1.14 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24) e LA 1.15 (Mese inizio: 25 Mese fine: 36)

Le LA1.14 e le LA1.15 prevedono lo sviluppo di nanocristalli di semiconduttori III-V (LA1.14) e di alogenuri metallici non basati su metalli tossici (LA1.15), nonché la loro validazione in dispositivi fotovoltaici prototipo.

Le attività coinvolgono non solo l'identificazione delle migliori procedure di sintesi, ma anche studi di superficie, di trattamenti post sintesi, di analisi delle loro proprietà ottiche di trasporto di carica e di fabbricazione di dispositivi. Al fine di espletare al meglio queste attività, è necessario assumere diverse figure professionali di post doc, con abilità nella sintesi, nella caratterizzazione e nella fabbricazione di dispositivi fotovoltaici. Inoltre, dato l'elevato numero di sintesi e di dispositivi da fabbricare, è prevedibile che anche i costi di esercizio relativi ai reagenti chimici, alle varie analisi avanzate (composizionali, strutturali, ottiche, di superficie) e ai vari materiali di laboratorio (vetreria, plasticheria, gas, griglie per microscopia, materiali per celle solari, componentistica ottica) saranno importanti.

LA 2.5 (Mese inizio: 1 Mese fine: 12)

Nella LA 2.5 la polvere a base silicio viene ricavata da differenti tipologie di pannelli fotovoltaici mediante pirolisi e carbonizzazione, con e senza la preventiva delaminazione delle componenti del pannello per l'asportazione del *backsheet*. Perché tale polvere possa trovare impiego come materiale anodico nelle batterie a ioni di litio, essa deve avere buona conducibilità elettrica ($> 10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$) ed elevata superficie specifica (valori pari a $12 \text{ m}^2/\text{g}^{-1}$ sono stati riportati in letteratura per il nano-silicio ottenuto da pannelli PV [Rahman et al., 2021, *End-of-Life Photovoltaic Recycled Silicon: A Sustainable Circular Materials Source for Electronic Industries. Adv. Energy Sustainability Res. 2100081*. <https://doi.org/10.1002/aesr.202100081>]). Pertanto la polvere deve essere processata al fine di eliminare le componenti ossidate a bassa conducibilità elettrica e deve essere macinata al fine di ottenere dimensioni sub-micrometriche. Inoltre la composizione chimica e la granulometria della polvere di silicio ottenuta da carbonizzazione e da pirolisi deve essere standardizzata, ovvero deve essere resa quanto più possibile indipendente dalla struttura compositiva iniziale del pannello. Dal momento che la polvere ottenuta dal trattamento termico dei pannelli (pirolisi/carbonizzazione) contiene i residui della combustione del *backsheet* e dal momento che quest'ultimo può essere di differenti tipologie, la formulazione chimica della polvere può variare a seconda della tipologia di pannelli trattati. Ci si aspetta che il trattamento termico della sola cella fotovoltaica preventivamente privata del *backsheet* possa dare una formulazione standardizzata della polvere, indipendente dalla tipologia iniziale dei pannelli. Per tale motivo i processi di pirolisi e carbonizzazione saranno applicati ai pannelli con e senza l'asportazione del *backsheet*. Inoltre, dal momento che i pannelli dismessi sono attualmente privi di etichettatura relativa alla loro composizione chimica, risulta necessario determinare la loro struttura prima del trattamento termico in modo da poter poi correlare le caratteristiche chimico-fisiche della polvere di silicio ricavata alla particolare tipologia del pannello di partenza. Sempre nella LA 2.5 le polveri ottenute a partire da differenti tipologie di pannelli, mediante carbonizzazione e pirolisi, con e senza la preventiva asportazione del *backsheet*, verranno processate per ottenere la polvere con le caratteristiche idonee per il suo utilizzo come materiale anodico. Per il raggiungimento di tali obiettivi sono richieste le seguenti ore uomo per le attività di seguito elencate:

1. Prelievo di campioni da differenti tipologie di pannelli PV da trattare mediante pirolisi e carbonizzazione (100 ore di personale tecnico)
2. Osservazione in *cross-section* al microscopio ottico della struttura dei campioni prelevati per individuare il numero di strati costituenti (100 ore di personale tecnico)
3. Delaminazione chimico-meccanica dei campioni prelevati dai pannelli PV per ottenere i singoli strati costituenti da analizzare (100 ore di personale tecnico)
4. Analisi dei singoli strati mediante XRD (300 ore di un ricercatore di profilo medio), Raman (300 ore di un ricercatore di profilo medio più 200 ore di un tecnico), FTIR (300 ore di un ricercatore di profilo

medio più 200 ore di un tecnico), analisi termiche (75 ore di un ricercatore di profilo medio), SEM/EDS (25 ore di un ricercatore di profilo medio e 20 ore di un tecnico)

