

**Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche
XXXV Ciclo – Anno Accademico 2019-2020**

Proponente: Michele Pavone

Informazioni sul progetto

1. Titolo del Progetto di Ricerca

Modeling multi-scala di interfacce solido-liquido in celle elettrochimiche per la riduzione di CO₂.

2. Parole chiave

Riduzione di CO₂; Multi-scale Modeling; interfaccia elettrodo-elettrolita; Fotoelettrochimica.

3. Descrizione sintetica del progetto di ricerca

Questo progetto affronta lo studio della riduzione elettrocatalitica della CO₂ verso sostanze chimiche ad alto valore aggiunto mediante la conversione efficiente dell'energia solare. Rispetto alle attuali celle fotoelettrochimiche, sarà progettato un nuovo dispositivo ibrido costituito da diversi materiali funzionali, ciascuno scelto appositamente per eseguire al meglio uno specifico compito tra i tanti necessari a convertire la CO₂ a combustibile solare (Fig. 1).

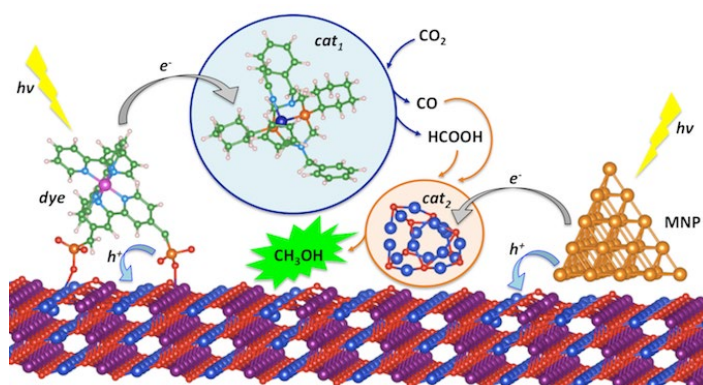


Figure 1. Multi-component heterogeneous catalyst for CO₂ reduction.

A tal fine, sarà sviluppato e convalidato un approccio innovativo multi-scala che combinerà dinamica molecolare ab initio, calcoli di struttura elettronica avanzati (TD-DFT, GW) e la recente Density Functional Embedding Theory (DFET). In un unico insieme, le simulazioni con questi metodi possono indagare diverse scale di spazio e tempo, consentendoci di disaccoppiare i tanti processi che sono coinvolti nella foto riduzione di CO₂, e quindi identificare e ottimizzare il materiale migliore per ogni reazione elementare, dall'assorbimento del fotone al prodotto finale.