PNRR - POR H2
PIANO OPERATIVO DI RICERCA SULL'IDROGENO

**Organismi di Ricerca e Università insieme
per lo sviluppo della filiera nazionale dell'idrogeno**

16-17 luglio 2024

Auditorium Antonianum
Viale Manzoni, 1 - 00185 Roma

Gruppo di lavoro

Claudia Bassano

Viviana Cigolotti

Paola Gison

Vera La Ferrara

Carla Menale

Roberta Mecozzi

Maria Rosaria Seminara

ORGANISMI DI RICERCA E UNIVERSITÀ INSIEME PER LO SVILUPPO DELLA FILIERA NAZIONALE DELL'IDROGENO

Nel contesto della transizione energetica globale, l'idrogeno emerge come una risorsa cruciale per costruire un futuro sostenibile. L'idrogeno può essere utilizzato sia come combustibile, producendo energia senza emissioni di carbonio, sia come vettore energetico per lo stoccaggio e la distribuzione di energia rinnovabile, migliorando l'efficienza delle reti integrate con fonti energetiche rinnovabili.

Il Piano Operativo di Ricerca sull'Idrogeno (POR H2) è uno strumento strategico per lo sviluppo e l'integrazione delle tecnologie legate all'idrogeno in Italia. Esso si inserisce in un contesto di finanziamenti nazionali e internazionali, tra cui il Piano Nazionale di Ripresa e Resilienza (PNRR), Missione 2, Componente 2, Investimento 3.5 "Ricerca e Sviluppo sull'Idrogeno", avviato a giugno 2022 con un finanziamento di 110 Milioni di Euro, l'iniziativa Mission Innovation, ed i progetti IPCEI, che nel loro insieme stanno mobilitando investimenti miliardari a sostegno della filiera dell'idrogeno.

L'Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia e lo sviluppo economico sostenibile (ENEA) è stata individuata dal MASE come soggetto realizzatore del POR H2 ed il Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR) e la Ricerca sul Sistema Energetico (RSE) come soggetti co-realizzatori. L'accordo di programma ha favorito la creazione di partenariati strategici tra enti come ENEA, CNR e RSE e numerose Università, promuovendo il trasferimento tecnologico e l'innovazione grazie alla condivisione di competenze e risorse. Nell'ambito del progetto, ENEA ha attivato 61 accordi di collaborazione, con le principali Università italiane, su tutti i temi riguardanti la ricerca e lo sviluppo delle tecnologie dell'idrogeno a basso TRL, finanziando più di 70 borse di dottorato di ricerca ed accogliendo 28 giovani ricercatori.

Il presente Book of Proceedings raccoglie i contributi raccolti in occasione dell'evento nazionale del POR H2, svoltosi a Roma il 16 e 17 luglio 2024 presso l'Antoniano. L'incontro ha rappresentato un'importante opportunità di confronto tra ricercatori, esperti e istituzioni, raggruppando la comunità scientifica italiana impegnata sul tema idrogeno. Con la partecipazione di oltre 220 specialisti provenienti dalle università italiane e dagli enti di ricerca ENEA, CNR e RSE, l'evento ha permesso di condividere obiettivi, attività e progressi del programma, rafforzando il dialogo tra il mondo della ricerca e il settore industriale, con l'obiettivo di consolidare la filiera nazionale dell'idrogeno.

Gli abstract qui raccolti sono suddivisi nelle varie arie tematiche che caratterizzano gli obiettivi del POR H2. Si ringraziano tutti gli autori, gli organizzatori ed i partecipanti che hanno reso possibile questo evento e la pubblicazione del presente volume.

OBIETTIVI DEL POR

Per tradurre gli obiettivi strategici in azioni concrete, il POR H2 è stato strutturato in quattro obiettivi principali, declinati in specifiche linee di attività operative, che coprono l'intera catena del valore dell'idrogeno: dalla produzione al trasporto, dallo stoccaggio fino al suo utilizzo in celle a combustibile e alla gestione intelligente delle infrastrutture. Il programma ha previsto investimenti in ricerca e sviluppo, favorendo il trasferimento tecnologico e la formazione di nuove competenze, coinvolgendo in modo sinergico tutti gli attori impegnati in ricerche sull'idrogeno, nelle università e negli enti di ricerca italiani.

Obiettivo 1: Produzione di idrogeno verde e pulito

Le attività inserite in questo obiettivo si focalizzano sullo sviluppo di tecnologie per la produzione di idrogeno a partire da fonti rinnovabili:

- Elettrolisi avanzata: ricerca e sviluppo di soluzioni elettrolizzatori a bassa e alta temperatura per migliorare il rendimento dei processi.
- Metodi alternativi quali processi fotocatalitici, termochimici e di conversione della biomassa per integrare la produzione di idrogeno con fonti rinnovabili.
- Studio di sistemi che combinino la produzione di idrogeno con la cogenerazione di energia termica, per incrementare la competitività economica.

Obiettivo 2: Stoccaggio, trasporto e trasformazione in carburanti sintetici (e-fuels)

Le attività inserite in questo obiettivo si focalizzano sulle tecnologie per lo stoccaggio ed il trasporto dell'idrogeno:

- Nuovi Materiali per lo Stoccaggio: Sviluppo e test di materiali ad alta capacità come Metal-Organic Frameworks (MOFs) e grafene, sia in forma liquida che solida, per garantire sicurezza ed efficienza.
- Infrastrutture di Trasporto: Progettazione di sistemi integrati che sfruttino infrastrutture esistenti (come gasdotti) verificando la possibilità di blending con il metano e la creazione di reti dedicate per il trasporto, minimizzando i rischi operativi.
- Conversione in Derivati: Ricerca di processi che permettano la trasformazione dell'idrogeno in combustibili sintetici o in prodotti alternativi come l'ammoniaca o il metanolo per favorire l'integrazione con le infrastrutture esistenti facilitando la logistica.

Obiettivo 3: Celle a combustibile

Le attività inserite in questo obiettivo sono dedicate allo sviluppo di celle a combustibile per applicazioni stazionarie e di mobilità:

- Efficienza e durata delle celle a combustibile: incremento della durata operativa ed ottimizzazione delle prestazioni
- Riduzione dell'utilizzo di materiali critici: soluzioni alternative e sviluppo di membrane innovative per ridurre l'uso di materiali rari o costosi, mantenendo standard elevati.
- Applicazioni nei trasporti: Sviluppo di progetti pilota per il settore automotive e per il trasporto pesante, con soluzioni adatte sia per applicazioni stazionarie che mobili

Obiettivo 4: Sistemi intelligenti di gestione delle infrastrutture

Le attività inserite in questo obiettivo prevedono la creazione di modelli digitali avanzati per la gestione integrata delle infrastrutture basate sull'idrogeno. L'uso di tecnologie di simulazione e ottimizzazione consentirà di migliorare l'affidabilità delle reti multi-vettore e di favorire l'integrazione dell'idrogeno nei sistemi energetici esistenti.

- Sistemi di monitoraggio e controllo: Implementazione di piattaforme digitali basate su algoritmi di intelligenza artificiale per il monitoraggio in tempo reale degli impianti.
- Integrazione delle reti: Progettazione di sistemi che consentano interoperabilità tra reti elettriche e gas ed una gestione integrata delle nuove infrastrutture con quelle elettriche esistenti.
- Piattaforme collaborative: Strumenti per favorire lo scambio di dati e il coordinamento tra i vari attori del settore.

Il POR H2 rappresenta un modello di innovazione integrata, in cui gli obiettivi strategici si traducono in azioni concrete grazie alla strutturazione in working packages e linee di attività. Il coordinamento tra MASE, enti di ricerca, università e industria non solo genera progetti pilota e iniziative innovative, ma prepara il terreno per formare una nuova generazione di professionisti in grado di affrontare le sfide della transizione ecologica. Attraverso questa sinergia, sarà possibile rafforzare la posizione dell'Italia a livello europeo e internazionale, contribuendo in modo determinante alla rivoluzione verde e alla decarbonizzazione del sistema energetico nazionale.

Indice

Sessione 1 - PROCESSI DI ELETTROLISI A BASSA TEMPERATURA	12
1.1 Processi Di Elettrolisi A Bassa Temperatura	13
<i>Antonino Salvatore Aricò, Stefano Trocino, Stefania Siracusano, Sabrina Zignani, Nicola Briguglio, Salvatore Micari</i>	
1.2 Elettrocatalizzatori senza platino per l'elettrolisi alcalina a bassa temperatura	15
<i>Lorenzo Mirizzi, Mohsin Muhyuddin, Carlo Santoro</i>	
1.3 Ossidi a struttura perovskitica per lo sviluppo di elettrocatalizzatori senza cobalto	17
<i>Elisabetta Di Bartolomeo, Leonardo Duranti, Anna Paola Panunzi</i>	
1.4 Sviluppo di ionomeri e membrane a conducibilità anionica a base di polichetone funzionalizzato	18
<i>Andrea Pucci e Andrea Giovanelli</i>	
1.5 Caratterizzazione di celle e short-stack bassa temperatura	20
<i>Massimo Santarelli, Domenico Ferrero, Laura Gennaro</i>	
Sessione 2 - PROCESSI DI GASSIFICAZIONE PER LA PRODUZIONE DI IDROGENO	21
2.1 Sviluppo di un modello cinetico per la simulazione del processo di Sorption Enhanced Gasification	22
<i>Emanuele Di Bisceglie, Andrea Di Carlo</i>	
2.2 Modellazione di un reattore per idrogassificazione di rifiuti solidi: sperimentazione e simulazione di processo	24
<i>Giorgio VILARDI, Alberto GIACONIA, Valentina SEGNERI</i>	
2.3 Impegno di cicli calcium looping per la decarbonizzazione dell'industria del vetro: valutazioni preliminari	26
<i>O. Palone, L. Gregori, L. Cedola, U. Pasqual Laverdura, G. Vanga, D. Borello</i>	
2.4 Produzione di correnti ricche in idrogeno mediante gassificazione di biomasse	27
<i>Giovanna Ruoppolo</i>	
Sessione 3 - COMPONENTI INNOVATIVI PER CELLE PEM	28
3.1 Sviluppo di processi per la produzione di membrane a conduzione protonica ad alta temperatura	29
<i>Oreste Tarallo, Carlo De Luca, Vincenzo Longobardi</i>	
3.2 Sintesi e Funzionalizzazione di PBI per HTPem FC	30
<i>Andrea Giovanelli e Andrea Pucci</i>	
3.3 Studio di metodiche di deposizione laser per la deposizione di catalizzatori per celle a combustibile a bassa temperatura	32
<i>Giovanni Ausanio</i>	

3.4	CeO₂/rGO co-catalysts for PEMFCs	34
	<i>L. Iacobini, N. Carboni, J. Montero, V. Naticchioni, M.A. Navarra</i>	
3.5	Sviluppo di sistemi catalitici ad elevata area superficiale per elettrocatalizzatori	36
	<i>Giuseppina Roviello</i>	
3.6	Sviluppo di MEA a base di catalizzatori non-PGM per celle a combustibile a elettrolita polimerico	38
	<i>Irene Gatto, Carmelo Lo Vecchio, Assunta Patti, Vincenzo Baglio</i>	
	Sessione 4 - Processi di conversione da biomasse per la produzione di idrogeno	40
4.1	Reforming catalitico del tar in un impianto pilota di gassificazione della biomassa: primi dati sperimentali	41
	<i>Francesco Zimbardi, Nadia Cerone, Luca Contuzzi, Giuseppe A. Zito, Massimo Carnevale, Vito Valerio, Antonio Villone</i>	
4.2	Integrazione di un processo elettrochimico nel sistema di scrubbing del syngas di un impianto di gassificazione di biomasse	43
	<i>Michele Mascia, Laura Mais, Nicola Melis, Annalisa Vacca</i>	
4.3	Catalizzatori a base di Ni-Cu per l'idrogenolisi in fase acquosa di glicerolo assistita dall'aqueous phase reforming di etanolo in condizioni di flusso	45
	<i>Vladimiro Dal Santo, Filippo Bossola</i>	
	Sessione 5 - Gestione integrata delle infrastrutture	47
5.1	Sviluppo e test delle logiche di controllo di un Controllore Centrale di Impianto per la gestione del vettore idrogeno in una rete di distribuzione intelligente	48
	<i>Marco Menga</i>	
5.2	Studio preliminare sull'utilizzo dell'idrogeno per accumulo e co-generazione in un sistema multy-energy	50
	<i>Sergio Bruno</i>	
5.3	Criteri di site suitability per la dislocazione ottimale di componenti di produzione, stoccaggio, distribuzione delle reti di idrogeno e di valutazione del potenziale di idrogeno. Definizione di modelli digitali del sistema di reti di idrogeno	52
	<i>Beniamino Murgante, Alfonso Annunziata, Rossella Scorzelli, Shiva Rahmani</i>	
5.4	Componenti di simulazione di nodi e segmenti significativi di reti di trasporto e distribuzione del vettore Idrogeno: valutazioni preliminari	54
	<i>Antonia Longobardi, Michele Villari</i>	
5.5	Digitalizzazione e Training nel contesto del trasporto e della distribuzione H₂	56
	<i>S. De Vito, G. Fattoruso, E. Esposito, M. Caliano, F. Sergi, A. Merola, M. Pucci</i>	

Sessione 6 - Stack e BOP di celle a combustibile PEM	58
6.1 Design di stack di celle a combustibile PEM ad alta temperatura	59
<i>M. Baldelli, L. Bartolucci, S. Cordiner, M. Kheirrouz, V. K. Krastev, V. Mulone, A. Agresta, F. Donato</i>	
6.2 Progettazione e realizzazione sistema controllo sistemi a celle a combustibile con membrana polimerica	61
<i>Michele Riccio, Andrea Irace, Maria Gragnaniello</i>	
6.3 Sviluppo di modelli per celle a combustibile polimeriche e coprogettazione BoP	63
<i>Andrea Facci</i>	
6.4 Architetture di conversione e controllo per una rete di Fuel-Cell	64
<i>Alessandro Lidozzi, Luca Solero, Giulia Di Nezio, Giovanni Marini</i>	
6.5 Ricerca tecnologica su nuove configurazioni di stack fuel cell ad idrogeno in ambito PNRR	66
<i>G. Giacoppo, E. Gallo, M. Totaro, O. Barbera</i>	
Sessione 7 - Processi di produzione di e-fuels	68
7.1 Definizione delle caratteristiche qualitative e prestazionali degli e-fuels	69
<i>Carlo Giorgio Visconti</i>	
7.2 Sviluppo di un processo catalitico per la sintesi diretta di e-cherosene	71
<i>Mattia Piacentini, Alessandro Porta, Carlo Giorgio Visconti, Luca Lietti</i>	
7.3 Sistemi innovativi per la produzione di ammoniaca verde	73
<i>Arianna Baldinelli, Umberto Desideri</i>	
7.4 Approcci in catalisi eterogenea per la conversione di metanolo a dimetiletere	74
<i>Giovanni Maestri</i>	
7.5 Sintesi e caratterizzazione di zeoliti semipermeabili all'acqua	76
<i>Alessandro Porta, Carlo Giorgio Visconti, Lidia Castoldi, Luca Lietti</i>	
Sessione 8 - Sistemi di accumulo, trasporto e rifornimento di idrogeno	78
8.1 Un modello di ottimizzazione tattico per l'integrazione di sistemi Power to gas in vettori multienergetici	79
<i>Silvia Anna Cordieri, Francesco Simmini</i>	
8.2 Modellistica e simulazione dinamica dell'immissione di idrogeno in reti di distribuzione di gas naturale	81
<i>Guido Sassaroli, Marcelo Andre Muro Alvarado, Vincenzo Casamassima</i>	

8.3 Cavi superconduttori raffreddati a idrogeno: metodologie per la simulazione numerica del comportamento del cavo e dei suoi componenti principali	83
<i>Marco Bocchi, Giuliano Angeli, Andrea Musso</i>	
8.4 Sviluppo di modelli numerici per il dimensionamento delle HRS e per l'ottimizzazione delle condizioni operative in base al tipo di fonte rinnovabile	85
<i>Alessandra Perna, Gabriella di Cicco, Davide Lanni, Viviana Cigolotti, Massimiliano Della Pietra, Antonio Agresta</i>	
8.5 Sviluppo di modelli per l'ottimizzazione del dimensionamento di una HRS	87
<i>Petronilla Fragiaco, Matteo Genovese, Francesco Piraino</i>	
8.6 Sviluppo di modelli per la razionalizzazione dell'esercizio di una HRS	89
<i>Petronilla Fragiaco, Matteo Genovese, Francesco Piraino</i>	
8.7 Serbatoi di accumulo idrogeno basati su idruri metallici per applicazioni mobili e stazionarie	91
<i>Gabriele Scarpati, Giovanni Di Ilio, Elio Jannelli</i>	
8.8 Sviluppo di soluzioni innovative per serbatoi di accumulo di idrogeno basati su idruri metallici	93
<i>Andrea Luigi Facci</i>	
8.9 Metal Hydrides for Maritime applications – Technology assessment, modelling and test bench development	94
<i>Stefano Barberis</i>	
8.10 Materiali innovativi per stoccaggio chimico e fisico di idrogeno allo stato solido	96
<i>Andrea Rossin, Manuela Melucci, Marzio Rancan, Francesco Mercuri, Daniele Colognesi, Rolando Pedicini, Michela Alfé, Cinzia Giannini</i>	
8.11 Progettazione del sensore di idrogeno e del sistema per il reading dei dati dal sensore	98
<i>Tiziana Polichetti, Ettore Massera, Brigida Alfano, Maria Lucia Miglietta, Andrea Cusano, Marco Consales, Angela Maria Cusano, Alberto Micco, Giuseppe Quero</i>	
8.12 Modellazione matematica e numerica di misuratori utilizzati nelle reti di trasporto e distribuzione del gas	100
<i>Gino Cortellessa</i>	
Sessione 9 - Celle a combustibile per applicazioni di mobilità	102
9.1 Prospettive della mobilità a Idrogeno: esperienze del CNR ITAE	103
<i>Laura Andaloro</i>	
9.2 Sviluppo di un trattore ad idrogeno per la logistica portuale	105
<i>Elio Jannelli</i>	

9.3	Configurazioni impiantistiche di sistemi propulsivi basati su SOFC alimentate con hydrogen carriers e sviluppo modelli numerici	107
	<i>Mariagiovanna Minutillo, Aniello Cappiello</i>	
9.4	Utilizzo di combustibili alternativi per la propulsione navale basata su celle a combustibile PEM: confronto fra le soluzioni impiantistiche	109
	<i>Davide Pivetta, Nicola Zuliani, Rodolfo Taccani</i>	
9.5	Soluzioni per la determinazione dello SoH di sistemi PEMFC	111
	<i>Pierpaolo Polverino, Massimo Sicilia, Cesare Pianese</i>	
9.6	Upgrade Sala Prova per Powertrain di Veicoli	113
	<i>Nicolò Mancino</i>	
	Sessione 10 - Processi di elettrolisi ad alta temperatura	115
10.1	Struttura e dinamiche dell'elettrolita di carbonato fuso Li1.24K0.76CO3: simulazioni molecolari con polarizzazione esplicita	116
	<i>Francesco Sessa, Massimiliano della Pietra, Simone Mataloni, Ana Belen Muñoz-Garcia, Michele Pavone</i>	
10.2	Studio parametrico dei principali fenomeni chimico-fisici dell'elettrolizzatore a carbonati fusi alimentato da fonti energetiche rinnovabili (RES)	118
	<i>Massimiliano Della Pietra, Silvia Lo Conte, Simone Mataloni, Gabriele Loreti, Stefano Frangini, Francesca Santoni</i>	
10.3	Analisi multi-scenario sull'integrazione di celle elettrochimiche reversibili ad alta temperatura nei settori chimico e residenziale	120
	<i>Francesca Mennilli, Andrea Monforti Ferrario, Mosè Rossi, Gabriele Comodi, Massimiliano Della Pietra</i>	
	Sessione 11 - Produzione di idrogeno da processi termochimici	122
11.1	Catalizzatori specifici per reattori di reforming elettrico e idrogassificazione di biomasse	123
	<i>Vincenzo Palma, Eugenio Meloni, Emilia Saraceno</i>	
	Sessione 12 - Analisi tecnico-economica e di sostenibilità	125
12.1	Valutazione tecnico-economica sull'utilizzo di idrogeno nei settori Hard to Abate	126
	<i>Simona Di Micco, Elio Jannelli, Mariagiovanna Minutillo, Alessandra Perna</i>	
12.2	Valutazione dell'impatto della mobilità pesante ad idrogeno sul sistema energetico italiano	128
	<i>Antonio De Padova, Andrea Lanzini, Francesco Demetrio Minuto, Alessandro Agostini, Claudio Carbone, Francesco Gracceva</i>	
12.3	Study of the environmental impacts of integrated systems for hydrogen storage by Life Cycle Analysis (LCA)	130
	<i>Alves Ediane; Carbone Claudio; Agostini Alessandro; Barrico Marcelo, Rizzi Paola</i>	

12.4	Valutazione degli impatti sociali dell'idrogeno: aspetti teorici e metodologici	132
	<i>Jacopo Bindi, Francesco Bartolomei, Giuseppe Pellegrini Masini, Alessandro Agostini</i>	
	Sessione 13 – Sistemi innovativi di produzione di idrogeno	134
13.1	Sviluppo di processi bioelettrochimici avanzati per la produzione di combustibili gassosi dal trattamento e la valorizzazione di matrici organiche di scarto	135
	<i>Marianna Villano, Marco Petrangeli Papini, Marco Zeppilli, Luca Di Palma, Raffaella Pomi, Alessandra Poletтини, Tatiana Zonfa, Martina Fazi, Clara Marandola, Domenico Rosa, Gaia Salvatori, Federico Scopetti</i>	
13.2	Elettrometanogenesi geotermica: una risorsa italiana da esplorare nell'ottica della transizione energetica	137
	<i>Pierangela Cristiani</i>	
13.3	Fonti alternative per la produzione di bio-idrogeno: esplorazione della biodiversità delle diatomee	139
	<i>Carlo Fasano, Paolo Facella, Giovanna Cangiulli, Alessandra Rogato, Maria Immacolata Ferrante, Monia Teresa Russo, Fiammetta Alagna, Linda Bianco, Loretta Daddiego, Elio Fantini, Loredana Lopez, Francesco Panara, Bruna Piccione</i>	
	Sessione 14 – Celle a combustibile per applicazioni stazionarie	141
14.1	Effetti di degrado indotti da contaminanti su celle a combustibile ad ossidi solidi	142
	<i>Lucia Pera, Marta Gandiglio, Paolo Marocco, Massimo Santarelli, Davide Pumiglia</i>	
14.2	Modellazione matematica e numerica di celle a combustibile ad alta temperatura di tipo SOFC	144
	<i>Giorgio Grossi, Fausto Arpino, Christian Canale, Gino Cortellessa, Giorgio Ficco, Davide Pumiglia</i>	
14.3	Integrazione di celle a combustibile reversibili ad alta temperatura in sistemi di accumulo ibridi con emissioni negative	146
	<i>Gabriele Loreti, Francesco Marino, Davide Pumiglia, Massimiliano della Pietra, Yuri De Pra, Viviana Cigolotti, Giulia Monteleone</i>	
14.4	Caratterizzazione sperimentale di short stack SOFC alimentati a blending CH₄/H₂	148
	<i>Francesco Marino</i>	
	Programma	150

SESSIONE 1 - PROCESSI DI ELETTROLISI A BASSA TEMPERATURA

CHAIR: Antonino Aricò-CNR

Antonino Salvatore Aricò, Stefano Trocino, Stefania Siracusano, Sabrina Zignani, Nicola Briguglio, Salvatore Micari

Istituto di Tecnologie Avanzate per l'Energia CNR-ITAE

Parole chiave: Idrogeno, Elettrolisi, protocolli, Materiali, Testing

Keywords: Hydrogen, Electrolysis, Protocols, Materials, Testing

Nell'ambito del progetto AdP POR Idrogeno l'ITAE ha sviluppato protocolli di test armonizzati per la valutazione di materiali, componenti e dispositivi per l'elettrolisi ed è stata effettuata la relativa validazione in laboratorio (Fig.1, Fig.2). Le attività hanno mirato a definire e standardizzare metodologie di caratterizzazione per materiali funzionali, valutando proprietà chimiche, fisiche, morfologiche, strutturali e di superficie. Sono stati sviluppati protocolli per test di attività catalitica e caratterizzazione elettrochimica. Specifiche procedure accelerate valutano la stabilità dei componenti nei processi. Per gli assemblati elettrodi-elettrolita, sono stati creati protocolli per misure di polarizzazione, stabilità e durata. Nell'ambito del convegno sono stati presentati sia risultati ottenuti nel progetto che risultati progressi [1] che sono comunque utilizzati come base di partenza per realizzare ulteriori progressi.

Figura 1 :
Curve di polarizzazione di un sistema di elettrolisi a membrana in un ampio campo di temperature.
Polarization curves of a membrane electrolysis system over a wide temperature range.

Figura 2 :
Test di durata di un sistema di elettrolisi a membrana a 80°C.
Durability test of a membrane electrolysis system at 80°C.

As part of the AdP POR Hydrogen project, the ITAE has developed harmonized test protocols for the evaluation of materials, components and devices for electrolysis and the related validation was carried out in the laboratory (Fig.1, Fig.2). The activities aimed to define and standardize characterization methodologies for functional materials, evaluating chemical, physical, morphological, structural and surface properties. Protocols for catalytic activity testing

and electrochemical characterization have been developed. Specific accelerated procedures evaluate the stability of components in processes. For electrode-electrolyte assemblies, protocols have been created for polarization, stability, and lifetime measurements. As part of the conference, both results obtained in the project and previous results were presented, which are however used as a starting point for making further progress.

Pubblicazioni

- Stefania Siracusano, Nicola Briguglio, Fabiola Pantò, Claudio Oldani, Laila Grahl-Madsen, Daniel A. Greenhalgh, Rachel Smith, Ben Green, Gunnar Kielmann, Alexander Flat, Swen Steinigeweg, Anna Molinari, Mette Blom and Antonino S. Aricò, *Advanced polymer electrolyte membrane water electrolysis for power to gas applications*, *Pure and Applied Chemistry*, 96(4), pp. 525-531, 2024, <https://doi.org/10.1515/pac-2023-1015>

Gruppo di ricerca

Istituto di Tecnologie Avanzate per l'Energia CNR-ITAE

Antonino Salvatore Aricò, arico@itae.cnr.it
Stefano Trocino, trocino@itae.cnr.it
Stefania Siracusano, siracusano@itae.cnr.it
Sabrina Zignani, zignani@itae.cnr.it
Nicola Briguglio, nicola.briguglio@itae.cnr.it
Salvatore Micari, micari@itae.cnr.it

1.2 ELETTROCATALIZZATORI SENZA PLATINO PER L'ELETTROLISI ALCALINA A BASSA TEMPERATURA

Lorenzo Mirizzi, Mohsin Muhyuddin, Carlo Santoro

University of Milano-Bicocca

Parole chiave: Elettrocatalizzatori, reazione di evoluzione di idrogeno, reazione di evoluzione di ossigeno, privi di materiali critici, elettrolizzatori a membrana a scambio anionico

Keywords: Electrocatalysts, hydrogen evolution reaction, oxygen evolution reaction, critical raw materials-free, anion exchange membrane water electrolyzers

Per essere competitiva in termini di costi, la generazione di idrogeno deve fare affidamento esclusivamente su componenti privi di materie prime critiche (CRM). Il percorso sintetico per realizzare elettrocatalizzatori a base di Ni per la reazione di evoluzione dell'idrogeno è stato studiato. Questi elettrocatalizzatori sono a base di Nichel ftalocianina supportata su carbon black ad alta area superficiale. La miscela è stata sottoposta a pirolisi nell'intervallo di temperature compreso tra 200 e 1000 °C. I campioni a ogni passaggio di 100 °C sono stati analizzati accuratamente utilizzando strumenti avanzati di caratterizzazione elettrochimica e dei materiali per sviluppare una relazione struttura-proprietà. La diffrazione dei raggi X (XRD) ha indicato la limitazione della crescita dei cristalli fino a 700 °C. Il sovrapotenziale HER tende a diminuire all'aumentare della temperatura di pirolisi. Ciò è dovuto principalmente alla formazione di nanoparticelle e ossidi di nichel. Parallelamente, anche le batterie usate agli ioni di litio contenenti Co al catodo sono state riciclate e il catodo composto da nanoparticelle metalliche e ossidi è stato testato per la HER. Nanoparticelle e ossidi di Cobalto sono stati miscelati con nero di carbonio ad elevata area superficiale, caratterizzati e testati in elettroliti alcalini con sovrapotenziali relativamente bassi. Inoltre sono stati fabbricati elettrocatalizzatori OER privi di CRM utilizzando una tecnica sol-gel semplice ed economica. Materiali amorfi nanostrutturati con diversi rapporti Ni/Fe che studiano l'effetto sinergico dei difetti strutturali indotti da Ni e Fe intrinseci. Sono stati ottenuti materiali Ni-Fe oxo/idrossi in termini di morfologia e proprietà fisico-chimiche. L'attività elettrocatalitica è stata studiata utilizzando un elettrodo a disco rotante (RDE) con basse sovrapotenziali.

(left) LSV related to HER of the electrocatalysts subjected to different temperature.

(Centre) TEM images of the samples treated from 500°C to 1000°C

(right) EXAFS spectra obtained on the NiPcs collected Ex-Situ (data acquired at the BM08 beamline LISA at ESRF).

Images taken from the reference: 10.1021/acscatal.4c03814.

To be competitive in terms of cost, hydrogen generation need to rely exclusively on critical raw materials-free (CRM-free) components. We have studied the synthetic route for making Ni based electrocatalysts for hydrogen evolution reaction. These electrocatalysts are based on Ni phthalocyanine supported over carbon black. The mixture was subject to pyrolysis subjected to pyrolysis over the temperature range of 200–1000 °C. The samples at each step of 100 °C were taken and analyzed thoroughly using advanced electrochemical and materials characterization tools to develop a structure-to-property relationship. X-ray diffraction (XRD) indicated the restriction of crystal growth up to 700 °C. The HER overpotential tends to drop as the pyrolysis temperature increases. This is mainly due to the for-

mation of nickel nanoparticles and oxides. In parallel, also waste lithium-ion batteries containing Co at their cathode were recycled and used as metal nanoparticles for HER. Co nanoparticles and oxides were mixed with high surface area carbon black, characterized and tested in alkaline electrolytes with relatively low overpotentials. At last CRM-free OER electrocatalysts were fabricated using an easy and cost-effective sol-gel technique. Nanostructured amorphous materials with different Ni/Fe ratios studying the synergic effect of intrinsic Ni and Fe induced structural defects. Ni-Fe oxo/hydroxo materials were obtained and in terms of morphology and physico-chemical properties. Electrocatalytic activity was studied using rotating disk electrode (RDE) with low overpotentials.

Electrocatalysis and Bioelectrocatalysis Laboratory (EBLAB) picture at the University of Milano-Bicocca.

Pubblicazioni

- S. A. Mirshokraee, M. Muhyuddin, R. Morina, L. Poggini, E. Berretti, M. Bellini, A. Lavacchi, C. Ferrara, C. Santoro. Upcycling of Waste Lithium-Cobalt-Oxide from Spent Batteries into Electrocatalysts for Hydrogen Evolution Reaction and Oxygen Reduction Reaction: A Strategy to Turn the Trash into Treasure. *Journal of Power Sources* 2023, 557, 232571. DOI:10.1016/j.jpowsour.2022.232571
- S.A. Mirshokraee, M. Muhyuddin, J. Orsilli, E. Berretti, L. Capozzoli, A. Lavacchi, C. Lo Vecchio, V. Baglio, A. Galli, A. Zaffora, F. Di Franco, M. Santamaria, L. Olivi, S. Pollastri, C. Santoro. Mono-, bi- and tri-metallic platinum group metal-free electrocatalyst for hydrogen evolution reaction following a facile synthetic route. *Industrial Chemistry and Materials*. 2023, 1, 343–359. DOI: 10.1039/D3IM00058C
- G. Zuccante, M. Acciarri, C. Lo Vecchio, I. Gatto, V. Baglio, N. Pianta, R. Ruffo, L. Navarini, C. Santoro. Oxygen reduction reaction platinum group metal-free electrocatalysts derived from spent coffee grounds. *Electrochimica Acta* 2024, 492, 144353. DOI: 10.1016/j.electacta.2024.144353
- G. Zuccante, M. Muhyuddin, V.C.A. Ficca, E. Placidi, M. Acciarri, N. Lamanna, A. Franzetti, L. Zoia, M. Bellini, E. Berretti, A. Lavacchi, C. Santoro. Transforming Cigarette Wastes into Oxygen Reduction Reaction Electrocatalyst: Does Each Component Behave Differently? An Experimental Evaluation. *ChemElectroChem* 2024, e202300725 DOI: 10.1002/celec.202300725.
- S.A. Mirshokraee, M. Muhyuddin, N. Pianta, E. Berretti, L. Capozzoli, J. Orsilli, F. d'Acapito, R. Viscardi, Rosanna, A. Cosenza, P. Atanassov, C. Santoro, A. Lavacchi. Ni-phthalocyanine derived electrocatalysts for oxygen reduction reaction and hydrogen evolution reaction: active sites formation and electrocatalytic activity. *ACS Catalysis* 2024, ACCEPTED. DOI: 10.1021/acscatal.4c03814

Gruppo di ricerca

University of Milano-Bicocca

Carlo Santoro, carlo.santoro@unimib.it
 Lorenzo Mirizzi, lorenzo.mirizzi@unimib.it
 Mohsin Muhyuddin, m.muhyuddin@campus.unimib.it

Elisabetta Di Bartolomeo, Leonardo Duranti, Anna Paola Panunzi

Università degli Studi di Roma Tor Vergata, Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, via della Ricerca Scientifica 00133 Roma

Keywords: Perovskites, doped ferrites, XRD, morphology, electrochemical characterization

L'attività ha riguardato la progettazione, la sintesi e la caratterizzazione di ossidi misti a struttura perovskitica per applicazioni anodiche in elettrolizzatori alcalini. Tali materiali costituiscono un'alternativa ai materiali convenzionali contenenti elementi critici, troppo costosi e scarsamente disponibili per un impiego su larga scala. I composti investigati sono PGM-free e Co-free e sono stati sintetizzati utilizzando un metodo di sintesi in soluzione, caratterizzati dal punto di vista strutturale e morfologico. Le proprietà elettrocatalitiche per la reazione di evoluzione dell'ossigeno sono state valutate attraverso uno screening elettrochimico.

a) Attività e b) sovrappotenziale OER in 1M KOH al 1° ciclo di misura per vari ossidi perovskitici.

The activity concerns the design, synthesis and characterization of mixed oxides with perovskite structure for anodic applications in alkaline electrolyzers. The selected compounds represent an alternative to conventional materials containing critical elements, too expensive and scarcely available for large-scale use.

The investigated powders are PGM-free and Co-free and have been synthesized using a solution synthesis method, characterized from a structural and morphological point of view. The electrocatalytic properties for the oxygen evolution reaction have been evaluated through an electrochemical screening.