5. Asportazione del *backsheet* mediante solventi organici o acquosi (200 ore di un ricercatore di profilo medio più 200 ore di un tecnico)
6. Pirolisi e carbonizzazione dei pannelli con e senza la preventiva asportazione del *backsheet* (350 ore di personale tecnico)
7. Lavorazione della polvere di silicio residua proveniente dai trattamenti termici per ottenere la polvere submicrometrica priva delle componenti ossidate (300 ore di personale tecnico)
8. Trattamenti chimici per eliminare le fasi ossidate e caratterizzazioni post-trattamento (243 ore di un ricercatore di profilo medio e 130 ore di personale tecnico)
9. Caratterizzazione delle polveri ottenute nelle diverse fasi del processo mediante XRD (300 ore di un ricercatore di profilo medio), Raman (300 ore di un ricercatore di profilo medio più 200 ore di un tecnico), FTIR (300 ore di un ricercatore di profilo medio più 200 ore di un tecnico), analisi termiche (75 ore di un ricercatore di profilo medio), SEM/EDS (25 ore di un ricercatore di profilo medio e 20 ore di un tecnico), analisi BET (20 ore di un tecnico), misure di granulometria mediante DLS (20 ore di un tecnico), XRF (75 ore di un ricercatore di profilo medio e 39 ore di un tecnico)
10. Ottimizzazione della resa del processo di lavorazione della polvere a base silicio: prove preliminari di trattamento degli scarti di lavorazione provenienti da pannelli fotovoltaici a fine vita ed utilizzo del prodotto ottenuto per l'infiltrazione ad alta temperatura di preforme porose di carburo di silicio (500 ore di un ricercatore di profilo medio e 79 ore di un tecnico)
11. Caratterizzazione dei compositi ottenuti dall'infiltrazione di preforme di SiC mediante analisi SEM-EDS e determinazione delle proprietà meccaniche (MOR, E) (63 ore di un ricercatore di profilo alto, 543 ore di un ricercatore di profilo medio)

In sintesi, il costo di personale della LA2.5 appare più elevato rispetto alle altre LA, ma congruo, poiché i processi e la caratterizzazione dei materiali necessitano di un ampio spettro di investigazioni per la ottimizzazione del materiale sviluppato.

LA 2.7 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24)

Si proseguirà con l'ottimizzazione del processo di lavorazione delle polveri di silicio ottenute da pannelli differenti, mediante carbonizzazione e pirolisi, con e senza la preventiva asportazione del *backsheet*. In particolare le polveri di silicio ottenute dai pannelli a fine vita saranno opportunamente processate mediante setacciatura e macinazione (*ball-milling*) e saranno ottimizzati i parametri di processo (dimensione delle maglie dei setacci, durata dei round di macinazione, temperatura durante la macinazione, reagenti di un eventuale processo di purificazione) al fine di ottenere una polvere ad elevata percentuale di silicio (>85%), carbonio ed altri metalli (Al, Ag, Cu). La polvere verrà caratterizzata con differenti tecniche diagnostiche. La polvere di silicio, dopo macinazione e analisi chimico-fisiche, sarà mescolata insieme ad un conduttore elettronico (carbone) e un legante polimerico, aventi lo scopo di garantire, rispettivamente, conduzione elettronica e stabilità meccanica all'elettrodo. Tale miscela sarà dispersa in opportuno solvente e depositata su un foglio di rame (avente la funzione di portacorrente). Dopo la rimozione del solvente ed essiccazione, l'elettrodo (in forma di nastro) sarà caratterizzato da un punto di vista morfologico (analisi SEM e porosimetria) ed elettrochimico (voltammetria, impedenza e cicli di carica/scarica in celle elettrochimiche) al fine di valutarne le prestazioni. Le frazioni più grossolane della polvere di Si recuperata dai pannelli fotovoltaici verranno valutate principalmente per la produzione di materiali compositi a base di Si-SiC sulla

base dei dati preliminari ottenuti nell'ambito della LA 2.5. Questa tipologia di materiale trova ampio uso in vari settori industriali (automotive, forni per alte temperature) grazie alle sue elevate proprietà meccaniche anche fino a 1350°C e si ottengono normalmente tramite infiltrazione di preforme porose di SiC o C-SiC con silicio liquido. Questo processo richiede però un grado di purezza del silicio prossimo al 99%. Nel caso non fosse possibile ottenere questo grado di purezza nella frazione grossolana anche in base ad una valutazione di sostenibilità economica del processo di purificazione di questa frazione, si valuterà di utilizzarla per ottenere un'altra tipologia di materiale ceramico. In particolare visto che le polveri a base silicio presentano significative percentuali oltre che di silicio anche di alluminio e titania, sempre ai fini della riduzione degli scarti di lavorazione si cercherà di ottenere compositi tialite/mullite a partire dalle polveri a granulometria grossolana mediante ossidazione termica in aria.

