

Università degli Studi di Perugia

Dipartimento di Ingegneria Civile e Ambientale

PNRR – Partenariati Estesi

Schede di sintesi delle proposte dei gruppi di ricerca presenti all'interno del DICA

SCHEDA N. 8 – GRUPPO CHIM/07

TEMA 3: Rischi ambientali, naturali e antropici

Proponente della proposta progettuale	Gruppo CHIM/07
Dipartimento/Centro del Proponente/Coordinatore	Dip. di Ingegneria Civile e Ambientale (DICA) – Tema 3 Dipartimento di Ingegneria (DI) – Tema 2, 15
Dipartimenti/Centri potenzialmente coinvolti	DI, DCBB (Tema 2) DI, DCBB, DSF, DSA3 (Tema 3) DCBB, DFeB, DMI
Eventuali collaborazioni pubbliche e/o private (riportare eventuali partner istituzionali/imprenditoriali coinvolgibili nell'idea progettuale)	Da definire
Titolo (indicativo) della proposta progettuale	Da definire
Tematica/tematiche di prevalente interesse (max 300 caratteri spazi inclusi)	<u>Tema 2: Scenari energetici del futuro</u> Materiali innovativi optoelettronici e (foto)catalisi in reazioni chimiche di interesse ambientale e nella produzione e stoccaggio di energia: si tratta di studi teorici volti a caratterizzare proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche di nuovi materiali per applicazioni fotovoltaiche low-cost. Su tutti, grande rilevanza è data allo studio delle perovskiti di alogenuri ibride organico-inorganiche (OIHP). Studio teorico di materiali layered (esfoliati) per fotocatalisi, storing di idrogeno e filtrazione di flussi gassosi pre- e post-combustione. Non solo rivolgiamo interesse a nuovi materiali per il fotovoltaico ma è di particolare attenzione lo studio di materiali specifici a bassa dimensionalità per fotocatalisi. Purificazione e utilizzo di CO ₂ con e senza catalisi in fase solida mediante l'uso di energie rinnovabili: produzione di metano o altri combustibili in un regime di economia circolare. Trattamento teorico e computazionale dei processi molecolari elementari reattivi e non reattivi e individuazione degli step microscopici determinanti la velocità di reazione. Generazione e caratterizzazione di plasmi per la conversione di CO ₂ a combustibili. <u>Tema 3: Rischi ambientali, naturali e antropici</u> Fotocatalisi con TiO ₂ . L'attività di ricerca è prevalentemente indirizzata alla preparazione e caratterizzazione sia teorico che sperimentale di una serie di polveri di titanio diossido (TiO ₂) che

	<p>presentino caratteristiche strutturali e di superficie tali da consentirne un'elevata efficienza nella fotodegradazione di molecole inquinanti presenti nell'atmosfera.</p> <p>Progettazione e realizzazione d'impianti di sanitizzazione e potabilizzazione di acque destinate ad uso industriale e civile;</p> <p>Determinazione analitica di contaminanti ambientali (metalli pesanti, VOCs, pesticidi, nitrati-nitriti, aflatossine, etc.);</p> <p>Studio della distribuzione della radioattività ambientale in biologia architettonica: esposizione a radiazioni ionizzanti in abitazioni, cantieri e ambienti di lavoro.</p> <p><u>Tema 15: Attività spaziali</u></p> <p>Studio sperimentale e teorico dei processi chimici elementari coinvolgenti specie neutre, radicaliche, eccitate e ioniche d'interesse nelle combustioni, nei plasmi, per le atmosfere planetarie e gli spazi interstellari e in astrobiologia. In particolare in ambito astrobiologico, risulta di fondamentale importanza lo studio delle origini ed evoluzione di composti organici di interesse biologico nello spazio (comete, asteroidi, pianeti rocciosi, lune) e composti prebiotici che stanno alla base dell'origine della vita. Questo studio può fornire informazioni sull'origine, l'evoluzione e l'adattamento della vita in ambienti estremi sulla Terra e nello spazio. Le specie di interesse astrochimico e astrobiologico e la loro reattività sono studiate:</p> <p>a) a livello sperimentale, mediante due apparati prototipo a fasci molecolari. In uno di essi si utilizza la tecnica dell'ion imaging in un apparato ad alto vuoto, che, generando un fascio di specie ioniche e uno di atomi o molecole neutre/radicaliche, è in grado di simulare le condizioni fisiche presenti nelle atmosfere planetarie e negli spazi interstellari e studiare in grande dettaglio e con elevatissima risoluzione i processi ionici reattivi che possono avvenire in questi ambienti; nell'altro apparato, ad incrociare un fascio di specie neutre, è un fascio di specie eccitate in grado di produrre reazioni di autoionizzazione collisionale, dette anche processi di ionizzazione Penning o chemiionizzazioni: si tratta di reazioni che possono costituire un importante percorso di formazione per le specie ioniche nelle alte atmosfere planetarie e che sono di estremo interesse nel caso delle problematiche correlate con la trasmissione dei segnali radio e satellitari;</p> <p>b) a livello teorico, mediante accurati metodi quantomeccanici ab initio che permettono di includere in maniera sistematica effetti di correlazione. Con tali metodi è possibile ottenere una descrizione della superficie potenziale dei sistemi di interesse, coinvolti in specifiche reazioni, attraverso il calcolo accurato dei punti stazionari della superficie (minimi e stati di transizione). Tali informazioni possono essere utilizzate per calcoli di costanti di velocità di reazione usando tecniche quali RRKM o capture theory. Queste costanti cinetiche possono essere inserite nei principali database astronomici (KIDA, UDfA) che sono di ausilio per l'interpretazione dei dati ricavati dagli osservatori, in modo di arrivare in ultimo ad un miglioramento delle capacità di osservazione dello spazio.</p>
Grado di T.R.L di partenza	Da definire

<p>(ove applicabile la scala TRL, descrivere il livello di maturità dell'ipotesi progettuale iniziale facendo riferimento ai gradi e alle declaratorie della scala TRL europea)</p>	
<p>Sintesi (estrema) degli obiettivi e delle possibili ricadute nel territorio locale e/o nazionale</p> <p>(descrivere i principali obiettivi, i risultati attesi e eventuali impatti di ricaduta; max 500 caratteri spazi inclusi)</p>	<p>Da definire</p>
<p>Costo complessivo del progetto</p> <p>(riportare in k-euro l'ordine di grandezza: 100 k-e, 500 k-e,)</p>	<p>Da definire</p>
<p>Informazioni aggiuntive</p> <p>(riportare ogni informazione ritenuta utile a rappresentare l'idea progettuale: es. eventuali finanziamenti nazionali/internazionali già ottenuti, eventuali partenariati nazionali/internazionali già consolidati intorno all'ipotesi progettuale; eventuali attività di ricerca commissionata in partenariati pubblico/privati collegati all'idea progettuale; eventuali brevetti collegati; collaborazioni in atto da lunga data etc. - max 500 caratteri spazi inclusi)</p>	<p>Da definire</p>