

PER CANDIDARSI ALLE TESI PROPOSTE SI RICHIEDE DI MANDARE APPENA POSSIBILE E COMUNQUE NON OLTRE IL 30/1/24 UNA MAIL AI PROFF. A. CASALEGNO, M. ZAGO, A. BARICCI E C. RABISSI, INCLUDENDO CURRICULUM VITAE, TRACK OF RECORD E COMPILANDO IL MODULO ALLEGATO.

Batterie a flusso

Come riportato nel Piano Nazionale Integrato per l'Energia e il Clima 2030 (PNIEC), lo sviluppo della capacità di accumulo è un obiettivo fondamentale ed entro il 2030 sarà infatti necessario prevedere accumuli di tipo elettrochimico con un tempo di accumulo di circa 8 ore. In questo contesto, le batterie a flusso al vanadio (VRFB) sono molto promettenti grazie all'elevata vita utile e alla capacità di disaccoppiare potenza ed energia. Tuttavia, alcune problematiche tecnologiche necessitano di essere ulteriormente approfondite al fine di aumentarne la competitività. Nel presente ambito si collocano i seguenti lavori di tesi magistrale con controrelatore:

1. Progettazione e realizzazione di un prototipo VRFB da 600 cm². L'obiettivo del lavoro è quello ottenere una singola cella basata su un design innovativo dei distributori, accoppiato all'utilizzo di separatori sviluppati e realizzati tramite Ultrasonic Spray Coating presso l'MRT Fuel Cell & Battery Lab (Attività svolta nell'ambito del progetto PNRR MUSA - Multilayered Urban Sustainability Action ed in collaborazione con un partner industriale).
2. Analisi della degradazione degli elettrodi in VRFB. L'obiettivo del lavoro è lo studio della degradazione tramite un approccio combinato sperimentale modellistico e la definizione di test di degradazione accelerata (ASTs) rappresentativi dei fenomeni di degradazione che avvengono durante cicli caratteristici del reale funzionamento della batteria. (Attività svolta nell'ambito del progetto MIAMI - Materiali Innovativi per Sistemi di Accumulo Ibrido).
3. Progettazione, realizzazione e caratterizzazione sperimentale di una batteria idrogeno-vanadio, basata su separatori di ridotto spessore e diverse configurazioni di elettrodi e distributori. Il lavoro proposto prevede inoltre un confronto con la tecnologia degli elettrolizzatori a membrana polimerica. (Attività svolta nell'ambito del progetto MIAMI - Materiali Innovativi per Sistemi di Accumulo Ibrido).

I lavori proposti sono prevalentemente sperimentali, ma sono anche integrati con attività teorico-modellistiche. Le attività sono svolte in presenza presso il laboratorio MRT Fuel Cell and Batteries (Bovisa BL25).

Data di inizio presunta: marzo 2024

Batterie al litio

I lavori di tesi si collocano nell'ambito dell'economia circolare delle batterie agli ioni di litio (LIB), che mira al riutilizzo di batterie usate in ambito automotive in applicazioni meno stringenti al fine di incrementare la sostenibilità della tecnologia.

Le attività comprendono attività sperimentali di studio della degradazione (test di aging accelerato e relativa diagnostica) ed interpretazione (basata sul potenziamento ed uso di modelli fisici preesistenti). Nel laboratorio MRT FC&B si studia il degrado e l'operazione delle singole celle, anche caratterizzandone campioni di materiale invecchiato con analisi ex-situ. Nel nuovo laboratorio Interdipartimentale Circ-EV si caratterizzano moduli di batterie di grande taglia provenienti da reale utilizzo veicolare per stimarne le prestazioni, ed interpretarne la degradazione, con particolare attenzione alla sua eterogeneità tra le singole celle che le costituiscono.

I lavori disponibili per tesi magistrale con controrelatore sono:

4. Perfezionamento del metodo innovativo di diagnostica di moduli di batterie, applicandolo alla stima dello stato di salute di campioni invecchiati nella reale applicazione, con particolare attenzione alla sua eterogeneità tra le celle costituenti. L'attività prevede la messa a punto di strategie innovative di monitoraggio e sensorizzazione termica e meccanica accoppiate a modellazione fisica dei fenomeni coinvolti.
5. Investigazione dell'operazione e dei conseguenti meccanismi di invecchiamento su single-cell commerciali, anche attraverso campagne di aging di laboratorio e interpretazione con modello fisico. L'attività richiederà la messa a punto e l'applicazione di metodologie di analisi ex-situ di campioni di materiale nuovo ed invecchiato e sviluppo di sensori elettrochimici e termici interni.
6. Predizione della vita residua di batterie sottoposte ad invecchiamento in applicazioni automotive in funzione del tipo di operazione e implementazione di diagnostiche on-board, sviluppando ed applicando logiche data-driven basate su Machine learning utilizzando dati sperimentali già disponibili e misure ad-hoc da effettuare in laboratorio. (In collaborazione con prof. B. Najafi)