Per il raggiungimento di tali obiettivi sono richieste le seguenti ore uomo per le attività di seguito elencate:

- Analisi compositiva delle polveri di silicio ottenute durante le diverse fasi della lavorazione e test di ripetibilità del processo. Le polveri ottenute verranno caratterizzate mediante XRD (400 ore di un ricercatore di profilo medio), Raman (400 ore di un ricercatore di profilo medio più 300 ore di un tecnico), FTIR (400 ore di un ricercatore di profilo medio più 300 ore di un tecnico), analisi termiche (400 ore di un ricercatore di profilo medio), SEM/EDS (25 ore di un ricercatore di profilo medio e 20 ore di un tecnico), analisi BET (200 ore di un tecnico), misure di granulometria mediante DLS (600 ore di un tecnico), XRF ed ICP (400 ore di un ricercatore di profilo medio e 600 ore di un tecnico)
- Realizzazione dell'anodo con la polvere di silicio e ottimizzazione delle percentuali del carbonio, del legante polimerico e del solvente per garantire buone proprietà elettriche e stabilità dell'anodo (159 ore di personale tecnico).
- Caratterizzazione morfologica ed elettrochimica dell'anodo rispettivamente mediante analisi SEM/EDS (25 ore di un ricercatore di profilo medio e 20 ore di un tecnico) e misure di voltammetria, impedenza e cicli di carica/scarica in celle elettrochimiche (393 ore di un ricercatore di profilo medio)
- Valutazione dell'utilizzo della frazione grossolana contenente silicio per la realizzazione di compositi Si-SiC, (300 ore di un ricercatore di profilo medio, 10 ore di un tecnico, 20 ore di un ricercatore di profilo alto).
- Valutazione dell'utilizzo della frazione grossolana contenente silicio per la realizzazione di materiali a base di tialite/mullite (400 ore di un ricercatore di profilo medio e 30 ore di un tecnico, 20 ore di un ricercatore di profilo alto).
- Caratterizzazione microstrutturale dei materiali ottenuti con la frazione grossolana contenente silicio (343 ore di un ricercatore di profilo medio, 39 ore di un tecnico, 23 ore di un ricercatore di profilo alto).

In sintesi, il costo di personale della LA2.7 appare più elevato rispetto alle altre LA, ma congruo, poiché i processi e la caratterizzazione dei materiali necessitano di un ampio spettro di investigazioni per la ottimizzazione del materiale sviluppato.

LA4.5 (Mese inizio: 13 Mese fine: 24) e LA4.6 (Mese inizio: 25 Mese fine: 36)

Le attività LA4.5 e LA4.6 prevedono test di laboratorio preliminari per ottimizzare alcuni parametri di processo, test sperimentali sul prototipo per la sua messa a punto, test sperimentali per la definizione del processo ed infine test di caratterizzazione dei materiali, sia all'inizio che alla fine dei test suddetti. Queste

attività sono giudicate con elevato *“time consuming”* e quindi richiedono l’impiego di molto personale. In particolare la struttura composita dei pannelli fotovoltaici da trattare nel prototipo deve essere determinata prima del trattamento in modo da correlare i parametri di processo alla particolare struttura del pannello (LA4.5). A tal fine sarà prelevato un campione da ciascun pannello e verrà effettuata su di esso un’analisi di tipo composito che richiederà una preventiva delaminazione di tipo chimico/meccanico del campione per poter analizzare ciascuno strato costituente. A tal fine sono richieste le seguenti ore uomo per le attività di seguito elencate:

- Prelievo dei campioni dai pannelli PV da trattare nel prototipo (25 ore di personale tecnico)
- Osservazione in cross section al microscopio ottico della struttura dei campioni prelevati per individuare il numero di strati costituenti (25 ore di personale tecnico).
- Delaminazione chimico-meccanica dei campioni prelevati dai pannelli PV per ottenere i singoli strati costituenti (50 ore di personale tecnico).
- Analisi XRD dei singoli strati (175 ore di un ricercatore di profilo medio)
- Spettroscopia vibrazionale (Raman e FTIR) sui singoli strati (25 ore di personale tecnico e 180 ore di un ricercatore di profilo medio).
- Spettroscopia XRF sui singoli strati (25 ore di personale tecnico e 136 ore di un ricercatore di profilo medio).

Il prototipo sarà progettato e realizzato appositamente e quindi gestito per la prima volta, e questo comporterà un impegno elevato da parte del personale preposto.

Le fasi legate all’esercizio del prototipo nelle attività LA4.5 ed i relativi impegni possono essere così schematizzati:

- Primi test funzionali (500 ore di un collaboratore tecnico e 500 ore di personale con profilo da ricercatore).
- Test sperimentali preliminari (300 ore di un collaboratore tecnico e 300 ore di personale con profilo da ricercatore).
- Test sperimentali (300 ore di un collaboratore tecnico e 300 ore di personale con profilo da ricercatore).
- Tutte le suddette fasi vedranno la partecipazione di un assegnista (per un totale di 1500 ore).

