

**Assegno di ricerca annuale (versione italiana):
“Studio computazionale sulla crescita dei PAH”**

Piano di Attività e Progetto di Ricerca

Progetto di Ricerca

Lo scopo principale del progetto SMART_H2 è sviluppare una strategia di modellizzazione multiscala che possa essere utilizzata per studiare la cinetica e ottimizzare la conversione del metano in idrogeno e polveri di carbonio sia a pressione atmosferica che pressioni superiori. La strategia per raggiungere questo obiettivo si sostanzia nei seguenti obiettivi specifici (O):

O1: Studiare la conversione del metano nei plasmi.

O2: Prevedere l'entità e la qualità della formazione di carbonio nei plasmi.

O3: Comprendere l'impatto della pressione sui plasmi di metano.

Nell'ambito degli obiettivi sopra indicati, la ricerca si concentrerà sulla nucleazione e crescita del carbonio nelle condizioni tipiche del plasma. Innanzitutto, è necessario studiare il meccanismo di formazione degli idrocarburi policiclici aromatici (PAH) nella regione immediatamente successiva alla formazione del plasma. Come informazione per studiare le fasi iniziali della crescita dei PAH, verrà utilizzata la composizione chimica prevista dal modello di scarica del plasma, che dovrebbe essere disponibile già a metà del primo anno del progetto. Verrà identificato un insieme di reazioni prototipo per descrivere la crescita di PAH di grandi dimensioni e di particelle di carbonio. Queste reazioni verranno studiate dal punto di vista termochimico e cinetico.

Nel corso dell'assegno di ricerca, della durata di 12 mesi, il candidato dedicherà interamente la propria attività di ricerca al raggiungimento degli obiettivi del suddetto progetto PRIN 2022 (fondo FIRST) “SMART_H2 – Simulations, Modeling and Applications of Plasma Assisted-conversion of methane to hydrogen and carbon”.

Piano di attività

- Nei primi mesi dell'assegno di ricerca, l'assegnista studierà la letteratura relativa alle reazioni che portano alla crescita dei PAH. In collaborazione con l'unità di ricerca del PI (PoliMI, Politecnico di Milano), verrà identificato un insieme di reazioni prototipo per descrivere la crescita di PAH di grandi dimensioni e di particelle di carbonio.

- A partire dal 3° mese, l'assegnista inizierà lo studio computazionale della superficie di energia potenziale reattiva (PES) delle reazioni più promettenti, identificando così tutti i punti stazionari e caratterizzandone l'energetica con grande accuratezza.

- Parallelamente all'attività sopra descritta, l'assegnista contribuirà allo sviluppo di un protocollo automatizzato per il campionamento di PES reattive e di schemi compositi computazionalmente vantaggiosi per ottenere caratterizzazioni termochimiche accurate.

**Assegno di ricerca annuale (English version):
“Computational study on PAH growth”**

Activity plan and Research project

Research project

The main aim of the SMART_H2 project is to develop a multiscale modeling strategy that can be used to study the kinetics and optimize the conversion of methane to hydrogen and carbon powders both at atmospheric and above atmospheric pressures. The strategy to achieve this goal is substantiated in the following specific objectives (O):

O1: To study methane conversion in plasmas.

O2: To predict extent and quality of carbon formation downstream of plasmas.

O3: To understand the impact of pressure on methane plasmas.

In the framework of the objectives above, the research will focus on carbon nucleation and growth in plasma conditions. First, the mechanism of formation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in the immediate plasma aftermath region needs to be studied. As information to study the initial stages of PAH growth, the chemical composition predicted by the plasmas discharge model, which is expected to be available after about half of the first year of the project, will be used. A set of reactions adequate to describe the growth of large PAHs and of carbon particles will be identified. These will be studied from the thermochemical and kinetic points of view.

During the 12-month research grant, the candidate will entirely devote his/her research activity to to achieve the objectives outlined above, which reflect the goals of the PRIN 2022 (FIRST fund) “SMART_H2 – Simulations, Modeling and Applications of Plasma Assisted-conversion of methane to hydrogen and carbon” project.

Activity plan

- In the first couple of months of the research grant, the post-doc will study the literature on the reactions that lead to PAHs growth. In collaboration with the PI’s research unit (PoliMI, Politecnico di Milano), a set of reactions adequate to describe the growth of large PAHs and of carbon particles will be identified.

- Starting from the 3rd month, the post-doc will start the computational investigation of the reactive potential energy surface (PES) of the most promising reactions, thereby identifying the stationary points and characterizing the energetics with great accuracy.
- In parallel to the activity described above, the post-doc will contribute to the development of an automatized protocol for sampling reactive PESs and of cost-effective composite schemes for obtaining accurate thermochemistry.