I lavori combinano attività sperimentali e modellistiche e sono svolte prevalentemente in presenza presso i laboratori MRT Fuel Cell & Batteries (BL25) e Circ-eV (B23), nel contesto di attività finanziate in progetti di ricerca pubblici e/o in collaborazioni industriali con aziende operanti nel settore dei trasporti.

Data di inizio presunta: marzo 2024

Celle a Combustibile PEM a idrogeno

I temi disponibili per tesi magistrale con controrelatore sul tema delle celle a combustibile PEM a idrogeno:

7. Sviluppo e test di hardware segmentato con area attiva pari a quella della reale applicazione. L'attività è svolta in collaborazione con partner industriali e prevede:
 - sviluppo del setup sperimentale e analisi sperimentale della distribuzione spaziale della densità di corrente e della temperatura per diverse condizioni operative;
 - studio della densità di corrente in cicli dinamici che riproducono i fenomeni di degradazione in reali condizioni di applicazione.
8. Analisi sperimentale del degrado di celle a combustibile PEM in condizioni di funzionamento heavy-duty, attraverso test sperimentali in cella singola su materiali commerciali. L'obiettivo è quello di studiare l'impatto delle condizioni operative di esercizio, quali temperatura, umidità relativa dei reagenti, profilo dinamico di carico e pressione sulla degradazione dei componenti del catalyst layer catodico e valutare eterogeneità di degradazione (in-plane e through-plane). Verranno eseguiti inoltre test ad-hoc per valutare nel dettaglio il degrado temporaneo e permanente dello ionomero all'interno del catalyst layer catodico con particolare attenzione all'interazione ionomero-catalizzatore. Attività svolta nell'ambito del progetto PERMANENT finanziato dal PNRR. **Fino a 2 persone.**
9. Sviluppo e caratterizzazione sperimentale di elettrodi per celle a combustibile PEM realizzati mediante Ultrasonic Spray Coating. L'oggetto del lavoro è lo studio dell'influenza delle proprietà dei materiali, in particolar modo dello ionomero, sulle prestazioni e la durabilità delle celle a combustibile. Il lavoro sarà volto anche alla progettazione di elettrodi per PEMFC innovativi con strutture a gradiente al fine di mitigare i processi di degradazione. Attività svolta nell'ambito del progetto PERMANENT finanziato dal PNRR.
10. Sviluppo e validazione di modelli numerici utili a comprendere l'impatto delle condizioni operative tipiche del mondo heavy-duty sulle prestazioni e sul degrado delle celle a combustibile PEM. L'attività, svolta all'interno del progetto italiano PERMANENT, partirà da una campagna sperimentale utile a comprendere l'effetto delle reali condizioni di esercizio sul meccanismo di trasporto dei radical scavenger, causa principale del degrado chimico e meccanico della membrana. Tale attività verrà supportata da uno studio modellistico finalizzato allo sviluppo in Matlab/Simulink di opportuni modelli fisici di degrado della membrana che, se integrati con un modello preesistente di stack, consentiranno di sviluppare un'innovativa struttura modellistica in grado di stimare correttamente l'impatto dei principali meccanismi di degrado sulle prestazioni e, quindi, di proporre opportune strategie di mitigazione. (La tesi parte da modelli già sviluppati all'interno del MRT Fuel Cell & Battery Lab).
11. Sviluppo e validazione di modello numerico di sistema PEMFC per applicazioni heavy-duty per scopi di ottimizzazione. L'attività è finalizzata alla comprensione e modellazione in MATLAB/Simscape dei principali fenomeni fisici che avvengono all'interno della PEMFC, utilizzando algoritmi di ottimizzazione e intelligenza artificiale per la parametrizzazione ottimale delle proprietà di trasporto. Il modello di PEMFC sarà calibrato e validato grazie ad un database sperimentale derivante da test eseguiti su un hardware di cella a combustibile differenziale (Zero-Gradient) e sarà integrato in un modello di sistema esistente per l'ottimizzazione della progettazione e delle strategie di



controllo. (Attività svolta con partner industriali e nell'ambito del progetto PERMANENT finanziato dal PNRR).