Nella LA4.6 saranno analizzati i materiali ottenuti a seguito del trattamento dei pannelli nel prototipo. In particolare verranno analizzati i residui di celle fotovoltaiche e i backsheets staccati dalle celle. Di particolare interesse è lo studio delle possibili alterazioni subite dal backsheets nel caso in cui esso sia riciclabile. I materiali ottenuti saranno caratterizzati mediante differenti tecniche di analisi e tale attività richiederà le seguenti ore uomo:

- Analisi composita dei materiali recuperati mediante spettroscopia XRF (70 ore di personale tecnico e 122 ore di un ricercatore di profilo medio)
- Analisi dei materiali recuperati mediante spettroscopia vibrazionale (70 ore di personale tecnico e 190 ore di un ricercatore di profilo medio)
- Analisi dei materiali recuperati mediante XRD (70 ore di personale tecnico e 180 ore di un ricercatore di profilo medio)

Le fasi legate all’esercizio del prototipo delle attività LA4.6 ed i relativi impegni possono essere così schematizzati:

- Test funzionali (170 ore di un collaboratore tecnico e 170 ore di personale con profilo da ricercatore)
- Test sperimentali preliminari (350 ore di un collaboratore tecnico e 360 ore di personale con profilo da ricercatore)
- Test sperimentali (400 ore di un collaboratore tecnico e 400 ore di personale con profilo da ricercatore)
- Tutte le suddette fasi vedranno la partecipazione di un assegnista (per un totale di 1500 ore)

7.2 Costi di esercizio

Per quanto riguarda i costi di esercizio si riportano i giustificativi per la Linea di Attività che si è conclusa al termine del primo anno.

LA4.13 (Aldo Di Carlo, CNR)

- I fondi per la quota di partecipazione del personale strutturato a tempo indeterminato sono stati utilizzati per
 - Sviluppo di perovskiti a larga gap sia ibride che inorganiche
 - modifiche della camera di crescita, e per trovare le condizioni esatte di crescita in termini di fluenza del laser, temperatura del substrato e pressione di ossigeno.
 - Sviluppo e caratterizzazione materiali per celle organiche e realizzazione e caratterizzazione delle stesse
 - Sviluppo e caratterizzazione di supercapacitorì con nanostrutture di SrO 0.5 : MnO 0.5
 - Deposizione PLD di MoS2
 - Deposizione sputtering di TiO2
 - Screening e studio di materiali semiconduttori fotoattivi e trasportatori di carica
 - Sviluppo e caratterizzazione di MXenes
- I costi di esercizio sono relativi ai materiali per laboratorio:
 - materiale per la preparazione dei supporti dei dispositivi
 - liquidi criogenici e consumabili correlati
 - gas tecnici per la crescita e caratterizzazione di dispositivi in ambiente controllato
 - plastic boxes porta campioni per celle solari e substrati di vari materiali (plastica, vetro, quarzo)
 - kit per polishing dei substrati su cui fare le celle solari

7.3 Costi infrastruttura

In particolare per la LA3.1, la Commissione ha rilevato che, anche a seguito della specifica integrazione richiesta, i costi indicati per l'acquisizione dell'infrastruttura non sono adeguatamente descritti, al fine di effettuare una completa valutazione della pertinenza e della congruenza degli stessi. La Commissione ammette il costo, ma prescrive che, in occasione del 1° SAL, sia fornita una dettagliata descrizione della pertinenza e della congruità della spesa.

In allegato viene fornito un annesso parte integrante in cui è descritta l'infrastruttura da realizzare e alcuni preventivi comparativi di macchinari di elettrofilatura industriale appartenenti a questa gamma che ne giustificano il costo di acquisizione.

7.4 Prodotti intermedi

La versione intermedia del deliverable D3.3 “Modelli FEM e statistici” verrà consegnata al mese 16

8 Prodotti finali consegnati

LA1.1

Filippo Palombi

D1.1 - Rapporto tecnico: "Istruzioni per accesso, l'autenticazione e utilizzo dell'infrastruttura CRESCO".

LA1.4

Marialuisa Mongelli

D1.4 - Rapporto tecnico: "Descrizione dell'architettura del DB".

LA1.7

Massimo Celino

D1.7 - Rapporto tecnico: "Stato dell'arte nel settore dati per la scienza dei materiali".

LA1.19

Francesco Buonocore

D1.22 - Rapporto tecnico: "Modelli periodici di materiali catodici basati su ossidi metallici e definizione del protocollo di calcolo ab initio delle proprietà dei materiali catodici degli accumulatori".

LA3.4

Siracusano Stefania

D3.8 Rapporto tecnico "Sviluppo di catalizzatori e data-set delle caratteristiche chimico-fisiche".

LA3.7

Briguglio Nicola

D3.11 Rapporto tecnico: "Protocolli di prova e preparazione componenti e dispositivi (catalizzatori reversibili, membrane, assemblati elettrodi-membrane, celle singole)".

D3.12 Rapporto tecnico: "Data-set delle caratteristiche elettrochimiche dei componenti sviluppati".

LA3.11

Simona Barison

D3.17 Rapporto tecnico "Identificazione di materiali per elettrodi per PCE, scelta di materiali e dati da inviare a piattaforma IEMAP, scelta di tecniche di sintesi di elettrodi ed esiti di sintesi".

LA4.1

Lucia Mercaldo

D4.1 Rapporto tecnico: "Sperimentazione su film sottili di perovskiti alogenate, trasportatori di carica e TCO per applicazione in celle solari".