Gruppo di ricerca LA N. 1.1.36

Responsabile: Elisabetta Di Bartolomeo, dibartolomeo@uniroma2.it

Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Leonardo Duranti, leonardo.duranti@uniroma2.it

Anna Paola Panunzi, annapaola.panunzi@uniroma2.it

1.4 SVILUPPO DI IONOMERI E MEMBRANE A CONDUCIBILITÀ ANIONICA A BASE DI POLICHETONE FUNZIONALIZZATO

Andrea Pucci e Andrea Giovanelli

Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale dell'Università di Pisa

Parole chiave: Polichetoni funzionalizzati, Membrane a scambio anionico, Elettrolisi alcalina dell'acqua, Quaternizzazione, Conduttività anionica

In questo studio, è stato esplorato lo sviluppo di nuove membrane a scambio anionico (AEM) basate su polichetoni (PK) funzionalizzati per applicazioni nell'elettrolisi alcalina dell'acqua. Sono stati adottati due approcci distinti: il primo ha comportato la funzionalizzazione dei PK con 1-(3-aminopropil)piperidina, mentre il secondo ha utilizzato 1-(3-aminopropil)imidazolo, entrambi mediante una reazione di Paal-Knorr priva di solventi. Il primo approccio ha prodotto AEM con stabilità termica fino a 250°C e una capacità di scambio ionico (IEC) di 2 meq/g; il secondo ha generato AEM con una IEC simile e una resistenza termica fino a 130°C. La quaternizzazione dei gruppi funzionali è stata ottenuta tramite l'uso di alogenuri alchilici, consentendo la reticolazione e migliorando le proprietà meccaniche. Le membrane ottenute hanno mostrato una conduttività ionica di circa 9,7 mS/cm, comparabile a quella delle AEM commerciali, e presentano potenziale per un uso efficiente e duraturo nei sistemi elettrochimici. Questi risultati evidenziano l'applicabilità promettente dei PK funzionalizzati nella tecnologia AEM, contribuendo al progresso della produzione di idrogeno verde mediante elettrolisi dell'acqua.

Figura 1. Schema sintetico impiegato per la preparazione di ionomeri e di membrane a scambio anionico a base di polichetone funzionalizzato.

Figura 2. Membrana a base di polichetone funzionalizzato con IM prima (Top) e dopo (Bottom) quaternizzazione con diiodobutano.

In this study, we explore the development of novel anion-exchange membranes (AEMs) based on functionalized polyketones (PKs) for applications in alkaline water electrolysis. Two different approaches were employed: one involving the functionalization of PKs with 1-(3-aminopropyl) piperidine and another with 1-(3-aminopropyl)imidazole, both through a solvent-less Paal-Knorr reaction. The first method yielded AEMs with thermal stability up to 250°C and ion exchange capacity (IEC) of 2 meq/g, while the second produced AEMs with a similar IEC and thermal resistance

up to 130°C. Quaternization of the functional groups was achieved using alkyl halides, enabling crosslinking and enhanced mechanical properties. The membranes exhibited ionic conductivities around 9.7 mS/cm, comparable to commercial AEMs, with potential for efficient and durable use in electrochemical systems. These findings highlight the promising application of functionalized PKs in AEM technology, contributing to the advancement of green hydrogen production through water electrolysis

Pubblicazioni

1. G. Benzahia, M. I. Ferahi, E. Magnani, A. Giovanelli, A. Pucci and R. Meghabar, *Polymers for Advanced Technologies*, 2024, 35, e6407
2. O. Racchi, R. Baldassari, E. Araya-Hermosilla, V. Mattoli, P. Minei, A. Pozio and A. Pucci, *Polymers*, 2023, 15
3. S. Rakhshani, R. Araneo, A. Pucci, A. Rinaldi, C. Giuliani and A. Pozio, *Membranes*, 2023, 13.
4. M. Faraj, M. Boccia, H. Miller, F. Martini, S. Borsacchi, M. Geppi and A. Pucci, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, 37, 14992-15002
5. M. Faraj, E. Elia, M. Boccia, A. Filpi, A. Pucci and F. Ciardelli, *Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry*, 2011, 49, 3437-3447
6. M. Piana, M. Boccia, A. Filpi, E. Flammia, H. A. Miller, M. Orsini, F. Salusti, S. Santiccioli, F. Ciardelli and A. Pucci, *Journal of Power Sources*, 2010, 195, 5875-5881.
7. Bert, P.; Ciardelli, F.; Liuzzo, V.; Pucci, A.; Ragnoli, M.; Tampucci, A. *Electrochemical devices containing anionic-exchange membranes and polymeric ionomers*. WO2009007922, 2009

Gruppo di ricerca LA N. 1.1.4

Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale Università di Pisa
Andrea Pucci, andrea.pucci@unipi.it

Andrea Giovanelli, andrea.giovanelli@phd.unipi.it

Massimo Santarelli, Domenico Ferrero, Laura Gennaro

Politecnico di Torino

Parole chiave: PEM electrolyzer; AEM electrolyzer; hydrogen production; EIS; testing.

L'attività di ricerca riportata descrive i principali risultati delle attività di test svolte per valutare le prestazioni di due diverse tecnologie per la produzione di idrogeno verde. La campagna sperimentale su un elettrolizzatore AEM innovativo ha incluso la valutazione dei KPI sia in condizioni nominali che non nominali, stress test e test di durata. Dai risultati lo stack di prima generazione ha dimostrato un consumo specifico del sistema in condizioni nominali migliore del SoA (2020) dell'SRIA e vicino al target SRIA aggiustato per il 2024, con un livello di densità di corrente superiore al target SRIA (1 A/cm² contro 0,6 A/cm²). La seconda generazione testata a 10 bar ha mostrato prestazioni peggiori rispetto alla prima generazione e al livello aggiustato SRIA SoA (2020), ma il suo design si è dimostrato più durevole consentendo di eseguire un test a lungo termine. Infine, è riportata la caratterizzazione sperimentale di un prototipo di elettrolizzatore PEM innovativo short-stack il quale tuttavia ha presentato numerose problematiche che hanno impedito di proseguire con l'attività sperimentale.

Figura 1. Consumo specifico del sistema (test 1 A/cm²) di prima e seconda generazione rispetto agli obiettivi SRIA e agli obiettivi SRIA.

Figura 2. Procedura di assemblaggio dello short-stack PEM.

The reported research activity describes the main results of testing activities carried out to assess performance of two different technologies for the production of green hydrogen. Experimental campaign on an innovative AEM electrolyzer included the evaluation of KPIs both in nominal and non-nominal conditions, stress test and durability tests. From the results the 1st generation stack demonstrated a system specific consumption in nominal conditions better than the SoA(2020) of the SRIA and close to the 2024 ad-

justed SRIA target, with a higher current density level than the SRIA target (1 A/cm² vs 0.6 A/cm²). The 2nd generation tested at 10 bar showed a performance worse than 1st generation and SRIA SoA (2020) adjusted level, but its design proved to be more durable allowing to perform a long-term test. Finally, the experimental characterization of a prototype of innovative PEM electrolyzer short-stack is reported, which however presented several issues that prevented to go further with the experimental activity.

Gruppo di ricerca LA N. 1.1.5

ENEA

Giuseppe Nigliaccio, giuseppe.nigliaccio@enea.it

POLITO

Massimo Santarelli, massimo.santarelli@polito.it

Domenico Ferrero, domenico.ferrero@polito.it

Laura Gennaro, laura.gennaro@polito.it

SESSIONE 2 - PROCESSI DI GASSIFICAZIONE PER LA PRODUZIONE DI IDROGENO

CHAIR: Donatella Barisano - ENEA

Emanuele Di Bisceglie, Andrea Di Carlo

Università degli studi di L'Aquila – DIIE

Parole chiave: Sorption Enhanced Gasification, CO₂ capture, solid sorbents, fluidized bed simulation, biomass.

La gassificazione con cattura di CO₂ è un processo che permette lo sfruttamento della biomassa per la produzione di energia e l'integrata cattura favorisce le reazioni endotermiche consentendo di ottenere un gas ricco di idrogeno, spostando gli equilibri termodinamici. In questo studio è stato simulato e modellato un reattore di gassificazione con integrata cattura di CO₂ con sorbenti solidi. La simulazione viene implementata in MATLAB e il modello è stato validato utilizzando i risultati sperimentali con reattori a letto fluidizzato da banco. Come input materiale sono stati utilizzati i prodotti di devolatilizzazione, considerata istantanea. Il letto fluidizzato è costituito da due regioni, bolla ed emulsione, che interagiscono tra di loro mediante un coefficiente di trasporto di materia. Il reattore opera a circa 650 °C, in regime di letto fluido bollente con una portata di biomassa inferiore a 1 kg/h. Il gas prodotto ricco di H₂ verrà poi pulito e condizionato ad alta temperatura al fine di rimuovere il particolato e convertire i TAR presenti nel gas. Il modello è stato in grado di prevedere in maniera ottimale la composizione del gas con errori tutti inferiori al 7%, un contenuto di idrogeno prossimo al 70% sul secco, con basse concentrazioni di CO e CO₂ (7.66% e 6.98% sul secco), un contenuto di TAR di 8.8 g/Nm³ invece di 9.5 g/Nm³ ottenuto sperimentalmente ed una resa di 0.75Nm³/kgbio, comparabile con quella sperimentale, che risulta essere di 0.77 Nm³/kgbio.

Figura 1: Gassificatore da banco e condizioni di test usate per la validazione del modello. Bench scale gasifier and test conditions adopted for the experimental test and for simulations.

Figura 2: Composizione del gas ottenuta dalla simulazione e sperimentalmente. Gas composition obtained by the simulation and experimentally).

Gasification with integrated CO_2 capture is an emerging technology in which biomass is gasified, and CO_2 is simultaneously removed. The in-situ CO_2 capture shifts the thermodynamic equilibrium of the gasification reactions allowing to obtain a rich hydrogen gas. In this work is modeled and simulated a gasification reactor with integrated CO_2 capture using solid sorbents. The model was implemented in MATLAB and validated using experimental results obtained with a bench-scale fluidized bed gasifier. Devolatilization products are used as material input and this step was considered instantaneous. The fluidized bed consists of two regions, the bubble and the emulsion phase, which interact with each other through a material transport co-

efficient. The reactor works at a temperature of 650°C in a bubbling fluidized bed regime with a biomass flow rate of 1 kg/h. Once the H_2 -rich product gas is formed, it will be cleaned and conditioned at high temperature to remove particulate matter and to convert tar. The model was able to optimally predict the composition of the gas with all errors lower than 7%. The hydrogen content in the gas is close to 70% on dry basis, while CO and CO_2 concentrations is 7.66% and 6.98% on dry basis respectively. The model predicted a tar concentration of 8.8 g/ Nm^3 instead of 9.5 g/ Nm^3 obtained experimentally. The gas yield predicted is 0.75 Nm^3/kgbio , very close to the 0.77 Nm^3/kgbio obtained from the experimental results.

Figura 3:
Concentrazione dei tar ottenuti dalla simulazione e sperimentalmente.
(Tar concentration obtained by the simulation and experimentally).

2.2 MODELLAZIONE DI UN REATTORE PER IDROGASSIFICAZIONE DI RIFIUTI SOLIDI: SPERIMENTAZIONE E SIMULAZIONE DI PROCESSO

Giorgio VILARDI¹, Alberto GIACONIA², Valentina SEGNERI¹

¹Università di Roma "La Sapienza", ²TERIN Department -ENEA

Parole chiave: Idrogassificazione. Rifiuti carboniosi, Sostenibilità, Modellazione cinetica, Simulazione.

L'idrogassificazione è una tecnologia avanzata che sfrutta l'idrogeno come agente gassificante, operando in condizioni di temperatura e pressione idonee per convertire rifiuti solidi in un gas ricco in metano e altri idrocarburi leggeri. Questo approccio non solo migliora la gestione dei rifiuti, ma crea anche nuove opportunità economiche attraverso la produzione di combustibili alternativi. Il processo di idrogassificazione è stato studiato sperimentalmente nei laboratori dell'ENEA in un reattore batch a letto fisso, appositamente progettato per analizzare la conversione dei rifiuti carboniosi. Il reattore è stato alimentato con campioni di palline da tennis usate, sottoposte a un pretrattamento meccanico di macinazione per ridurle in pellets costituiti da gomma e feltro. Le condizioni operative, quali temperatura e rapporto stechiometrico dell'idrogeno alimentato (rispetto al solido caricato), sono state accuratamente controllate per ottimizzare la produzione di gas. In parallelo l'Università La Sapienza ha effettuato la modellazione cinetica delle reazioni e costruita la simulazione del processo di idrogassificazione attraverso software avanzati come Aspen Plus. Questi strumenti permettono di simulare le reazioni chimiche e i flussi energetici, fornendo previsioni accurate sulle prestazioni del processo in diverse condizioni operative. La modellazione è essenziale per ottimizzare i parametri di processo e valutare la fattibilità economica e carboniosa è una ambientale della tecnologia proposta. In conclusione, lo studio dimostra che l'idrogassificazione dei rifiuti tecnologia promettente per affrontare le sfide ambientali ed energetiche contemporanee. Questo processo non solo offre una via sostenibile per la gestione dei rifiuti, ma contribuisce anche allo sviluppo di un'economia più verde e circolare.

Impianto sperimentale di idrogassificazione presso il laboratorio TERIN-DEC-H2V dell'ENEA. Il sistema comprende un reattore con flusso dal basso verso l'alto, riscaldato tramite resistenza elettrica, un condensatore per il recupero dei tar, analizzatori di gas sulla linea di uscita e controllori di temperatura e pressione. L'insieme di questi componenti permette di monitorare e ottimizzare il processo sperimentale.

Hydrogasification is an advanced technology that uses hydrogen as a gasifying agent, operating at suitable temperatures and pressures to convert solid wastes into a gas mixture rich in light hydrocarbons. This approach not only improves waste management but also creates new economic opportunities through the production of alternative fuels. The hydrogasification process was experimentally studied at ENEA's laboratories in a fixed-bed batch reactor, specifically designed to analyze the conversion of carbonaceous waste into methane and other light hydrocarbons. The reactor was fed with used tennis balls, subjected to a grinding pretreatment. Operating conditions, such as temperature and stoichiometric ratio of hydrogen (versus loaded mass of solids), were carefully controlled to optimize the gas production.

In parallel, the University La Sapienza of Rome performed kinetic modelling of the reactions, and the simulation of the hydrogasification process was built using an advanced software such as Aspen Plus. These tools allow to simulate chemical reactions and energy flows, providing accurate predictions of process performance under different operating conditions. Modeling is essential to optimize process parameters and evaluate the economic and environmental feasibility of the proposed technology. In conclusion, the study shows that carbonaceous waste hydrogasification is a promising technology to address contemporary environmental and energy challenges. This process not only offers a sustainable way to manage wastes but also contributes to the development of a greener and more circular economy.

Feedstock e prodotti ottenuti dai test sperimentali svolti presso i laboratori dell'ENEA. Al centro, il materiale di partenza, un campione di scarti di palline da tennis; a sinistra, il residuo solido ("Char") derivato dal processo; a destra, il "Tar" raccolto, un sottoprodotto liquido della reazione. Questi risultati evidenziano i diversi output generati durante l'idrogassificazione dei rifiuti carboniosi.

Gruppo di ricerca LA N. 1.1.20

Responsabile Giorgio VILARDI, giorgio.vilardi@uniroma1.it

Università di Roma "La Sapienza",

Alberto GIACONIA – ENEA, lab. TERIN-DEC-H2V, alberto.giaconia@enea.it

Pietro COLUCCI – ENEA, lab. TERIN-DEC-H2V, pietro.colucci@enea.it

Fabio CODIGNOLE LUZ – ENEA, lab. TERIN-DEC-H2V, fabio.codignoleluz@enea.it

Claudia BASSANO – ENEA, lab. TERIN-DEC-H2V, claudia.bassano@enea.it

Gianpaolo CAPUTO – ENEA, lab. TERIN-SSI-EDS, gianpaolo.caputo@enea.it

Maria Beatrice FALASCONI – University Campus Bio-medico of Rome, maria.falasconi@unicampus.it

Lorenzo DE PAOLA – University Campus Bio-medico of Rome, lorenzo.depaola@unicampus.it

Valentina SEGNERI – Università di Roma "La Sapienza", valentina.segneri@uniroma1.it

2.3 IMPEGNO DI CICLI CALCIUM LOOPING PER LA DECARBONIZZAZIONE DELL'INDUSTRIA DEL VETRO: VALUTAZIONI PRELIMINARI

O. Palone, L. Gregori, L. Cedola, U. Pasqual Laverdura, G. Vanga, D. Borello

Università di Roma "La Sapienza"

Parole chiave Glass, Decarbonization, Calcium Looping, Energy efficiency.

La transizione energetica è fortemente connessa all'identificazione di percorsi innovativi ed efficienti per la decarbonizzazione dei settori hard-to-abate, come l'acciaio, il cemento e il vetro. Questo lavoro esplora da un punto di vista energetico e ambientale l'impatto associato all'introduzione di cicli di calcium looping a valle di impianti per la produzione di vetro per contenitori. Un impianto da 250 t/g è stato modellato in Aspen Plus ipotizzando un forno fusorio end-port con recupero di calore integrato dai gas di combustione. Il sistema è stato validato tramite confronto con i dati di letteratura, che mostrano una deviazione inferiore al 7% nelle portate e nelle composizioni delle correnti solide e gassose. L'impianto evidenzia una produzione diretta di CO₂, dovuta alla combustione e decomposizione delle materie prime, di circa 358 kg/t, con uno scostamento del 6% rispetto al riferimento. La CO₂ totale emessa, tenendo conto anche dell'utilizzo del vettore elettrico, si attesta a 507 kg/t, con uno scostamento del 4% rispetto al riferimento ipotizzato. Complessivamente, l'impianto di produzione ha un fabbisogno di energia termica di 5.5 GJ/t, coperto dall'utilizzo di gas naturale, e un fabbisogno di energia elettrica di 1.1 GJ/t, per un totale di 6.59 GJ/t. La portata massica di CO₂ in ingresso al carbonatore ammonta a 3.7 t/h, mentre una corrente di CO₂ ad alta purezza con una portata massica di 3.5 t/h viene recuperata in uscita dal calcinatore. In totale, la riduzione delle emissioni di CO₂ è di circa il 95%.

The energy transition is strongly connected with the identification of novel and efficient pathways for the decarbonization of hard-to-abate industries, such as steel, cement, and glass. This work explores from an energy and environmental standpoint the application of calcium looping cycles to container glass production. A baseline production line with an output of 250 t/d has been modelled in Aspen Plus, assuming an end-port melting furnace with integrated heat recovery from the flue gases. The system has been validated by comparison with data from the literature, showing a deviation below 7% for the flow rates and compo-

sitions. The plant shows a direct CO₂ production (from the combustion and decomposition of raw materials) of about 358 kg/t with a deviation of 6% compared to the reference. In total, the production plant has a thermal energy demand of 5.5 GJ/t, which is covered by the use of natural gas, and an electricity demand of 1.1 GJ/t, for a total of 6.6 GJ/t. The mass flow rate of CO₂ entering the carbonation reactor is equal to 3.7 t/h, while a high purity CO₂ stream with a mass flow rate of 3.5 t/h is recovered at the outlet of the calciner reactor, providing CO₂ emissions reduction of around 95%.

Pubblicazioni

- Decarbonisation of container glass production via carbon capture technologies and electrification: an energy and environmental study, O. Palone, F. Famà, U. Pasqual Laverdura, G. Vanga, L. Cedola, D. Borello, Submitted to SepTech Conference, 21-23 2025, Eindhoven (NL)

Gruppo di ricerca LA N. 1.1.20

Dipartimento di ingegneria meccanica e aerospaziale, Sapienza Università di Roma

Orlando Palone, orlando.palone@uniroma.it,
Domenico Borello, domenico.borello@uniroma1.it,

Giovanna Ruoppolo

Istituto di Scienze e Tecnologie per l'Energia e la Mobilità Sostenibili (CNR_STEMS) piazzale V. Tecchio, 80 -80125 Napoli

Parole chiave: Hydrogen rich, thermochemical process, residual biomasses.

La presentazione riporta brevemente sulle attività di ricerca di due diverse linee di attività (LA 1.1.23 e LA 1.2.7 portate avanti dai ricercatori impegnati nelle due linee e che possono essere inquadrare sotto il filo conduttore delle strategie adottate per l'arricchimento in H₂ di correnti derivanti da processi di gassificazione di biomasse che possono essere riepilogate nei punti di seguito riportati: a) ricognizione, individuazione e caratterizzazione di biomasse diffuse sul territorio con caratteristiche idonee all'impiego in processi termochimici; b) Sviluppo di metodi di pretrattamento fisici (setacciature, essiccazione) e termochimici di biomasse (torrefazione in reattori a letto fluido e fisso) non solo per aumentare la processabilità dei feedstock ma anche per migliorare i prodotti dei successivi processi termochimici di trasformazione; c) Metodi di preparazione e caratterizzazione di catalizzatori (a base di ossidi di ferro e nichel), anche in ottica di economia circolare, per il cracking e il reforming del tar e del metano e test catalitici in reattori a letto fisso in scala da laboratorio; d) sviluppo di modelli catalitici per la conversione di metanolo in idrogeno tramite metodi machine-learning e studio dei cammini di reazione per la reazione $\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$; e) Sviluppo di configurazioni reattoristiche di reattori a letto fluido circolante per prove di chemical looping gasification per realizzazione di processi di oxygasification.

The presentation briefly reports on the research activities of two different lines of activity (LA 1.1.23 and LA 1.2.7 carried out by the researchers involved which can be regarded under the common thread of the strategies adopted for the enrichment in H₂ of streams derived from biomass gasification processes. The activities can be summarized in the following points: a) survey, identification, and characterization of available biomasses in the territory with characteristics suitable for use in thermochemical processes; b) Development of physical (sieving, drying) and thermochemical pretreatment methods of biomass (torrefaction in fluidized and fixed bed reactors) not only to increase the processability of feedstocks but also to improve the prod-

ucts of further thermochemical transformation processes; c) Methods for the preparation and characterization of catalysts (based on iron and nickel oxides), also from a circular economy perspective, for the cracking and reforming of tar and methane and catalytic tests in fixed bed reactors at laboratory scale; d) development of catalytic models for the conversion of methanol into hydrogen using machine-learning methods and study of reaction pathways for the reaction $\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$; e) development of reactor configurations of circulating fluidized bed reactors for chemical looping gasification tests for the realization of oxygasification processes.

Publicazioni

1. K. Ghasemzadeh, T. Torabi, T. Yousefi Amiri, A. Fortunelli, A. Iulianelli, Parametric and sensitive analysis of Pd-Ag MR performance in biogas reforming to generate decarbonized hydrogen by CFD-RSM method, *Fuel*, 365 (2024) 131205. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131205>

Gruppo di ricerca N. 1.1.23 e 1.2.7

G. Ruoppolo (CNR_STEMS), giovanna.ruoppolo@cnr.it , A. Fortunelli (CNR_ICCOM), alessandro.fortunelli@cnr.it , F. Bossola (CNR_SCITEC), filippo.bossola@cnr.it , P. Brachi (CNR_STEMS), paola.brachi@cnr.it , V. Chiodo (CNR_ITAE): vitaliano.chiodo@cnr.it , P. Giudicianni (CNR_STEMS): paola.giudicianni@cnr.it, G. Melani (CNR_ICCOM), giacomo.melani@cnr.it, A. Iulianelli (CNR_ITM), adolfo.iulianelli@cnr.it , F. Miccio (CNR_ISSMC), francesco.miccio@cnr.it , P. Sabia (CNR_STEMS), pino.sabia@cnr.it , L. Sementa (CNR_ICCOM), luca.sementa@cnr.it , F. Urbani (CNR_ITAE), francesco.urbani@cnr.it , A. Vittadini (CNR_ICMATE), andrea.vittadini@cnr.it , D. Forrer (CNR_ICMATE): daniel.forrer@cnr.it

SESSIONE 3 - COMPONENTI INNOVATIVI PER CELLE PEM

CHAIR: Valentina Naticchioni - ENEA

Oreste Tarallo, Carlo De Luca, Vincenzo Longobardi

Università degli Studi di Napoli Federico II

Parole chiave: Polybenzimidazole, electrospinning, membranes.

Nel contributo sono stati illustrati i principali risultati ad oggi conseguiti nell'ambito del progetto di ricerca "Sviluppo di metodi e processi per la preparazione e la caratterizzazione di membrane funzionanti ad alta temperatura" svolto in collaborazione fra ENEA e il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Napoli Federico II. In questo progetto sono state ottenute membrane a base di polibenzilimidazolo per elettrofilatura a partire da soluzione commerciali di polimero. Sono stati determinate le migliori condizioni di processo per l'ottenimento di campioni di spessore omogeneo, perfettamente riproducibili, e dimensioni adatte a fungere da elettroliti solidi in celle a combustibile di grandi dimensioni (non inferiori a 10cmX10cm) adatte anche ad applicazioni "heavy duty". I manufatti ottenuti sono stati caratterizzati con diverse metodologie e tecniche (diffrazione di raggi X ad alto angolo, microscopia elettronica a scansione, spettroscopia FT-IR, analisi delle proprietà meccaniche). Sono state studiate anche le proprietà di impregnazioni di tali membrane con acido fosforico e se ne sono determinate le principali proprietà elettrochimiche.

Optical image of a membrane sample produced within the present research project.

SEM micrograph of a membrane produced as part of the ongoing research project.

The paper illustrates the main results achieved to date in the research project "Development of methods and processes for the preparation and characterization of membranes operating at high temperatures" carried out in collaboration between ENEA and the Department of Chemical Sciences of the University of Naples Federico II. In this project, membranes based on polybenzimidazole were obtained by electrospinning starting from commercial polymer solutions. The best process conditions were determined to obtain samples of homogeneous thickness,

perfectly reproducible, and dimensions suitable for acting as solid electrolytes in fuel cells of large dimensions (not less than 10cmX10cm) also suitable for "heavy duty" applications. The obtained artifacts were characterized with different methodologies and techniques (wide-angle X-ray diffraction, scanning electron microscopy, FT-IR spectroscopy, analysis of mechanical properties). The impregnation properties of these membranes with phosphoric acid were also studied and their main electrochemical properties were determined too.

Gruppo di ricerca

Università degli Studi di Napoli Federico II

Oreste Tarallo, oreste.tarallo@unina.it

Carlo Del Luca, carlo.deluca2@unina.it

Vincenzo Longobardi, vince.longobardi@studenti.unina.it

3.2 SINTESI E FUNZIONALIZZAZIONE DI PBI PER HTPEM FC

Andrea Giovanelli e Andrea Pucci

Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale dell'Università di Pisa

Parole chiave: Polybenzimidazole, Proton Exchange Membrane, High Temperature Fuel Cell.

La riconversione dell'idrogeno in energia elettrica viene comunemente eseguita tramite l'impiego di Fuel Cell (FC). Le FC si distinguono in low-temperature (LT-FC) e high-temperature (HT-FC) a seconda della temperatura di esercizio. Le HT-FC sono molto promettenti in quanto rimuovono problemi relativi alla gestione dell'acqua di scarto e permettono una maggiore efficienza dei catalizzatori depositati sugli elettrodi. Tuttavia, se si lavora ad alta temperatura, non è possibile idratare la membrana a scambio protonico (PEM), la quale di conseguenza non riuscirà a condurre efficacemente gli ioni. Per ovviare a questo problema, membrane a base di Polibenzimidazolo (PBI) vengono largamente studiate per la applicazione in HTPEM-FC. Il PBI, infatti, presenta un'elevata resistenza termica e può essere impregnato con acido fosforico per garantire la conducibilità. In questo studio, è stato esplorato, sulla base di lavori di letteratura, un protocollo di sintesi e purificazione che possa portare in maniera efficiente alla produzione di PBI a partire da diamminobenzidina e acido isoftalico. Il PBI ottenuto verrà poi impiegato in processi di elettrofilatura per ottenere membrane. Inoltre, un tentativo di funzionalizzazione de PBI ottenuto è stato eseguito per cercare di introdurre gruppi solfonici nel polimero. Ulteriori ottimizzazioni e strategie dovranno essere provate per ottenere un protocollo di sintesi solido che permetta di ottenere grandi quantità di PBI idoneo al processo di elettrofilatura.

Figura 1: PBI precipitato in acqua dopo la sintesi.

The conversion of hydrogen into energy is not typically performed by direct combustion, but through the use of a Fuel Cell (FC). FCs can be divided into low-temperature (LT-FC) and high-temperature (HT-FC), depending on the working temperature of the system. HT-FCs are promising systems that remove problems related to water management and enhance the efficiency of catalysts present on electrodes. However, when working at high temperatures, it is not possible to hydrate the proton exchange membrane (PEM) which leads to inefficient ion conductivity. To avoid this issue, membranes based on Polybenzimidazole (PBI)

are studied for the application in HTPEM-FC. PBI shows high thermal resistance and can be doped with phosphoric acid to obtain the ion conductivity without the need for hydration. In this study, based on data from the literature, a protocol for the synthesis and purification of PBI has been developed. The obtained PBI will then be electrospun to prepare membranes. Additionally, attempts have been made to introduce sulfonic groups covalently bound to the polymeric backbone of PBI. Further optimization is still necessary to design a reliable synthesis that can produce large quantities of PBI suitable for electrospinning.

Figura 2: Apparato per la sintesi del PBI.

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale dell'Università di Pisa

Andrea Pucci, andrea.pucci@unipi.it

Andrea Giovanelli, andrea.giovanelli@phd.unipi.it

3.3 STUDIO DI METODICHE DI DEPOSIZIONE LASER PER LA DEPOSIZIONE DI CATALIZZATORI PER CELLE A COMBUSTIBILE A BASSA TEMPERATURA

Giovanni Ausanio

Dipartimento di Fisica "E. Pancini", Università degli Studi Federico II Napoli

Parole chiave: Celle a combustibile basate su membrana selettiva a scambio protonico (FC-PEM), Deposizione Laser Pulsata (PLD), Nanoparticelle Pt.

La voce di costo maggiore relativo alla produzione delle celle a combustibile basate su membrana selettiva a scambio protonico (FC-PEM) è quella relativa al Pt. Gli sforzi diretti a migliorare l'efficienza di utilizzo del catalizzatore a base di Pt sono concentrati sulla ricerca di configurazioni ottimali del materiale che riducano al minimo il carico di Pt soddisfacendo allo stesso tempo i requisiti di accesso al gas, e della conduzione di protoni e di elettroni. Per incrementare la reattività del catalizzatore è importante che il rapporto tra superficie esposta e il volume sia elevato, per cui risulterebbe auspicabile che il Pt venga depositato in forma nanoparticellare. Potendo così realizzare un deposito di catalizzatore con un contenuto di Pt molto inferiore a quello realizzato con le attuali tecniche. La deposizione laser pulsata (PLD) si è rivelata una interessante tecnica di deposizione di film sottili: essa prevede la focalizzazione di un raggio laser pulsato ad alta intensità su un materiale da depositare (target), all'interno di una camera in condizioni di vuoto o bassa pressione. Il materiale viene espulso in forma di piuma (plume) e depositato su un substrato, ottenendo film e strutture con eccellente aderenza al substrato, una buona omogeneità e controllo dello spessore. In questa ricerca sono state usate diverse condizioni sperimentali, ottimizzandole per massimizzare il rate di deposizione e le caratteristiche morfologiche e strutturali delle nanoparticelle.

Schema di un tipico setup per Deposizione Laser Pulsata PLD.

The largest cost item related to the production of fuel cells based on selective proton exchange membrane (FC-PEM) is that of Pt. Efforts to improve the utilisation efficiency of the Pt-based catalyst are focused on finding optimal material configurations that minimise Pt loading while meeting the requirements of gas access, proton and electron conduction. To increase the reactivity of the catalyst, it is important that the ratio of exposed surface area to volume is high, so it would be desirable for the Pt to be deposited in nanoparticle form. This would make it possible to deposit catalyst with a much lower Pt content than with current

techniques. Pulsed laser deposition (PLD) has proved to be an interesting thin-film deposition technique: it involves focusing a high-intensity pulsed laser beam on a material to be deposited (target), inside a chamber under vacuum or low pressure. The material is ejected as a plume and deposited onto a substrate, resulting in films and structures with excellent adhesion to the substrate, good homogeneity and thickness control. Different experimental conditions were used in this research, optimising them to maximise the deposition rate and the morphological and structural characteristics of the nanoparticles.

Immagine AFM di un deposito di nanoparticelle di Pt.

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Fisica "E. Pancini", Università degli Studi Federico II Napoli

Giovanni Ausanio, ausanio@unina.it

L. Iacobini¹, N. Carboni¹, J. Montero¹, V. Naticchioni², M.A. Navarra³

¹Dipartimento di Chimica, Sapienza Università di Roma, ²ENEA, CR-Casaccia, ³Dipartimento di Chimica – Centro di Ricerca Hydro-Eco, Sapienza Università di Roma

Parole chiave: celle a combustibile con membrana elettrolitica polimerica (PEMFC); elettrocatalizzatori; reazione di riduzione dell'ossigeno (ORR); ossido di cerio sub-stechiometrico; ossido di grafene ridotto.

Il presente lavoro è focalizzato sulla sintesi e caratterizzazione di nuovi materiali catalitici per le reazioni elettrodiche in celle a combustibile con membrana elettrolitica polimerica (PEMFC). Tali reazioni ad oggi vedono l'impegno di materiali critici e metalli preziosi, quali il platino. Allo scopo di ridurre la quantità di catalizzatore di platino all'elettrodo, aumentarne la stabilità e l'efficienza, abbassando allo stesso tempo i costi, si propone un ossido di cerio sub-stechiometrico supportato da ossido di grafene ridotto come additivo elettrodico. Questo materiale viene proposto per implementare la reazione catodica di riduzione dell'ossigeno (ORR), cineticamente limitante. L'ossido di cerio, grazie alle sue caratteristiche redox, può avere proprietà catalitiche. In particolare, il composto CeO_{2-x} sub-stechiometrico mostra capacità di interazione con ossigeno e acqua, e un'azione contro le specie perossidiche e radicaliche che possono degradare la membrana e gli elettrodi. Per aumentare la sua conducibilità elettronica e minimizzare la solubilità degli ioni cerio in acqua, l'ossido di grafene ridotto (rGO) viene proposto in questo lavoro come possibile materiale di supporto. In base al grado di riduzione, l'rGO è un conduttore elettronico, oltre a presentare un'ampia area superficiale, essenziale per una buona attività catalitica, e infine può formare interazioni superficiali con l'ossido di cerio enfatizzando la sua attività catalitica e stabilità.

Figura 1: Voltammetrie cicliche in ambiente saturo di N₂ (figura a sinistra) e valori dell'area elettrochimicamente attiva (ECSA) (tabella a destra) dei vari materiali catalitici.

The present work is focused on the synthesis and characterization of new catalytic materials for electrode reactions in polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs). These reactions today involve the use of critical materials and precious metals, such as platinum. In order to reduce the amount of platinum catalyst at the electrode, increase its stability and efficiency, while lowering costs, a sub-stoichiometric cerium oxide supported by reduced graphene oxide is proposed as an electrode additive. This material is proposed to implement the kinetically limiting cathodic oxygen reduction reaction (ORR).

