

Assegno di Ricerca

Caratterizzazione e modellazione delle proprietà di trasporto di gas in polimeri barriera (24 mesi)

L'assegno di ricerca si focalizza su attività sia sperimentali che modellistiche, legate all'analisi delle proprietà di barriera ai gas di polimeri di ad elevate prestazioni, come Poliammidi (PA), Polietilene ad alta densità (HDPE) ed altri materiali, cristallini e/o compositi, che risultino di interesse a valle di una attenta analisi bibliografica. Le applicazioni di interesse si focalizzano sui sistemi di trasporto e stoccaggio gas nell'ambito delle applicazioni legate al trasporto di CO₂ ed al trasporto e stoccaggio di idrogeno o altri carrier energetici innovativi, non verranno comunque trascurate le applicazioni più classiche come per esempio quelle in ambito oil & gas.

I gas di interesse saranno dunque principalmente CO₂ ed idrogeno, anche se non è escluso l'utilizzo di altre sostanze, quali, per esempio, H₂S, metano ed ammoniaca, che presentano comunque un elevato interesse applicativo.

A valle di una iniziale ricerca bibliografica ad ampio spettro, si procederà, quindi, alla selezione ed acquisizione dei diversi materiali e alla loro caratterizzazione sia fisicochimica sia in relazione alla permeazione di gas puri ed in miscela.

I test sperimentali saranno finalizzati da una parte a caratterizzare il polimero tal quale (cristallinità, transizione vetrosa, densità ecc..) dall'altra parte a misurare la solubilità, diffusività e permeabilità nei confronti dei gas considerati. L'influenza delle condizioni operative (temperatura, pressione, umidità ecc....) saranno anche considerate per avere un quadro completo delle proprietà del polimero.

La caratterizzazione sperimentale sarà poi accompagnata dalla modellazione del sistema dal punto di vista termodinamico e cinetico in modo da costruire relazioni che possano stimare con elevata confidenza le proprietà del polimero anche in condizioni operative distanti da quelle utilizzabili in laboratorio. In tal senso si farà riferimento principalmente a modelli macroscopici (equazioni di stato) e della meccanica del continuo (modelli di diffusività e permeabilità) anche se non si esclude la possibilità di considerare approcci molecolari per la stima e la verifica delle interazioni esistenti tra i vari composti.

Un maggior dettaglio delle attività in cui sarà strutturato l'assegno è riportato nel piano di attività sottostante. Lo studio si svolgerà sotto la supervisione del professor Marco Giacinti Baschetti del Dipartimento di Ingegneria Civile, Chimica, Ambientale e dei Materiali.

PIANO di ATTIVITA'

Il piano delle attività previste durante il periodo dell'assegno viene riportato di sotto completo di una definizione temporale delle attività. Resta inteso che saranno possibili modifiche al piano originale in seguito a eventuali problemi o imprevisti incontrati nell'ambito dello sviluppo del progetto.

- **STATO dell'ARTE** (mesi 1-3) Analisi degli studi esistenti e redazione di uno stato dell'arte relativo ai principali polimeri utilizzati o considerati per lo stoccaggio e trasporto del gas nei settori petrolchimico e in quelli futuribili legati alla CCS ed alla hydrogen economy.

- **CARATTERIZZAZIONE: POLIMERI di BASE** (mesi 1-12) In parallelo alle attività di ricerca bibliografica il ricercatore prenderà confidenza con la strumentazione di laboratorio caratterizzando dei materiali di base (HDPE e PA prevalentemente) ripetendo dapprima dati già disponibili per poi passare alla caratterizzazione di nuovi gas e/o miscele in un ampio range di temperature e pressioni.

- **CARATTERIZZAZIONE: POLIMERI AVANZATI** (mesi 4-20) a valle dell'attività di ricerca bibliografica verranno selezionati altri materiali (un minimo di 2) di interesse per lo studio che verranno acquisiti e per i

quali verranno ripetute le stesse caratterizzazioni effettuate sui materiali di base, al fine di costruire un dataset completo che permetta di confrontare le performance dei vari polimeri nelle diverse condizioni di lavoro.

- **MODELLAZIONE: SISTEMI BINARI** (mesi 2-16) tutta l'attività sperimentale sarà accompagnata da una parallela attività di modellazione che partirà dalla descrizione dei comportamenti già noti per i polimeri di base per poi estendersi a quelli avanzati. In particolare si procederà alla modellazione dei sistemi binari polimero-penetrante utilizzando i risultati già disponibili per i polimeri di base estendendoli a nuovi gas sulla base dei risultati delle prove sperimentali. Gli stessi penetranti saranno poi utilizzati nel secondo anno di attività per analizzare anche il comportamento dei polimeri innovativi.

- **MODELLAZIONE: SISTEMI COMPLESSI** (mesi 8-24) A valle dei primi risultati sui sistemi binari la modellazione sarà estesa anche a sistemi ternari che coinvolgono un polimero e 2 (o più penetranti). Anche in questo caso i dati sperimentali permetteranno l'ottimizzazione dei sistemi modellistici scelti tramite la definizione dei parametri di miscela più idonei a definire le interazioni dei diversi penetranti all'interno del polimero. L'obiettivo finale è ovviamente quello di ottenere degli strumenti matematici in grado di descrivere il comportamento dei diversi polimeri in presenza di uno o più solventi e possibilmente predirne il comportamento anche in condizioni operative non raggiungibili all'interno del laboratorio.