LA4.13

Aldo Di Carlo

D4.30 - Rapporto tecnico: "Analisi dei materiali investigati e dei relativi metodi di caratterizzazione per assorbitori e trasportatori di carica in sistemi fotovoltaico-accumulo a tre terminali".

D4.31 - Database: Database contenente le informazioni circa materiali, caratterizzazione e performance a livello di dispositivo di test per la piattaforma IEMAP.

LA4.16

Rampino Stefano

D4.37 Software, "Strumenti di modelling complessivo dei dispositivi ibridi fotovoltaico+accumulo".

D4.38 Rapporto tecnico, "Strumenti di modelling per l'integrazione con la piattaforma IEMAP".

9 ALLEGATO 1: Descrizione della pertinenza e della congruità della spesa per l'acquisizione dell'infrastruttura indicata nella linea di attività L.A. 3.1

9.1 Pertinenza: aspetti generali dell'infrastruttura ENEA

L'individuazione di materiali innovativi per la tecnologia degli elettrolizzatori, in particolare per la fabbricazione di membrane AEM, è l'obiettivo primario perseguito nell'ambito della LA3 del progetto IEMAP WP 3, definendo un processo accelerato di progettazione e produzione ed integrando materiali diversi (multi-materiale) e diversi concetti di advanced manufacturing (multi-tecnologia). Al centro di questo approccio tecnologico si pone l'acquisizione dell'infrastruttura di manifattura adeguata allo scopo, che sia multi-tecnologia e multi-materiale, i.e. capace di integrare le seguenti tre tecnologie ritenute di interesse per ENEA nello sviluppo di componenti AEM: electrospinning, blow-spinning, e dipping. In fase di proposta era già stata condotta una valutazione che aveva permesso di valutare positivamente la fattibilità di implementare tale infrastruttura *custom* in IEMAP sulla base di piattaforme commerciali di elettrofilatura disponibile sul catalogo Fluidnatek della Bioincia SA (Spagna), commercializzata e gestita nel post-vendita dalla Nanofaber per l'Italia. Le macchine di elettrofilatura Fluidnatek, focalizzandosi sui modelli LE50, LE100, LE500 (di dimensioni via via crescenti), hanno infatti caratteristiche tecniche e affidabilità tali da garantire non soltanto un processo di elettrofilatura di grado industriale ma anche l'implementazione delle altre due tecnologie di interesse ENEA. In relazione al budget disponibile ed alle attività previste, l'ENEA ha scelto di usare come sistema di riferimento la LE100, giudicando la LE50 troppo piccola e la LE500 troppo costosa e sovradimensionata in questa fase. Ad esempio, la piattaforma proposta per l'infrastruttura di concerto con la Nanofaber è basata sulla LE100 per garantire lo spazio necessario ad accomodare alcune personalizzazioni tra cui il collettore Roll2Roll, non disponibile sulla LE50. Tutte le macchine hanno la possibilità di essere equipaggiate in futuro con unità di condizionamento del volume di processo complete di diagramma igrometrico, garantendo la ulteriore espandibilità dell'infrastruttura anche dopo IEMAP.

In virtù del sistema di elettrofilatura Fluidnatek con architettura "ad iniettore", il sistema LE100 ben si presta all'implementazione contestuale ed integrata della modalità di funzionamento per "spin-blowing" e "dipping". Tramite piccole customizzazioni possibili in fabbrica al momento dell'ordine (sia lato hardware che lato software), la LE100 fornita all'ENEA è in grado di funzionare nella modalità "spin-blowing" tramite una linea di pressione aggiuntiva operante a 6 bar di pressione, che consente la formazione di coating e/o membrane self-standing senza il ricorso al campo elettrico per l'estrazione di filamenti polimerici (come nell'electrospinning). Questa modalità è peraltro implementabile attualmente anche in modalità "needle-less" ma sempre con un accurato controllo del flow-rate (una delle caratteristiche uniche sul mercato). In aggiunta, la configurazione ENEA viene completata inserendo il "dipping" controllato tramite l'automazione di un attuatore aggiuntivo sull'asse z (verticale) per una movimentazione del campione o del rullo collettore,

così da consentire l'inserimento della membrana AEM in un bagno di ionomero desiderato. Questa configurazione ha dunque caratteristiche uniche che la rendono pienamente pertinente all'obiettivo di IEMAP. Questo è anche illustrato dalla specifica tecnica della macchina LE100 richiesta ENEA e dettagliata nella Sez. 1.2, che include pure l'implementazione di un sistema collettore roll-2-roll e l'equipaggiamento con generatori ausiliari e dummy collector per prevenire il gocciolamento della soluzione durante i transitori tra una modalità fabbricativa all'altra nelle attività di manufacturing. La parte hardware dell'infrastruttura è accompagnata da una parte software standard "on-board" completamente integrata su controller SIEMENS di grado industriale per pilotare in modalità closed-loop con la massima affidabilità e bassi tempi di latenza tutti gli attuatori al fine di realizzare complessi processi fabbricativi layer-by-layer in modalità. La spesa prevista per l'infrastruttura verde sul reperimento della stazione industriale "multi-tecnologia" fin qui descritta, secondo le specifiche nella sezione 1.1, strettamente funzionale al raggiungimento del sistema prototipale multi-tecnologia per AEM.