Cerium oxide, thanks to its redox characteristics, can have

catalytic properties. In particular, the sub-stoichiometric CeO_{2-x} compound shows the ability to interact with oxygen and water, and an action against peroxide and radical species that can degrade the membrane and electrodes. To increase its electronic conductivity and minimize the solubility of cerium ions in water, reduced graphene oxide (rGO) is proposed in this work as a possible support material. Based on the degree of reduction, rGO is an electronic conductor, as well as having a large surface area, which is essential for good catalytic activity, and finally can form surface interactions with cerium oxide emphasizing its catalytic activity and stability.

Figura 2: Voltammetrie lineari in ambiente saturo di O₂ (figura a sinistra) e valori della corrente limite e dell'onset di potenziale della ORR (tabella a destra) per i vari materiali catalitici.

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Chimica, Sapienza Università di Roma

Maria Assunta Navarra, mariassunta.navarra@uniroma1.it

Luna Iacobini, luna.iacobini@uniroma1.it

Nicholas Carboni, nicholas.carboni@uniroma1.it

3.5 SVILUPPO DI SISTEMI CATALITICI AD ELEVATA AREA SUPERFICIALE PER ELETTROCATALIZZATORI

Giuseppina Roviello

Dipartimento di Ingegneria, Università Parthenope, Centro Direzionale di Napoli, Isola C4, 80143 Napoli

Parole chiave: ORR reaction, PGM-free catalyst, ceramic support, ink formulation.

Nelle celle a combustibile con membrana a scambio protonico (PEM), l'idrogeno (combustibile) viene ossidato all'anodo producendo protoni che vengono trasportati attraverso l'elettrolita (membrana) al catodo dove l'ossigeno viene ridotto formando acqua. La bassa temperatura di funzionamento (<80 °C) e la lenta cinetica di ossidazione dell'idrogeno e in particolare di riduzione dell'ossigeno richiedono elettrocatalizzatori a base di Pt, che sono oggi quelli commercialmente più utilizzati. Negli ultimi anni, l'attenzione del mondo scientifico ed industriale si è rivolta alla sperimentazione di metalli diversi dal platino, come il palladio che è un metallo del gruppo del platino, molto affine ad esso per reattività, sia ai cosiddetti metalli non PGM, quindi non appartenenti al gruppo del platino. Nell'ambito del presente lavoro sono stati progettati e sintetizzati nuovi catalizzatori a base di palladio supportati su miscele di ossidi ceramici, che in una seconda fase saranno utilizzati in combinazione con opportuna fase carboniosa, ionomero e sistema solvente per realizzare inchiostri innovativi per la realizzazione di MEA. Sui supporti catalitici sono state eseguite analisi morfologiche ed XRD. Sono attualmente in corso analisi TEM ed XPS allo scopo di valutare gli stati di ossidazione del metallo. In seguito, si procederà alla formulazione degli inchiostri ed al testing dell'attività catalitica.

Figura 1: Schema esemplificativo del processo di riduzione dell'ossigeno catalizzato dai sistemi supportati a base di palladio.

In Proton Exchange Membrane (PEM) fuel cells, hydrogen (fuel) is oxidized at the anode producing protons that are transported through the electrolyte (membrane) to the cathode where oxygen is reduced to form water. The low operating temperature (<80 °C) and the slow kinetics of hydrogen oxidation and of oxygen reduction, require Pt-based electrocatalysts, which are the most commercially used today. In recent years, the attention of the scientific and industrial world has turned to the experimentation of metals other than platinum, such as palladium, which is a metal of the platinum group, with very similar reactivity, and to the

so-called non-PGM metals, therefore not belonging to the platinum group. In the present work, new palladium-based catalysts supported on ceramic oxide mixtures have been designed and synthesized, which in a second phase will be used in combination with an appropriate carbon phase, ionomer and solvent system to create innovative inks for the realization of MEA. Morphological and XRD analyses have been performed on the catalytic supports. TEM and XPS analyses are currently underway, to evaluate the oxidation states of the metal. Subsequently, the inks will be formulated and the catalytic activity tested.

Figura 2: Catalizzatori supportati su ossidi ceramici prima (sx) e dopo (dx) la riduzione in reattore tubolare al quarzo con miscela idrogeno/argon H₂ (2%)-Ar (98%) a T=450°C.

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Ingegneria, Università Parthenope, Napoli

Giuseppina Roviello, giuseppina.roviello@uniparthenope.it

3.6 SVILUPPO DI MEA A BASE DI CATALIZZATORI NON-PGM PER CELLE A COMBUSTIBILE A ELETTROLITA POLIMERICO

Irene Gatto, Carmelo Lo Vecchio, Assunta Patti, Vincenzo Baglio

CNR- ITAE

Parole chiave: Catalizzatori no-PGM, attività ORR, ottimizzazione ionomero, preparativa MEA, caratterizzazione elettrochimica in cella singola PEFC.

Alcuni degli svantaggi per l'ampia commercializzazione delle celle a combustibile PEFC sono: l'uso di elettrocatalizzatori a base di metalli nobili ad alte prestazioni, la bassa resistenza alla corrosione dei carboni utilizzati come supporto dei catalizzatori e l'alto costo delle membrane a base di PFSA. In questo contesto, è necessario sviluppare catalizzatori altamente attivi, stabili ed economici privi di metalli del gruppo del platino (privi di PGM). I catalizzatori a base di metallo-azoto-carbonio (M-N-C, dove M = metallo di transizione) sono tra i candidati no-PGM più promettenti per sostituire i catalizzatori catodici a base di platino nelle PEFC, grazie alla loro elevata attività per la reazione di riduzione dell'ossigeno (ORR), e la possibilità di utilizzare un'ampia gamma dei precursori e di approcci di sintesi. In questo ambito, anche la struttura elettrodica deve essere ottimizzata tenendo conto delle proprietà chimico-fisiche del catalizzatore catodico utilizzato. In questo lavoro è stata effettuata una ottimizzazione della quantità di ionomero da introdurre nello strato catalitico. Sono stati sviluppati MEA, utilizzando come ionomero commerciale il Nafion 1100 EW, la membrana NR212, e Fe-N-C come catalizzatore catodico. La quantità di ionomero nello strato catalitico catodico è compresa tra il 35 e il 55% in peso rispetto al catalizzatore. I MEA preparati sono stati caratterizzati in configurazione di cella singola, valutandone le prestazioni e la stabilità.

Figura 1: Set-up della cella singola e della stazione di prova PEFC.

The use of high-performance noble metals as electro-catalysts, the low corrosion resistance of the carbons used as catalysts support and the high cost of the PFSA based membranes represent some of the drawbacks for the widespread PEFCs commercialization. In this scenario, the development of highly active, stable, and cost-effective platinum-group-metal-free catalysts (PGM-free) is required. Metal-nitrogen-carbon (M-N-C, where M = transition metal) materials are among the most promising PGM-free candidates to replace the platinum-based cathodes in PEFCs, due to their high ORR activity, combined with the possibility of using a wide range of precursors and synthesis ap-

proaches. In this context, also the electrodic structure have to be optimized taking into account the physico-chemical properties of the cathodic electrocatalyst used. In this work, an evaluation of the most appropriate amount of ionomer to be used in the catalytic layer was carried out. MEAs, based on commercial 1100 EW Nafion ionomer and NR212 membrane, and Fe-N-C as cathodic electro-catalysts were developed. The ionomer amount in the cathodic catalytic layer was ranging among 35-55wt% respect to the catalysts. The electrochemical characterizations of the prepared MEAs were carried out in a single cell configuration, in terms of performance and stability.

Figura 2: Curve di polarizzazione e di densità di potenza ottenute con i MEA sviluppati con differenti quantità di ionomero.

Pubblicazioni

- I. Gatto, A. Patti, C. Lo Vecchio, A. Serov, V. Baglio, Investigation of the ionomer content on PEFC performance by using Fe-N-C- catalysts of ORR, 9th Symposium on Hydrogen, fuel cells and Advanced Batteries, Milazzo (Italy) June 30th – July 3rd, 2024.

Gruppo di ricerca

CNR ITAE

Irene Gatto, irene.gatto@cnr.it

Carmelo Lo Vecchio, carmelo.lovecchio@cnr.it

Assunta Patti, assunta.patti@cnr.it

Vincenzo Baglio, vincenzo.baglio@cnr.it

SESSIONE 4 - PROCESSI DI CONVERSIONE DA BIOMASSE PER LA PRODUZIONE DI IDROGENO

CHAIR: Nadia Cerone - ENEA

Francesco Zimbardi, Nadia Cerone, Luca Contuzzi, Giuseppe A. Zito*, Massimo Carnevale, Vito Valerio, Antonio Villone

ENEA- Dipartimento Tecnologie Energetiche e Fonti Rinnovabili - CR Trisaia, Rotondella (MT)

** PhD student, Polytechnic University of Bari*

Parole chiave: Tar, Biomass, Gasification, Reforming, Catalyst.

Questo studio ha riguardato lo steam reforming catalitico del tar generato dalla gassificazione updraft di gusci di nocciola. Due flussi di syngas sono stati estratti a diverse altezze all'interno del letto di reazione di un gassificatore utilizzato per convertire 20-30 kg/h di biomassa. Il syngas è stato poi convogliato in una sezione catalitica di nuova costruzione per un ulteriore trattamento, e su cui questo lavoro si è focalizzato. È stata impiegata una configurazione a due letti in serie, che ha permesso l'uso della dolomite come catalizzatore a basso costo e trappola chimica per zolfo e cloro, riducendo così i potenziali danni al catalizzatore più avanzato Ni/CeO₂/Al₂O₃. Quest'ultimo catalizzatore è stato sottoposto a una caratterizzazione completa per valutarne le prestazioni. Il reforming del tar in entrambi i flussi ha ottenuto una resa superiore al 98,5%. In seguito al trattamento catalitico, il contenuto di H₂ è aumentato del 112-134% in termini di moli, in parte grazie alla conversione del CO tramite la reazione di water-gas shift (WGS). Questo trattamento ha portato a un guadagno energetico di 1,33-2,94 MJ per metro cubo di syngas campionato dai punti di estrazione inferiore e superiore, rispettivamente. Lo studio sottolinea il ruolo multifunzionale della dolomite nel processo di gassificazione e l'impatto positivo della pre-adsorbimento di CO₂, che ha migliorato il contenuto di H₂, la pulizia e il valore energetico del syngas trattato.

Impianto di gasificazione updraft utilizzato per la produzione di syngas (Centro Ricerca Trisaia).

This study investigated the catalytic steam reforming of tar generated from the updraft gasification of hazelnut shells. Two syngas streams were extracted at different heights within the reaction bed of a gasifier designed to process 20–30 kg/h of biomass. The syngas was then routed to a newly constructed catalytic section for further treatment. A two-bed series configuration was employed, allowing the use of dolomite as a low-cost catalyst and chemical trap for sulphur and chlorine, thus reducing potential harm to the more advanced Ni/CeO₂/Al₂O₃ catalyst. The latter catalyst underwent thorough characterization to assess its per-

formance. Tar reforming in both streams achieved a yield of over 98.5%. Following the catalytic treatment, the H₂ content increased by 112–134% in terms of moles, partially due to the conversion of CO via the water-gas shift (WGS) reaction. This treatment led to an energy gain of 1.33–2.94 MJ per cubic meter of syngas sampled from the lower and upper extraction points, respectively. The study emphasizes dolomite's multifaceted role in the gasification process and the beneficial impact of CO₂ pre-adsorption, which enhanced the H₂ content, cleanliness, and heating value of the upgraded syngas.

Schema del reattore di cracking catalitico utilizzato per il reforming del tar.

Pubblicazioni

- Cerone, N., Zimbardi, F., Contuzzi, L., Strügas, N., Eimontas, J., & Zito, G. D. (2024). Production of hydrogen-rich syngas from biomass gasification by double step steam catalytic tar reforming. *International Journal of Hydrogen Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.07.290>

Gruppo di ricerca N. 1.1.15

ENEA

Nadia Cerone, nadia.cerone@enea.it
Francesco Zimbardi, francesco.zimbardi@enea.it
Luca Contuzzi, luca.contuzzi@enea.it

4.2 INTEGRAZIONE DI UN PROCESSO ELETTROCHIMICO NEL SISTEMA DI SCRUBBING DEL SYNGAS DI UN IMPIANTO DI GASSIFICAZIONE DI BIOMASSE

Michele Mascia, Laura Mais, Nicola Melis, Annalisa Vacca

Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Chimica e dei Materiali. Università degli Studi di Cagliari

Parole chiave: Electrochemical oxidation, gasification of biomass, hydrogen generation.

Tramite gassificazione delle biomasse può essere ottenuto syngas che è una fonte di carbonio o idrogeno, ma la purificazione del syngas genera un'elevata quantità di acque reflue da trattare, riducendo la sostenibilità del processo. L'ossidazione elettrochimica con recupero di idrogeno potrebbe essere usata per trattare acque con elevato carico organico che possono essere usate in celle senza membrana dove l'evoluzione di ossigeno è sostituita dall'ossidazione degli organici. L'idrogeno ottenuto è di bassa qualità, ma può essere miscelato con il syngas, aumentando la resa complessiva del processo. Proponiamo qui l'integrazione di un elettrolizzatore in un processo di gassificazione della biomassa, in cui le acque reflue sono alimentate alla cella, dove le sostanze organiche sono rimosse e si ottiene idrogeno. Il processo è stato studiato in scala di laboratorio valutando l'effetto dei parametri operativi su portata e purezza dell'idrogeno ottenuto. Sono state usate acque provenienti da un impianto di gassificazione di biomasse, nel quale biodiesel è utilizzato nello scrubber e le acque sono separate dal solvente esausto in un decanter. Sono state ottenute condizioni per una concentrazione stabile di sostanze organiche nell'acqua, con buona purezza dell'idrogeno. L'idrogeno dall'elettrolizzatore può potenzialmente aumentare la portata del syngas di circa il 15% e ridurre notevolmente i costi per il trattamento delle acque reflue, sfruttando l'elettricità da fonti rinnovabili.

Figura 1: razionale del progetto.

Gasification of biomasses can be used to obtain syngas that is a source of carbon or hydrogen. However, purification of syngas generates high amount of wastewater to be treated, which poses a big problem to the sustainability of gasification. Electrochemical oxidation with recovery of the hydrogen could be a cost-effective technology to treat these wastewaters with high organic load as it could be used in membraneless cells, where the oxygen evolution is replaced by the oxidation of organics. The hydrogen obtained would be of low quality, but could be mixed with the syngas, increasing the overall yield of the process. We propose here the integration of an electrolyser in a biomass gasification process, where the wastewater form

the clean-up process is fed to the cell, with simultaneous anodic oxidation of organics and cathodic generation of hydrogen. The process was investigated in a lab-scale system assessing the effect of operative parameters on flow rate and purity of the hydrogen obtained. Wastewater from a biomass gasification plant was used, where biodiesel is used in the scrubber, and the wastewater is separated from the spent solvent in a decanter. Conditions for steady state concentration of organics in the water were obtained, with purity of the hydrogen. The hydrogen from the electrolyser can potentially increase the flowrate of syngas by about 15%, and considerably reduce the cost for the wastewater treatment, exploiting electricity from renewable sources.

Figura 2: schema del sistema sperimentale utilizzato.

Gruppo di ricerca

Università degli Studi di Cagliari, Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Chimica e dei Materiali

Michele Mascia, michele.mascia@unica.it

Laura Mais, laura.mais@unica.it

Nicola Melis, nicola.melis87@unica.it

Annalisa Vacca, annalisa.vacca@unica.it

Vladimiro Dal Santo, Filippo Bossola

Consiglio Nazionale delle Ricerche – Istituto di Scienze e Tecnologie Chimiche “Giulio Natta”, Via Camillo Golgi, 19 – 20133 Milano, Italia

Parole chiave: Catalizzatori bimetallici, idrogenolisi, aqueous phase reforming.

E' stata preparata una serie di catalizzatori bimetallici a base di Ni e Cu a diversi rapporti Ni/Cu supportati su un ossido di Mg-Al. I catalizzatori sono stati ridotti a 350 °C o 700 °C per valutare l'impatto della temperatura di riduzione sulle prestazioni catalitiche. Abbiamo eseguito la reazione in un reattore tubolare in acciaio inossidabile a 210 °C e 36 bar per 24 ore a una WHSV di 12 h⁻¹. I risultati mostrano che il glicerolo è convertito più facilmente dell'etanolo e che le prestazioni catalitiche dipendono dal rapporto Ni/Cu. Mentre i catalizzatori monometallici convertono male i reagenti e producono poco 1,2-PDO e acetolo, i catalizzatori bimetallici hanno un'attività catalitica più elevata con una resa di 1,2-PDO fino a otto volte superiore. Sembra che esista un rapporto Ni/Cu ottimale, il che significa che l'interazione tra i due metalli è critica, probabilmente per la formazione di una lega. Caratterizzazioni di H₂-TPR puntano in questa direzione poiché il picco di alta temperatura scompare e l'evento di riduzione principale si sposta a temperature più basse nei sistemi bimetallici. La riduzione dei catalizzatori a temperature più elevate (700 °C) determina una diminuzione dell'attività catalitica di circa il 30%, il che implica che anche l'interazione dei metalli con il supporto, insieme alla loro dispersione, svolgono un ruolo critico. La scarsa conversione dell'etanolo è la sfida principale di questo complicato sistema catalitico e dovrebbe essere migliorata.

Figura 1: Catalytic tests APR + APH with catalysts reduced at 350°C. (Reaction conditions: T = 210 °C, P = 36 bar, WHSV = 12 h⁻¹, Gly/EtOH = 4:1 (mol/mol), Gly = 8.8 wt%, EtOH = 16.6 wt%, data collected after 25 h TOS).

We prepared a series of Ni-Cu bimetallic catalysts at different Ni/Cu ratios supported on a Mg-Al mixed oxide. The catalysts were reduced at 350 °C or 700 °C to evaluate the impact of the reduction temperature on the catalytic performances. We carried out the reaction in a stainless-steel tubular reactor at 210 °C and 36 bar by flowing the aqueous solution of the reactants for 24 hours at a WHSV of 12 h⁻¹. The results show that glycerol is converted much more easily than ethanol and that the overall catalytic performances depend on the Ni/Cu ratio. While both the monometallic catalysts convert the reactants poorly and produce little 1,2-PDO and acetol, bimetallic catalysts have much higher catalytic activity showing up to an eight-fold higher 1,2-PDO

yield. Interestingly, it seems that an optimal Ni/Cu ratio exists meaning that the interaction between the two metals is critical, probably by forming an alloy. Preliminary H₂-TPR characterizations point toward this direction since in the reduction profile of the bimetallic catalyst the high temperature peak disappears and the main reduction event shifts to lower temperatures. Reducing the catalysts at higher temperatures (i.e., 700 °C) results in a decrease of the catalytic activity of about 30%, which implies that the interaction of the metals with the support along with their dispersion also play a critical role. The poor conversion of ethanol is the main challenge of this complicated catalytic system and should be improved.

Figura 2: Temperature Programmed Reduction (TPR-H₂) profiles of mon- and bimetallic Cu-Ni catalysts (Cu₃₀, Ni₃₀, Cu₁₀-Ni₂₀).

Gruppo di ricerca

STEMS-CNR

Giovanna Ruoppolo, giovanna.ruoppolo@cnr.it

Consiglio Nazionale delle Ricerche - Istituto di Scienze e Tecnologie Chimiche "G. Natta" Via Camillo Golgi, 19 - 20133 Milano

Vladimiro dal Santo, vladimiro.dalsanto@cnr.it

Filippo Bossola, filippo.bossola@cnr.it

SESSIONE 5 - GESTIONE INTEGRATA DELLE INFRASTRUTTURE

CHAIR: Antonio Ricca - ENEA

Marco Menga

POLIBARI

Parole chiave: Idrogeno, controllore centrale d'impianto, servizi di regolazione, macchina a stati, modelli dinamici.

Il presente lavoro analizza l'adozione dei Controllori Centrali d'Impianto (CCI) per la gestione di microreti che comprendono risorse basate su idrogeno, con l'obiettivo di fornire servizi di regolazione nelle reti elettriche di distribuzione. In particolare, lo studio valuta l'efficacia di un CCI nel garantire al DSO capacità di monitoraggio e controllo su una microrete in corrente continua, connessa alla rete MT e composta da un impianto fotovoltaico, una cella a combustibile e un elettrolizzatore, in conformità con i requisiti stabiliti dalla normativa italiana CEI 0-16. Le simulazioni condotte in MATLAB/Simulink dimostrano come l'algoritmo di controllo del CCI modellato, implementato sotto forma di una macchina a stati in Stateflow, sia in grado di soddisfare le richieste di regolazione del DSO, modulando e limitando la potenza attiva scambiata tra la microrete e la rete principale modellata. I risultati ottenuti dimostrano che un CCI conforme alla CEI 0-16 consente di sfruttare la flessibilità delle tecnologie basate sull'idrogeno per soddisfare le esigenze operative dei DSO nell'esercizio delle reti di distribuzione. Tuttavia, emerge la necessità di migliorare lo scambio di informazioni tra CCI e DSO, nonché di rendere più accurati i modelli dinamici delle risorse a idrogeno mediante dati sperimentali.

Figura 1: Rappresentazione schematica della microrete in corrente continua modellata e gestita attraverso un Controllore Centrale d'Impianto programmato in conformità alla CEI 0-16.

Figura 2: Struttura di controllo annidata del CCI modellato: algoritmo di controllo centralizzato (macchina a stati) per abilitazione delle risorse energetiche necessarie al soddisfacimento delle richieste del DSO (anello di regolazione lento), ed insieme di schemi a blocchi per definizione dei set-point da inviare alle risorse attivate (anello di regolazione veloce).

This study analyzes the adoption of Central Plant Controllers (CPC) for the management of microgrids comprising hydrogen-based resources, with the aim at providing regulation services in electrical distribution networks. Specifically, the study evaluates the effectiveness of a CPC in enabling the DSO to monitor and control a DC microgrid, connected to the MV network and composed of a photovoltaic plant, a fuel cell, and an electrolyzer, in compliance with requirements set by the current Italian grid code CEI 0-16. Simulations conducted in MATLAB/Simulink demonstrate how the control algorithm of the modelled CPC, implemented as a finite-state machine in Stateflow, effectively meets

the regulation commands required by the DSO by modulating and limiting the active power exchanged between the modelled microgrid and the main grid. The obtained results indicate that a CPC compliant with CEI 0-16 allows for the exploitation of the flexibility of hydrogen-based technologies to meet the operational needs of DSOs in distribution network management. However, the study highlights the need to improve the information exchange between the CPC and DSOs, as well as to enhance the accuracy of dynamic models of hydrogen resources through experimental data.

Pubblicazioni

- M. Menga, F. Lorusso, C. Iurlaro, M. La Scala, G. Adinolfi, S. Bruno, "Control of a PV-Electrolyzer-Fuel Cell Microgrid for the Provision of Grid Services in Distribution Systems", presented at 2024 IEEE 24th International Conference on Environmental and Electrical Engineering (EEEIC), Rome, Italy, 2024

Gruppo di ricerca N. 1.1.20

Politecnico di Bari

Sergio Bruno, sergio.bruno@poliba.it
Roberto Cometa, r.cometa1@phd.poliba.it
Cosimo Iurlaro, cosimo.iurlaro@poliba.it
Massimo La Scala, massimo.lascale@poliba.it
Francesco Lorusso, f.lorusso19@studenti.poliba.it
Marco Menga, marco.menga@phd.poliba.it
Mohammad Rajabi Nasab, m.rajabinasab@phd.poliba.it
Angelo Velini, a.velini@studenti.poliba.it

5.2 STUDIO PRELIMINARE SULL'UTILIZZO DELL'IDROGENO PER ACCUMULO E CO-GENERAZIONE IN UN SISTEMA MULTI-ENERGY

Sergio Bruno

POLIBARI

Parole chiave: Net-zero energy, optimal predictive control, multi-energy systems, hydrogen storage systems, combined heat and power.

Il presente lavoro si inserisce nell'ambito delle strategie volte al raggiungimento dell'obiettivo di net-zero energy (NZE) tramite l'ottimizzazione dell'autosufficienza energetica di sistemi multi-energetici che combinano fonti rinnovabili e tecnologie di accumulo. Al fine di valutare l'efficacia della combinazione tra accumulo a idrogeno e cogenerazione (CHP) nel contesto di sistemi di piccola scala, è stata modellata una rete energetica comprendente carichi elettrici e termici, generazione rinnovabile (fotovoltaico ed eolico), accumulo con batterie, stoccaggio di idrogeno e un sistema CHP. La gestione del sistema è stata modellata tramite un problema di ottimizzazione predittivo, usando tecniche di Mixed Integer Linear Programming (MILP), con l'obiettivo di minimizzare una funzione di costo su base giornaliera. I test condotti, basati su profili annuali di domanda e produzione, hanno permesso di confrontare le prestazioni di batterie e idrogeno in relazione all'autosufficienza del sistema. A tale scopo, sono stati introdotti due indici: il System Self Consumption Index (SSCI) e il System Self Sufficiency Index (SSSI). I risultati ottenuti mostrano che l'idrogeno, combinato con la cogenerazione, migliora significativamente l'autosufficienza rispetto alle sole batterie, mentre l'integrazione simultanea di batterie e idrogeno offre miglioramenti marginali rispetto all'uso esclusivo dell'idrogeno.

Figura 1: Rappresentazione schematica del sistema multi-energetico esaminato: calore (rosso), idrogeno (verde), elettricità (blu).

The hereby presented study falls within the scope of strategies aimed at achieving the net-zero energy (NZE) goal through the optimization of energy self-sufficiency in multi-energy systems that integrate renewable energy sources and storage technologies. To assess the effectiveness of combining hydrogen storage systems with combined heat and power (CHP) in small-scale systems, an energy system that includes electrical and thermal loads, renewable generation (photovoltaic and wind), battery and hydrogen storage systems, and a CHP system, was modelled. Its energy management was implemented through an optimization problem, employing Mixed Integer Linear Program-

ming (MILP) techniques, which aims to minimize a daily cost function. Then, tests based on annual demand and production profiles allowed for the comparison of battery and hydrogen performance in relation to system self-sufficiency. To this end, two indices have been introduced: the System Self Consumption Index (SSCI) and the System Self Sufficiency Index (SSSI). The obtained results indicate that hydrogen, in combination with CHP, significantly enhances self-sufficiency compared to using batteries alone, while the simultaneous integration of batteries and hydrogen offers only marginal improvements over using hydrogen exclusively.

Figura 2: Profili di generazione (in alto) e consumo (in basso) per una settimana estiva in assenza di sistemi di accumulo.

Gruppo di ricerca N. 1.1.20

Politecnico di Bari

Sergio Bruno, sergio.bruno@poliba.it
 Roberto Cometa, r.cometa1@phd.poliba.it
 Cosimo Iurlaro, cosimo.iurlaro@poliba.it
 Massimo La Scala, massimo.lascalas@poliba.it
 Francesco Lorusso, f.lorusso19@studenti.poliba.it
 Marco Menga, marco.menga@phd.poliba.it
 Mohammad Rajabi Nasab, m.rajabinasab@phd.poliba.it
 Angelo Velini, a.velini@studenti.poliba.it

CRITERI DI SITE SUITABILITY PER LA DISLOCAZIONE OTTIMALE DI COMPONENTI DI PRODUZIONE, STOCCAGGIO, DISTRIBUZIONE DELLE RETI DI IDROGENO E DI VALUTAZIONE DEL POTENZIALE DI IDROGENO. DEFINIZIONE DI MODELLI DIGITALI DEL SISTEMA DI RETI DI IDROGENO

Beniamino Murgante, Alfonso Annunziata, Rossella Scorzelli, Shiva Rahmani

UNIBAS

Parole chiave: Resilienza energetica; Idrogeno verde; Infrastrutture energetiche sostenibili; Analytic Hierarchy Process (AHP); Pianificazione urbana sostenibile.

La resilienza energetica è fondamentale nel contesto attuale, dove le nazioni affrontano sfide economiche, ambientali e sociali. Una pianificazione urbana sostenibile è strategica, con una crescente attenzione alle energie rinnovabili come l'idrogeno verde. La collocazione delle Green Hydrogen Infrastructure (GHI) è essenziale e richiede una valutazione basata su criteri tecnici, economici e ambientali, utilizzando come metodologia l'integrazione tra l'Analytic Hierarchy Process (AHP) e sistemi GIS. Inoltre, è stato elaborato un modello digitale per la gestione delle infrastrutture di idrogeno verde, che integra dati in tempo reale per ottimizzare produzione, distribuzione e utilizzo, considerando sia l'infrastruttura fisica sia gli aspetti ecologici. Questa metodologia è stata applicata nella regione Basilicata, individuando le migliori posizioni per le GHI (in tre casi studio elaborati) e sviluppando una mappa di idoneità del suolo.

Figura 1: Land Suitability Map per l'individuazione di siti idonei alla collocazione delle GHI per il caso studio riguardante l'industria Siderpotenza S.p.A. collocata a Potenza (Basilicata).

Energy resilience is crucial in today's context, where nations face economic, environmental and social challenges. Sustainable urban planning is strategic, with an increasing focus on renewable energies such as green hydrogen. The location of Green Hydrogen Infrastructure (GHI) is essential and requires an assessment based on technical, economic and environmental criteria, using the integration of Analytic Hierarchy Process (AHP) and GIS systems as a methodology.

In addition, a digital model was developed for the management of green hydrogen infrastructure, which integrates real-time data to optimise production, distribution and utilisation, considering both the physical infrastructure and ecological aspects. This methodology was applied in the Basilicata region, identifying the best locations for the GHI (in three elaborated case studies) and developing a soil suitability map.

Figura 2: Land Suitability Map per l'individuazione di siti idonei alla collocazione delle GHI per il caso studio riguardante l'industria Centro Oli Val d'Agri (Viggiano, Basilicata).

Pubblicazioni

1. Rahmani, S., Scorzelli, R., Ragone, F., Fattoruso, G., Murgante, B. (2024). Utilizing Spatial Multi-criteria Analysis to Determine Optimal Sites for Green Hydrogen Infrastructure Deployment. In: Marucci, A., Zullo, F., Fiorini, L., Saganeiti, L. (eds) Innovation in Urban and Regional Planning. INPUT 2023. Lecture Notes in Civil Engineering, vol 463. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-54096-7_34
2. Scorzelli, R., Rahmani, S., Telesca, A., Fattoruso, G., & Murgante, B. (2023, June). Spatial Multi-criteria Analysis for Identifying Suitable Locations for Green Hydrogen Infrastructure. In International Conference on Computational Science and Its Applications (pp. 480-494). Cham: Springer Nature Switzerland.

Gruppo di ricerca

ENEA

Grazia Fattoruso, grazia.fattoruso@enea.it

UNIBAS

Beniamino Murgante, beniamino.murgante@unibas.it

Alfonso Annunziata, alfonso.f.annunziata@gmail.com

Rossella Scorzelli, rossella.scorzelli@unibas.it

Shiva Rahmani, shiva.rahmani@unibas.it

5.4 COMPONENTI DI SIMULAZIONE DI NODI E SEGMENTI SIGNIFICATIVI DI RETI DI TRASPORTO E DISTRIBUZIONE DEL VETTORE IDROGENO: VALUTAZIONI PRELIMINARI

Antonia Longobardi¹, Michele Villari²

¹Dipartimento Ingegneria Civile Università di Salerno, ²CUGRI, Università di Salerno

Parole chiave: Trasporto idrogeno, Digital twin, Simscape Matlab MathWorks.

Potenzialmente, le reti gas esistenti possono trasportare miscele di idrogeno e gas naturale o idrogeno puro in luogo di gas naturale. Tuttavia, l'impatto che il trasporto dell'idrogeno ha su una rete esistente, composta anche da impianti di compressione, di riduzione della pressione, di misurazione, di odorizzazione, etc. non è ancora completamente noto. In particolare, l'esercizio in sicurezza di una infrastruttura di rete che trasporta idrogeno richiede non solo l'attenta e puntuale applicazione di regole di progettazione e costruzione (molte ancora in fase di definizione), ma anche un continuo processo di monitoraggio e manutenzione preventiva di tutta l'infrastruttura; occorrono ricerche finalizzate a comprendere se e come debbano essere modificate le procedure di controllo e gestione per mantenere inalterati gli elevati standard di sicurezza ed efficienza delle reti attuali, trasportando esse idrogeno, sia in miscela col gas naturale o puro. Avere una rappresentazione digitale (digital twin) accurata e aggiornata della rete fisica è essenziale per effettuare valutazioni di fattibilità, di impatto, di integrità, di sicurezza e di efficienza della rete con l'introduzione dell'idrogeno. È dunque di estrema rilevanza per la formazione di figure tecniche la disponibilità di strumenti atti a simulare una rete di trasporto e le sue componenti fondamentali in presenza di miscele di idrogeno e gas naturale.

Potentially, existing gas networks can transport mixtures of hydrogen and natural gas or pure hydrogen instead of natural gas. However, the impact that hydrogen transport has on an existing network, also made up of compression, pressure reduction, measurement, odorization systems, etc. it is not yet fully known. In particular, the safe operation of a network infrastructure that transports hydrogen requires not only the careful and timely application of design and construction rules (many still in the definition phase), but also a continuous monitoring and preventive maintenance process of the entire infrastructure; Research is needed aimed at understanding whether and how the control and

management procedures should be modified to maintain the high safety and efficiency standards of the current networks unchanged, transporting hydrogen, whether mixed with natural or pure gas. Having an accurate and updated digital representation (digital twin) of the physical network is essential to carry out feasibility, impact, integrity, security and efficiency assessments of the network with the introduction of hydrogen. The availability of tools suitable for simulating a transport network and its fundamental components in the presence of mixtures of hydrogen and natural gas is therefore extremely relevant for the training of technical figures.

Gruppo di ricerca

Dipartimento Ingegneria Civile Università di Salerno
Antonia Longobardi, alongobardi@unisa.it

CUGRI - Università di Salerno
Michele Villari

5.5 DIGITALIZZAZIONE E TRAINING NEL CONTESTO DEL TRASPORTO E DELLA DISTRIBUZIONE H2

S. De Vito, G. Fattoruso, E. Esposito, M. Caliano, F. Sergi, A. Merola, M. Pucci

Parole chiave: Hydrogen transport network digital twin, Site Suitability, Training, Ontologies, Machine Learning.

Il WP 4.3, articolandosi in 8 attività, si focalizza sul raggiungimento di obiettivi prodromici alla realizzazione di supporti alla digitalizzazione e alla formazione nell'ambito del trasporto e della distribuzione del vettore idrogeno anche in miscela con GN. Il WP costruisce le sue attività realizzando componenti per il digital twinning dei sistemi prioritari della rete realizzando una sinergia volta allo sfruttamento degli stessi componenti sia in ambito formazione che per testing e integrazione. In attività specifiche, il WP ha investigato il problema stratificando lo studio e la realizzazione di Ontologie specifiche, l'individuazione e lo sfruttamento di criteri di idoneità ad ospitare componenti infrastrutturali, la realizzazione di modelli e sistemi di simulazione dei suddetti ed infine l'utilizzo di tali sistemi per lo sviluppo di tecniche di machine learning a supporto dell'operation and maintenance. Pienamente integrate con l'approccio sono state la realizzazione di linee guida per il testing e l'integrazione e l'approccio alla formazione del personale per lo smart management delle stesse. Ciò è stato perseguito implementando curricula di tipo PCTO e di Dottorato di Ricerca per il sostegno alla formazione di figure idonee ad affrontare le sfide della transizione in atto.