12. Sviluppo di modelli numerici in grado di descrivere l'instabilità del catalizzatore delle celle PEM a idrogeno. La comprensione dei meccanismi di dissoluzione e di rideposizione del catalizzatore aiuterà ad identificare i fenomeni critici che si riscontrano nel funzionamento dinamico dell'applicazione. Il modello sarà validato su dati sperimentali relativi a materiali commerciali allo stato dell'arte, già disponibili presso il laboratorio MRT Fuel Cell & Battery, e a materiali innovativi, in particolare leghe platino-cobalto, garantiti da collaborazioni. Nell'ambito di questo lavoro si interagirà strettamente con il National Institute of Chemistry di Ljubljana (ElectroCat Lab), dedicato a studi fondamentali.

I lavori proposti sono prevalentemente sperimentali e possono essere integrati con attività teorico-modellistiche. Le attività sono svolte in presenza presso il laboratorio MRT Fuel Cell and Batteries (Bovisa BL25). I lavori si inseriscono all'interno di progetti finanziati dal PNRR e/o in collaborazioni industriali con aziende operanti nel settore dei trasporti.

Data di inizio presunta: marzo 2024

TO APPLY IS NECESSARY TO SEND AS SOON AS POSSIBLE AND BY 30/1/24 AN EMAIL TO PROFS. A. CASALEGNO, M. ZAGO, A. BARICCI AND C. RABISSI INCLUDING CURRICULUM VITAE AND TRACK RECORD OF EXAMS, FILLING THE ATTACHED FORM.

Redox flow batteries

As reported in Piano Nazionale Integrato per l'Energia e il Clima 2030 (PNIEC), the development of storage technologies is fundamental and by 2030 it will be necessary to introduce electrochemical storage technologies with energy-to-power ration equal to 8. In this scenario, vanadium redox flow batteries (VRFBs) are promising due to the high cycle life and the intrinsic possibility to decouple energy and power. However, some technical issues need to be further investigated in order to increase technology competitiveness. Considering this framework, the following research master thesis topics with external examiner are proposed:

1. Design and manufacturing of a 600 cm² VRFB prototype. The aim of the work is the realization of a VRFB single cell based on an innovative design of the flow field, coupled with a selective layer developed and manufactured with Ultrasonic Spray Coating at MRT Fuel Cell & Battery Lab (Activity performed in the framework of the PNRR project MUSA - Multilayered Urban Sustainability Action and in collaboration with an industrial partner).
2. Analysis of the causes and mechanisms behind the degradation of VRFB electrodes. The aim of the work is the investigation of VRFB degradation by means of a combined experimental and modelling analysis and the definition of Accelerated Stress Test (ASTs) representative of degradation occurring during real operation. (Activity performed in the framework of the project MIAMI - Materiali Innovativi per Sistemi di Accumulo Ibrido).
3. Design, development and characterization of a hydrogen-vanadium battery, based on thin separators and different electrode and flow-field configurations. The proposed thesis project includes also a comparison with polymer electrolyte membrane water electrolyzers. (Activity performed in the framework of the project MIAMI - Materiali Innovativi per Sistemi di Accumulo Ibrido).

The proposed projects are mainly experimental, but are also integrated with theoretical and modelling activities. These activities are performed personally at the MRT Fuel Cell and Batteries laboratory (Bovisa BL.25).

Estimated start date: march 2024

Lithium-ion batteries

The thesis works are part of the circular economy of lithium-ion batteries (LIB), aiming at the reuse of batteries used in the automotive sector in less demanding applications, in order to improve the sustainability of the technology.

Activities include experimental activities of degradation study (accelerated aging test and related diagnostics) and interpretation (based on the enhancement and usage of pre-developed physical models). In the MRT FC&B laboratory, the degradation and operation of single cells is studied, also characterizing samples of aged material with ex-situ analysis, while in the new Circ-EV Interdepartmental laboratory, large battery modules from real vehicular use are characterized to estimate their performance and interpret their degradation.