A conclusione di questa panoramica, si evidenzia che la fornitura della piattaforma Fluidnatek LE100 di cui alla Sez.1.2 non esaurisce l'infrastruttura, che include moduli aggiuntivi a carico della Nanofaber. Infatti la macchina LE100 funziona secondo una logica di controllo "chiusa", pensata per funzionare in modo affidabile, self-standing e sicuro (da manomissioni e da attacchi informatici) in ambienti manifatturieri. Per questo motivo l'infrastruttura ENEA si completa con software addizionale elaborato dalla Nanofaber e in grado di "aprire" la macchina di processo verso l'esterno, i.e. l'intranet ENEA, al fine di consentire l'interfacciamento della linea di processo con un PC o server ENEA. Il supporto di Nanofaber è garantito da contratti già in essere e finalizzati anche alla creazione di una GUI personalizzata e basata su interfacce "web-API" dettagliate nel D3.1 volte a consentire all'infrastruttura di operare in modo semi automatico ed "informato" dai modelli sviluppati nella LA3.1.

9.2 Specifica tecnica hardware e software di base della infrastruttura LE-100-ENEA

La macchina FLUIDNATEK LE100 customizzata per ENEA ha una configurazione adatta a condurre test di produzione multi-tecnologia e scale-up di membrane AEM, con 3 assi di movimentazione + collettore a nastro per lavorare anche in modalità Roll2Roll. Gli automatismi sono in particolare progettati per integrare la modalità di blow-spinning e di dipping (tramite la movimentazione computerizzata dell'asse "z"). L'hardware proposto è adatto alle personalizzazioni software per il lancio di lavoro da remoto e invio di traiettorie tridimensionali degli emettitori (a carico della Nanofaber durante il secondo anno). Vengono inoltre adottati sistemi ad iniezione a "fessura" per lavoro di piloting e studi di scale-up, ma sempre con controllo fine del "flow-rate". Segue un estratto in lingua italiana delle principali specifiche hardware della fornitura:

1. Struttura meccanica premium, con pannellature e chassis in acciaio, alluminio e vetro
2. Sistema di estrazione dei vapori con upgrade per regolazione adattativa dell'estrazione
3. Illuminazione led ad alta intensità (Special safety-encapsulated diffuse LED lighting)
4. Controllo on board tramite Touch Screen
5. Ethernet remote diagnostics e predisposizione per interfacciamento industry 4.0
6. Doppio generatore a alta tensione da 30 kV, con polarità invertibile al collettore
7. Doppia pompa per siringa e predisposizione (cablaggio in fabbrica) per applicazione pompa a doppio canale ad alta pressione
8. Un emettitore "single phase", un emettitore parallel (5 aghi), un emettitore "slitemitter" custom per consentire "solution electrospinning" sia "needle-based" sia "needle-free"

9. Collettore piano standard e collettore Roll2Roll a nastro (da 30 cm di larghezza)
10. Automazione assi x-y
11. Regolazione automatizzata distanza dell'emettitore dal collector (0-30 cm, asse z)
12. Sistema “Dummy collector” con generatore indipendente negativo per ovviare al dripping nella gestione dei transitori e dei malfunzionamenti in modalità “manufacturing”
13. Protezione dell'emettitore con gas-jacket per controllo di solventi alto-volatili *
14. Gas assisted electrospinning (blow-spinning) *
15. Temperature and humidity display
16. Macchina montata su ruote ad alto carico

(*NB: richiede 6-8 bar di pressione tramite linea/bombola di aria compressa/azoto)

La parte software dell'infrastruttura sarà completata e integrata sulla macchina e sulla rete ENEA da Nanofaber srl nel corso del secondo anno (ref. D3.1).

9.3 Congruità della Spesa

Il costo proposto di 152.000 € (comprensivo di IVA e trasporto) per la LE100-ENEA è congruo ed in linea con il mercato, come dimostrato dai dati sotto riportati. Tale costo relativo alla specifica tecnica sopra riportata è da ritenersi valido nei limiti di validità dell'offerta vincolante della Nanofaber srl effettivamente sottoscritta da ENEA , vale a dire nelle more di possibili rincari imposti dalla Bionicia che potrebbero intercorrere prima dell'aggiudicazione della fornitura indipendente dalla Nanofaber srl, data un contesto di mercato fortemente turbato dalla pandemia da COVID19 e da instabilità geo-politica tali da generare incrementi di costo generalizzato su tutta la suppli chain del 10-30%. La concorrenza è esclusa per motivi tecnici. Limitatamente a macchinari di elettrofilatura (non multi-tecnologia), l'ENEA esclude a priori macchinari di natura puramente prototipale (non derivati da catalogo commerciale e non in grado di garantire livelli di affidabilità desiderati) e macchine non-industriali destinate alla ricerca accademica, l'altro fornitore in grado di offrire sistemi Roll2Roll industriali sarebbe la El Marco (Repubblica Ceca) , scartata per motivi tecnici per l'applicazione in oggetto data la mancanza di controllo fine sul processo limitata a modalità needle-less e impossibilità di integrazione altre tecnologie. Per quanto concerne la congruità del prezzo limitatamente alla linea Fluidnatek, il prezzo offerto è in linea con il costo di prodotti standard del catalogo Fluidnatek, tenendo in considerazione prezzi che dipendono fortemente dalla configurazione. Si riportano di seguito alcune quotazioni ufficiali recenti (gentilmente condivise dalla Nanofaber) per illustrare il posizionamento di mercato della gamma Fluidnatek:

