PROGETTO DI RICERCA

**Sviluppo di sistemi catalitici per la produzione di e-fuel rinnovabili (progetto e-KEROMETH)**

La borsa di ricerca si colloca all’interno del progetto di ricerca e-Kerometh (co-elettrolisi di CO2 ed H2O per la produzione di e-fuel rinnovabili).

L’obiettivo della borsa di ricerca è di sviluppare catalizzatori per la reazione di produzione di kerosene in particolare migliorando l’ingegnerizzazione del catalizzatore prodotto negli altri OR, controllando la dimensione delle particelle delle specie a base di Fe, la loro interazione con il supporto e aggiungendo un’ulteriore fase attiva (a base di Co o Ru).

A differenza della classica produzione di kerosene da CO e H2, la presenza di CO2 e H2O provenienti dalla miscela ottenuta per co-elettrolisi può produrre delle modifiche delle fasi attive presenti. In particolare, ciò è influenzato dai rapporti presenti nella miscela, ma anche dalla struttura del catalizzatore come ad esempio la dimensione delle particelle di fase attiva, l’interazione con i siti acidi e con il supporto o la presenza di altre fasi attive. A questo scopo il catalizzatore verrà ingegnerizzato al fine di migliorarne l’attività e di comprendere l’effetto della composizione della miscela su di esso. Si cercherà di ottimizzare la dispersione delle fasi attive (Fe3O4 e Fe5C2) e la loro interazione con la parte acida, evitando una diretta supportazione del ferro e mantenendo separate le fasi attive. Un ulteriore approccio riguarda lo sviluppo di particelle a base di Fe supportate su diversi materiali in modo da studiare l’effetto del supporto sulla dispersione e distribuzione di Fe3O4 e Fe5C2. Inoltre, questo sistema sarà studiato accoppiandolo, con diverse modalità, al sistema ottenuto su zeoliti. Infine, verrà sviluppato un sistema catalitico a base di Fe accoppiato con Co o Ru. La presenza di Co ha lo scopo di permettere di sviluppare processi Fischer -Tropsch per la produzione di prodotti a catena più lunga. Il sistema sarà provato tal quale, ma anche accoppiato con sistemi zeolitici per aumentare l’aromatizzazione e incrementare il numero di ottano. Sui sistemi sviluppati sarà studiata l’evoluzione delle fasi attive in funzione del contenuto di H2O e CO2 e della miscela post co-elettrolisi.

I sistemi migliori ottenuti saranno sviluppati su sistemi anulari o schiume tramite metodi di deposizione elettrochimica o coating. La sintesi permette la deposizione di sottili strati di materiali, anche in più strati. Le proprietà del sistema strutturato prodotto saranno valutate in termini di composizione, struttura, morfologia e in termini della loro omogeneità. La deposizione permetterà di ottenere sistemi catalitici in grado di distribuire e disperdere meglio il calore, migliorando le prestazioni del catalizzatore.

L’attività prevede inoltre lo studio dei meccanismi di reazione e interazione tra i catalizzatori sviluppati e la miscela di post co-elettrolisi con riferimento alle reazioni di produzione di e-kerosene e l’identificazione del ruolo delle diverse fasi attive (Co, Fe3O4 e Fe5C2, siti acidi) nelle reazioni che portano alla produzione di kerosene (reverse water gas shift, produzione di olefine e aromatizzazione-oligomerizzazione). In particolare, si intende valutare, in maniera separata e accoppiata il ruolo delle fasi attive. Inoltre, si prevede la caratterizzazione delle miscele ottenute nella produzione di e-kerosene. Particolare attenzione verrà volta alla correlazione tra i rapporti delle fasi di ferro all’interno del catalizzatore e la formazione di prodotti quali olefine ed ossigenati a catena corta, così come all’occorrenza della reazione parassita di water gas shift. La presenza di siti di Co all’interno del catalizzatore, necessaria all’ottenimento di catene di carbonio più lunghe, sarà ulteriormente investigata al fine di studiare il disaccoppiamento della reazione di Fischer -Tropsch dalle condizioni di reazione. Ciò potrebbe quindi permettere di prescindere dall’utilizzo di zeoliti, o limitare la loro importanza nel processo complessivo.