Figura 1: Realistic Transport Network simulator for Hydrogen/Methane mixture transport (LA4.3.4).

The WP 4.3, articulating itself in 8 activities, focuses on the achievement of prodromic objectives to the realization of supports to digitization and training in the field of transport and distribution of hydrogen/methane mixtures. The WP builds its activities by creating components for the digital twinning of the priority systems of the network by sustaining a synergy aimed at exploiting the same components also for training. In its specific line of activities, the WP has investigated the problem by stratifying a) the study and creation of specific ontologies, b) the identification and exploitation of suitability criteria to identify optimal

sites for host infrastructure components, c) the creation of models and simulation systems of the aforementioned and finally d) the use of these systems for the development of Machine Learning techniques in support of Operation and Maintenance of infrastructures. Fully integrated with the approach, the creation of guidelines for testing and integration and the training actions for staff capable to implement smart infrastructure management has been pursued by implementing PCTO actions and a doctoral curriculum. This will support the training of human resources capable to the challenges of this in-progress transition.

Figura 2: Site Suitability Maps for Green H2 production sites selection.

Gruppo di ricerca

ENEA - TERIN-SSI-EDS

Saverio De Vito

SESSIONE 6 - STACK E BOP DI CELLE A COMBUSTIBILE PEM

CHAIR: Giuseppe Nigliaccio - ENEA

M. Baldelli¹, L. Bartolucci¹, S. Cordiner¹, M. Kheirrouz¹, V. K. Krastev¹, V. Mulone¹, A. Agresta², F. Donato²

¹Università di Roma Tor Vergata, ²ENEA

Parole chiave: HT-PEM, Fuel Cells, Computational Fluid Dynamics, Hydrogen.

Il progetto ha riguardato la progettazione di uno stack di celle a combustibile High Temperature (HT) PEM, con speciale riguardo ai fenomeni termici nei diversi sottocomponenti. Sono state utilizzate tecniche di simulazione applicate al design mediante un modello 3D Computational Fluid Dynamics (CFD) di una singola cella a combustibile HT-PEM, passo iniziale verso la modellazione di uno stack completo. Il modello ha consentito di catturare le complesse interazioni tra i flussi dei reagenti e prodotti, il trasferimento di calore e le reazioni elettrochimiche evolventi negli elettrodi della cella. Alcuni aspetti chiave quali la distribuzione della temperatura, la concentrazione dei gas reagenti, la caduta di pressione attraverso i canali e la densità di corrente sono stati discussi approfonditamente per comprenderne l'impatto sulle prestazioni della cella. I risultati della simulazione sono stati validati in confronto con dati sperimentali di letteratura, dimostrando l'accuratezza e l'affidabilità del modello. Inoltre, il medesimo modello è stato utilizzato per ottimizzare la progettazione dei "flow field" e dei canali di raffreddamento per ottenere il miglior compromesso tra caduta di pressione ed efficienza. Il lavoro svolto finora sarà esteso a simulazioni di stack multi-cella, e la validazione sarà ulteriormente perseguita attraverso un confronto con i dati misurati in laboratorio mediante esperimenti specifici.

Flow field design and current distribution on the MEA.

Layout of cooling plate.

This project dealt with the design of a High Temperature (HT) PEM Fuel Cell stack, considering the control of heat transfer and temperature in its different sub-components. Simulation techniques have been used for design purposes according to a detailed three-dimensional computational fluid dynamics (CFD) model of a single high-temperature PEM fuel cell, serving as an initial step towards the comprehensive modeling of a complete fuel cell stack. The model captured the complex interactions between the fluid flows, heat transfer, and electrochemical reactions in the cell electrodes. Key aspects such as temperature distribution, reactant gas concentration, pressure drop through chan-

nels and current density have been discussed thoroughly to understand their impact on cell performance. The simulation results were validated against reference literature data, demonstrating the accuracy and reliability of the model. The model has further been used to optimize the design of the flow field and cooling channels to get the best trade-off between pressure drop and efficiency. The work done so far will be extended for the scaling up to multi-cell stack simulations, and validation will be further pursued through a comparison with data collected in-house on specific experiments.

Pubblicazioni

- *M. Baldelli, L. Bartolucci, S. Cordiner, F. Donato, M. Kheirrouz, V. K. Krastev, V. Mulone, Proceedings of SEEP2024 conference, 09-12 September 2024, University of Natural Resources and Life Science, Vienna (2024).*

Gruppo di ricerca

Università di Roma Tor Vergata

Vincenzo Mulone, mulone@uniroma2.it

Matteo Baldelli, matteo.baldelli@uniroma2.it

Lorenzo Bartolucci, l.bartolucci@ing.uniroma2.it

Stefano Cordiner, cordiner@uniroma2.it

Mahdi Kheirrouz, mahdi.kheir.rouz@uniroma2.it

Vesselin Krassimirov Krastev, krastev@dii.uniroma2.it

ENEA

Antonio Agresta, antonio.agresta@enea.it

Filippo Donato, filippo.donato@enea.it

6.2 PROGETTAZIONE E REALIZZAZIONE SISTEMA CONTROLLO SISTEMI A CELLE A COMBUSTIBILE CON MEMBRANA POLIMERICA

Michele Riccio, Andrea Irace, Maria Gragnaniello

CeRICT srl

Parole chiave: Electronic; Microcontroller; BoP; PEM; Control-System.

L'accordo di collaborazione riguarda la progettazione e l'implementazione prototipale su board di sviluppo di sistemi elettronici per l'ottimizzazione ed il controllo del Balance of Plant e dello stack di celle a combustibile. Il sistema di controllo deve essere caratterizzato da un elevato carattere modulare che ne permetta una corretta integrazione nella attuale tecnologia delle celle a combustibile. A tale scopo, durante la prima fase di lavoro si è reso necessario l'analisi-studio di un modello di stack di celle a combustibile a membrana a scambio protonico (PEM) e l'implementazione di tale modello in ambiente Simscape™. Il modello è costituito da diversi blocchi principali: Il blocco centrale 'MEA' che modella una pila di gruppi di elettrodi a membrana 'MEA' per una cella PEM con canali di flusso anodici e catodici; Sorgente di idrogeno; Ricircolo; Umidificatore anodico; Sorgente di ossigeno; Rete termica; Sistema di raffreddamento. Sono altresì presenti sotto-blocchi che descrivono funzionalità di basso livello. Particolare attenzione è posta verso i sistemi di controllo di ogni singola sotto-parte distribuiti nel modello. Le leggi di controllo implementate si basano su approccio PID. Questa scelta garantisce un compromesso tra convergenza tra i metodi di calibrazione di tali modelli cooperanti sulle diverse sotto-parti e la possibile implementazione di tali leggi di controllo su elettronica programmabile (microcontrollori). La forte natura modulare dell'approccio proposto garantisce la possibilità di ottimizzare alcune leggi di controllo con modelli più sofisticati in grado di gestire il carattere non lineare di determinati elementi costituenti la cella PEM.

Figura 1: (a) Modello di stack di celle a combustibile a membrana a scambio protonico (PEM) in ambiente Simscape™, (b) Tipico output di simulazioni ottenute con approccio mission-profile.

The collaboration agreement covers the design and prototype implementation on development boards of electronic systems for the optimization and control of the Balance of Plant (BoP) and the fuel cell stack. The control system must be highly modular to allow proper integration with current fuel cell technology. To this end, in the first phase of the project, it was necessary to conduct an analysis and study of a proton exchange membrane (PEM) fuel cell stack model, followed by its implementation in the Simscape™ environment. The model consists of several main blocks: The central 'MEA' block, which models a stack of membrane electrode assemblies (MEA) for a PEM cell, including anode and cathode flow channels; Hydrogen source; Recirculation system; Anode humidifier; Oxygen source; Thermal

network: Cooling system. Additionally, there are sub-blocks that describe lower-level functionalities. Special attention is given to the control systems of each individual sub-part distributed within the model. The control laws implemented are based on a PID approach. This choice ensures a compromise between convergence of calibration methods across the cooperating sub-models and the potential implementation of these control laws on programmable electronics (e.g., microcontrollers). The highly modular nature of the proposed approach allows for the optimization of certain control laws with more sophisticated models capable of managing the nonlinear behavior of specific elements within the PEM cell.

Figura 2: Schema di implementazione su hardware a microcontrollore delle leggi di controllo per applicazioni di sviluppo Hardware In the Loop.

Gruppo di ricerca

CeRICT srl

Michele Riccio, michele.riccio@unina.it

Andrea Irace, andrea.irace@unina.it

Maria Gragnaniello, maria.gragnaniello@unina.it

Andrea Facci

Università della Tuscia

Parole chiave: PEM fuel cells, BoP, Cogeneration.

Il progetto si prefigge come obiettivo l'analisi e la modellazione dei componenti ausiliari (balance of plant) di uno stack di celle a combustibile di tipo PEM. In particolare, nella prima parte sono state analizzate le peculiarità di tutti i sistemi ausiliari necessari per il funzionamento dello stack. I più importanti sono l'umidificatore, il compressore, il circuito di raffreddamento e il sistema di fornitura dell'idrogeno. Tra questi particolare attenzione è stata rivolta al sistema di fornitura dell'aria con lo scopo di sviluppare un modello rappresentativo per lo studio del comportamento del compressore. Nella seconda parte, con l'utilizzo del software di calcolo MATLAB/SIMULINK, è stata implementata la mappa prestazionale del compressore per poi calcolare la potenza assorbita, determinare la curva di funzionamento della macchina e dell'impianto e analizzare diversi metodi di regolazione della portata per variare il punto di funzionamento della macchina.

Figura 1: Schema del BoP della cella a combustibile

Figura 2. Schema del modello Simscape per la simulazione del compressore di alimentazione dell'aria.

The project aims to analyze and model the auxiliary components (balance of plant) of a PEM fuel cell stack. In particular, in the first part the peculiarities of all the auxiliary systems necessary for the operation of the stack were analyzed. The most important are the humidifier, the compressor, the cooling circuit and the hydrogen supply system. Among these, particular attention was paid to the air supply system with the aim of developing a representa-

tive model for the study of the compressor behavior. In the second part, with the use of the MATLAB/SIMULINK calculation software, the compressor performance map was implemented to then calculate the absorbed power, determine the operating curve of the machine and the system and analyze different flow rate regulation methods to vary the operating point of the machine.

Gruppo di ricerca
Università della Tuscia

Andrea Luigi Facci, andrea.facci@unitus.it
Fulvio Paolo Buzzi, fulviopaolo.buzzi@unitus.it

Alessandro Lidozzi, Luca Solero, Giulia Di Nezio, Giovanni Marini

Università degli Studi ROMA TRE, DICITA

Parole chiave: Conversione statica dell'energia elettrica, cella a combustibile, conversione statica continua-continua-
Keywords: Power converters, Fuel-Cell, DC-DC power conversion.

L'attività ha riguardato lo studio di configurazioni elettroniche di potenza per l'interfacciamento di sistemi di alimentazione basati su celle a combustibile. Diverse architetture, sia con che senza isolamento galvanico, sono state valutate in funzione di volume, peso, costo e complessità circuitale. Per la configurazione selezionata è stato prodotto un progetto esecutivo che ha portato alla successiva realizzazione hardware. I test sperimentali eseguiti presso il CR ENEA della Casaccia saranno utili a validare sia i criteri progettuali che il funzionamento della configurazione proposta.

Figura 1: Vista 3D relativa al modulo di potenza che verrà realizzato. La creazione della vista 3D del modulo di potenza è propedeutica alla fase realizzativa. In questa fase vengono valutati gli ingombri, le tolleranze ed i requisiti meccanici dei vari componenti che dovranno poi essere realizzati.

Figura 2: Convertitore statico di potenza per l'interfacciamento di Fuel-Cell. Assemblaggio finale del phase-leg base che andrà a comporre il convertitore multi-ingresso riconfigurabile per la gestione delle Fuel-Cell.

The activity concerned the study of power electronic configurations for the interfacing of fuel cell-based power systems. Different architectures, both with and without galvanic isolation, were evaluated as a function of volume, weight, cost and circuit complexity. For the selected con-

figuration, an executive project was produced that led to the subsequent hardware implementation. The experimental tests performed at the CR ENEA Casaccia will be useful to validate both the design criteria and the operation of the proposed configuration.

Figura 3: Predisposizione setup di collaudo per i convertitori statici di potenza. Allestimento del setup di collaudo per i moduli di potenza realizzati. I test verranno effettuati a diversi valori di tensione e corrente, per la verifica delle commutazioni, delle misure e del comportamento termico.

Gruppo di ricerca Attività AdC N. 3.3.1 - Architetture di conversione e controllo per una rete di Fuel-Cell

Università degli Studi ROMA TRE, DICITA

Alessandro Lidozzi, alessandro.lidozzi@uniroma3.it

Luca Solero, luca.solero@uniroma3.it

Giulia Di Nezio, giulia.dinezio@uniroma3.it

Giovanni Marini, giovanni.marini@uniroma3.it

G. Giacoppo, E. Gallo, M. Totaro, O. Barbera

CNR ITAE

Parole chiave: Stack design, bipolar plate design, flow-field, polymer electrolyte membrane fuel cell.

La ricerca su nuove configurazioni di stack fuel cell a idrogeno in ambito PNRR prevede di sviluppare architetture ad “alta modularità”, ossia con potenza scalabile ad intervalli più piccoli rispetto allo stato dell’arte (25-50 W), per una maggiore flessibilità di scale-up dei sistemi e una più ampia offerta di mercato. In letteratura la ricerca si orienta verso le tecniche di prototipazione per stampa 3D, simulazione numerica multifisica, strategie di diagnostica/controllo e design del flow-field. Il mercato offre stack e moduli completi con potenze da 3 kW al MW. Lo scale-up, ottenuto per aggiunta di piatti o per assemblaggio di più stack, è proposto con incrementi di potenza dell’ordine del kW. I brevetti si rivolgono alla sigillatura e conformazione dei piatti bipolari, distribuzione interna di gas e modalità di assemblaggio. La nuova architettura “aggiunge” modularità a livello di piatto bipolare, ricavato assemblando uno o più piatti-modulo di area attiva prefissata fino a raggiungere il valore di potenza di cella singola desiderato (Fig.1). Fissato il concetto dei piatti bipolari sono stati progettati tutti i componenti dello stack, optando per due prototipi da 20 celle in configurazione di piatto bipolare da 1 e 3 moduli (0,5 kW, 1,5 kW, Fig. 2). Per agevolare il processo di progettazione è stato messo a punto un software che, scelto il numero di moduli per piatto e il numero di celle, provvede al conteggio del numero di parti necessarie e all’assemblaggio virtuale.

Figura 1: Concetto di stack ad elevata modularità. Vista dell’unità elementare del piatto bipolare.

The research on new configurations of hydrogen fuel cell stacks within the PNRR framework aims to develop “high modularity” architectures with scalable power at smaller intervals compared to the state-of-the-art (25-50 W), for increased flexibility in system scale-up and a broader market offering. In the literature, research is oriented toward 3D printing prototyping techniques, multi-physics numerical simulation, diagnostic/control strategies, and flow-field design. The market offers stacks and complete modules ranging from 3 kW to 1 MW. The scale-up is obtained by adding bipolar plates or assembling multiple stacks, and proposed with power increments in the kW range. Patents address the sealing and shaping of bipolar plates, internal

gas distribution, and assembly methods. The new architecture “adds” modularity at the bipolar plate level, achieved by assembling one or more “module-plates” with a predetermined active area, until reaching the desired single-cell power value (Fig. 1). Once the concept of the bipolar plates was established, all stack components were designed, opting for two prototypes with 20 cells with bipolar plate configured using 1 and 3 modules (0.5 kW, 1.5 kW, Fig. 2). To facilitate the design process, software was developed that, given the number of modules per plate and the number of cells, calculates the required number of parts and performs virtual assembly.

Figura 2: Sviluppo di un'interfaccia parametrica per il progetto esecutivo dello stack modulare.

Gruppo di ricerca

CNR ITAE

Orazio Barbera , irene.gatto@cnr.it

Giosuè Giacoppo, giosue.giacoppo@itae.cnr.it

Edoardo Gallo, edoardo.gallo@itae.cnr.it

Martina Totaro, martina.totaro@itae.cnr.it

SESSIONE 7 - PROCESSI DI PRODUZIONE DI E-FUELS

CHAIR: Giuseppina Vanga - ENEA

Carlo Giorgio Visconti

POLIMI

Parole chiave: SAF, e-fuels, GC-VUV, RefuelEU.

Lo studio analizza le caratteristiche qualitative e prestazionali degli e-fuels, con particolare attenzione all'e-cherosene, combustibile chiave per la decarbonizzazione del trasporto aereo. Il progetto in corso mira a definire standard, metodologie e linee guida per la validazione di questi carburanti sintetici, essenziali per la loro integrazione nel settore aeronautico. L'approvazione della normativa RefuelEU Aviation (2023) ha infatti introdotto l'obbligo di una quota minima di Sustainable Aviation Fuels (SAF), incentivando la ricerca su alternative sostenibili. In questo contesto, lo studio si propone di caratterizzare gli e-fuels confrontandoli rispetto ai combustibili fossili, analizzandone parametri chimico-fisici fondamentali come densità, viscosità e composizione, e di sviluppare protocolli di analisi per certificarne la qualità e l'applicabilità su scala industriale.

In quest'ottica, verranno presentati i primi risultati ottenuti mediante tecniche avanzate di caratterizzazione chimico-fisica, tra cui GC-VUV (Figura 1) e GCxGC, che consentono una speciazione dettagliata degli idrocarburi presenti nella carica combustibile.

Figura 1: Analisi di un campione di jet-fuel analizzato mediante GC-VUV.

The study analyzes the qualitative and performance characteristics of e-fuels, with a particular focus on e-kerosene, a key fuel for the decarbonization of air transport. The ongoing project aims to define standards, methodologies, and guidelines for the validation of these synthetic fuels, essential for their integration into the aviation sector. The approval of the RefuelEU Aviation (2023) regulation has introduced a mandatory minimum share of Sustainable Aviation Fuels (SAF), encouraging research into sustainable alternatives. In this context, the study aims to charac-

terize e-fuels by comparing them to fossil fuels, analyzing fundamental physicochemical parameters such as density, viscosity, and composition, and developing analytical protocols to certify their quality and industrial applicability. In this framework, the first results obtained through advanced physicochemical characterization techniques, including GC-VUV (Figure 1) and GCxGC, will be presented. These techniques enable a detailed speciation of the hydrocarbons present in the fuel charge.

Gruppo di ricerca

POLIMI

Carlo Giorgio Visconti, carlo.visconti@polimi.it

Luca Lietti, luca.lietti@polimi.it

Alessandro Porta, alessandro1.porta@polimi.it

Mattia Piacentini, mattia.piacentini@polimi.it

INNOVHUB

Angelo Lunghi, angelo.lunghi@mi.camcom.it

Simone Casadei, simone.casadei@mi.camcom.it

Gabriele Migliavacca, gabriele.migliavacca@mi.camcom.it

Davide Faedo, davide.faedo@mi.camcom.it

Mattia Piacentini, Alessandro Porta, Carlo Giorgio Visconti, Luca Lietti

Laboratory of Catalysis and Catalytic Processes, Dipartimento di Energia, Politecnico di Milano

Parole chiave: SAF, e-cherosene, e-fuels, CCU, ferro.

La conversione di CO_2 e H_2 in idrocarburi a catena lunga è particolarmente attraente per la produzione di combustibili per l'aviazione, un settore che richiede un'elevata densità energetica e in cui ridurre l'impatto ambientale rappresenta una sfida significativa. La maggior parte della letteratura tecnica e scientifica propone un processo in due stadi: la CO_2 è prima convertita in CO tramite la reazione di reverse water-gas shift, successivamente il CO viene convertito in idrocarburi tramite la sintesi di Fischer-Tropsch. Lo sviluppo di un processo a singolo stadio tramite la "sintesi di Fischer-Tropsch modificata" può incrementare l'efficienza globale e la competitività. A questo scopo, un catalizzatore a base ferro è stato preparato tramite coprecipitazione di ferro e zinco, seguita da due impregnazioni sequenziali di rame e potassio, per raggiungere un catalizzatore con composizione finale 100 Fe: 10 Zn: 1 Cu: 4 K (rapporti atomici). Il catalizzatore si è dimostrato attivo nella conversione di miscele CO_2/H_2 indistillati medi (Figure 1). Il prodotto è una miscela di alcoli, paraffine lineari, olefine lineari ed idrocarburi ramificati, con una lunghezza di catena compresa tra i 3 ed i 28 atomi di carbonio, con più del 70% in peso nel taglio C8-C16, ideale per l'aviazione.

Tuttavia, la selettività globale segue la distribuzione Anderson-Schultz-Flory, con oltre il 10% in peso di prodotti condensati aventi più di 16 atomi di carbonio. Conseguentemente, un catalizzatore di cracking (una zeolite), può essere aggiunto come secondo letto catalitico nello stesso reattore per aumentare la selettività ai combustibili aeronautici.

Figura 1: Campione di e-crude prodotto.

Figura 2: Distribuzione di idrocarburi nell'e-crude prodotto.

The conversion of CO₂ into long-chain hydrocarbons using low-carbon H₂ is particularly appealing for the production of aviation fuels, where a high energy density is required and closing the emission gap is particularly challenging. In most of the R&D papers on this topic, CO₂ is firstly reduced to CO via reverse water-gas shift, and then CO is converted into hydrocarbons via Fischer-Tropsch synthesis (FT). Developing a single stage process where CO₂ is transformed into long-chain hydrocarbons in a single reactor via a modified Fischer-Tropsch (MFT) process can increase the overall efficiency, helping the final product to become competitive on their fossil-based equivalent. To this aim, a Fe-based catalyst was prepared by Fe-Zn coprecipitation followed by sequential Cu and K impregnation to reach a composition

of 100 Fe: 10 Zn: 1 Cu: 4K (atomic ratio). The catalyst was able to convert mixtures of CO₂ and H₂ in middle distillates (Figure 1). The product composition is a mixture of alcohols, linear paraffins, linear olefins and branched hydrocarbons, with a carbon number distribution between 3 and 28 carbon atoms. Notably, within the condensed products, more than 70% falls in the C₈-C₁₆ cut, being interesting for aviation fuel application. However, the overall product selectivity is governed by the Anderson-Schultz-Flory distribution that imposes a broad range of hydrocarbon products, and more than 10 %wt within the condensed products is C₁₆+. Therefore, a cracking catalyst (i.e, a zeolite) can be added as a second bed in the same reactor to increase the selectivity to the aviation fuel cut.

Gruppo di ricerca

POLIMI

Carlo Giorgio Visconti, carlo.visconti@polim.it

Luca Lietti, luca.lietti@polimi.it

Alessandro Porta, alessandro1.porta@polimi.it

Mattia Piacentini, mattia.piacentini@polimi.it

Arianna Baldinelli, Umberto Desideri

Università di Pisa, Dipartimento di Ingegneria dell'Energia, dei Sistemi, del Territorio e delle Costruzioni

Nel contesto energetico attuale, l'ammoniaca verde appare molto promettente come energy commodity per l'accumulo energetico di lungo termine e la distribuzione su lunghe distanze. Per questo è identificata come un'opzione di elevato interesse per la decarbonizzazione del settore dei trasporti ed altre applicazioni hard-to-abate. Sebbene il processo di sintesi Haber-Bosch (HB) sia ben consolidato, la sua integrazione con fonti di energia rinnovabile variabile (V-RES) presenta sostanziali sfide. L'intermittenza delle V-RES è infatti incompatibile con il funzionamento a carico parziale e la limitata flessibilità del tradizionale processo di produzione di ammoniaca, basato su a gas naturale. Ciò è vero, a meno di considerare accumuli elettrici, gas e termici e di notevole capacità. Questo studio si concentra sull'analisi di un sistema innovativo per la produzione di ammoniaca verde, selezionato tra i nuovi design proposti nella linea di azione 2.3.1 del progetto POR H2. In particolare, questo studio verte su una soluzione ibrida che combina utilizzo di biomasse ed elettrificazione del sottoprocesso di sintesi dell'idrogeno: L'integrazione di solare fotovoltaico con biomasse è strategica per fornire fonti di idrogeno diversificate ed un profilo di produzione costante, garantendo il funzionamento dell'HB entro i limiti di flessibilità consentiti dalla tecnologia attuale. Pertanto, lo studio esplora un sistema innovativo basato sull'elettrolisi ad alta temperatura alimentata da energia solare e sulla gassificazione di biomassa lignocellulosica e ne valuta la fattibilità in due scenari di implementazione, ovvero la produzione su scala industriale con impianto on-grid e la produzione su piccola scala con impianto off-grid.

Il sistema proposto è analizzato utilizzando un approccio di modellazione termochimica OD, con i risultati valutati secondo sintetici indicatori di prestazione 3E (energy, economics e environment). Sulla base della tecnologia e dei costi delle materie prime attuali, i risultati mostrano un consumo energetico specifico compreso tra 8,76-10,65 MWh/tonNH₃, un Levelized Cost of Ammonia nel range 970-1230 €/tonNH₃ e una riduzione di CO₂ dal 65% fino al 100% (ammoniaca completamente verde).

In the present energy context, green ammonia shows significant promise as an energy commodity for long-term storage and long-distance distribution, being a strong candidate for decarbonizing the transport sector and other hard-to-abate sectors. Although the Haber-Bosch (HB) synthesis process is well-established, integrating it with Variable Renewable Energy Sources (V-RES) presents challenges. The intermittency of V-RES is incompatible with the limited partial load flexibility of the traditional ammonia production process running on natural gas, unless substantial electricity, gas, and thermal storage capacity are included. Among the innovative system design envisaged, this study focuses on a hybrid solution combining biomass and electrification of the hydrogen synthesis sub-process. Therefore, solar photovoltaic is supplemented with

biomass resources to provide diverse hydrogen sources, ensuring HB operation within the flexibility limits allowed by the current technology. The study investigates a novel system concept based on solar-powered high-temperature electrolysis with lignocellulosic biomass gasification in two implementation scenarios, namely industrial-size on-grid production plant and small-scale off-grid production plant. The proposed system is analyzed using a OD thermochemical modeling approach, with results assessed against the 3E synthetic performance indicators (3E = energy, economic, and environmental). Based on current technology and raw material costs, findings show specific energy consumption between 8.76-10.65 MWh/tonNH₃, a Levelized Cost of Ammonia between 970-1230 €/tonNH₃, and CO₂ reduction from 65% up to 100% (fully green ammonia).

7.4 APPROCCI IN CATALISI ETEROGENA PER LA CONVERSIONE DI METANOLO A DIMETILETERE

Giovanni Maestri

Università di Parma

Parole chiave: Catalisi; DME; materiali ibridi; solidi acidi; metanolo.

La produzione di dimetiletere (DME) tramite disidratazione del metanolo rappresenta un processo rilevante per lo sfruttamento di risorse potenzialmente di origine rinnovabile. I catalizzatori inorganici tipicamente utilizzati per promuovere questa reazione soffrono però del facile avvelenamento dei loro siti catalitici da parte di molecole d'acqua, le quali, a loro volta, sono parte ineluttabile di qualsiasi processo sintetico poiché rappresentano il coprodotto della reazione di formazione del DME stesso.

Al fine di ovviare a queste intrinseche limitazioni, l'intervento presenta le principali competenze del gruppo di ricerca, nonché gli studi che sono stati condotti negli ultimi anni in collaborazione con ENEA per lo sviluppo di catalizzatori per la sintesi del DME basati sulla realizzazione di materiali ibridi. Questi derivati presentano un cuore inorganico, che dona loro robustezza, e dei pendagli organici che presentano funzionalità acide, in grado di essere meno facilmente avvelenate in presenza di acqua. E' inoltre brevemente presentata l'efficacia catalitica di questi materiali ed una panoramica delle tecniche usate per la loro caratterizzazione.

Figura 1: Preparazione dei materiali.

Figura 2: Esempi di tecniche di caratterizzazione.

The production of dimethyl ether (DME) through the dehydration of methanol represents a relevant process for the exploitation of resources that might potentially derive from renewable sources. The inorganic catalysts typically used to promote this reaction, however, suffer from the easy poisoning of their catalytic sites by water molecules, which, in turn, are an inevitable part of any synthetic process since they represent the co-product of the reaction that affords DME. In order to overcome these intrinsic limitations, the intervention presents the main skills of the research group,

as well as the studies that have been conducted in recent years in collaboration with ENEA for the development of catalysts for the synthesis of DME based on the creation of hybrid materials. These derivatives have an inorganic heart, which gives them chemical robustness, and organic pendants that have acidic functionalities, capable of being less easily poisoned in the presence of water. The catalytic efficacy of these materials and an overview of the techniques used for their characterization are also briefly presented.

Figura 3: Risultati della sintesi catalitica del DME.

Gruppo di ricerca
Università di Parma

Giovanni Maestri, giovanni.maestri@unipr.it
Raimondo Maggi, raimondo.maggi@unipr.it
Nicola Della Ca', nicola.dellaca@unipr.it
Matteo Lanzi, matteo.lanzi@unipr.it

Alessandro Porta, Carlo Giorgio Visconti, Lidia Castoldi, Luca Lietti

Laboratory of Catalysis and Catalytic Processes, Dipartimento di Energia, Politecnico di Milano

Parole chiave: Membrane, metanolo, zeolite, LTA.

La presente ricerca si focalizza sulla sintesi e caratterizzazione di zeoliti semipermeabili all'acqua, in vista di un possibile utilizzo per reattori a membrana per la produzione di metanolo. L'impiego di membrane zeolitiche consente infatti la rimozione selettiva dell'acqua dal sistema di reazione, incrementando la resa del processo produttivo. A questo scopo è stata selezionata una zeolite LTA ad alto rapporto Si/Al, grazie alla sua buona permeabilità all'acqua e stabilità idrotermale. La zeolite è stata quindi sintetizzata in autoclave secondo una procedura riportata in letteratura (Figura 1A - 1B), avendo come obiettivo la produzione di piccoli cristalliti da utilizzare come centri di nucleazione per la successiva produzione della membrana. La procedura preparativa è stata verificata mediante caratterizzazione BET, SEM-EDS, TEM (Figura 1C), XRD (Figura 1D), e FT-IR. In un secondo momento, i cristalliti così ottenuti sono stati depositati meccanicamente su tubi di allumina porosa, poi ripositionati in autoclave per permettere la formazione e l'accrescimento della membrana.

Figura 1: A) Preparazione del gel; B) riscaldamento e maturazione del gel in autoclave.

This research focuses on the synthesis and characterization of water-semipermeable zeolites for potential use in membrane reactors for methanol production. The use of zeolite membranes enables the selective removal of water from the reaction system, increasing the efficiency of the production process. For this purpose, a high Si/Al ratio LTA zeolite was selected due to its good water permeability and hydrothermal stability. The zeolite was synthesized in an autoclave following a procedure reported in the litera-

ture (Figure 1A - 1B), with the aim of producing small crystallites to serve as nucleation centers for the subsequent membrane formation. The preparation procedure was validated through BET, SEM-EDS, TEM (Figure 1C), XRD (Figure 1D) and FT-IR characterization. Subsequently, the obtained crystallites were mechanically deposited onto porous alumina tubes, which were then placed back into the autoclave to allow for the formation and growth of the zeolite membrane.

Figura 2: Immagine TEM.

Figura 3: Pattern XRD della zeolite LTA prodotta.

Gruppo di ricerca

Politecnico di Milano

Luca Lietti, luca.lietti@polimi.it

Lidia Castoldi, lidia.castoldi@polimi.it

Carlo Giorgio Visconti, carlo.visconti@polimi.it

Alessandro Porta, alessandro1.porta@polimi.it

SESSIONE 8 - SISTEMI DI ACCUMULO, TRASPORTO E RIFORNIMENTO DI IDROGENO

da 8.1 a 8.6 - CHAIR: Claudio Zagano - RSE

da 8.7 a 8.12 - CHAIR: Paola Gislon - ENEA

Silvia Anna Cordieri, Francesco Simmini

RSE

Parole chiave: : Energy-Hub, idrogeno, ottimizzazione, Power To Gas, sistema energetico multi-vettore.

Il settore elettrico gioca attualmente un ruolo importante per l'avvenuta maturazione delle tecnologie di generazione da fonti rinnovabili e la progressiva elettrificazione dei consumi. Tuttavia, questo genera anche alcune criticità, come la necessità di bilanciare quasi istantaneamente produzione e consumo e di gestire brevi ed intensi picchi di produzione. In questo scenario, i sistemi energetici multi-vettore possono veicolare energia da una forma ad un'altra, garantendo la flessibilità necessaria per bilanciare produzione e consumo. Inoltre, l'integrazione di impianti Power To Gas in questi sistemi può aumentare ulteriormente la flessibilità e consentire l'accumulo a lungo termine di idrogeno.

In questo lavoro, viene modellizzato un sistema energetico multi-vettore che integra diversi Energy-Hub (EH), collegati tra loro tramite rete elettrica, di teleriscaldamento, gas e idrogeno. All'interno di ogni EH è integrato un sistema Power To Gas, che tramite elettrolisi converte l'energia elettrica in energia chimica, producendo idrogeno. Viene sviluppata una procedura di ottimizzazione per la gestione a lungo termine degli EH e dell'intero sistema. La procedura si articola in due fasi: nella prima viene ottimizzato ogni EH singolarmente, per gestire l'energia prodotta dalle fonti rinnovabili; nella seconda vengono minimizzati i costi di trasmissione dell'energia tra gli EH. I risultati ottenuti confermano una gestione efficiente degli EH e dell'intero sistema.

Figura 1 : Sistema multivettore analizzato costituito da rete elettrica (rappresentata in rosso), rete locale di teleriscaldamento (in arancione), rete gas naturale (in verde), rete di idrogeno (in blu). La miscela gas naturale e idrogeno è rappresentata in magenta.

The electric sector currently plays an important role due to the maturation of renewable energy generation technologies and the progressive electrification of consumption. However, this also presents certain challenges, such as the need to balance production and consumption almost instantaneously and to manage short and intense production peaks. In this scenario, multi-carrier energy systems can convert energy from one form to another, providing the flexibility required to balance production and consumption. Additionally, the integration of Power To Gas plants in these systems can further enhance flexibility and enable the long-term storage of hydrogen. In this work, we model a multi-carrier energy system that integrates multiple

Energy-Hubs (EHs) connected through electrical, district heating, gas, and hydrogen networks. Each EH includes a Power To Gas system, which converts electrical energy into chemical energy via electrolysis, producing hydrogen. An optimization procedure is developed for the long-term management of the EHs and the entire system. The procedure consists of two phases: in the first phase, each EH is optimized individually to manage the energy produced by renewable sources; in the second phase, the energy transmission costs between the EHs are minimized. The results confirm efficient management of both the EHs and the overall system.

Figura 2 : Energy-Hub analizzato costituito da rete elettrica (rappresentata in rosso), rete locale di teleriscaldamento (in arancione), rete di idrogeno (in blu). La miscela gas naturale e idrogeno è rappresentata in magenta.