- Tabella 1: Quotazione ufficiale LE50 di macchina comprensiva di condizionamento climatico base , aggiudicata ad un PA italiana ed installata nel 2019; valore fornitura di oltre 85k€(IVA esclusa);
- Tabella 2: Quotazione ufficiale LE100 risalente al 2020 di macchina per un privato NO-PROFIT e ad oggi non aggiudicata ; valore fornitura di oltre 180k€ (IVA esclusa)
- Tabella 3: Quotazione ufficiale LE500 risalente al 2022, aggiudicata a privato ed in via di installazione; valore fornitura di oltre 330k€ (IVA esclusa)

Tabella 1: LE50 installata 2019

Item	Description	Quantity	Price / Euro
Errore. L'origine riferime nto non è stata trovata. ata.	FLUIDNATEK® LE-50 Laboratory eStretching Machine , including: a) Stainless steel, aluminum and glass frame and enclosures b) Special safety-encapsulated diffuse LED lighting c) Control from Touch Screen d) Primary HV power supply (adjustable from 0kV up to 30kV) e) Non-adjustable HV power supply (-2kV) f) One syringe pump g) Single phase emitter h) Plate collector stand300x300 mm i) Temperature and humidity display j) Passive exhaust system k) Sealed cable pass-through l) Ethernet remote diagnostics and software upgrading m) CE compliance	1	
2.3	Universal rotating collector platform	1	
2.4	Drum collector – to fit Item Errore. L'origine riferimento non è stata trovata. (Diam. 100mm; Length 200mm)	1	
2.5	Mandrel collector – to fit Item 2.3 (Diam. 5mm)	1	
SF	Automated X-Y axes emitter motion (stroke 300 x 300 mm)	1	
SF	Single-phase spinning head (one single emitter) – luer lock system	3	
2.10	Actively regulated exhaust system – to fit item 2.12	1	
2.12	Drying-Heating control unit (DHU) for regulation of temperature and relative humidity	1	
Errore. L'origine riferime nto non è stata trovata. ata.	Taylor cone visualization system (integrated camera and display)	1	
Errore. L'origine riferime nto non è stata trovata. ata.	Data logging and export function	1	
Errore. L'origine riferime nto non è stata trovata. ata.	Multi-user level access with recipe database	1	

non è stata trov ata.			
SF	Additional 12-months warranty extension (to have a total warranty of 24 months)	1	
SF	Starter kit suitcase (containing needles, tubing, adapters...)	1	
SF	Preventative maintenance at month 24 (change of pump clutch and rotating system belt)	1	
	SUBTOTAL		€ 83.660
	Shipping & handling		€ 2.000
	TOTAL (iva esclusa)		€ 85.660

Tabella 2: LE100 quotata 2020

tem	Description	Qu ant ity	Price / Euro
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	FLUIDNATEK®LE-100 Laboratory eStretching Machine, including: a) Stainless steel, aluminum and glass frame and enclosures b) Special safety-encapsulated diffuse LED lighting c) Control from Touch Screen d) Ethernet remote diagnostics e) One HV power supply (up to 30 kV) f) One syringe pump g) Single phase emitter h) Flat plate collector i) Regulation of emitter-collector distance (0-30 cm) j) Temperature and humidity display k) Special castors l) CE compliance	1	
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Negative HV power supply for collector (down to -30 kV)	1	
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	2nd syringe pump with coaxial spinning head	1	
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Third syringe pump with triaxial spinning head	1	
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Universal rotating collector platform	1	

Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Drum collector – to fit Item Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	X-Y Axis automated linear emitter motion	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Single phase/coaxial parallel multi-emitter spinning head (20 emitters)	1
2.18	Solvent-gas-jacket system	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Tubeless solution dispensing system	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Syringe heater for tubeless solution dispensing system	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Taylor cone visualization system (integrated camera and display)	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Actively regulated exhaust system – to fit Item 2.27 (required)	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Exhaust filter (HEPA or ULPA)	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	UV-C germicidal lamps	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Data logging and export function	1
Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Multi-user level access with recipe database	1

Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.	Air conditioning: temperature and RH control unit	1
SPECIAL FEATURES		
SF1	Non-conductive flat stationary plate collector	1
SF2	Non-conductive mandrel collector (D=15mm) to fit Item 2.5	1
SF3	Training on the job at manufacturer for up to 3 months (customer pays travel expenses only)	
	subTOTAL	€ 186.400
Shipping & handling		€ 2.000
	TOTAL (iva esclusa)	€ 188.400