The works available for MSc thesis with counter-supervisor are:

4. Improvement of the innovative method of diagnostics of battery modules, applying it to the estimation of the health status of aged samples in real application, with particular attention to its heterogeneity among the constituent cells. The activity involves the development of innovative strategies for thermal and mechanical monitoring and sensorization coupled with physical modeling of the phenomena involved.
5. Investigation of the operation and the consequent mechanisms of aging on commercial single-cells, also through laboratory aging campaigns and interpretation with physical model. The activity will require the development and application of ex-situ analysis methodologies of samples of new and aged material and the development of internal electrochemical and thermal sensors.
6. Prediction of the residual life of aging batteries in automotive applications as a function of operative profile and implementation of on-board diagnostics, developing and applying data-driven logics based on A.I. to experimental data already available and ad-hoc measurements to be carried out in the laboratory. (In collaboration with prof. B. Najafi)

The works combine experimental and modelling activities and are to be mainly carried out in presence at the MRT Fuel Cell & Batteries (BL25) and Circ-eV (B23) laboratories, in the context of activities funded in public research projects and/or in industrial collaborations with companies operating in the transport sector.

Estimated start date: march 2024

Hydrogen PEM Fuel Cells

The available topics for a master's thesis with a co-supervisor on the subject of hydrogen PEM fuel cells:

7. Development and testing of a segmented hardware with active area equal to the one of the real application. The activity is performed in collaboration with industrial partners and involves:
 - development of the experimental setup and experimental analysis of the current density and temperature spatial distribution under different operative conditions;
 - evaluation of the current density distribution under dynamic cycles reproducing the degradation mechanisms occurring in real applications.
8. Experimental investigation of PEM fuel cell degradation under heavy-duty conditions. The aim of the work is to assess the impact of operating conditions, such as temperature, reactants relative humidity, pressure and dynamic load profile, on cathode catalyst layer components degradation and the evaluation of degradation heterogeneities (in-plane and through-plane). Ad-hoc tests will be carried out for a detailed evaluation of temporary and permanent ionomer degradation, with particular focus on catalyst-ionomer interaction. This activity is carried out in the framework of the PNRR project PERMANENT. **Up to 2 people.**
9. Development and experimental characterization of PEM fuel cell electrodes manufactured with Ultrasonic Spray Deposition. The aim of the work is the investigation of material properties, in particular ionomer properties, on fuel cells performance and durability. The work will be also focused on the development of innovative electrodes with gradient structures, aiming at mitigating degradation processes. This activity is carried out in the framework of the PNRR project PERMANENT.
10. Development and validation of numerical models aimed at understanding the impact of typical heavy-duty operating conditions on the performance and degradation of PEM fuel cells. The activity, carried out in the framework of Italian project PERMANENT, will start with an experimental campaign aimed at understanding the effect of the real world operating conditions on the transport mechanisms responsible for radical scavenger migration, which lead to the chemical and mechanical degradation of the membrane. This research line will also be supported by a modelling analysis aimed at developing in Matlab/Simulink proper physical degradation models of the membrane. The integration of these models with an existing performance stack model will allow to develop an innovative model framework able to estimate the impact of the main ageing mechanisms on fuel cell performance and, therefore, to develop proper mitigation strategies. (The thesis will exploit existing models previously developed by the staff of MRT Fuel Cell & Battery Lab)
11. Development and validation of numerical PEM fuel cell system model for heavy-duty application suitable for engineering optimization. The activity is aimed at the understanding and modelling in MATLAB/Simscape of the main physical phenomena occurring inside the PEMFC, utilizing optimization algorithms and artificial intelligence for optimal parametrization of transport properties. The model of PEMFC will be calibrated and validated thanks to an experimental database from tests performed on a differential fuel cell hardware (Zero-Gradient) and will be integrated into an existing system model for design and control optimization. (Activity carried out together with industrial partners and in the framework of the PNRR project PERMANENT).



12. Development of numerical models able to describe the instability of PEM cells catalyst. Understanding the mechanisms of catalyst dissolution and redeposition will help to identify the critical phenomena encountered in the dynamic operation of the application. The model will be validated on experimental data obtained from state-of-the-art commercial materials, already available at the MRT Fuel Cell & Battery Lab, and from innovative materials, in particular platinum-cobalt alloys, which will be ensured through collaborations. As core part of this work, there will a strict interaction with the National Institute of Chemistry of Ljubljana (ElectroCat Lab), dedicated to fundamental studies.

The proposed activities are primarily experimental and can be integrated with theoretical and modelling activities. These activities are performed personally at the MRT Fuel Cell and Batteries laboratory (Bovisa BL25). The work is part of projects financed by the National Recovery and Resilience Plan (PNRR) and/or in industrial collaborations with companies operating in the transport sector.

Estimated start date: march 2024