Gruppo di ricerca

RSE

Silvia Anna Cordier, silviaanna.cordieri@rse-web.it

Francesco Simmini, francesco.simmini@rse-web.it

8.2 MODELLISTICA E SIMULAZIONE DINAMICA DELL'IMMISSIONE DI IDROGENO IN RETI DI DISTRIBUZIONE DI GAS NATURALE

Guido Sassaroli, Marcelo Andre Muro Alvarado, Vincenzo Casamassima

Dipartimento Tecnologie di Generazione e Materiali - RSE

Parole chiave: idrogeno, modellistica, simulazione, rete gas, Modelica.

L'importanza di un futuro energetico più sostenibile ha stimolato l'esplorazione di soluzioni per ridurre le emissioni di carbonio. Tra queste, l'idrogeno si è affermato come un candidato chiave. La sua integrazione nelle reti di distribuzione del gas naturale esistenti rappresenta un passo cruciale verso la decarbonizzazione, sostituendo progressivamente i gas fossili con gas a impatto neutro sul ciclo del carbonio. Tuttavia, questo passaggio presenta sfide tecniche, poiché la rete di distribuzione del gas deve evolversi da un'operatività monodirezionale con un unico punto di immissione e gas omogeneo, a una più complessa, con molteplici punti di immissione, flussi bidirezionali e miscele di gas a percentuali variabili. Un efficace approccio per studiare e affrontare queste sfide è l'uso di strumenti modellistici che siano capaci di descrivere il trasporto di miscele di gas nelle reti. Questo lavoro presenta lo sviluppo di modelli specifici, implementati attraverso una libreria in Modelica, per analizzare le dinamiche delle reti di distribuzione con immissione di idrogeno. Questo strumento simula la propagazione dinamica del gas e monitora la sua qualità. La validazione del nostro modello, effettuata confrontandolo con altri strumenti che presentano alcune limitazioni, dimostra che il nostro approccio offre simulazioni statiche e dinamiche, e una valutazione della qualità del gas, inclusi il potere calorifico superiore e l'indice di Wobbe.

Figura 1: Diagramma della rete gas in Modelica per il caso studio, evidenziando il nodo 3 e la uscita della tubazione 16 della rete.

Figura 2: Confronto dei valori della composizione di massa di metano e idrogeno tra i risultati della nostra libreria e quelli della Modelica Standard Library all'uscita della tubazione 16. (a) Portata di idrogeno inserita nel nodo 3. (b) Profilo dinamico di metano e idrogeno durante i primi 1500 secondi.

The significance of achieving a more sustainable energy future has driven the exploration of solutions to reduce carbon emissions. Among these, hydrogen has emerged as a key candidate. Its integration into existing natural gas distribution networks is a crucial step toward decarbonization, progressively replacing fossil gases with carbon-neutral gases. However, this transition presents technical challenges, as the gas distribution network must evolve from a unidirectional operation with a single injection point and homogeneous gas, to a more complex one with multiple injection points, bidirectional flows, and variable gas mixtures. An effective approach to studying and address-

ing these challenges is the use of modeling tools capable of describing the transport of gas mixtures in distribution networks. This work presents the development of specific models, implemented through a Modelica library, to analyze the dynamics of gas distribution networks with hydrogen blending. This simulation tool simulates the dynamic propagation of the gas and monitors its quality. The validation of our model, carried out by comparing it with other tools that have some limitations, shows that our approach offers static and dynamic simulations, and an evaluation of gas quality, including the Higher Heating Value and Wobbe index.

Figura 3: Confronto dei valori dell'indice di Wobbe tra i risultati della nostra libreria e quelli di Cheli ^[1] all'uscita della tubazione 16, in una giornata. (a) Portata di idrogeno inserita nel nodo 3. (b) Profilo dinamico dell'indice di Wobbe nel corso della giornata.

^[1] Cheli, et al., "Steady-state analysis of a natural gas distribution network with hydrogen injection to absorb excess renewable electricity, 2021.

Gruppo di ricerca

RSE

Vincenzo Casamassima, vincenzo.casamassima@rse-web.it

Guido Sassaroli, guido.sassaroli@rse-web.it

Marcelo Andre Muro Alvarado, marcelo.muro@rse-web.it

Marco Bocchi, Giuliano Angeli, Andrea Musso

RSE

Parole chiave: Idrogeno, cavi superconduttori, fluidi criogenici, proprietà termo-elettriche, proprietà fluido-dinamiche.

L'idrogeno si presenta in forma liquida a temperature criogeniche compatibili con il raffreddamento di materiali superconduttori e questo apre la strada alla possibilità di trasportare energia chimica attraverso idrogeno liquido che fluisce in un criostato, che a sua volta raffredda un cavo superconduttore (SC) che trasporta energia elettrica. I cavi SC, tuttavia, non hanno ancora raggiunto la maturità tecnologica ed è quindi fondamentale sviluppare modelli che descrivano il comportamento per ottimizzarne la progettazione. In tale contesto RSE ha già portato avanti un'attività di sviluppo ed implementazione di modelli al fine di simulare gli aspetti fondamentali dei cavi superconduttori. In questa presentazione, in particolare, viene descritto l'impiego di un materiale superconduttore chiamato MgB_2 all'interno dei cavi raffreddati ad idrogeno, dei quali ne viene presa in considerazione una tipica configurazione. Le proprietà termo-elettriche dei singoli fili di MgB_2 costituenti il cavo sono state modellizzate a partire dalle proprietà dei singoli materiali costituenti e dalle loro sezioni trasversali in un range compreso tra le temperature criogeniche e 500 K. Infine, il modello termo-elettrico è stato utilizzato all'interno di un modello fluido-dinamico monodimensionale stazionario sviluppato da RSE per studiare l'andamento lungo la lunghezza del criostato di tutte le proprietà termofisiche e termodinamiche dei fluidi criogenici.

Figura 1: Layout del cavo superconduttore in MgB_2 preso in considerazione nella presentazione.

Hydrogen occurs in liquid form at cryogenic temperatures compatible with the cooling of superconducting materials and this opens the way to the possibility of transporting chemical energy through liquid hydrogen flowing into a cryostat, which in turn cools a superconducting (SC) cable that carries electricity. SC cables, however, have not yet reached technological maturity and it is therefore essential to develop models that describe their behavior to optimize their design. In this context, RSE has already carried out a model development and implementation activity in order to simulate the fundamental aspects of superconducting cables. In this presentation, in particular, the use of a superconducting material called MgB2 inside hydro-

gen-cooled cables is described, of which a typical configuration is taken into consideration. The thermo-electrical properties of the individual MgB2 wires constituting the cable were modeled starting from the properties of the individual constituent materials and their cross sections in a range between cryogenic temperatures and 500 K. Finally, the thermo-electrical model was used within a stationary one-dimensional fluid-dynamic model developed by RSE to study the trend along the length of the cryostat of all the thermophysical and thermodynamic properties of cryogenic fluids: static and dynamic simulations, and an evaluation of gas quality, including the Higher Heating Value and Wobbe index.

Figura 2: Andamenti della pressione e della temperatura dell'idrogeno in funzione della posizione lungo l'asse del criostato, parametrizzato sulla portata di massa.

Gruppo di ricerca

RSE

Marco Bocchi, marco.bocchi@rse-web.it
 Giuliano Angeli, giuliano.angeli@rse-web.it
 Andrea Musso, andrea.musso@rse-web.it

8.4 SVILUPPO DI MODELLI NUMERICI PER IL DIMENSIONAMENTO DELLE HRS E PER L'OTTIMIZZAZIONE DELLE CONDIZIONI OPERATIVE IN BASE AL TIPO DI FONTE RINNOVABILE

Alessandra Perna¹, Gabriella di Cicco¹, Davide Lanni¹, Viviana Cigolotti², Massimiliano Della Pietra², Antonio Agresta²

¹Università di Cassino e del Lazio Meridionale, ²ENEA

Parole chiave: Stazioni di rifornimento di idrogeno on-site; fonti rinnovabili intermittenti; biogas; ammoniaca; profilo di domanda di idrogeno.

In base alla strategia di produzione impiegata (Power to Hydrogen, PtH, o Fuel to Hydrogen, FtH) le configurazioni considerate sono: i) IRES-BASED CONFIGURATION (PtH): il sistema è costituito da un impianto rinnovabile intermittente che produce l'energia elettrica richiesta dall'unità di elettrolisi e dalla refueling line. Nella soluzione on-grid sono possibili scambi con la rete elettrica, in quella off-grid le richieste di energia elettrica della stazione sono soddisfatte solo dall'impianto rinnovabile. In tal caso è previsto un accumulo elettrico in batterie; ii) BIOGAS-BASED CONFIGURATION e AMMONIA-BASED CONFIGURATION (FtH): il sistema è basato sull'unità di processo del biogas o dell'ammoniaca, costituita dal reattore di reforming o di cracking, rispettivamente, dal reattore di water gas shift e dalla sezione di separazione e purificazione dell'idrogeno. Altri componenti (i.e. scambiatori, compressor) sono considerati nel BoP del sistema. La richiesta elettrica complessiva è coperta dalla rete elettrica nella soluzione on-grid, mentre in quella off-grid è prevista la presenza di un'unità di potenza opportunamente dimensionata. Le attività presentate sono focalizzate su due aspetti chiave della procedura per lo sviluppo dei modelli di dimensionamento e fattibilità tecnico-economica delle stazioni on-site: i) lo sviluppo di un algoritmo per la generazione del profilo di domanda, ii) la definizione delle configurazioni impiantistiche del sistema di produzione di idrogeno.

Depending on the production strategy employed (Power to Hydrogen, PtH, or Fuel to Hydrogen, FtH), the configurations considered are: i) IRES-BASED CONFIGURATION (PtH): the system consists of an intermittent renewable plant that produces the electricity required by the electrolysis unit and the refuelling line. In the on-grid solution, electricity can be delivered to or imported from the grid; in the off-grid solution, the station's electricity demands are met only by the renewable plant. In this case, electrical storage in batteries is foreseen; ii) BIOGAS-BASED CONFIGURATION and AMMONIA-BASED CONFIGURATION (FtH): the system is based on the biogas or ammonia process unit, consisting of the reforming or cracking reactor, respectively, the water

gas shift reactor and the hydrogen separation and purification section. Other components (e.g. heat exchangers, compressors) are considered in the BoP of the system. The total electrical demand is covered by the power grid in the on-grid solution, while in the off-grid solution, a suitably sized power unit is provided. The presented activities focus on two key aspects of the procedure for the development of the sizing models and technical-economic feasibility of the on-site stations: i) the development of an algorithm for the generation of the hydrogen demand profile, ii) the definition of the plant configurations of the hydrogen production system.

Pubblicazioni

- G. Spazzafumo, D. Lanni, G. Di Cicco, V. Cigolotti, M. Della Pietra, A. Perna. Definition of green hydrogen refuelling station layouts. 24th World Hydrogen Energy Conference (WHEC-2024), Tulum - Riviera Maya, Mexico from the 23rd to the 27th of June 2024
- A. Perna, D. Lanni, G. Di Cicco, V. Cigolotti, M. Della Pietra. Techno-economic assessment of electrolytic hydrogen production for refuelling stations: case studies in Italy. 24th EEEIC, June 17TH - 20TH 2024, Rome, Italy
- A. Perna, D. Lanni, G. D'Antuono, M. Minutillo, V. Cigolotti, M. Della Pietra, Designing and sizing of a green liquid hydrogen supply chain for ship refueling. EFC2023 European Fuel Cell and Hydrogen Conference - Piero Lunghi Conference, September 13-15, 2023, Capri, Italy.

Figura 1: Layout delle stazioni di rifornimento di idrogeno basate su produzione da elettrolisi, cracking di ammoniaca e reforming del biogas.

Figura 3: Profilo orario della domanda di idrogeno per HRS small, medium e large nel WC scenario.

Figura 2: Procedura per lo sviluppo dei modelli di dimensionamento e di fattibilità tecnico-economica delle stazioni di rifornimento on-site.

Figura 4: Layouts di HRS on-site on-grid.

Figura 5 -Layouts di HRS on-site off-grid.

Gruppo di ricerca N. 14.2

ENEA

Viviana Cigolotti, viviana.cigolotti@enea.it

Massimiliano della Pietra, massimiliano.dellapietra@enea.it

Antonio Agresta, antonio.agresta@enea.it

Università di Cassino e del Lazio Meridionale

Alessandra Perna, perna@unicas.it

Giuseppe Spazzafumo, spazzafumo@unicas.it

Gabriella di Cicco, gabriella.dicicco@unicas.it

Davide Lanni, davide.lanni@unicas.it

Petronilla Fragiaco, Matteo Genovese, Francesco Piraino

Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Energetica e Gestionale, Università della Calabria

Parole chiave: Stazioni di rifornimento di idrogeno, dimensionamento dei componenti, massimizzazione dell'efficienza energetica, minimizzazione del hydrogen shortfall.

Le attività di ricerca, svolte finora nell'accordo di collaborazione "Studio e ottimizzazione tecnico-economica del dimensionamento e dell'esercizio dei principali componenti di stazioni di rifornimento a idrogeno" hanno riguardato l'implementazione di un tool per studiare i componenti principali delle stazioni di rifornimento di idrogeno, individuando la taglia dei componenti attraverso considerazioni tecnico-economiche. A valle della definizione di una classificazione delle stazioni di rifornimento di idrogeno e delle principali configurazioni operative, è stato investigato l'approccio di modellazione basato sulla risoluzione di uno o più funzioni obiettivo relative agli indicatori di performance delle infrastrutture di rifornimento. È stata effettuata l'implementazione del modello, partendo dai profili di rifornimento e soffermandosi sulla creazione di classi per ogni componente (elettrolizzatore, delivery esterno, compressori, serbatoi, sistema di raffreddamento e dispenser) e di funzioni per la tipologia di rifornimento. È stato quindi sviluppato il codice di ottimizzazione per il dimensionamento della stazione di rifornimento. Sono stati riportati i risultati preliminari ottenuti, tra questi: efficienza energetica della stazione pari al 64% (considerando solo elettrolizzatore e compressore); incidenza del hydrogen shortfall pari a 0.

Figura 1: Classi implementate all'interno del modello di ottimizzazione del dimensionamento di stazioni di rifornimento di idrogeno.

The research activities carried out in the collaboration agreement "Studio e ottimizzazione tecnico-economica del dimensionamento e dell'esercizio dei principali componenti di stazioni di rifornimento a idrogeno" have concerned the implementation of a tool able to study the main components of hydrogen refueling stations, identifying the size of the components through technical-economic considerations. After defining a classification of hydrogen refueling stations and the main operating configurations, the modeling approach, based on the resolution of one or more objective functions related to the performance indicators

of the refueling infrastructures, has been investigated. The model has been implemented, starting from the refueling profiles and focusing on creating classes for each component (electrolyzers, external delivery, compressors, tanks, cooling systems and dispensers) and functions for the type of refueling.

Consequently, the optimization code for the sizing of the hydrogen refueling station has been developed. The preliminary results obtained concern the station energy efficiency of about 64% (considering only the electrolyzer and compressor) and a hydrogen shortfall value of 0.

Figura 2: Risultati preliminari ottenuti dal modello di ottimizzazione del dimensionamento di stazioni di rifornimento di idrogeno.

Publicazioni

- A Comprehensive Classification of Hydrogen Refuelling Stations: Factors and Global Comparisons, M. Genovese, F. Piraino, V. Cigolotti, M. Della Pietra, P. Fragiaco, European Fuel Cells and Hydrogen Piero Lunghi Conference.

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Energetica e Gestionale, Università della Calabria

Petronilla Fragiaco, petronilla.fragiacomo@unical.it

Matteo Genovese, matteo.genovese@unical.it

Francesco Piraino, francesco.piraino@unical.it

Petronilla Fragiaco, Matteo Genovese, Francesco Piraino

Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Energetica e Gestionale, Università della Calabria

Parole chiave: Stazioni di rifornimento di idrogeno, implementazione di un modello dinamico, ottimizzazione di esercizio.

Le attività di ricerca, previste nell'accordo di collaborazione "Sviluppo di modelli di ottimizzazione dell'esercizio dei principali componenti costituenti di stazioni di rifornimento a idrogeno (HRS)", hanno riguardato lo sviluppo di un modello numerico utile ad ottimizzare l'operatività di una stazione di rifornimento, attraverso la considerazione delle fasi operative transitorie, la valutazione delle principali condizioni operative dei componenti e l'analisi di diversi parametri di input quali: la quantità di idrogeno rifornito, la pressione nominale di rifornimento, la frequenza dei rifornimenti, il fattore di carico rispetto alla capacità nominale delle HRS. A partire dai profili di rifornimento misti, è stata implementato un modello numerico di ottimizzazione, con particolare attenzione rivolta alla creazione di classi per ogni componente e di funzioni per la tipologia di rifornimento (stazioni on-site e off-site, processo di rifornimento in cascata e con pressurizzazione diretta). L'analisi dei risultati si è focalizzata sulla verifica del corretto funzionamento del modello di ottimizzazione del dimensionamento di una stazione di rifornimento, sviluppato nell'accordo di collaborazione LA N. 2.4.1_A. Attività future riguarderanno l'integrazione del modello di ottimizzazione dell'esercizio con quello relativo al dimensionamento di stazioni di rifornimento di idrogeno.

Figura 1: Funzioni implementate all'interno del modello di ottimizzazione dell'esercizio di stazioni di rifornimento di idrogeno.

The research activities of the collaboration agreement “Sviluppo di modelli di ottimizzazione dell'esercizio dei principali componenti costituenti di stazioni di rifornimento a idrogeno (HRS)”, have involved the development of a numerical model useful for optimizing the operation of a refueling station. They have been developed through the consideration of the transitory operating phases, the evaluation of the main operating conditions of the components and the analysis of various input parameters such as: the quantity of hydrogen refueled, the nominal refueling pressure, the frequency of refueling, the load factor compared to the nominal capacity. Starting from the refueling profiles,

a numerical optimization model has been implemented, with particular attention to the creation of classes for each component and functions for the type of refueling (on-site and off-site stations, cascade refueling process and directly pressurized). The result analysis has been focused on verifying the correct functioning of the optimization model for the sizing of a refueling station, developed in the collaboration agreement LA N. 2.4.1_A. Future activities will concern the integration of the operation optimization model with the one related to the sizing of hydrogen refueling stations.

Figura 2: Risultati preliminari ottenuti dal modello di ottimizzazione dell'esercizio di stazioni di rifornimento di idrogeno.

Pubblicazioni

- *A Comprehensive Classification of Hydrogen Refuelling Stations: Factors and Global Comparisons*, M. Genovese, F. Piraino, V. Cigolotti, M. Della Pietra, P. Fragiaco, *European Fuel Cells and Hydrogen Piero Lunghi Conference*.

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Energetica e Gestionale, Università della Calabria

Petronilla Fragiaco, petronilla.fragiacomo@unical.it

Matteo Genovese, matteo.genovese@unical.it

Francesco Piraino, francesco.piraino@unical.it

8.7 SERBATOI DI ACCUMULO IDROGENO BASATI SU IDRURI METALLICI PER APPLICAZIONI MOBILI E STAZIONARIE

Gabriele Scarpati, Giovanni Di Ilio, Elio Jannelli

Università degli Studi di Napoli Parthenope

Parole chiave: Idruri metallici; Condizionamento termico; Stoccaggio di idrogeno; Mobilità; Modellazione FEM.

Gli idruri metallici offrono una valida alternativa ai metodi fisici di accumulo di idrogeno (gas ad elevata pressione e idrogeno liquido criogenico). Essi permettono di lavorare in condizioni di temperatura e pressione contenute, garantendo una maggiore sicurezza, soprattutto in ambito mobile, ed una minore richiesta energetica. Di contro, essi sono caratterizzati da basse capacità gravimetriche ed elevate entalpie di reazione, con conseguente rilascio o assorbimento di ingenti quantità di energia. In questo studio sono stati progettati ed analizzati, mediante simulazione agli elementi finiti, un sistema stazionario ed uno per applicazioni mobili, con buone prestazioni di stoccaggio e un'adeguata gestione termica. Nel caso stazionario, il sistema, progettato con un approccio modulare, ha una capacità complessiva di 250 kg di H₂ a 30 bar. Numerose strategie di condizionamento termico sono state confrontate, tra cui l'introduzione di barre di alluminio, l'aggiunta di grafite naturale espansa, l'applicazione di convezione naturale o forzata, applicata esternamente e/o internamente in appositi canali, con acqua o con aria. Per il caso stazionario, è stato progettato un sistema ibrido batterie-serbatoio di idrogeno ad idruri metallici. L'interazione tra le batterie, che rilasciano calore durante il funzionamento, e il serbatoio ad idruri metallici, caratterizzati da un desorbimento endotermico, permette l'accoppiamento termico dei due elementi e una mutuale gestione termica.

Figura 1: Distribuzione della concentrazione dopo 1 ora per diversi casi relativi al sistema stazionario.

Metal hydrides offer a valid alternative for storing hydrogen to physical methods (high-pressure gas and cryogenic liquid hydrogen). They allow to operate at mild temperature and pressure conditions, gaining a higher safety, especially in mobile applications and a lower energy demand. On the opposite, they are characterized by low gravimetric capacities and high reaction enthalpies, with a consequent release of high amounts of energy. In the present study, a stationary and a mobile systems have been designed and analyzed through finite element methods simulations, both with good storage performances and proper thermal management. In the stationary case, the system, designed with

a modular approach, has a total capacity of 250 kg at 30 bar. Several thermal management strategies have been compared, including the introduction of aluminum bars, the addition of expanded natural graphite, the application of natural or forced convection, applied externally and/or internally in specific channels, with water or air. For the stationary case, a hybrid battery-metal hydride based hydrogen storage tank has been designed. The interaction between batteries, releasing heat during operation, and metal hydrides, characterized by an endothermic desorption, allows the thermal coupling between the two elements and a mutual thermal management.

Figura 2: Distribuzione della temperatura dopo 5 ore nel sistema ibrido per applicazioni mobili.

Gruppo di ricerca

ENEA

Viviana Cigolotti, viviana.cigolotti@enea.it

Marco Martino, marco.martino@enea.it

Università degli Studi di Napoli Parthenope

Elio Jannelli, elio.jannelli@uniparthenope.it

Giovanni Di Ilio, giovanni.diilio@uniparthenope.it

Gabriele Scarpati, gabriele.scarpati001@studenti.uniparthenope.it

Andrea Luigi Facci

Università della Tuscia

Parole chiave: MH, PCM, Hydrogen Storage.

Il progetto si prefigge di caratterizzare il funzionamento di un sistema di accumulo di idrogeno agli idruri metallici e PCM (Phase Change Materials - Materiali a cambiamento di Fase). Lo scopo è di mettere in evidenza i parametri adimensionali più influenti sui tempi di carica e scarica (ovvero sulle potenze medie di carica e scarica) e giungere alla progettazione di un sistema di accumulo ibrido MH-PCM. Tali sistemi ibridi di accumulo sono promettenti per via delle basse pressioni e temperature di esercizio (per la maggior parte degli idruri), e sono più sicuri ed efficienti dei sistemi a idrogeno compresso. L'integrazione di PCM ed MH permette una semplice ed efficace gestione termica dell'idruro metallico riducendo i costi del sistema ed aumentane l'efficienza grazie all'accumulo del calore di reazione durante la fase di carica.

Figura 1: Schema delle configurazioni studiate: (A) configurazione tubo mantello; (B) configurazione con tubo alettato; (C) configurazione con tubo alettato.

Figura 2: Performance dei sistemi analizzati.

The project aims to characterize the operation of a hydrogen storage system based on metal hydrides and PCM (Phase Change Materials). The aim is to highlight the dimensionless parameters that influence the charging and discharging times (i.e. the average charging and discharging powers) and to design a hybrid MH-PCM storage system. Such hybrid storage systems are promising because

of their low operating pressures and temperatures (for most hydrides), and are safer and more efficient than compressed hydrogen systems. The integration of PCM and MH allows a simple and effective thermal management of the metal hydride, reducing the system costs and increasing its efficiency thanks to the accumulation of the reaction heat during the charging phase.

Gruppo di ricerca
Università della Tuscia

Andrea Luigi Facci, andrea.facci@unitus.it
Marco Maggini, marco.maggini@unitus.it

8.9 METAL HYDRIDES FOR MARITIME APPLICATIONS – TECHNOLOGY ASSESSMENT, MODELLING AND TEST BENCH DEVELOPMENT

Stefano Barberis

UNIGE

Parole chiave: Idruri metallici, accoppiamento fuel cell, marittimo

Keywords: Metal hydrides, coupling with Fuel Cell, maritime applications

In questa presentazione sono stati discussi i risultati della prima fase delle attività di progetto che ha previsto l'esecuzione di un'analisi comparativa dei sistemi di stoccaggio dell'idrogeno con particolare riferimento a idruri metallici a bassa temperatura e loro accoppiamento con FC di tipo PEMFC, tipicamente utilizzati in natanti. Tale analisi è stata svolta guardando sia allo stato dell'arte presente in letteratura che tra i produttori di mercato a livello nazionale/internazionale. Nella prima fase del lavoro inoltre sono stati definiti i requisiti necessari e dei parametri ottimali per la selezione della tipologia di idruro metallico da usarsi a bordo del natante guardando a: i) pesi e ingombri, ii) Costi e reperibilità sul mercato, iii) Possibilità di accoppiamento per la gestione termica degli idruri sfruttando il calore di scarto dei sistemi fuel cell) Tale attività è propedeutica alle altre attività del progetto specialmente per quel che riguarda l'identificazione del miglior materiale da accoppiarsi alle PEMFC presenti nei laboratori dell'università di Genova dove verrà validato il comportamento di un sistema integrato PEMFC+MH (attraverso una test bench il cui design è stato presentato durante l'evento) e i modelli dinamici per la gestione degli stessi che verranno sviluppati partendo anche dalle esperienze che il gruppo di ricerca ha avuto in progetti precedenti.

Figura 1: Test bench for metal hydrides thermal management.

This presentation discussed the results of the first phase of the project activities, which foresaw a comparative analysis of hydrogen storage systems for maritime applications, focusing particularly on low-temperature metal hydrides and their coupling with PEMFC fuel cells, typically used in marine vessels. This analysis was conducted by examining both the literature/market state of the art in the literature at national/international levels. In the first phase of the work, the necessary requirements and optimal parameters for selecting the type of metal hydride to be used on board the vessel were defined, considering: i) weight and dimensions, ii) costs and availability in the market, iii)

the potential for coupling for thermal management of the hydrides by utilizing waste heat from the fuel cell systems. This activity is preparatory to the other project activities, especially regarding the identification of the best material to couple with the PEMFCs available in the laboratories of the University of Genoa, where the behavior of an integrated PEMFC+MH system will be validated (through a test bench whose design was presented during the event), along with dynamic models for managing them, which will be developed also based on the experiences the research group has had in previous projects.

Figura 2: Potential loop for coupling of fuel cell and metal hydrides.

Gruppo di ricerca

UNIGE

Aristide Massardo, aristide.massardo@unige.it

Stefano Barberis, stefano.barberis@unige.it

8.10 MATERIALI INNOVATIVI PER STOCCAGGIO CHIMICO E FISICO DI IDROGENO ALLO STATO SOLIDO

Andrea Rossin, Manuela Melucci, Marzio Rancan, Francesco Mercuri, Daniele Colognesi, Rolando Pedicini, Michela Alfé, Cinzia Giannini

CNR

Parole chiave: Functionalized Graphene Oxide – Metal-Organic Frameworks Lightweight inorganic hydrides – Ice XVII – Innovative structural resolution methods – Predictive computational models

Questo contributo raccoglie le attività scientifiche svolte nella Linea di Attività 2.3.6. - Materiali innovativi per stoccaggio chimico e fisico di idrogeno allo stato solido. La partecipazione di due diversi dipartimenti CNR (DSCTM e DIITET) ed otto relativi istituti afferenti (cinque da DSCTM: ICCOM, ISOF, ISMN, IC, ICMATE; tre da DIITET: IFAC, STEMS, ITAE) ha permesso di effettuare studi in tematiche tra loro diverse ma complementari e tutte afferenti al medesimo settore, lo stoccaggio di idrogeno in materiali solidi. I tipi di materiali esaminati sono: (a) grafene ossido (GO) funzionalizzato con building blocks aromatici (per eventuale realizzazione di compositi Metal-Organic Framework (MOF)/GO) o con α -ciclodestrina (ISOF); (b) compositi Cu-MOF (HKUST-1)/grafene decorato con percentuali variabili di gruppi carbossilici (-COOH) oppure amminici (-NH₂) (STEMS); (c) compositi MgH₂/Fe a percentuali relative variabili ottenuti tramite ball milling (ITAE); (d) compositi di idruri inorganici leggeri a base BN [ammoniaca borano, idrazina bis(borano)] con MOFs (ICCOM); (e) gabbie di coordinazione porose a base di metalli del blocco 3d di transizione (ICMATE); (f) ghiaccio XVII e suoi clatrati con idrogeno molecolare a basse temperature (IFAC). Per i compositi preparati ad ICCOM, la risoluzione strutturale è stata possibile grazie al contributo di IC che ha appositamente sviluppato un nuovo metodo utilizzando dati combinati [XRPD+PDF]. Infine, modelli computazionali generati dal team ISMN hanno permesso di determinare i siti di adsorbimento preferenziali di H₂ su GO. Lo stesso gruppo sta anche cercando di predire questi siti tramite l'utilizzo di Intelligenza Artificiale (AI) al fine di indirizzare meglio le attività sperimentali.

This contribution collects the scientific activities carried out in Activity Line 2.3.6. - Innovative materials for the chemical and physical hydrogen storage in the solid state. The participation of two different CNR departments (DSCTM and DIITET) and eight related institutes (five from DSCTM: ICCOM, ISOF, ISMN, IC, ICMATE; three from DIITET: IFAC, STEMS, ITAE) has led to a comprehensive study on different but complementary topics and all related to H₂ storage in solid materials. The types of materials examined are: (a) graphene oxide (GO) functionalized with aromatic building blocks (for the possible creation of Metal-Organic Framework (MOF)/GO composites) or with α -cyclodextrin (ISOF); (b) Cu-MOF (HKUST-1)/graphene composites decorated with variable percentages of carboxyl (-COOH) or

amine (-NH₂) groups (STEMS); (c) MgH₂/Fe composites with variable relative percentages obtained through ball milling (ITAE); (d) [BN light inorganic hydride (ammonia borane, hydrazine bis(borane))@MOF] composites (ICCOM); (e) porous coordination cages built with 3d transition metals (ICMATE); (f) ice XVII and its clathrates with molecular hydrogen at low temperatures (IFAC). For the composites prepared at ICCOM, IC specifically developed a new structure resolution method using combined [XRPD+PDF] data. Finally, computational models generated by the ISMN team allowed the determination of the preferential H₂ adsorption sites on GO. The same group is also trying to predict these sites using Artificial Intelligence (AI) in order to better target experimental activities.

Pubblicazioni

- L. Del Rosso, D. Colognesi, A. Donati, S. Rudic, M. Celli. Microscopic dynamics of gas molecules confined in porous channel-like ice structure. *J. Chem. Phys.* 160, 154707 (2024). DOI: 10.1063/5.0201961
- V. Gargiulo, A. Policicchio, L. Lisi, M. Alfe. CO₂ Capture and Gas Storage Capacities Enhancement of HKUST 1 by Hybridization with Functionalized Graphene-like Materials. *Energy and Fuels* 37(7), 5291-5302 (2023). DOI: 10.1021/acs.energyfuels.2c04289.
- G. Provinciali, N. Consoli, R. Caliendo, V. Mangini, L. Barba, C. Giannini, G. Tuci, G. Giambastiani, M. Lelli, A. Rossin. Ammonia Borane and Hydrazine Bis(Borane) Confined within Zirconium Bithiazole and Bipyridyl Metal-Organic Frameworks as Chemical Hydrogen Storage Materials. Manuscript under revision.

Gruppo di ricerca

CNR

Andrea Rossin, CNR-ICCOM, a.rossin@iccom.cnr.it
Manuela Melucci, CNR-ISOF, manuela.melucci@isof.cnr.it
Marzio Rancan, CNR-ICMATE, marzio.rancan@cnr.it
Francesco Mercuri, CNR-ISMN, francesco.mercuri@cnr.it
Daniele Colognesi, CNR-IFAC, d.colognesi@ifac.cnr.it
Rolando Pedicini, CNR-ITAE, rolando.pedicini@itae.cnr.it
Michela Alfé, CNR-STEMS, michela.alf@stems.cnr.it
Cinzia Giannini, CNR-IC, cinzia.giannini@ic.cnr.it

8.11 PROGETTAZIONE DEL SENSORE DI IDROGENO E DEL SISTEMA PER IL READING DEI DATI DAL SENSORE

Tiziana Polichetti¹, Ettore Massera¹, Brigida Alfano¹, Maria Lucia Miglietta¹, Andrea Cusano², Marco Consales², Angela Maria Cusano², Alberto Micco², Giuseppe Quero²

¹ENEA, ²Cerict scrl

Parole chiave: RFID, monitoraggio ambientale idrogeno, wireless batteryless.

Nel campo della tecnologia dei sensori per il rilevamento dell'idrogeno, l'affidabilità dei dispositivi riveste un ruolo cruciale, poiché questo gas è ampiamente utilizzato in settori come l'industria, l'energia, la chimica e l'elettronica, dove le sue proprietà infiammabili possono rappresentare un rischio potenziale. I recenti progressi tecnologici hanno notevolmente migliorato la sensibilità, i tempi di risposta e la selettività dei sensori, permettendo di rilevare concentrazioni sempre più basse di idrogeno. Questo studio propone un'innovativa soluzione basata sulla tecnologia RFID UHF per il rilevamento dell'idrogeno, focalizzandosi sulla progettazione di un tag RFID dotato di un'interfaccia analogica per la misurazione della resistenza DC di un chemiresistore sensibile all'idrogeno (composto Gr-Pt). Per questo scopo, è stato impiegato il chip RFID Asygn AS3212, che include pin dedicati alla misurazione delle resistenze, un ADC a 10 bit e un amplificatore integrato con guadagno variabile. Attraverso una corretta configurazione dei parametri, è stato possibile misurare l'intero range di variazione della resistenza del chemiresistore, sfruttando appieno la dinamica dell'ADC. Questa metodologia offre un approccio pratico e diretto, particolarmente utile per applicazioni di monitoraggio ambientale e di sicurezza, permettendo interrogazioni semplici tramite un lettore RFID standard.

Figura 1: chemiresistore realizzato; (a) composto GrPt depositato su trasduttore interdigitato; (b) resistenza del chemiresistore al variare della concentrazione di idrogeno.

In the field of sensor technology for hydrogen detection, the reliability of devices plays a crucial role, as this gas is widely used in sectors such as industry, energy, chemistry, and electronics, where its flammable properties can pose a potential risk. Recent technological advancements have significantly improved the sensitivity, response times, and selectivity of sensors, allowing for the detection of increasingly lower hydrogen concentrations. This study proposes an innovative solution based on UHF RFID technology for hydrogen detection, focusing on the design of an RFID tag equipped with an analog interface for measuring the DC re-

sistance of a hydrogen-sensitive chemiresistor (Gr-Pt composite). For this purpose, the Asygn AS3212 RFID chip was used, which includes pins dedicated to resistance measurement, a 10-bit ADC, and an integrated amplifier with variable gain. By properly configuring the parameters, it was possible to measure the entire range of resistance variation of the chemiresistor, fully utilizing the ADC's dynamic range. This method offers a practical and direct approach, particularly useful for environmental and safety monitoring applications, enabling simple interrogation via a standard RFID reader.