Tabella 3: LE500 aggiudicata ed in via di installazione (nord Italia) nel 2022

Item	ID	Description	Quantity	Price /Euro
Error e. L'origine riferimento non è stata trovata.	LE500BS	FLUIDNATEK® LE-500 Pilot-scale electrospinning machine, including:	1	
SF1		Gloves port in the chamber door	1	
SF2		ISO 5 chamber	1	
Error e. L'origine riferimento non è stata trovata.	LE500VP1	Large-volume peristaltic liquid feeding system with precise gravimetric dose control (up to 4L)	1	
Error e. L'origine riferimento	LE500P1	First syringe pump with coaxial spinning head	1	

o non è stata trova ta.-1				
2.6	LE500HPP	Twin channel (2 x 140mL) syringe pump	1	
Error e. L'orig ine riferi ment o non è stata trova ta.	LE500R2R	Roll-to-roll semi continuous collecting system	1	
Error e. L'orig ine riferi ment o non è stata trova ta.	LE500RASM	Universal rotating collector platform with encoded motor (20-2000rpm)	1	
Error e. L'orig ine riferi ment o non è stata trova ta.	LE500DRC	Drum collector	1	
Error e. L'orig ine riferi ment o non è stata trova ta.	LE500MC	Mandrel collector (5mm diam)	1	
Error e. L'orig ine	LE500YSM	Y-Axis automated scanning emitter motion	1	

riferimento non è stata trovata.				
Error e. L'origine riferimento non è stata trovata.	LE500TS	Tubeless solution dispensing system(one single emitter)	1	
Error e. L'origine riferimento non è stata trovata.	LE500EF	Exhaust filter (HEPA or ULPA)	1	
Error e. L'origine riferimento non è stata trovata.	LE500AC	Environmental Control Unit (ECU): Temp and RH regulation	1	
SF4		Pre-installation for a possible future upgrade of one high-pressure 4-channel syringe pump	1	
SF5		High-Definition Process Data Hub (Industry 4.0)	1	
Error e. L'origine riferimento non è stata trovata.	LE500RDB	Multi-user level access with recipe database	1	

Error e. L'origine riferiment o non è stata trova ta.	LE500PSMR	Programmable sequential multi-step recipe function	1	
SF7		Development of programmable recipes from an external computer	1	
Error e. L'origine riferiment o non è stata trova ta.	LE500ATF	Audit trail function	1	
Error e. L'origine riferiment o non è stata trova ta.	LE500BCF	Batch control function	1	
SF8		Remote visualization/commanding of the equipment software tool (Sm@rt Server included) – (Industry 4.0)	1	
		User guide provided in both English and Italian	1	
SF10		HMI menus in Italian language as well (includes the programming work + translation)	1	
		TOTAL 1 (Ex-Works, VAT excluded)		€333.550
		Consumables/Spare Parts Kit	1	€2.000
		Estimated Shipping incl. insurance (Incoterm: DAP) +	1	€2.800
		Optional installation & training course – standard SAT (2-3 days) ++	1	€3.100

In linea generale la tabella riassuntiva illustra il range orientativo di macchine e costo (limitatamente alla LE100 e LE500) per una macchina ben equipaggiata e con ROLL2ROLL

- la LE100 standard (orientata allo sviluppo) può infatti variare tra 120-190k€ + IVA.
- la LE500 o LE500PRO (orientate al manufacturing) può variare tra 240-440k€ + IVA

TABELLA 4: raffronto sinottico tra le macchine Fluidnatek con roll-2-roll

MODELLO	OSSERVAZIONI e LINK
LE100	<ul style="list-style-type: none"> • Produzione in batch • Roll2roll da 30 cm • Sistema a siringa (fino a 150 mL) x3 • Software controllo in line del processo e del campione (decine di parametri) • Bassissimi costo di gestione e massima flessibilità, consentendo ogni configurazione possibile e piccole produzioni prototipali di grado industriale • Piccolissima impronta a terra • Versione BIO in Inox disponibile per GMP e clean room <p>https://www.youtube.com/watch?v=yVdzwB1_2lc</p>
LE500	<ul style="list-style-type: none"> • Produzione Semi-continua • Roll2roll da 50 cm • Batch da 8L con sistema cilindri + • Sistemi a siringa per R&D • Possibilità di spinnare dal basso da bagno liquido (tecnologia proprietaria) • Software controllo in line del processo e del campione (decine di parametri) • Nella versione PRO: <ul style="list-style-type: none"> ◦ sistema alto throughput con pompa peristaltica fino a 4 L ◦ funzionamento in azoto di default e controllo Ossigeno per ATEX <p>https://www.youtube.com/watch?v=mcezC5neMog</p>
LE HT	<ul style="list-style-type: none"> • Produzione continua (1 fermo macchina a settimana) • Possibilità di montare oltre 200 iniettori in parallelo • Possibilità di spinnare dal basso da bagno liquido (tecnologia proprietaria) <p>Link non disponibile Visibile direttamente presso Bioinicia</p>

Tutte sono condizionabili con il proprio sistema di condizionamento dedicato (non illustrato).