Figura 2: tag RFID UHF GEN2 progettato, con pad per la connessione del chemiresistore.

Gruppo di ricerca

ENEA

Tiziana Polichetti, tiziana.polichetti@enea.it

Ettore Massera, ettore.massera@enea.it

Brigida Alfano, brigida.alfano@enea.it

Maria Lucia Miglietta, marialucia.miglietta@enea.it

CERICT scarl

Andrea Cusano, acusano@unisannio.it

Marco Consales, consales@unisannio.it

Angela Maria Cusano, angelamaria.cusano@cerict.it

Alberto Micco, alberto.micco@cerict.it

Giuseppe Quero, giuquero@unisannio.it

Gino Cortellessa

Università Degli Studi Di Cassino

Parole chiave: CFD, Misuratore massico-termico, Miscele di idrogeno e gas naturale, Rete di distribuzione del gas, Proprietà termofisiche

Keywords: CFD, Thermal-Flow Meter, Hydrogen and Natural Gas mixtures, Gas distribution network, Thermophysical properties.

Tra i "green" gas l'idrogeno sta assumendo sempre più un ruolo primario come vettore energetico per garantire il raggiungimento degli obiettivi europei di decarbonizzazione entro il 2050. La presente attività di ricerca consiste nello sviluppo e validazione, attraverso attività sperimentale, di un modello matematico e numerico tridimensionale, in grado di descrivere il comportamento e le prestazioni metrologiche di una tipologia selezionata di misuratori utilizzati nelle reti di distribuzione e trasporto del gas naturale in presenza di miscele di idrogeno e gas naturale con contenuto di idrogeno via via crescente fino al 100%. Il modello matematico è stato implementato e risolto numericamente utilizzando un codice di calcolo basato sul metodo dei volumi finiti. Il modello potrà essere utilizzato per: (i) investigare differenti condizioni operative (e.g. portata volumetrica, temperatura e pressione); (ii) effettuare un'analisi parametrica difficile da ottenere mediante una campagna di misure sperimentali; (iii) ottenere informazioni dettagliate circa i campi termofluidodinamici (e.g. densità e viscosità del fluido); (iv) analizzare gli effetti di deriva della curva caratteristica del misuratore valutando gli stress termici dei materiali in funzione delle condizioni operative. Il modello matematico e numerico sarà validato attraverso il test e la sperimentazione di misuratori tradizionali ed utilizzato per la progettazione di un prototipo di sistema di misura della portata di una miscela di idrogeno.

Figura 1: Validation by experimental data of the numerical model developed for the simulation of a Thermal Flow Meter.

Among the “green” gases, hydrogen is increasingly playing a primary role as an energy carrier to ensure the achievement of European decarbonization goals by 2050. This research activity involves the development and validation, through experimental activities, of a three-dimensional mathematical and numerical model capable of describing the behavior and metrological performance of a selected type of meter used in natural gas distribution and transport networks in the presence of hydrogen-natural gas mixtures with an increasing hydrogen content, up to 100%. The mathematical model was implemented and solved numerically using a calculation code based on the finite volume method. The model can be used to: (i) inves-

tigate different operating conditions (e.g., volumetric flow rate, temperature, and pressure); (ii) perform a parametric analysis that is difficult to achieve through an experimental measurement campaign; (iii) obtain detailed information on thermofluidynamic fields (e.g., fluid density and viscosity); (iv) analyze the drift effects of the meter's characteristic curve by evaluating the thermal stresses of materials as a function of operating conditions. The mathematical and numerical model will be validated through testing and experimentation with traditional meters and used for the design of a prototype system for measuring the flow rate of a hydrogen mixture.

Figura 2: Application of the validated numerical model for investigating hydrogen stratification in hydrogen-natural gas blends.

Gruppo di ricerca

Università degli Studi di Cassino

Gino Cortellessa, g.cortellessa@unicas.it

Giorgio Ficco, ficco@unicas.it

Fausto Arpino, f.arpino@unicas.it

SESSIONE 9 - CELLE A COMBUSTIBILE PER APPLICAZIONI DI MOBILITÀ

CHAIR: Francesco Vellucci, ENEA

Laura Andaloro

CNR

Parole chiave: Idrogeno, Trasporto marittimo, Fuel cell a ossigeno, MEA.

Il lavoro presentato descrive le prospettive dell'idrogeno nel settore dei trasporti: tra le diverse tipologie di trasporto (su strada, marittimo, aereo e ferroviario) il trasporto su strada in Italia resta la modalità di trasporto principale (91,5% delle emissioni di CO₂ del settore trasporti). Le previsioni sull'adozione dell'idrogeno delineano una strada abbastanza definita per il trasporto su strada, dove i veicoli pesanti e commerciali leggeri costituiscono il segmento di trasporto più compatibile con la mobilità a idrogeno. Anche per il settore ferroviario l'idrogeno rappresenta una tecnologia abilitante specie per la decarbonizzazione delle tratte non elettrificate. Più difficile risulta invece nel breve-medio termine una conversione all'elettrico e all'idrogeno nei trasporti marittimi e aerei. Nell'ambito del presente progetto l'ITAE sta sviluppando fuel cell che operino in alte percentuali di ossigeno (> 25%) per applicazioni a bordo di imbarcazioni, al fine di renderle funzionali anche quando l'utilizzo dell'aria diretta non è consigliabile (ambiente marino ricco di umidità e salinità) e per impiegare l'ossigeno prodotto da eventuale elettrolizzatore a bordo. Di contro l'ossigeno puro come gas catodico espone i materiali ad un ambiente più aggressivo con alto rischio di infiammabilità. Dopo avere individuato i materiali più idonei, è stato eseguito il dimensionamento di un mini-stack, ovvero la determinazione della tensione di lavoro, dell'area attiva di cella, la geometria dei flow-field, ecc. È stato eseguito l'assemblaggio, virtuale e reale, e sono stati testati diversi MEA con membrane di spessore e formulazione catalitica differenti.

Potenza di progetto	W	3500,00
Tensione totale di progetto	V	36,00
Tensione di cella	Vc	0,760
n.celle	-	48,00
Area attiva	cm ²	246,00
Potenza ricalcolata	W	3535,79
Tens. di lavoro	V	36,48
Corr. di lavoro	A	96,92

Figura 1: Valori del dimensionamento del mini-stack.

Figura 2: Assemblaggio virtuale del mini-stack.

The presented work describes the prospects of hydrogen in the transportation sector: Among the various types of transportation (road, maritime, air, and rail), road transport in Italy remains the main mode of transport (91.5% of CO₂ emissions from the transport sector). The forecasts on hydrogen adoption outline a fairly clear path for road transport, where heavy and light commercial vehicles represent the segment of transport most compatible with hydrogen mobility. For the railway sector as well, hydrogen represents an enabling technology, especially for the decarbonization of non-electrified routes. In the short to medium term, a transition to electric and hydrogen in maritime and air transport proves to be more challenging. As part of, ITAE is developing fuel cells that operate at high othe

current project oxygen percentages (> 25%) for applications on board vessels, in order to make them functional even when the use of direct air is not advisable (marine environment rich in humidity and salinity) and to utilize the oxygen produced by any electrolyzer on board. On the other hand, pure oxygen as a cathodic gas exposes materials to a more aggressive environment with a high risk of flammability. After identifying the most suitable materials, the sizing of a mini-stack was carried out, which includes determining the operating voltage, the active cell area, the geometry of the flow fields, and so on. The assembly, both virtual and real, has been carried out, and several MEAs with different membrane thicknesses and catalytic formulations have been tested.

Figura 3: Curve di polarizzazione relative a tre MEA diversi.

Gruppo di ricerca N. 3.3.6

Sviluppo di celle a combustibile per applicazioni on-board e in aree portuali e validazione in stack prototipali

CNR ITAE

Laura Andalaro, laura.andalaro@itae.cnr.it

Orazio Barbera, orazio.barbera@itae.cnr.it

Giosuè Giacoppo, giosue.giacoppo@itae.cnr.it

Alessandra Di Blasi, alessandra.diblas@itae.cnr.it

Ilenia Belviso, ilenia.belviso@itae.cnr.it

Maria Giovanna Bottai, maria.bottari@itae.cnr.it

Giovanni Brunaccini, giovanni.brunaccini@itae.cnr.it

Giorgio Dispenza, giorgio.dispenza@itae.cnr.it

Elio Jannelli

UNIPARTHENOPE

Parole chiave: Hybrid fuel cell/battery powertrain; hydrogen-fueled heavy-duty vehicle; sustainable ports.

L'industria della logistica portuale ha un forte impatto in termini di emissioni inquinanti, relative all'uso dei sistemi ausiliari a bordo delle navi operanti durante le soste in porto e dei veicoli stradali impiegati per le operazioni di logistica, oggi comunemente alimentati a combustibili fossili. La decarbonizzazione dei porti richiede dunque l'adozione di tecnologie di propulsione pulite e, tra queste, emergono quelle legate all'idrogeno. Questo studio presenta le attività relative alla progettazione preliminare di un sistema ibrido a celle a combustibile e batteria per un veicolo heavy-duty 4x2, ossia uno Yard Tractor utilizzato nelle operazioni di logistica portuale. Requisito del nuovo veicolo è quello di garantire le stesse prestazioni, in termini sia di capacità operativa che di autonomia, del veicolo originale alimentato a Diesel. Innanzitutto, è stato messo a punto un sistema di telemetria on-board, che ha consentito di effettuare una campagna di acquisizione su tre identici veicoli operanti in ambiente reale, presso il terminal PSA Genova Pra', al fine di studiare tipici duty cycles e determinare i requisiti tecnici da soddisfare. Sulla base di questa analisi, sono state definite le taglie dei componenti principali del sistema di propulsione e del sistema di stoccaggio idrogeno, e i componenti selezionati sono stati dunque collocati all'interno del layout del veicolo revisionato. I risultati ottenuti confermano il potenziale del veicolo ibrido proposto ad essere effettivamente impiegato nell'ambito di una logistica portuale a zero emissioni.

Figura 1: Trattore portuale oggetto dell'attività di conversione a idrogeno.

Figura 2: Risultati campagna di acquisizione - requisiti di energia.

The port logistics industry has a significant impact in terms of pollutant emissions, related to the use of auxiliary systems on board of ships during port stays and road vehicles employed in logistics operations, which are currently commonly powered by fossil fuels. The decarbonization of ports therefore requires the adoption of clean propulsion technologies, among which hydrogen-based solutions stand out. This study presents the activities related to the preliminary design of a hybrid fuel cell and battery system for a heavy-duty 4x2 vehicle, specifically a Yard Tractor used in port logistics operations. The new vehicle must ensure the same performance, both in terms of operational capacity

and range, as the original Diesel-powered vehicle. First, an onboard telemetry system was developed, enabling a data acquisition campaign on three identical vehicles operating in a real-world environment at the PSA Genova Pra' terminal. This was done to study typical duty cycles and determine the technical requirements to be met. Based on this analysis, the main components of the propulsion system and hydrogen storage system were sized, and the selected components were then integrated into the revised vehicle layout. The results obtained confirm the potential of the proposed hybrid vehicle to be effectively deployed in the context of zero-emission port logistics.

Figura 3: Risultati campagna di acquisizione - requisiti di potenza.

Gruppo di ricerca

Università degli Studi di Napoli Parthenope

Giovanni Di Ilio, giovanni.diilio@uniparthenope.it

Andrea Altomonte, andry.altomonte@gmail.com

Elio Simeoni, elio.simeoni001@studenti.uniparthenope.it

9.3 CONFIGURAZIONI IMPIANTISTICHE DI SISTEMI PROPULSIVI BASATI SU SOFC ALIMENTATE CON HYDROGEN CARRIERS E SVILUPPO MODELLI NUMERICI

Mariagiovanna Minutillo, Aniello Cappiello

Università degli Studi di Salerno Dipartimento di Ingegneria Industriale

Parole chiave: Decarbonizzazione, SOFC, metanolo, ammoniaca, consumi.

L'attività di ricerca svolta è finalizzata alla definizione ed analisi delle configurazioni impiantistiche che possono essere adottate per la realizzazione di sistemi propulsivi per applicazioni navali, basati sulla tecnologia delle celle a combustibile ad ossidi solidi (SOFC).

Prima di affrontare lo studio delle configurazioni, è stata condotta un'analisi sulla caratterizzazione di diverse tipologie di navi sulle quali è possibile pensare di sostituire il sistema propulsivo convenzionale, basato sul motore a combustione interna, con un sistema basato sulle celle a combustibile ad ossidi solidi alimentate con carriers di idrogeno. Particolare attenzione è stata posta alla caratterizzazione e definizione delle condizioni operative di 3 tipi di navi che si differenziano per la stazza (o gross tonnage) e la taglia dei motori. Per tali navi sono stati analizzati i profili di missione, in modo da poter poi valutare, attraverso lo sviluppo di modelli numerici, i consumi di combustibile, la CO₂ evitata e i costi operativi nel caso di funzionamento con le tecnologie SOFC. Le configurazioni proposte e studiate si differenziano per il combustibile utilizzato, ossia metanolo ed ammoniaca, e, conseguentemente, per il BoP del sistema propulsivo. Le configurazioni impiantistiche analizzate sono le seguenti: i) SOFC alimentata con metanolo, ii) SOFC alimentata con ammoniaca, iii) SOFC alimentata con syngas da reforming di metanolo, iv) SOFC alimentata con syngas da cracking dell'ammoniaca.

Figura 1: Caratterizzazione della potenza del sistema propulsivo e della lunghezza di diverse tipologie di navi.

Figura 2: Schema del sistema propulsivo con SOFC alimentata con ammoniaca o metanolo.

The research activity is aimed at the definition and analysis of plant configurations that can be adopted for the realization of propulsion systems for naval applications, based on solid oxide fuel cell (SOFC) technology.

The study of the proposed configurations has been preceded by the characterization of various types of vessels for which it is possible to consider replacing the conventional propulsion system based on the internal combustion engine with a system based on solid oxide fuel cells powered by hydrogen carriers. Particular attention has been paid to defining the operating conditions of three types of ships,

which differ in terms of gross tonnage and engine size. The mission profiles of these vessels have been analyzed to assess the fuel consumption, the CO₂ avoidance and the operating costs associated with SOFC technology through the development of numerical models. The proposed and studied configurations differ according to the fuel used, i.e. methanol and ammonia, and, consequently, to the BoP of the propulsion system. The plant configurations are as follows: i) SOFC fueled with methanol, ii) SOFC fueled with ammonia, iii) SOFC fueled with syngas from methanol reforming, iv) SOFC fueled with syngas from ammonia cracking.

Approccio metodologico

Pubblicazioni

- Di Micco, S., Cigolotti, V., Mastropasqua, L., Brouwer, J., Minutillo, M., Ammonia-powered ships: Concept design and feasibility assessment of power-train systems for a sustainable approach in maritime industry, *Energy Conversion and Management*: 2024, 22, 100539

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università degli Studi di Salerno

Aniello Cappiello, ancappiello@unisa.it

Mariagiovanna Minutillo, mminutillo@unisa.it

9.4 UTILIZZO DI COMBUSTIBILI ALTERNATIVI PER LA PROPULSIONE NAVALE BASATA SU CELLE A COMBUSTIBILE PEM: CONFRONTO FRA LE SOLUZIONI IMPIANTISTICHE

Daive Pivetta, Nicola Zuliani, Rodolfo Taccani

Università degli studi di Trieste

Parole chiave: PEMFC, Ships, Hydrogen, Ammonia, LOHC.

Lo scopo di questo lavoro è di selezionare i componenti e i dispositivi necessari per assicurare il corretto funzionamento di un sistema energetico, basato su tecnologia PEMFC (Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell), da installarsi a bordo delle navi. L'attività si è suddivisa in:

- definizione dei possibili carrier d'idrogeno che possono essere utilizzati a bordo nave;
- definizione delle tipologie di navi che possono maggiormente beneficiare da questa integrazione;
- definizione delle configurazioni impiantistiche.

In particolare, sono stati analizzati i seguenti carrier d'idrogeno: idrogeno puro, Liquid Organic Hydrogen Carrier (LOHC) e ammoniaca. Le tipologie di navi che possono ottenere i maggiori benefici economici dall'installazione di celle a combustibile sono state identificate concentrandosi su quelle che operano principalmente in aree a emissioni controllate. In base alle esigenze energetiche, è stato proposto il tipo di vettore di idrogeno più appropriato per una specifica tipologia di nave considerando, come fattori decisionali, le caratteristiche impiantistiche (ad esempio ingombri e pesi) e l'efficienza attesa. Attraverso l'individuazione delle configurazioni impiantistiche più opportune, lo studio ha l'obiettivo di ridurre significativamente le emissioni e supportare la decarbonizzazione all'interno dell'industria marittima.

Figura 1: Timeline of activities.

The aim of this work is to select the components and devices necessary to ensure the proper functioning of an energy system based on PEMFC (Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell) technology, to be installed on board ships. The work has been divided into the following steps:

- definition of possible hydrogen carriers that can be used on board ships;
- identification of ship types that can benefit the most from this integration;
- definition of system configuration options.

In particular, the following hydrogen carriers were analyzed: pure hydrogen, Liquid Organic Hydrogen Carrier (LOHC),

and ammonia. The ship types that would gain the most economic benefit from the installation of fuel cells on board were identified by focusing on vessels that operate primarily in emission-controlled areas. Based on energy requirements, the most suitable hydrogen carrier was proposed for each ship type, considering system characteristics (such as space and weight constraints) and the expected efficiency as key decision factors. By identifying the most appropriate system configurations, the study aims to significantly reduce emissions and support decarbonization within the maritime industry.

Figura 2: Simplified Schematic of liquid hydrogen plant configuration.

Gruppo di ricerca
Università degli studi di Trieste

Davide Pivetta, davide.pivetta@phd.units.it
Nicola Zuliani, nicola.zuliani@dia.units.it
Federico del Mondo, federico.delmondo@dia.units.it
Marco Bogar, marco.bogar@dia.units.it
Rodolfo Taccani, taccani@units.it

Pierpaolo Polverino, Massimo Sicilia, Cesare Pianese

Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università degli Studi di Salerno

Parole chiave: PEMFC, diagnosi, SoH, modellazione, automotive.

La diagnosi dei sistemi a celle a combustibile riveste un ruolo centrale per la diffusione di tali tecnologie per applicazioni sia mobili che stazionarie. La determinazione di condizioni di guasto e di degrado facilita interventi manutentivi ed azioni correttive da parte del sistema di controllo per limitare al minimo le interruzioni di esercizio ed incrementarne la vita utile. L'implementazione di logiche di diagnosi e controllo avanzate, che sfruttino una determinazione dello stato di guasto ed una previsione della sua evoluzione temporale, richiedono modelli con una elevata accuratezza nella rappresentazione del sistema ed al contempo ridotti tempi di calcolo. In tale contesto, numerosi sono gli approcci che sfruttano modelli basati su leggi fisiche e correlazioni desunte da dati sperimentali. Nell'ambito del progetto, si pone particolare attenzione a soluzioni basate su modelli veloci per il monitoraggio a fini diagnostici, che possano fornire indicazioni sullo stato di guasto sia dello stack che dei componenti ausiliari. Tra i principali vantaggi dell'approccio scelto ricadono la velocità di calcolo, compatibile con applicazioni in tempo reale, la generalizzabilità dei modelli dei componenti d'impianto, la necessità di ridotti dati sperimentali per la caratterizzazione e la validazione degli stessi, in quanto basati su leggi fisiche e relazioni di tipo grey-box. L'attività del progetto riguarda la caratterizzazione di un modello semplificato di sistema PEMFC, basato sulla tecnologia di Arco Technologies, asservito allo studio di guasti ed all'identificazione dello stato di salute.

Figura 1: Schema modello a parametri concentrati di stack PEMFC.

Diagnosis of fuel cell systems plays a central role in the deployment of these technologies in both mobile and stationary applications. The monitoring of fault and degradation conditions facilitates maintenance and corrective actions by the control system to minimize malfunctioning and increase lifetime.

The implementation of advanced diagnostic and control logics based on fault state detection and prediction of its temporal evolution requires models with high accuracy in representing the system and at the same time reduced computational time. In this context, there are several approaches that use models based on physical laws and correlations derived from experimental data. In the context of

this project particular emphasis is given to solutions based on fast models for monitoring and diagnostic purposes, which can provide indications of the state-of-health of both the stack and auxiliary components. The main advantages of the chosen approach are the computational speed compatible with real-time applications, the generalizability of the plant component models and the reduced need for experimental data for characterization and validation, as they are based on physical laws and grey box relationships. Project activities include the characterization of a simplified PEMFC system model, based on Arco Technologies' FC systems, for the study of failures and the identification of health states.

Figura 2: Schema d'impianto sistema PEMFC Arco Technologies, con relativi obiettivi modellistici.

Pubblicazioni

- Sicilia M., Cervone D., A., Polverino P., Pianese C., *Model-based algorithm for water management diagnosis and control of PEMFC systems for motive applications*, SAE Technical Paper 2024-37-0004, 2024, doi:10.4271/2024-37-0004

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università degli Studi di Salerno

Cesare Pianese, pianese@unisa.it

Pierpaolo Polverino, ppolverino@unisa.it.

Nicolò Mancino

ENEA

Parole chiave: Test Bench Upgrade, Powertrain Testing, Vehicle Simulation, Fuel Cell, Electric Motors.

L'intervento "Upgrade Sale Prova per Powertrain di Veicoli" è incentrato sulla illustrazione degli sviluppi ed il potenziamento dei sistemi di test per powertrain automobilistici presenti nel Laboratorio ENEA di "Mobilità Sostenibile e Trasporti" (MOST). È descritto l'attuale layout dell'edificio adibito al testing di powertrain per veicoli, presentando la funzione delle diverse sale prova: sala "Fuel Cell", sala "100 kW", sala "30 + 30 kW", sala "Ciclatore". Queste sale, collegate con bus in DC che ne consente la mutua interconnessione, possono ricostruire i flussi di potenza scambiati in un drive train di un veicolo ibrido, consentendo il test di tutti i componenti del veicolo completo (allocati ciascuno nella rispettiva sala) oppure del singolo componente del medesimo. La facility di test consente la simulazione e lo studio di powertrain automobilistici sia tradizionali che ibridi, come anche full electric ed a fuel cell. Sono infine descritti i requisiti tecnici del potenziamento previsto per le sale prova nell'ambito delle attività del PORH2, al fine di garantire un potenziamento delle prestazioni dei test ed assicurare gli standard di sicurezza necessari.

Figura 1: Attuale configurazione dell'edificio contenente le sale prove per powertrain di veicoli: 1) Sala controllo; 2) Sala Prova 30+30kW; 3) Sala Prova 100kW; 4) Sala Fuel Cell; 5) Locale Ciclatore. La configurazione delle sale sarà rispettata e soggetta ad upgrade.

The presentation "Upgrade of the Test Facility for Vehicle Powertrains" focuses on illustrating the developments and enhancements of the test systems for automotive powertrains at the ENEA Laboratory for "Sustainable Mobility and Transport" (MOST). The current layout of the building dedicated to vehicle powertrain testing is described, highlighting the function of the different test rooms: the "Fuel Cell" room, the "100 kW" room, the "30 + 30 kW" room, and the "Cycler" room. These rooms, connected by a DC bus that allows mutual interconnection, can replicate the power

flows exchanged in the drivetrain of a hybrid vehicle, enabling the testing of either all components of the complete vehicle (each allocated in its respective room) or a single component.

The testing facility allows for the simulation and study of traditional, hybrid, full-electric, and fuel cell automotive powertrains. Finally, the technical requirements of the planned upgrades for the test rooms within the PORH2 activities are described, aiming to enhance testing performance and ensure the necessary safety standards.

Figure 2: Esempio di banco test per Fuel Cell e Balance of Plant recentemente acquistato dal laboratorio TERIN-DEC-MOST.

Gruppo di ricerca

ENEA

Manlio Pasquali, manlio.pasquali@enea.it
Francesco Vellucci, francesco.vellucci@enea.it
Fernando Ortenzi, fernando.ortenzi@enea.it
Carla Menale, carla.menale@enea.it
Francesco Vitiello, francesco.vitiello@enea.it
Nicolò Mancino, nicolo.mancino@enea.it

10

SESSIONE 10 - PROCESSI DI ELETTROLISI AD ALTA TEMPERATURA

CHAIR: Alessandra Sanson, CNR

Francesco Sessa¹, Massimiliano della Pietra², Simone Mataloni², Ana Belen Muñoz-García¹, Michele Pavone¹

¹Università di Napoli "Federico II", ²ENEA

Parole chiave: Molten carbonate electrolysis cells, green hydrogen, molecular simulations, molten salts.

La ricerca di fonti di energia pulite è una delle grandi richieste di questo secolo, spinta dalla necessità di mitigare l'impatto antropico sugli ecosistemi del pianeta. Le fonti rinnovabili che dipendono dal tempo atmosferico richiedono lo sviluppo di tecnologia atte all'accumulo energetico. Le celle elettrolitiche a carbonati fusi (MCEC), in grado di convertire energia in portatori gassosi come H_2 , ne sono un esempio. Per migliorare l'efficienza di questi dispositivi è necessario raggiungere una comprensione approfondita dei materiali e processi responsabili del funzionamento. In questo lavoro presentiamo una approfondita caratterizzazione strutturale dell'elettrolita tipo di queste celle, la miscela eutettica $\text{Li}_{1.24}\text{K}_{0.76}\text{CO}_3$. Simulazioni di dinamica molecolare con polarizzazione esplicita mostrano una struttura dominata da una forte rete di interazioni litio-carbonato che intrappolano gli ioni potassio. Questa conoscenza a livello atomistico della struttura dell'elettrolita permette di razionalizzare l'andamento della conduttività visti sperimentalmente per diverse miscele di carbonati fusi. A partire dalle simulazioni presentiamo anche una previsione del fattore di struttura ($S(q)$) della miscela alla temperatura operativa delle MCEC. Questo lavoro è il primo passo di un percorso più ampio il cui obiettivo è caratterizzare a livello atomistico tutti gli elementi coinvolti nel funzionamento delle MCEC. Il campo di forze polarizzabile sviluppato qui sarà il punto di partenza per studi successivi sul ruolo dell'elettrolita nelle MCEC.

Figura 1: Fattore di struttura della miscela di carbonati fusi $\text{Li}_{1.24}\text{K}_{0.76}\text{CO}_3$. Le due strutture di coordinazione, una per ciascun catione, più ricorrenti nella simulazione sono riportate in figura.

Figura 2: Le distribuzioni di probabilità per i numeri di coordinazione, e per la correlazione distanze-angoli, permettono di studiare le interazioni tra ioni litio e ioni carbonato per identificarne le diverse geometrie di coordinazione presenti in soluzione.

Clean energy is one of the big demands of this century, driven by the need to mitigate human impact on the planet's ecosystems. Weather-dependent renewable sources require advancements in energy storage technologies. Molten carbonate electrolysis cells (MCECs) are a prime example of devices able to convert surplus energy from a renewable source into gaseous energy carriers, like H₂. To further improve the efficiency of these devices, we require reaching a deeper understanding of each step involved in the functioning process.

Here, we start with a thorough structural investigation of the electrolyte of choice for MCECs, namely the molten Li_{1.24}K_{0.76}CO₃ eutectic mixture. We employ explicit polarization molecular dynamics to show that the structure

of this molten mixture is characterized by tight lithium-carbonate interactions, giving rise to a structural network in which the K⁺ ions are loosely embedded. Using the knowledge of the melt structure at an atomic level, we can rationalize the conductivity trends we see experimentally in molten carbonate mixtures. Finally, from our simulation we provide the first theoretical prediction of the static structure factor, $S(q)$, of the Li_{1.24}K_{0.76}CO₃ melt at the typical operating temperature of MCECs. This work will be the first step in a larger endeavor to characterize at an atomic level each element of the chemical processes involved in these devices. The polarizable force field developed here will lead to more advanced studies on the role of the electrolyte in the cell.

Publicazioni

1. F. Sessa, M. Della Pietra, S. Mataloni, A.B. Muñoz-Garcia, M. Pavone. *Phys Chem Chem Phys* (2024), 26, 14420-14429.

Gruppo di ricerca

Università di Napoli "Federico II"

Michele Pavone, Dipartimento di Scienze Chimiche, michele.pavone@unina.it

Francesco Sessa, Dipartimento di Scienze Chimiche, francesco.sessa@unina.it

Ana Belen Muñoz-Garcia, Dipartimento di Fisica "Ettore Pancini", anabelen.munozgarcia@unina.it

ENEA

Massimiliano della Pietra, massimiliano.dellapietra@enea.it

Simone Mataloni, simone.mataloni@enea.it

10.2 STUDIO PARAMETRICO DEI PRINCIPALI FENOMENI CHIMICO-FISICI DELL'ELETTROLIZZATORE A CARBONATI FUSI ALIMENTATO DA FONTI ENERGETICHE RINNOVABILI (RES)

Massimiliano Della Pietra¹, Silvia Lo Conte², Simone Mataloni¹, Gabriele Loreti¹, Stefano Frangini¹, Francesca Santoni¹

¹ENEA, ²UniRoma1 Sapienza

Parole chiave: MCEC; Diagnostica in operando; Meccanismi di degrado; DRT

Al fine di poter comprendere a fondo il funzionamento e i meccanismi di degrado degli elettrolizzatori a carbonati fusi (MCEC) è necessario investigare dettagliatamente i fenomeni chimico-fisici che avvengono al loro interno durante la loro operazione e come essi evolvano nel tempo. Scopo del presente lavoro è stato quello di definire ed eseguire una serie di campagne sperimentali volte a mettere in luce principi di funzionamento e meccanismi di degrado delle MCEC variando parametricamente le condizioni operative di celle elettrolitiche su scala di laboratorio.

Per poter validamente assolvere a questo compito è stato necessario strutturare delle campagne sperimentali specifiche, per massimizzare, a seconda del layout sperimentale utilizzato, l'efficacia degli strumenti diagnostici impiegati (e.g. curve di polarizzazione, spettri di impedenza, DRT e caratterizzazione gas cromatografica). Seguendo dunque questa filosofia le campagne sperimentali che sono state definite e realizzate assolvono a due obiettivi principali:

- Identificare i fenomeni chimico-fisici avvenenti all'interno di una MCEC, utilizzando tecniche diagnostiche avanzate in operando
- Definire i meccanismi di degrado nel tempo ipotizzando l'accoppiamento dinamico con fonti rinnovabili (PV).

Figura 1: Definizione delle campagne sperimentali svolte su MCEC.

In order to thoroughly understand the functioning and degradation mechanisms of molten carbonate electrolyzers (MCEC), it is necessary to investigate in detail the chemical-physical phenomena that occur within them during operation and how they evolve over time. The purpose of this work was to define and carry out a series of experimental campaigns aimed at highlighting the operating principles and degradation mechanisms of MCECs by parametrically varying the operating conditions of laboratory-scale electrolytic cells. To validly achieve this goal, it was necessary to structure specific experimental campaigns, in order to

maximize, depending on the experimental setup used, the effectiveness of the diagnostic tools employed (e.g., polarization curves, impedance spectra, DRT and gas chromatographic characterization). Thus, following this approach, the experimental campaigns that were defined and carried out serve two main objectives:

- Identify the chemical-physical phenomena occurring inside an MCEC using advanced in-operando diagnostic techniques
- Define the degradation mechanisms over time, assuming dynamic coupling with renewable sources (PV).

Figura 2: Analisi DRT di una button cell MCEC.

Publicazioni

- Structure and dynamics of $\text{Li}_1.24\text{K}_0.76\text{CO}_3$ molten carbonate electrolyte from molecular simulations with explicit polarization, 10.1039/d4cp00805g

Gruppo di ricerca

ENEA

Massimiliano Della Pietra, massimiliano.dellapietra@enea.it

Gabriele Loreti, gabriele.loreti@enea.it

Simone Mataloni, simone.mataloni@enea.it

Stefano Frangini, stefano.frangini@enea.it

Francesca Santoni, francesca.santoni@enea.it

UNIROMA1 SAPIENZA

Silvia Lo conte, silvia.loconte@uniroma1.it

10.3 ANALISI MULTI-SCENARIO SULL'INTEGRAZIONE DI CELLE ELETTROCHIMICHE REVERSIBILI AD ALTA TEMPERATURA NEI SETTORI CHIMICO E RESIDENZIALE

Francesca Mennilli¹, Andrea Monforti Ferrario², Mosè Rossi¹, Gabriele Comodi¹, Massimiliano Della Pietra²

¹UNIVPM-DIISM, ²ENEA

Parole chiave: Idrogeno verde; rSOC; rMCC; Test di laboratorio; Modello numerico semi-empirico; Integrazione di sistema; Analisi di scenario; Decarbonizzazione dei settori; Transizione energetica.

L'obiettivo del presente studio è quello di valutare l'integrazione di celle elettrochimiche reversibili ad alta temperatura, accoppiate con fonti rinnovabili, nei settori residenziali ed industriali ed analizzare diversi scenari di funzionamento. A valle di un'approfondita analisi bibliografica relativamente alle tecnologie legate all'idrogeno legata alla sua produzione ed al suo utilizzo, si è scelto di focalizzare l'attenzione e lo studio su quelle ad ossidi solidi e a carbonati fusi. Successivamente sono state svolte campagne sperimentali presso il centro di ricerca ENEA di Roma (Casaccia) su entrambe le tecnologie, variandone i parametri operativi (es. temperatura, portate, composizioni, ecc.). Per ogni prova è stato acquisito uno spettro di impedenza ed una curva I-V. Per la tecnologia ad ossidi solidi si è notato che, operando alte concentrazioni di acqua e a basse concentrazioni/portate di ossigeno/aria, il sistema risulta essere instabile. In merito alla tecnologia ad ossidi solidi si è sviluppato un modello semi-empirico utilizzando due ambienti di lavoro, precisamente Matlab® e Python, che sono stati validati utilizzando i dati sperimentali raccolti in laboratorio.

Si è scelto di utilizzare questi due diversi approcci di modellazione per avere, nel proseguo delle attività in merito a questa LA, la possibilità di poter implementare le tecnologie in sistemi energetici e di fornire indicazioni utili ai ricercatori, a valle della pubblicazione di articoli scientifici, per poter utilizzare quanto ad oggi sviluppato (replicabilità). Dalla validazione dei modelli è emerso che il minimo scostamento nella comparazione sperimentale/numerico è stato pari allo 0,6%, ottenuto in corrispondenza di una composizione 30%-70% di H₂-H₂O. Pertanto, il modello numerico sviluppato per la tecnologia ad ossidi solidi può essere ritenuto affidabile e utilizzato per simulare l'integrazione di tale tecnologia all'interno di uno scenario residenziale in accoppiamento con una fonte rinnovabile. Per quanto concerne la campagna sperimentale relativa alla tecnologia a carbonati fusi, questa è stata completata e il relativo modello numerico è attualmente in fase di sviluppo. In tal caso, il modello verrà utilizzato per simulare il comportamento di tale tecnologia all'interno di uno scenario industriale.

Figura 1: Banco prova per i test sulla tecnologia ad ossidi solidi.

Figura 2: Assemblaggio finale della cella ad ossidi solidi.

Figura 3: "Fuel" (sinistra) e "air" (destra) "electrode" della cella ad ossidi solidi.

The objective of this study is to evaluate the integration of high-temperature reversible electrochemical cells coupled with renewable sources in both residential and industrial scenarios. After a deep investigation of the scientific literature regarding the hydrogen technologies available and under investigation so far, solid oxide and molten carbonate technologies have been selected for carrying on further research activities. Experimental tests were carried out in both technologies, changing their operating parameters (e.g., temperature, flow rates, compositions, etc.). Per each test, an impedance spectrum and an I-V curve have been recorded. Regarding the solid oxide technology, it has been noticed that a high water content and a low oxygen/air concentration/flow rate make the system unstable. A semi-empirical model has been developed in both Matlab® and Python environments, which have been subsequently validated using experimental data collected in the laboratory of the research center ENEA in Rome (Ca-

saccia). It was decided to use these two different modeling approaches to have, while continuing the activities related to this research, the possibility to implement the technologies in energy systems and provide useful information to researchers, after the publication of scientific articles regarding this study, to use what has been developed so far (replicability). The model validation revealed a minimum deviation of 0.6% in the electrolysis mode, corresponding to a composition of 30%-70% of H₂-H₂O. The numerical model developed for the solid oxide technology can be considered reliable and will be used to simulate the integration of this technology within a residential scenario coupled with a renewable source.

On the other hand, the experimental campaign on the molten carbonate technology has been completed and the related numerical model is currently under development. This will be used to simulate the behavior of this technology in an industrial context with different scenarios.

Publicazioni

- F. Mennilli, L. Giannetti, A. Monforti Ferrario, M. Rossi, G. Comodi, M. Della Pietra, An Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS) analysis of a reversible Solid Oxide Cell (rSOC) for its electrochemical characterisation, *Journal of Physics: Conference Series* (2024).

Gruppo di ricerca

ENEA

Massimiliano Della Pietra, massimiliano.dellapietra@enea.it

UNIVPM-DIISM

Mosè Rossi, mose.rossi@staff.univpm.it

Francesca Mennilli, f.mennilli@pm.univpm.it

Gabriele Comodi, g.comodi@staff.univpm.it

SESSIONE 11 - PRODUZIONE DI IDROGENO DA PROCESSI TERMOCHIMICI

CHAIR: Nicola Lisi, ENEA

11.1 CATALIZZATORI SPECIFICI PER REATTORI DI REFORMING ELETTRICO E IDROGASSIFICAZIONE DI BIOMASSE

Vincenzo Palma, Eugenio Meloni, Emilia Saraceno

Dipartimento di Ingegneria Industriale - Università degli Studi di Salerno

Parole chiave: Intensificazione di processo, catalizzatori strutturati, elettrificazione dei processi chimici, idrogassificazione di biomasse.

Le principali criticità delle reazioni di reforming sono rappresentate dall'enorme carico termico richiesto per il riscaldamento dell'alimentazione e per l'endotermicità della reazione, che comporta quindi un mezzo di riscaldamento ad altissima temperatura ($T > 1500^\circ\text{C}$) e acciai speciali. Il processo di trasferimento di calore è la fase limitante la velocità: questa complessità si traduce in elevati costi fissi e operativi e, a sua volta, in una riduzione dell'efficienza complessiva del processo. Per superare le criticità del reattore di reforming, l'uso di un catalizzatore strutturato combinato al riscaldamento resistivo mira a realizzare il riscaldamento diretto del catalizzatore, rimuovendo la fase limitante la velocità del trasferimento di calore e i relativi inconvenienti negativi. La possibilità di fornire calore in modo rapido e diretto all'interno del volume catalitico consente di realizzare una progettazione più semplice del reattore, una drastica riduzione del volume di reazione, tempi di avviamento più brevi e l'impiego di materiali più economici. Le biomasse in generale sono oggi una delle fonti rinnovabili di maggiore interesse nell'industria chimica. Esse possono essere sottoposte a molteplici trattamenti, sia di recupero termico, trattandole come combustibili, sia di valorizzazione chimica, utilizzandole come reagenti per la produzione di composti di interesse per l'industria chimica, quali syngas, bio-diesel, bio-oli, metano ed altri. Un trattamento fortemente innovativo è l'idrogassificazione catalitica: tramite l'utilizzo di idrogeno come reagente è possibile convertire la biomassa in una miscela gassosa ricca principalmente in metano, e il residuo a valle di questo trattamento ha una massa inferiore rispetto a quella iniziale, andandone ad abbassare i costi legati allo smaltimento e l'impatto ambientale.

Figura 1: Consumo energetico in funzione della portata totale di idrogeno prodotto tramite reforming catalitico elettrificato.

The main critical issues of reforming reactions are the huge heat load required for heating the feed and the endothermicity of the reaction, which therefore requires a very high temperature heating medium ($T > 1500^\circ\text{C}$) and special steels. The heat transfer process is the rate-limiting step: this complexity translates into high fixed and operating costs and, in turn, a reduction in the overall process efficiency. To overcome the critical issues of the reforming reactor, the use of a structured catalyst combined with resistive heating aims to achieve direct heating of the catalyst, removing the rate-limiting step of heat transfer and its related negative drawbacks. The possibility of providing heat quickly and directly inside the catalytic volume allows for a simpler reactor design, a drastic reduction of the reac-

tion volume, shorter startup times and the use of cheaper materials. Biomass in general is today one of the renewable sources of greatest interest in the chemical industry. They can be subjected to multiple treatments, including thermal recovery, treating them as fuels, and chemical valorization, using them as reagents for the production of compounds of interest for the chemical industry, such as syngas, bio-diesel, bio-oils, methane and others. A highly innovative treatment is catalytic hydrogasification: using hydrogen as a reactant it is possible to convert the biomass into a gaseous mixture rich mainly in methane, and the residue downstream of this treatment has a lower mass than the initial one, thus lowering the costs related to disposal and the environmental impact.

Figura 2: Risultati di prove sperimentali di Idrogassificazione catalitica di plasmix.

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Ingegneria Industriale Università degli Studi di Salerno

Vincenzo Palma, vpalma@unisa.it

Eugenio Meloni, emeloni@unisa.it

Emilia Saraceno, vsaraceno@unisa.it

SESSIONE 12 - ANALISI TECNICO-ECONOMICA E DI SOSTENIBILITÀ

CHAIR: Claudia Bassano, ENEA

Simona Di Micco¹, Elio Jannelli¹, Mariagiovanna Minutillo², Alessandra Perna³

¹Università degli Studi di Napoli Parthenope, ²Università degli Studi di Salerno, ³Univ. di Cassino e del Lazio Meridionale

Parole chiave: Decarbonizzazione, idrogeno, modellazione, rinnovabili, cartiera.

L'attività di ricerca ha riguardato l'individuazione della configurazione ottimale di un impianto per la produzione di idrogeno da fonte rinnovabile da integrarsi in uno dei comparti industriali dell'Hard-to-Abate, ossia quello delle cartiere. L'attività si è focalizzata sul caso studio di una cartiera per la quale viene studiata la possibilità di fare blending di idrogeno al 65% per l'alimentazione di un impianto turbogas in assetto cogenerativo, dimensionato per soddisfare i fabbisogni di energia elettrica e termica della cartiera stessa. L'impianto proposto è un nuovo impianto di cogenerazione integrato con un impianto per la produzione di idrogeno "rinnovabile" secondo quella che possiamo definire una configurazione Power-to-Hydrogen-to-Power (P2H2P). L'impianto è sostanzialmente diviso in 2 sezioni: a) sezione unità di produzione idrogeno, b) sezione unità di cogenerazione. Attraverso lo sviluppo di un modello di calcolo termodinamico della turbina a gas, modificata per essere alimentata con un mix di fuel, e sulla base dei profili di carico (elettrico e termico) della cartiera, è stata calcolata la richiesta di idrogeno. In base a tale richiesta sono stati dimensionati i componenti della sezione di produzione idrogeno. Il dimensionamento dei diversi componenti dell'impianto è stato effettuato utilizzando un modello di ottimizzazione sviluppato in ambiente Matlab.

A valle del dimensionamento è stato possibile valutare il costo di produzione di idrogeno (LCOH), la CO₂ evitata nell'anno di esercizio e di stimare i vantaggi economici con riferimento al costo evitato di metano e al costo evitato per la CO₂ emessa (secondo il meccanismo dell'Emission Trading).

Figura 1: Approccio metodologico.

Figura 2: Schema del sistema integrato Power to Hydrogen to Power (P2H2P).

The research activity concerns a technical-economic analysis aimed at assessing the feasibility of meeting the electrical and thermal needs of a paper mill by means of a Combined Heat and Power (CHP) turbogas plant using a mixture of natural gas and 65% hydrogen.

The proposed plant is a new combined heat and power (CHP) system integrated with a 'renewable' hydrogen production unit in a so-called Power-Hydrogen-Power (P2H2P) configuration. The plant is basically divided into 2 sections: a) hydrogen production unit section, b) cogeneration unit section. Thanks to the development of a thermodynamic model of the gas turbine, able to be fed with a fuel mix,

and taking into account the paper mill load profiles (electrical and thermal load profiles), the hydrogen demand has been calculated. According to this demand, the hydrogen production section was sized by considering its grid-connected configuration. An optimization model developed in the Matlab environment was used for the sizing of the plant components. Results of the technical analysis have allowed to estimate the livelized cost of hydrogen (LCOH) and the CO₂ avoided during the annual operation, as well as to evaluate the economic benefits in terms of savings due to the reduction of methane consumption and the avoided CO₂ (according to the Emission Trading System).

Pubblicazioni

- Di Cicco G, Bassano C, Di Micco S, Minutillo M., Lanni D., Perna A, *Techno-economic assessment of hydrogen production and its application in the paper industry: a case study, submitted at International Journal of Hydrogen Energy.*

Gruppo di ricerca

Dipartimento di Ingegneria, Università degli Studi di Napoli Parthenope

Elio Jannelli, elio.jannelli@uniparthenope.it
Simona Di Micco, simona.dimicco@uniparthenope.it

Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università degli Studi di Salerno
Mariagiovanna Minutillo, mminutillo@unisa.it

Dipartimento di Ingegneria Civile e Meccanica, Università di Cassino e del Lazio Meridionale
Alessandra Perna, perna@unicas.it

12.2 VALUTAZIONE DELL'IMPATTO DELLA MOBILITÀ PESANTE AD IDROGENO SUL SISTEMA ENERGETICO ITALIANO

Antonio De Padova¹, Andrea Lanzini¹, Francesco Demetrio Minuto¹, Alessandro Agostini², Claudio Carbone², Francesco Gracceva²

¹Politecnico di Torino, ²ENEA

Parole chiave: stazioni di rifornimento di idrogeno; trasporto pesante su strada; analisi geospaziale; ottimizzazione; piano di sviluppo.

Il settore dei trasporti costituisce circa il 25% delle emissioni di gas climalteranti in Europa, per cui una sua profonda decarbonizzazione risulta necessaria. L'utilizzo di veicoli alimentati ad idrogeno può essere una delle soluzioni per ottenere questo obiettivo. Questo lavoro presenta uno strumento per il posizionamento ottimale di stazioni di rifornimento di idrogeno (o Hydrogen Refueling Stations, HRS) per veicoli pesanti ad idrogeno considerando limitazioni tecniche, di policy e normative. Il modello si serve di un database europeo sul trasporto merci su strada in Europa per modellare il fabbisogno di carburante sulla rete stradale. Una ri-formulazione del Node Capacitated Flow Refueling Location Model è quindi proposta per minimizzare il numero di HRS per servire il fabbisogno previsto, utilizzando taglie standard di stazioni di rifornimento. Per il caso studio italiano, si è osservato che 76 nodi sono necessari, assumendo una penetrazione di veicoli ad idrogeno del 10%, come previsto dal PNRR. Aggregando su scala macro-territoriale (ad esempio, per zona di mercato elettrico) i risultati ottenuti, è possibile stimare l'impatto che una transizione verso questi veicoli possa comportare sul sistema energetico nazionale. Il modello può essere uno strumento utile per il posizionamento strategico di stazioni di rifornimento, sia per i decisori politici che per gli stakeholders.

The need for deep decarbonization of the transport sector cannot be understated, as it accounts for about the 25% of greenhouse gas emissions in Europe. Developing hydrogen-based trucks is one of the viable solutions for reaching this goal. This work presents an optimization framework to optimally place Hydrogen Refueling Stations (HRS) for hydrogen-based trucks under technical, policy and regulatory constraints. It relies on an EU heavy-duty road freight transport database to represent the fuel demand on the road network. A revised Node Capacitated Flow Refueling Location Model is proposed to minimize the number of HRS

to be sited on the highway network, by considering standard sized HRS. It was found that at least 76 HRS nodes are required across the road network if a 10% share of hydrogen vehicles is considered, as planned in the Italian National Recovery and Resilience Plan. By aggregating the results on a macro-territorial scale (e.g., by electricity market zone), it is possible to estimate the impact that a transition to these vehicles could have on the national energy system. The framework can be a useful evaluation tool to strategically site HRS, both for policymakers and stakeholders.

Publicazioni

- A. De Padova, D. S. Schiera, F. D. Minuto, A. Lanzini, *Spatial MILP Optimization Framework for Siting Hydrogen Refueling Stations in Heavy-Duty Freight Transport*, *Int. Jour. Of Hydrogen Energy*, 2024. Under review.

Gruppo di ricerca

ENEA

Alessandro Agostini, alessandro.agostini@enea.it
Claudio Carbone, claudio.carbone@enea.it
Francesco Gracceva, francesco.gracceva@enea.it

Politecnico di Torino

Andrea Lanzini, andrea.lanzini@polito.it
Francesco Demetrio Minuto, francesco.minuto@polito.it
Antonio De Padova, antonio.depado@polito.it

12.3 STUDY OF THE ENVIRONMENTAL IMPACTS OF INTEGRATED SYSTEMS FOR HYDROGEN STORAGE BY LIFE CYCLE ANALYSIS (LCA)

Alves Ediane¹; Carbone Claudio²; Agostini Alessandro²; Barrico Marcelo¹, Rizzi Paola¹

¹Dipartimento di Chimica e NIS-INSTM, Università di Torino, ²ENEA

Parole chiave: Stoccaggio dell'idrogeno, valutazione del ciclo di vita, LCA, idruri metallici, database.

L'attività di ricerca ha riguardato l'individuazione della configurazione ottimale di un impianto per la produzione di idrogeno da fonte rinnovabile da integrarsi in uno dei comparti industriali dell'Hard-to-Abate, ossia quello delle cartiere. L'attività si è focalizzata sul caso studio di una cartiera per la quale viene studiata la possibilità di fare blending di idrogeno al 65% per l'alimentazione di un impianto turbogas in assetto cogenerativo, dimensionato per soddisfare i fabbisogni di energia elettrica e termica della cartiera stessa. L'impianto proposto è un nuovo impianto di cogenerazione integrato con un impianto per la produzione di idrogeno "rinnovabile" secondo quella che possiamo definire una configurazione Power-to-Hydrogen-to-Power (P2H2P). L'impianto è sostanzialmente diviso in 2 sezioni: a) sezione unità di produzione idrogeno, b) sezione unità di cogenerazione. Attraverso lo sviluppo di un modello di calcolo termodinamico della turbina a gas, modificata per essere alimentata con un mix di fuel, e sulla base dei profili di carico (elettrico e termico) della cartiera, è stata calcolata la richiesta di idrogeno. In base a tale richiesta sono stati dimensionati i componenti della sezione di produzione idrogeno. Il dimensionamento dei diversi componenti dell'impianto è stato effettuato utilizzando un modello di ottimizzazione sviluppato in ambiente Matlab.

A valle del dimensionamento è stato possibile valutare il costo di produzione di idrogeno (LCOH), la CO₂ evitata nell'anno di esercizio e di stimare i vantaggi economici con riferimento al costo evitato di metano e al costo evitato per la CO₂ emessa (secondo il meccanismo dell'Emission Trading).

Figura 1: Grafici degli impatti ambientali calcolati con il metodo Environmental Footprint 3.1 dei componenti dei sistemi di stoccaggio dell'idrogeno utilizzando due diversi database.

The research activity concerns a technical-economic analysis aimed at assessing the feasibility of meeting the electrical and thermal needs of a paper mill by means of a Combined Heat and Power (CHP) turbogas plant using a mixture of natural gas and 65% hydrogen.

The proposed plant is a new combined heat and power (CHP) system integrated with a 'renewable' hydrogen production unit in a so-called Power-Hydrogen-Power (P2H2P) configuration. The plant is basically divided into 2 sections: a) hydrogen production unit section, b) cogeneration unit section. Thanks to the development of a thermodynamic model of the gas turbine, able to be fed with a fuel mix,

and taking into account the paper mill load profiles (electrical and thermal load profiles), the hydrogen demand has been calculated. According to this demand, the hydrogen production section was sized by considering its grid-connected configuration. An optimization model developed in the Matlab environment was used for the sizing of the plant components. Results of the technical analysis have allowed to estimate the livelized cost of hydrogen (LCOH) and the CO₂ avoided during the annual operation, as well as to evaluate the economic benefits in terms of savings due to the reduction of methane consumption and the avoided CO₂ (according to the Emission Trading System).

Gruppo di ricerca

ENEA, Sezione Metodologie, Approcci e Strumenti per l'analisi della Sostenibilità delle Tecnologie Energetiche (TERIN-STE)

Claudio Carbone, claudio.carbone@enea.it

Università di Torino

Paola Rizzi, paola.rizzi@unito.it

Dario Padovan, dario.padovan@unito.it

Jacopo Bindi, jacopo.bindi@unito.it

Ediane De Sa Alves, ediane.desaalves@unito.it

12.4 VALUTAZIONE DEGLI IMPATTI SOCIALI DELL'IDROGENO: ASPETTI TEORICI E METODOLOGICI

Jacopo Bindi¹, Francesco Bartolomei^{1,2}, Giuseppe Pellegrini Masini³, Alessandro Agostini³

¹Department of Cultures, Politics and Society, University of Turin, 10124 Turin, Italy, ²Department of Science, Technology and Society, IUSS Pavia, 27100, Pavia, Italy, ³ENEA-Italian National Agency for New Technologies, Energy and the Environment, Via Anguillarese 301, 00123 Rome, Italy

Parole chiave: social impact, green hydrogen, energy justice, just transition, theoretical framework.

Questa ricerca presenta un quadro teorico per valutare gli impatti sociali e i problemi di giustizia energetica associati alle filiere dell'idrogeno verde. La transizione verso un'economia dell'idrogeno deve affrontare notevoli problemi di giustizia sociale, sia in Europa che nel contesto del commercio globale. Il nostro lavoro sottolinea l'importanza di integrare i principi della giustizia energetica - giustizia distributiva, procedurale e di riconoscimento - in tutta la catena del valore dell'idrogeno per garantire una transizione equa. L'adozione di un approccio basato sulle capabilities consente di sviluppare uno strumento flessibile per la valutazione degli impatti sociali in una serie di contesti sociali. Collegando le teorie delle capabilities e dei diritti umani, discutiamo la logica della selezione delle capabilities che possono essere influenzate dalla penetrazione dell'idrogeno nei sistemi energetici europei e internazionali. Studi empirici sul benessere soggettivo forniscono una motivazione per distinguere tra le capabilities di mantenimento e di crescita degli individui, consentendo così una valutazione gerarchica all'interno di un'ampia gamma di dimensioni. L'identificazione degli aspetti socialmente rilevanti è illustrata attraverso l'esame della letteratura tecnica e sociale relativa alle filiere dell'idrogeno verde.

Il quadro proposto offre criteri di sostenibilità sociale per supportare la progettazione e la valutazione delle politiche e viene presentato come uno strumento che può guidare la ricerca empirica per valutare gli impatti sociali degli scenari di politica energetica.

This research presents a theoretical framework for assessing the social impacts and energy justice concerns associated with green hydrogen supply chains. The transition to a hydrogen economy must confront considerable social justice issues, both in Europe and in the context of global trade. Our work emphasises the importance of integrating energy justice tenets - distributive, procedural, and recognition justice- throughout the hydrogen value chain to ensure an equitable transition. The adoption of a capability approach enables the development of a flexible instrument for the evaluation of social impacts across a range of social contexts. By linking capabilities and human rights theories, we discuss the rationale for the selection

of capabilities that may be affected by the penetration of hydrogen into European and international energy systems. Empirical studies on subjective well-being provide a rationale for distinguishing between the maintenance and growth capabilities of individuals, thereby enabling a hierarchical evaluation within a broad range of dimensions. The identification of socially relevant aspects is illustrated through an examination of both technical and social science literature pertaining to green hydrogen supply chains. The proposed framework offers social sustainability criteria to support policy design and evaluation, and is presented as a tool that can guide empirical research to assess the social impacts of energy policy scenarios.

Publicazioni

- *Bindi J.; Bartolomei F.; Pellegrini-Masini G.; Agostini A.; Padovan D.; Assessing social impacts and Energy Justice along green hydrogen supply chains: a Capability-based framework Energy Research and Social Science under review*

Gruppo di ricerca

ENEA, Sezione Metodologie, Approcci e Strumenti per l'analisi della Sostenibilità delle Tecnologie Energetiche (TERIN-STE)

Claudio Carbone, claudio.carbone@enea.it

Università di Torino

Paola Rizzi, paola.rizzi@unito.it

Dario Padovan, dario.padovan@unito.it

Jacopo Bindi, jacopo.bindi@unito.it

Ediane De Sa Alves, ediane.desaalves@unito.it

SESSIONE 13 - SISTEMI INNOVATIVI DI PRODUZIONE DI IDROGENO

CHAIR: Antonella Marone, ENEA

13.1 SVILUPPO DI PROCESSI BIOELETTROCHIMICI AVANZATI PER LA PRODUZIONE DI COMBUSTIBILI GASSOSI DAL TRATTAMENTO E LA VALORIZZAZIONE DI MATRICI ORGANICHE DI SCARTO

Marianna Villano, Marco Petrangeli Papini, Marco Zeppilli, Luca Di Palma, Raffaella Pomi, Alessandra Poletti, Tatiana Zonfa, Martina Fazi, Clara Marandola, Domenico Rosa, Gaia Salvatori, Federico Scopetti

Sapienza Università di Roma

Parole chiave: Processi bioelettrochimici; Bioidrogeno; Biometano; Biochar.

L'attività di ricerca riguarda lo sviluppo di sistemi bioelettrochimici (BES) finalizzati a: (i) investigare la tecnologia innovativa di Elettro-Fermentazione (EF); (ii) produrre idrogeno verde in celle di elettrolisi microbiche (MEC); (iii) integrare i BES con la digestione anaerobica (DA) per la produzione di biometano.

Nell'ambito della EF (i), la ricerca ha l'obiettivo di massimizzare la produzione di bioidrogeno durante la degradazione biologica di scarti organici. Sono stati, pertanto, effettuati test bioelettrochimici preliminari con siero di latte ovino applicando un potenziale di 0.50 V e 0.80 V, per valutarne l'effetto sulle cinetiche di produzione di idrogeno. Per quanto riguarda le MEC (ii), sono state effettuate prove finalizzate alla formazione (a partire da un fango attivo) di un biofilm elettricamente attivo su un anodo di grafite polarizzato a +0.20 V (vs. SHE). Si è osservata una elevata efficienza coulombica, ovvero la frazione di substrato consumato convertito in corrente, sia utilizzando matrici organiche di scarto che substrati sintetici. Esperimenti futuri saranno orientati ad accoppiare la reazione anodica alla reazione catodica di produzione di idrogeno. Nell'ambito della biometanazione (iii), è stato valutato l'effetto di materiali conduttivi, es. biochar sia commerciale che preparato dalla pirolisi di diverse matrici di scarto, sulla cinetica della reazione biologica. Inoltre, è stato realizzato un reattore prototipo per integrare i BES con la DA.

Figura 1: Immagine del set up sperimentale utilizzato per prove bioelettrochimiche preliminari in celle a due camere.

Figura 2: Immagine del prototipo realizzato per lo studio della biometanazione in situ con i processi bioelettrochimici.

The research activity concerns the development of bioelectrochemical systems (BES) aimed at: (i) investigating the innovative Electro-Fermentation (EF) technology; (ii) producing green hydrogen in microbial electrolysis cells (MEC); (iii) integrating BES with anaerobic digestion (DA) for biomethane production. As for EF (i), the main aim is to maximize biohydrogen production during the biological degradation of organic (waste) compounds. Preliminary bioelectrochemical tests were, therefore, carried out with cheese whey by applying a potential of 0.50 V and 0.80 V to evaluate its effect on the hydrogen production kinetic. As for MEC (ii), tests were carried out to establish the for-

mation (from an active sludge) of an electrically active biofilm on a graphite anode polarized at +0.20 V (vs. SHE). High coulombic efficiency, that is the fraction of consumed substrate converted into current, was observed by using both waste organic and synthetic substrates. Future experiments will be aimed at coupling the anodic reaction to hydrogen production at the MEC cathode. In the context of biomethanation (iii), the effect of conductive materials (e.g., biochar both commercially available and ad-hoc prepared by pyrolysis of different waste matrices) on the kinetics of the biological reaction was evaluated. In addition, a prototype reactor was built to integrate BES with DA.

Pubblicazioni

1. Clara Marandola, Lorenzo Cristiani, Marco Zeppilli, Marianna Villano, Mauro Majone, Elio Fantini, Loretta Daddiego, Loredana Lopez, Roberto Ciccoli, Antonella Signorini, Silvia Rosa, Antonella Marone*, "Harvesting biofuels with microbial electrochemical technologies (METs): state of the art and future challenges" in "Wastewater exploitation - from microbiological activity to energy", Springer Water book series, Springer Nature 2024, <https://doi.org/10.1007/978-3-031-57735-2>
2. Gaia Salvatori, Federico Scopetti, Eleonora De Santis, Silvia Rosa, Roberto Ciccoli, Marianna Villano, Antonella Marone*, "Two Stages Process For Bio-Hydrogen Production From Cheese Whey: Coupling Dark Fermentation And Microbial Electrolysis Cell", European Biotechnology Congress, Istanbul, October 3-5, 2024.
3. Clara Marandola, Gaia Salvatori, Federico Scopetti, Marco Zeppilli, Antonella Signorini, Antonella Marone, Andrea Gianico, Agata Gallipoli, Camilla Braguglia, Marianna Villano, "Evaluation of bio-anode performance in a microbial electrolysis cell fed with waste organic feedstock", European Biotechnology Congress, Istanbul, October 3-5, 2024.
4. Clara Marandola, Federico Scopetti, Luca Saraconi, Gaia Salvatori, Marco Zeppilli, Antonella Signorini, Antonella Marone, Luca Di Palma, Marianna Villano, "Steering bioelectrochemical methane production with biochar", Symposium for Young Chemists: Innovation and Sustainability - (SYNC 2024), Rome, June 24-28, 2024.
5. Federico Scopetti, Igino De Bellis, Clara Marandola, Marco Zeppilli, Roberto Ciccoli, Antonella Signorini, Antonella Marone, Marianna Villano, "Hydrogen and methane production in a microbial electrolysis cell", Symposium for Young Chemists: Innovation and Sustainability - (SYNC 2024), Rome, June 24-28, 2024.

Gruppo di ricerca

Sapienza Università di Roma

Dipartimento di Chimica

Marianna Villano, marianna.villano@uniroma1.it

Marco Zeppilli, marco.zeppilli@uniroma1.it

Marco Petrangeli Papini, marco.petrangelipapini@uniroma1.it

Dipartimento di Ingegneria Chimica Materiali Ambiente

Luca Di Palma, luca.dipalma@uniroma1.it

Dipartimento di Ingegneria Civile, Edile, Ambientale

Raffaella Pomi, raffaella.pomi@uniroma1.it

13.2 ELETTROMETANOGENESI GEOTERMICA: UNA RISORSA ITALIANA DA ESPORARE NELL'OTTICA DELLA TRANSIZIONE ENERGETICA

Pierangela Cristiani

RSE

Parole chiave: Power-to-gas, Electromethanogenesis, Hydrogen storage, bioelectrochemical systems, Methane.

Nella ricerca globale di sistemi per l'accumulo di energia elettrica prodotta da fonti di energia sostenibile non programmabile, grande interesse ha recentemente suscitato la sintesi bioelettrochimica di idrogeno e metano con tecnologie note come power-to-gas bioelettrochimico (BEP2G). In questo contesto, una delle tecnologie più innovative è rappresentata dall'elettrometanogenesi. Si tratta di un processo di metanazione che utilizza consorzi microbici ricchi di organismi idrogenotrofi (Archaea) che sono in grado di ridurre la CO_2 a metano su biocatalizzatori polarizzati, in un ambiente strettamente anaerobico. Il territorio italiano, essendo prevalentemente vulcanico, è molto ricco di fonti di CO_2 geotermiche che ben si prestano ad essere sfruttate per il processo di elettrometanogenesi. L'Italia, pertanto, più di altri Paesi potrebbe beneficiare di questa tecnologia bioelettrochimica. Tuttavia, per scalare a livello pre-competitivo l'elettrometanogenesi sono necessari ulteriori progressi nell'ingegneria dei materiali, e nello studio dell'interazione degli elettrodi con i microorganismi coinvolti. La ricerca in corso si inserisce in quest'ottica, focalizzandosi sullo sviluppo e sulla validazione di un materiale multicomposito innovativo per il catodo, costituito da biochar poroso (carbonio derivato da fusti di mais), rame (Cu) e nanoparticelle di idrossiapatite ($\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$, HAP).

La composizione del multicomposito è stata ottimizzata per ottenere un tasso di produzione di metano elevato. I risultati ottenuti finora utilizzando reattori bioelettrochimici operanti con catodi compositi, contenenti il 20% in peso di Cu e il 10% in peso di HAP, e polarizzati a -1V vs Ag/AgCl , hanno evidenziato una produzione di metano fino a $866 \pm 199 \text{ mmol/m}^2/\text{d}$, con un'efficienza faradica del 64%.

Figura 1: Immagine della sperimentazione di elettrometanogenesi con bioreattori elettrochimici da laboratorio in cui sono stati sperimentati diversi materiali per gli elettrodi.

Figura 2. Risultati espressi in termini di produzione di metano normalizzata alla superficie del catodo e al volume del bioreattore. Sono stati sperimentati catodi di diverso materiale: carbon cloth (CC), biochar e compositi con diverse percentuali in peso di Cu e HAP depositati su biochar: 20Cu = 20% di Cu; 5Cu/HAP = 5% di Cu e 5% di HAP; 20Cu/10HAP = 20% di Cu e 10% di HAP.

In the global search for systems to store electricity generated from non-programmable sustainable energy sources, significant interest has recently been drawn to the bioelectrochemical synthesis of hydrogen and methane through technologies known as bioelectrochemical power-to-gas (BEP2G). In this context, one of the most innovative technologies is electromethanogenesis. This is a methanation process that uses hydrogenotrophic microbial consortia (Archaea) capable of reducing CO₂ to methane on polarized biocathodes in a strictly anaerobic environment. Italy, being predominantly volcanic, is very rich in geothermal CO₂ sources, which are well-suited for exploitation in the electromethanogenesis process. Therefore, Italy, more than other countries, can benefit from this bioelectrochemical technology. However, to scale electromethanogenesis to

a pre-competitive level, further advances are required in material engineering and in the study of the interaction between electrodes and the microorganisms involved. With this in mind, the research conducted has developed a new and cost-effective composite material for the cathode, consisting of porous biochar (carbon derived from corn stalks), copper (Cu), and hydroxyapatite nanoparticles (Ca₅(PO₄)₃OH, HAP), whose composition has been optimized to achieve a high methane production rate. The results obtained so far have shown that composites containing 20% by weight of Cu and 10% by weight of HAP, used as cathodes and polarized at -1V vs Ag/AgCl, have allowed for a methane production of 866±199 mmol/m²/d, with a Faradaic efficiency of 64% [1-3].

Pubblicazioni

1. Bigica, M., Ghiara, G., Cristiani, P., Campisi, S., Gervasini, A. Interface properties of hydroxyapatite in ternary composites cathodes for electromethanogenesis, *New Journal of Chemistry*, 2024, 48(22), pp. 9909-9919. <https://doi.org/10.1039/D4NJ01053AYy>
2. G. Ghiara, S. Campisi, A. Goglio, F. Formicola, M. Balordi, A. Gervasini, S.P.M. Trasatti, F. Adani, A. Franzetti, P. Cristiani, Biochar based cathode enriched with hydroxyapatite and Cu nanoparticles boosting electromethanogenesis, *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, Vol. 57, 2023, 103274. <https://doi.org/10.1016/j.seta.2023.103274>
3. M. Ferri, L. Delafontaine, S. Guo, T. Asset, P. Cristiani, S. Campisi, A. Gervasini, and P. Atanassov. Steering Cu-Based CO₂RR Electrocatalysts' Selectivity: Effect of Hydroxyapatite Acid/Base Moieties in Promoting Formate Production. *ACS Energy Lett.* 2022, 7, 2304-2310. <https://doi.org/10.1021/acsenerylett.2c01144>

Gruppo di ricerca

RSE

Pierangela Cristiani, Ricerca sul Sistema Energetico, pierangela.cristiani@rse-web.it
Dipartimento Sviluppo sostenibile e fonti

UNIROMA1

Marco Zeppilli, Dipartimento di Chimica, Sapienza Università di Roma, marco.zeppilli@uniroma1.it
Marco Petrangeli Papini, Dipartimento di Chimica - Sapienza Università di Roma, marco.petrangelipapini@uniroma1.it
Luca Di Palma, Dipartimento di Ingegneria Chimica Materiali Ambiente - Sapienza Università di Roma, luca.dipalma@uniroma1.it
Raffaella Pomi, Dipartimento di Ingegneria Civile, Edile, Ambientale - Sapienza Università di Roma, raffaella.pomi@uniroma1.it

13.3 FONTI ALTERNATIVE PER LA PRODUZIONE DI BIO-IDROGENO: ESPLORAZIONE DELLA BIODIVERSITÀ DELLE DIATOMEE

Carlo Fasano¹, Paolo Facella¹, Giovanna Cangiulli¹, Alessandra Rogato², Maria Immacolata Ferrante², Monia Teresa Russo², Fiammetta Alagna¹, Linda Bianco¹, Loretta Daddiego¹, Elio Fantini¹, Loredana Lopez¹, Francesco Panara¹, Bruna Piccione¹

¹ENEA, ²Stazione Zoologica Anton Dohrn

Parole chiave: Idrogeno, microalghe, diatomee, genome editing.

La produzione di idrogeno (H₂) utilizzando microrganismi fotosintetici come le microalghe è stimolante come fonte per le energie rinnovabile. Tuttavia, la produzione di H₂ nelle microalghe non è costante e duratura perché è limitata da condizioni di crescita anossiche. Infatti, si è dimostrato che l'idrogenasi è fortemente inibita dalla presenza di ossigeno molecolare. In questo contesto, la nostra ricerca mira a ottenere microalghe ingegnerizzate con maggiore capacità per la produrre di H₂. Ad oggi, l'alga verde *Chlamydomonas reinhardtii* è la specie modello per la ricerca nell'ambito dell'H₂. Infatti, il mutante per la proteina del gradiente protonico del tilacoide (Δ PGR5) è caratterizzato da una maggiore capacità di produrre H₂, bypassando la perdita di elettroni e l'accumulo di ossigeno. Questa scoperta sarà applicata alla produzione di H₂ nelle diatomee. Queste alghe unicellulari sono interessanti perché la loro parete cellulare, il frustolo, costituita da una nano-struttura di silicio poroso, potrebbe essere utilizzata per assorbire e immagazzinare H₂. Inoltre, la loro elevata variabilità genetica e plasticità metabolica possono essere sfruttate per identificare specie in grado di produrre in modo efficiente H₂. In questo studio abbiamo selezionato *Cyclotella cryptica* e *Phaeodactylum tricornutum*, in base alla loro flessibilità trofica, ai protocolli di trasformazione genetica e, infine, alla presenza degli enzimi per la produzione di H₂ nel loro genoma.

Figura 2: Colture di crescita di Δ pgr5 *C. reinhardtii* (A), Wild Type *C. cryptica* (B) and Wild Type *P. tricornutum* (C) durante il protocollo di produzione dell'idrogeno ed i rispettivi cromatogrammi per la misura dei gas prodotti nello spazio di testa della cultura.

Figura 1: flusso di lavoro descrittivo della LA 1.1.29 "Produzione di idrogeno da microalghe: ingegneria genetica per aumentare la produzione di idrogeno nelle microalghe.

The production of hydrogen (H₂) using photosynthetic microorganisms such as microalgae is interesting as renewable and environmentally friendly energy source. However, microalgae's H₂ production is not constant and long-lasting because it's limited by anoxic growth conditions. Indeed, studies show that the hydrogenase, the key enzyme in hydrogen is strongly inhibited by the presence of molecular oxygen. In this context, our research aims to obtain engineered microalgae with increased capacity to produce hydrogen. To date, the green alga *Chlamydomonas reinhardtii* has been the most studied microalgal species for its ability to produce hydrogen. In fact, the thylakoid proton gradient (Δ PGR5) mutant is characterized by an increased capacity

to produce hydrogen, bypassing electron loss and oxygen accumulation. This knowledge will be applied to H₂ production in diatoms. These unicellular algae are particularly interesting because their cell wall, known as the frustule, made of a porous silicon nanoarchitecture structure, could be used to absorb and store H₂. Moreover, their high genetic variability and metabolic plasticity can be exploited to identify species capable to efficiently produce H₂. In this study we selected *Cyclotella cryptica* and *Phaeodactylum tricornutum*, based on trophic flexibility, genetic transformation protocols and finally, the presence of H₂ production enzymes in their genome.

Pubblicazioni

1. Cangiulli G., Facella P., Rogato A., Ferrante M. I., Russo M. T., Manfellotto F., Alagna F., Bianco L., Daddiego L., Fantini E., Lopez L., Panara F., Piccione B., Montemurro C., Fasano C. *BIO-HYDROGEN FROM DIATOMS: A SOLUTION FOR SUSTAINABLE BIO-ENERGY PRODUCTION* Proceedings of the LXVII SIGA Annual Congress, Bologna, 10/13 September 2024. ISBN: 978-88-944843-5-9. Poster Communication Abstract - 8.02
2. Cangiulli G., Facella P., Rogato A., Ferrante M. I., Russo M. T., Manfellotto F., Alagna F., Bianco L., Daddiego L., Fantini E., Lopez L., Panara F., Piccione B., Montemurro C., Fasano C. *BIO-HYDROGEN FROM DIATOMS: A SOLUTION FOR SUSTAINABLE BIO-ENERGY PRODUCTION* Book of Abstract del Convegno AISAM 2024 (53-54), Firenze, 16/18 Ottobre 2024. Comunicazione orale.

Gruppo di ricerca

ENEA

Carlo Fasano, carlo.fasano@enea.it
Paolo Facella, paolo.facella@enea.it
Giovanna Cangiulli, giovanna.cangiulli@uniba.it
Fiammetta Alagna, fiammetta.alagna@enea.it
Linda Bianco, linda.bianco@enea.it
Loretta Daddiego, loretta.daddiego@enea.it
Elio Fantini, elio.fantini@enea.it
Loredana Lopez, loredana.lopez@enea.it
Francesco Panara, francesco.panara@enea.it
Bruna Piccione, b.piccione@studenti.uniba.it

SESSIONE 14 - CELLE A COMBUSTIBILE PER APPLICAZIONI STAZIONARIE

CHAIR: Davide Pumiglia, ENEA

Lucia Pera¹, Marta Gandiglio¹, Paolo Marocco¹, Massimo Santarelli¹, Davide Pumiglia²

¹Dipartimento di Energia, Politecnico di Torino, Corso Duca degli Abruzzi 24, 10129 Torino, Italia, ²ENEA - Dipartimento tecnologie energetiche e fonti rinnovabili (TERIN), Laboratorio Idrogeno e nuovi Vettori Energetici (H2V), Centro di ricerca Casaccia; Roma, Italia

Parole chiave: biogas composition; trace contaminants; solid oxide fuel cells; button cell testing.

L'adozione del biogas garantisce una fonte di energia rinnovabile e controllabile, riducendo la dipendenza dai combustibili fossili e favorendo la gestione dei rifiuti, in linea con i principi dell'economia circolare. Questo studio si focalizza sull'impiego del biogas per la produzione di elettricità mediante celle a combustibile a ossidi solidi (SOFC), apprezzate per la loro efficienza, il recupero di calore e la flessibilità nell'uso di combustibili, incluso il biogas.

Il principale obiettivo della ricerca riguarda l'analisi dei contaminanti presenti nel biogas e la valutazione dell'impatto sulle prestazioni delle SOFC. La revisione della letteratura è quindi necessaria per mappare le impurità e stabilire i limiti di tolleranza delle celle a combustibile.

La fase sperimentale nei laboratori di ENEA Casaccia, ambisce invece a valutare l'evoluzione temporale dei processi che determinano le prestazioni complessive. Essa prevede l'uso di button cells, testate con bio-syngas contaminato e confrontate con celle alimentate da bio-syngas pulito, misurando l'evoluzione della tensione nel tempo e utilizzando tecniche come la Spettroscopia di Impedenza Elettrochimica (EIS) e la Distribution of Relaxation Time (DRT).

I test includono diversi contaminanti, con l'obiettivo di comprendere i processi che avvengono nella cella e di conseguenza il livello che può essere tollerato.

Figura 1: Andamento della tensione durante test di degrado. Si riferisce, a titolo esemplificativo, al test di DMS con concentrazione di 1 ppm.

Figura 2: Grafico DRT - Test a lunga durata con contaminante (DMS con concentrazione di 1 ppm).

The adoption of biogas offers a renewable and controllable energy source, reducing reliance on fossil fuels and promoting waste management in line with circular economy principles. This study focuses on the use of biogas for electricity generation through solid oxide fuel cells (SOFCs), valued for their efficiency, heat recovery capabilities, and fuel flexibility, including biogas. The main objective is to analyze biogas contaminants and assess their impact on SOFC performance. A literature review has been conducted to map impurities and establish tolerance limits for fuel cells. The experimental phase carried out in ENEA Casaccia labora-

tories, aims to evaluate the temporal evolution of the processes affecting overall performance. It involves testing button cells with contaminated bio-syngas and comparing them to those powered by clean bio-syngas. Key measurements include voltage changes over time and advanced techniques such as Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS) and Distribution of Relaxation Time (DRT). The tests assess the effects of various contaminants, aiming to understand the processes within the cell and determine the tolerable contamination levels for optimal performance.

Figura 3: ENEA Casaccia - Banco di prova per test di SOFC alimentate da bio-syngas.

Publicazioni

- L. Pera, M. Gandiglio, P. Marocco, D. Pumiglia, M. Santarelli, "Trace contaminants in biogas: biomass sources, variability and implications for technology applications", *Journal of Environmental Chemical Engineering*, UNDER REVIEW

Gruppo di ricerca

14.2 MODELLAZIONE MATEMATICA E NUMERICA DI CELLE A COMBUSTIBILE AD ALTA TEMPERATURA DI TIPO SOFC

Giorgio Grossi¹, Fausto Arpino¹, Christian Canale¹, Gino Cortellessa¹, Giorgio Ficco¹, Davide Pumiglia²

¹Department of Civil and Mechanical Engineering, University of Cassino and Southern Lazio, Cassino, FR, Italy

²ENEA Department of Energy Technologies and Renewable Sources, Laboratory for Hydrogen and new Energy Vectors (H2V), Casaccia Research Centre, Rome, Italy

Parole chiave: Computational Fluid Dynamics (CFD), Fuel Cells, Validation, Heat Transfer.

L'idrogeno verde riveste un ruolo cruciale nella transizione verso le fonti di energia rinnovabili grazie alla sua versatilità e alla compatibilità con tecnologie energetiche pulite, quali celle a combustibile ed elettrolizzatori. Questi dispositivi rappresentano alternative promettenti alle tecnologie tradizionali basate sui combustibili fossili; tuttavia, la loro ottimizzazione richiede un'analisi approfondita dei fenomeni di trasporto di massa ed energia, nonché dei processi elettrochimici coinvolti.

Il presente studio propone un modello CFD (Computational Fluid Dynamics) per l'analisi dei complessi fenomeni multifisici che si verificano all'interno di celle a combustibile a ossidi solidi (SOFC) planari con supporto anodico, utilizzando il software open-source OpenFOAM. Il modello numerico, validato attraverso dati disponibili nella letteratura scientifica, è stato utilizzato per valutare il gradiente di temperatura nelle regioni solide della cella in diverse condizioni operative, considerando una singola unità ripetitiva della cella con flussi in controcorrente. I risultati evidenziano che la temperatura operativa ha un impatto limitato sulla distribuzione dei gradienti di temperatura, con il massimo gradiente localizzato in corrispondenza della sezione di ingresso del catodo. Questo lavoro costituisce la fase iniziale di un più ampio progetto di ricerca finalizzato allo studio, sia numerico che sperimentale, degli effetti di diversi fattori sulle prestazioni delle SOFC a supporto anodico, inclusa la presenza di contaminanti e il loro impatto sull'invecchiamento dei materiali.

Figura 1: Geometry model of the anode-supported SOFC under study.

Figura 2: Computational grid employed for numerical simulations, composed of 1,348,800 cells.

Green hydrogen plays a crucial role in the transition to renewable energy sources due to its versatility and compatibility with clean energy technologies such as fuel cells and electrolyzers. These devices are promising replacements for traditional fossil fuel-based technologies but require detailed investigation of mass and energy transport phenomena and electrochemical processes for optimization. This study conducts 3D Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations to examine the complex multi-physics phenomena in anode-supported planar solid oxide fuel cells (SOFCs), using the open-source OpenFOAM toolbox. The numerical model, validated against data from the sci-

entific literature, is employed to evaluate the temperature gradient within the solid regions of the cell under different operating conditions. A single-unit model in a counter-flow configuration is considered for the investigations. Results indicate that the operating temperature has a minimal effect on the distribution of temperature gradients, with the maximum gradient occurring at the cathode inlet section. This work represents the first stage of a larger research project aimed at investigating, both numerically and experimentally, the effects of various factors on the performance of anode-supported SOFCs, including the presence of contaminants and their impact on material aging.

Figure 3: Operative cell voltage as a function of average current density, compared with Mauro et al. (Mauro A., Arpino F. and Massarotti N., 2011. Three-dimensional simulation of heat and mass transport phenomena in planar SOFCs, International Journal of Hydrogen Energy, 36, 10288–301)

Figure 4: Predicted contours of temperature gradient within the solid regions, for an operating temperature of (a) 973 K and (b) 923 K.

Pubblicazioni

- Grossi G., Arpino F., Canale C., Cortellessa G., Ficco G., Hamidi Jahromi R. and Pumiglia D. (2024). CFD investigation of heat and mass transport in solid oxide fuel cells. *Proceedings of the Sixth International Conference on Computational Methods for Thermal and Energy Problems*.

Gruppo di ricerca N. 3.4.1_B

ENEA

Giulia Monteleone, giulia.monteleone@enea.it

Università degli Studi di Cassino e del Lazio Meridionale

Fausto Arpino, f.arpino@unicas.it

Gino Cortellessa, g.cortellessa@unicas.it

Giorgio Grossi, giorgio.grossi@unicas.it

14.3 INTEGRAZIONE DI CELLE A COMBUSTIBILE REVERSIBILI AD ALTA TEMPERATURA IN SISTEMI DI ACCUMULO IBRIDI CON EMISSIONI NEGATIVE

Gabriele Loreti, Francesco Marino, Davide Pumiglia, Massimiliano della Pietra, Yuri De Pra, Viviana Cigolotti, Giulia Monteleone

ENEA

Parole chiave: Emissioni di CO₂ negative, accumulo di energia a gas compresso, celle ad ossidi solidi reversibili, ossi-combustione.

Combinando fonti di energia rinnovabile con tecnologie ad idrogeno è possibile immagazzinare energia elettrica in modo efficiente ottenendo anche emissioni negative di anidride carbonica. Tali sistemi "multi-energy" sono necessari per compensare le emissioni dei settori "hard to abate" e per aumentare la penetrazione delle energie rinnovabili, portando al raggiungimento degli obiettivi internazionali sulle emissioni di gas serra.

In questo lavoro si valuta l'integrazione di sistemi di celle a ossidi solidi reversibili in un sistema "multi-energy" composto da fonti di energia rinnovabile non controllabili e un accumulo di energia a gas compresso alimentato da biocarburante. Pochi articoli presentano tali sistemi "multi-energy" in letteratura. Inoltre, l'integrazione della tecnologia delle celle reversibili ad alta temperatura non è mai stata studiata, anche se presenta i seguenti vantaggi: aumentare l'efficienza di "round-trip" dell'accumulo riducendo il combustibile richiesto tramite integrazione termica e ridurre la spesa in conto capitale del sistema utilizzando un singolo elemento sia per la modalità cella a combustibile che per quella elettrolizzatore.

Figura 1: valutazione dell'efficienza di "round-trip".

Figura 2: schema d'impianto analizzato.

Combining renewable energy sources with hydrogen technologies it is possible to store electric energy efficiently while also achieving negative carbon dioxide emissions. Such multi-energy systems are necessary to compensate the emissions of hard to abate sectors and to increase the renewable energy penetration leading to the achievement of international targets on greenhouse gases emissions. In this paper we evaluate the integration of reversible solid oxide fuel cell systems in a multi energy system composed

of non-dispatchable renewable energy sources and a compressed gas energy storage fed by biofuel. Few papers present such multi-energy systems in literature. Moreover, the integration of high temperature reversible fuel cell technology has never been studied, even though it has the following advantages: to increase the storage roundtrip efficiency by reducing the required fuel through thermal integration, and to lower the capital expenditure of the system by using a single system for both fuel cell and electrolyser mode.

Publicazioni

1. Loretì, Gabriele, Francesco Marino, and Davide Pumiglia. "Integration of reversible high temperature fuel cell technology to improve the efficiency of hybrid energy storage with negative carbon emission.", EFCF conference 2024, Lucerne.

Gruppo di ricerca

ENEA - Laboratorio Idrogeno e nuovi vettori energetici

Davide Pumiglia

Gabriele Loretì

Massimiliano della Pietra

Francesco Marino, Dipartimento di Ingegneria, Università degli Studi Parthenope

Livia della Seta

Yuri de Pra

Luca Simonetti

Department of Chemistry and Industrial Chemistry, Università degli Studi di Genova, Genova, Italy

Paolo Piccardo

14.4 CARATTERIZZAZIONE SPERIMENTALE DI SHORT STACK SOFC ALIMENTATI A BLENDING CH₄/H₂

Francesco Marino

Università degli Studi di Napoli Parthenope

Parole chiave: SOFC, cogeneration, gas grid scenario, varying inlet fuel mixture.

Questa linea di attività è stata incentrata sull'analisi di celle a combustibile ad ossidi solidi (SOFC), il cui scopo finale è validare la loro bontà nel settore cogenerativo. Gli obiettivi della ricerca sono quelli di verificare la flessibilità a diversi combustibili in ingresso e la compatibilità dell'attuale stato della tecnologia SOFC con la rete del gas in continua evoluzione. Definito un protocollo di test apposito, è stato realizzato il testing sperimentale di uno short-stack e sono state individuate le sue performance e condizioni migliori di funzionamento. Lo short-stack oggetto di studio è di tecnologia anodo-supportata con potenza nominale di 0.4 kW (15 celle da 121 cm²). Tre composizioni di gas in ingresso sono state considerate, ciascuna rappresentante un diverso scenario della rete del gas (100% CH₄, 67% H₂ in CH₄ e 100% H₂, simulanti rispettivamente lo scenario attuale, a medio e a lungo termine). I risultati delle prove mostrano una potenza generata crescente all'aumentare della frazione di H₂ nella miscela in ingresso, come preventivabile. Si è osservato inoltre un miglioramento delle performance (3.5% di incremento di potenza rispetto alla condizione nominale) a temperature più alte grazie ad una migliore conversione del metano in ingresso, e specularmente un peggioramento della potenza in uscita a temperature più basse (power drop fino al 10%).

Figura 1: short-stack da 15 cell in uso per i test.

Figura 2: P&ID dell'impianto sperimentale.

The present line of activity has focused on the analysis of solid oxide fuel cells (SOFCs), and its ultimate scope is to validate their goodness in the cogeneration sector. The goals of the research are ensuring the flexibility at different inlet fuels and the compatibility of the current state of art SOFC technology with the gas grid in continuous evolution. After defining a dedicated test protocol, a short-stack has been tested experimentally and its performances and best operating conditions have been evaluated. The anode-supported short-stack object of study is made out of 15 cells by 121 cm², with a nominal power of 0.4 kW. Three inlet gas

compositions have been considered, each of them representing a different gas grid scenario (100% CH₄, 67% H₂ in CH₄ and 100% H₂, simulating respectively the current, mid-term and long term scenario). The results of the tests show an increasing power output as H₂ inlet content increases, as expected. It was also observed a tangible improvement in the performance (3.5% more power with respect to the nominal condition) at higher temperatures thanks to a better inlet methane conversion, and conversely a performance drop at lower temps (power drop up to 10%).

Figura 3: curve di performance map al variare di composizione, fattore di utilizzo del combustibile e temperatura.

Gruppo di ricerca

ENEA, TERIN-DEC-H2V

Massimiliano Della Pietra, massimiliano.dellapietra@enea.it

Gabriele Loreti ENEA, gabriele.loreti@enea.it

Simone Mataloni, simone.mataloni@enea.it

Francesca Santoni, francesca.santoni@enea.it

UNIROMA1 SAPIENZA, DICMA

Silvia Lo conte, silvia.loconte@uniroma1.it

UNI PARTHENOPE

Francesco Marino, francesco.marino005@studenti.uniparthenope.it

martedì 16 luglio

09:00	Registrazione - Welcome Coffee		
	AUDITORIUM		
	SESSIONE PLENARIA		
	Saluti istituzionali		
09:30	<ul style="list-style-type: none"> Stefania Crotta, <i>Direttrice Generale Direzione Generale Programmi e Incentivi Finanziari (PIF), Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica</i> Giorgio Graditi, <i>Direttore Generale, ENEA</i> Giulia Monteleone, <i>Direttrice del Dipartimento Tecnologie Energetiche e Fonti Rinnovabili, ENEA</i> Emilio Fortunato Campana, <i>Dipartimento di Ingegneria, ICT e Tecnologie per l'Energia e i Trasporti, CNR</i> Lidia Armelao, <i>Dipartimento di Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali, CNR</i> Franco Cotana, <i>Amministratore Delegato, RSE</i> 		
11:00	<p>Presentazione delle attività ed obiettivi del POR H2, Viviana Cigolotti, ENEA</p> <p>Obiettivo 1: Produzione di idrogeno verde e pulito, <i>Alberto Gioconia, ENEA</i></p> <p>Obiettivo 2: Tecnologie innovative per lo stoccaggio e il trasporto dell'idrogeno e la sua trasformazione in derivati ed e-fuels. <i>Claudia Bassano, ENEA</i></p> <p>Obiettivo 3: Celle a combustibile, <i>Giuseppe Nigliaccio, ENEA</i></p> <p>Obiettivo 4: Sistemi intelligenti di gestione integrata per migliorare la resilienza e l'affidabilità delle infrastrutture intelligenti basate sull'idrogeno, <i>Antonio Ricca, ENEA</i></p>		
12:00	Question time		
12:30	PRANZO		
	AUDITORIUM Processi di Elettrolisi a bassa temperatura	SAN BERNARDINO DA SIENA Processi di gassificazione per la produzione di idrogeno	SAN FRANCESCO Componenti innovativi per celle PEM
14:00	Chair Antonino Aricò, CNR	Chair Donatella Barisano, ENEA	Chair Valentina Naticchioni, ENEA
14:10	Elettrocatalizzatori senza platino per l'elettrolisi alcalina a bassa temperatura <i>Lorenzo Mirizzi - BICOCCA</i>	Sviluppo di un modello cinetico per la simulazione del processo di Sorption Enhanced Gasification <i>Andrea Di Carlo - UNIAQUILA</i>	Sviluppo di metodi e processi per la preparazione e la caratterizzazione di membrane funzionanti ad alta temperatura <i>Oreste Tarallo - UNINA</i>
14:20	Materiali per elettrolizzatori a membrana alcalina <i>Alessandro Lavacchi - CNR</i>	Modellazione di un reattore per idrogassificazione di rifiuti solidi: sperimentazione e simulazione di processo <i>Valentina Segneri - LA SAPIENZA</i>	Sintesi e Funzionalizzazione di PBI per HTPEM FC <i>Andrea Giovanelli - UNIPISA</i>
14:30	Ossidi a struttura perovskitica per lo sviluppo di elettrocatalizzatori senza cobalto <i>Elisabetta Di Bartolomeo - TOR VERGATA</i>	Impegno di cicli calcium looping per la decarbonizzazione dell'industria del vetro: valutazioni preliminari <i>Domenico Borello - LA SAPIENZA</i>	Studio di metodiche di deposizione laser per la deposizione di catalizzatori per celle a combustibile a bassa temperatura <i>Giovanni Ausanio - UNINA</i>

14.40	Sviluppo di ionomeri e membrane a conducibilità anionica a base di polichetone funzionalizzato <i>Andrea Pucci - UNIPISA</i>	Progettazione di impianto prototipale per la gassificazione in reattore a letto fluidizzato a camere interconnesse <i>Armando Vitale - UNIAQUILA</i>	CeO ₂ /rGO co-catalysts for PEMFCs <i>Marie Assunta Navarra - LA SAPIENZA</i>
14.50	Analisi dei parametri di progetto per l'efficientamento di celle elettrolitiche per impianti alcalini <i>Alessandro Guzzini - UNIBO</i>	Sorbenti per il condizionamento del biosyngas finalizzati all'arricchimento in Idrogeno <i>Sonia Dell'Aversano - UNIAQUILA</i>	Sviluppo di sistemi catalitici ad elevata area superficiale per elettrocatalizzatori <i>Giuseppina Rowello - UNIPARTHENOPE</i>
15.00	Caratterizzazione di celle e short-stack bassa temperatura <i>Messimo Santarelli - POLITO</i>	Produzione di correnti ricche in idrogeno mediante gassificazione di biomasse <i>Giovanna Ruoppolo - CNR</i>	Sviluppo di MEA a base di catalizzatori non-PGM per celle a combustibile a elettrolita polimerico <i>Irene Gatto - CNR</i>
15.10	Question time	Question time	Question time
15.30	COFFEE BREAK		
	Processi di conversione da biomasse per la produzione di idrogeno	Gestione integrata delle infrastrutture	Stack e BOP di celle a combustibile PEM
16:10	Chair Nadia Cerone, ENEA	Chair Antonio Ricca, ENEA	Chair Giuseppe Nigliaccio, ENEA
16:20	Reforming catalitico del tar in un impianto pilota di gassificazione della biomassa: primi dati sperimentali <i>Francesco Zimbardi - ENEA</i>	Sviluppo e test delle logiche di controllo di un Controllore Centrale di Impianto per la gestione del vettore idrogeno in una rete di distribuzione intelligente <i>Marco Menga - POLIBARI</i>	Design di stack di celle a combustibile PEM ad alta temperatura <i>Vincenzo Mulone - TOR VERGATA</i>
16:30	Pulizia del syngas: catalizzatori per il reforming del tar <i>Paolo De Filippis - LA SAPIENZA</i>	Studio preliminare sull'utilizzo dell'idrogeno per accumulo e co-generazione in un sistema multi-energy <i>Sergio Bruno - POLIBARI</i>	Progettazione e realizzazione sistema controllo sistemi a celle a combustibile con membrana polimerica <i>Michelo Riccio - CeRICT</i>
16:40	Integrazione di un processo elettrochimico nel sistema di scrubbing del syngas di un impianto di gassificazione di biomasse <i>Michele Mascia - UNICAGLIARI</i>	Criteri di site suitability per la dislocazione ottimale di componenti di produzione, stoccaggio, distribuzione delle reti di idrogeno e di valutazione del potenziale di idrogeno. Definizione di modelli digitali del sistema di reti di idrogeno <i>Rossella Scorzelli - UNIBASILICATA</i>	Sviluppo di modelli per celle a combustibile polimeriche e coprogettazione BoP <i>Andrea Facci - UNITUSCIA</i>
16.50	Aspetti critici caratterizzazione e indicazioni per lo sviluppo di catalizzatori per la conversione di contaminanti nella corrente di gas da gassificazione biomasse <i>Andrea Fasolini - UNIBO</i>	Componenti di simulazione di nodi e segmenti significativi di reti di trasporto e distribuzione del vettore Idrogeno: valutazioni preliminari <i>Antonia Longobardi - CUGRI</i>	Architetture di conversione e controllo per una rete di Fuel-Cell <i>Luca Solero - UNIROMATRE</i>
17.00	Catalizzatori mono e bimetallici per processi di reforming e cracking <i>Vladimiro Dal Santo - CNR</i>	Digitalizzazione e Training nel contesto del trasporto e della distribuzione H ₂ <i>Saverio De Vito - ENEA</i>	Ricerca tecnologica su nuove configurazioni di stack fuel cell ad idrogeno in ambito PNRR <i>Giosuè Giacoppo - CNR</i>
17:10	Question time	Question time	Question time
18.00	APERITIVO SOCIALE		

mercoledì 17 luglio

08:30	Registrazione		
	AUDITORIUM		
	<p>TAVOLA ROTONDA</p> <p>Il ruolo dell'idrogeno verde nella transizione energetica: quali strategie per ridurre i costi, diversificare le fonti, includendo anche i biofuels, ed incentivare una maggiore diffusione per gli usi finali</p> <p>Moderatrice: Giulia Monteleone, ENEA</p>		
09:00	<ul style="list-style-type: none"> • Luca Benedetti, GSE • Andrea Di Stefano, Responsabile del Market Design & Evaluation per idrogeno e mobilità, ENI • Marco Trombetti, Direzione Standardizzazione, Operatività e Sviluppo Aeroportualità Regionale, ENAC • Fabio Dattilo, Università degli Studi di Padova 		
	AUDITORIUM Processi di produzione di e-fuels	SAN BERNARDINO DA SIENA Sistemi di accumulo, trasporto e rifornimento di idrogeno	SAN FRANCESCO Celle a combustibile per applicazioni di mobilità
10:00	Chair Giuseppina Vanga, ENEA	Chair Claudio Zagano, RSE	Chair Francesco Vellucci, ENEA
10:10	Definizione delle caratteristiche qualitative e prestazionali degli e-fuels Carlo Giorgio Visconti - POLIMI	Un modello di ottimizzazione tattico per l'integrazione di sistemi Power To Gas in vettori multienergetici Silvia Anna Cordieri - RSE	Prospettive della mobilità a Idrogeno: esperienze del CNR ITAE Laura Andaloro - CNR
10:20	Sviluppo di un processo catalitico per la sintesi diretta di e-cherosene Mattia Piacentini - POLIMI	Modellistica e simulazione dinamica dell'immissione di idrogeno in reti di distribuzione di gas naturale Marcelo Andre Muro Alvarado - RSE	Sviluppo di un trattore ad idrogeno per la logistica portuale Elio Jannelli - UNIPARTHENOPE
10:30	Sistemi innovativi per la produzione di ammoniaca verde Umberto Desideri - UNIPISA	Studi per la simulazione e l'analisi tecnico-economica di cavi superconduttori refrigerati con idrogeno liquido per il trasporto combinato di idrogeno ed energia elettrica Marco Bocchi e Giuliano Angeli - RSE	Configurazioni impiantistiche di sistemi propulsivi basati su SOFC alimentate con hydrogen carriers e sviluppo modelli numerici Mariagiovanna Minutillo - UNISA
10:40	Sviluppo di un processo innovativo per la produzione dell'idrogeno e la sua conversione in ammoniaca utilizzando vettori termici ed elettrici rinnovabili Cecilia Pistolesi - CAMPUS BIOMEDICO	Sviluppo di modelli numerici per il dimensionamento delle HRS e per l'ottimizzazione delle condizioni operative in base al tipo di fonte rinnovabile Alessandra Perna - UNICAS	Utilizzo di combustibili alternativi per la propulsione navale basata su celle a combustibile PEM: confronto fra le soluzioni impiantistiche Rodolfo Taccani - UNITRIESTE
10:50	Approcci in catalisi eterogenea per la conversione di metanolo a dimetiletere Giovanni Maestri - UNIPARMA	Sviluppo di modelli per l'ottimizzazione del dimensionamento di una HRS Francesco Piraino - UNICAL	Soluzioni per la determinazione dello SoH di sistemi PEMFC Pier Paolo Polverino - UNISA
11:00	Sintesi e caratterizzazione di zeoliti semipermeabili all'acqua Alessandro Porta - POLIMI	Sviluppo di modelli per la razionalizzazione dell'esercizio di una HRS Francesco Piraino - UNICAL	Upgrade Sala Prova per Powertrain di Veicoli Nicolò Marcino - ENEA
11:10	Question time	Question time	Question time
11:30	COFFEE BREAK		

	Processi di elettrolisi ad alta temperatura	Sistemi di accumulo, trasporto e rifornimento di idrogeno	Produzione di idrogeno da processi termochimici
11:50	Chair Alessandra Sanson , CNR	Chair Paola Gislou , ENEA Serbatoi di accumulo idrogeno basati su idruri metallici per applicazioni mobili e stazionarie <i>Gabriele Scarpati - UNIPARTHENOPE</i>	Chair Nicola Lisi , ENEA
12:00	Struttura e dinamiche dell'elettrolita di carbonato fuso $\text{Li}_1.24\text{K}_0.76\text{CO}_3$: simulazioni molecolari con polarizzazione esplicita <i>Francesco Sessa - INSTM</i>	Modellazione ed ottimizzazione di sistemi MH-PCM <i>Andrea Facci - UNITUSCIA</i>	Catalizzatori specifici per reattori di reforming elettrico e idrogassificazione di biomasse <i>Vincenzo Palma - UNISA</i>
12:10	Studio parametrico dei principali fenomeni chimico-fisici dell'elettrolizzatore a carbonati fusi alimentato da fonti energetiche rinnovabili (RES) <i>Massimiliano Della Pietra - ENEA</i>	Metal Hydrides for Maritime applications – Technology assessment, modelling and test bench development <i>Stefano Barberis - UNIGE</i>	Produzione di H_2 da CO con WGS a bassa temperatura <i>Eugenio Meloni - UNISA</i>
12:20	Analisi SEM per lo studio della distribuzione del Nickel in elettrodi di celle SOC dopo l'operazione per lunghi periodi <i>Paolo Piccardi - UNIGE</i>	Materiali innovativi per stoccaggio chimico e fisico di idrogeno allo stato solido <i>Andrea Rossin - CNR</i>	Influenza della struttura della lignina sulla formazione e sulle caratteristiche del biochar <i>Heiko Lange - BICOCCA</i>
12:30	Analisi multi-scenario sull'integrazione di celle elettrochimiche reversibili ad alta temperatura nei settori chimico e residenziale <i>Francesca Mennilli - UNIVPM</i>	Progettazione del sensore di idrogeno e del sistema per il reading dei dati dal sensore <i>Roberto Parente - CeRICT</i>	Metanazione biologica di biogas e syngas da gassificazione di biomassa solida: stato dell'arte e applicazione al contesto Italiano <i>Fabrizio Rainone, Maria Luisa Vittoria Nordio, Andrea Rossetti - RSE</i>
12:40	Modellazione 0D e 2D di una cella SOEC elettrolita-supportata e analisi preliminare della distribuzione del gas nei canali di flusso <i>Maria Anna Murmura - LA SAPIENZA</i>	Modellazione matematica e numerica di misuratori utilizzati nelle reti di trasporto e distribuzione del gas <i>Gino Cortellessa - UNICAS</i>	Splitting termochimico dell'acqua: progettazione di un reattore a doppia membrana solida <i>Stefano Cordiner - TOR VERGATA</i>
12:50	Question time	Question time	Question time
13:10		PRANZO	
	Analisi tecnico-economica e di sostenibilità	Sistemi innovativi di produzione di idrogeno	Celle a combustibile per applicazioni stazionarie
14:40	Chair Claudia Bassano , ENEA	Chair Antonella Marone , ENEA	Chair Davide Pumiglia , ENEA
14:50	Valutazione tecnico-economica sull'utilizzo di idrogeno nei settori Hard to Abate <i>Simona Di Micco - UNIPARTHENOPE</i>	Sviluppo di processi bioelettrochimici avanzati per la produzione di combustibili gassosi dal trattamento e la valorizzazione di matrici organiche di scarto <i>Marianna Villano - LA SAPIENZA</i>	Effetti di degrado indotti da contaminanti su celle a combustibile ad ossidi solidi <i>Lucia Pera - POLITO</i>
15:00	Valutazione dell'impatto della mobilità pesante ad idrogeno sul sistema energetico italiano <i>Antonio De Padova - POLITO</i>	Processi biologici sostenibili per la produzione di idrogeno da batteri ipertermofili e microrganismi fotosintetici <i>Massimo Trotta - CNR</i>	Modellazione matematica e numerica di celle a combustibile ad alta temperatura di tipo SOFC <i>Giorgio Grossi - UNICAS</i>
15:10	Study of the environmental impacts of integrated systems for hydrogen storage by Life Cycle Analysis (LCA) <i>Paola Rizzi e Ediano De Sa Alves - UNITO</i>	Fonti alternative per la produzione di bio-idrogeno: esplorazione della biodiversità delle diatomee <i>Carlo Fasano - ENEA</i>	Integrazione di celle a combustibile reversibili ad alta temperatura in sistemi di accumulo ibridi con emissioni negative <i>Gabriele Loreti - ENEA</i>
15:20	Valutazione degli impatti sociali dell'idrogeno: aspetti teorici e metodologici <i>Jacopo Bindi e Francesco Bartolomei - UNITO</i>	Elettrometanogenesi geotermica: una risorsa italiana da esplorare nell'ottica della transizione energetica <i>Pierangela Cristiani - RSE</i>	Caratterizzazione sperimentale di short stack SOFC alimentati a blending CH_4/H_2 <i>Francesco Marino - ENEA</i>
15:30	Question time	Question time	Question time
15:50	SALUTI FINALI e CHIUSURA EVENTO		

ENEA

AGENZIA NAZIONALE PER LE NUOVE TECNOLOGIE,
L'ENERGIA E LO SVILUPPO ECONOMICO SOSTENIBILE

enea.it