

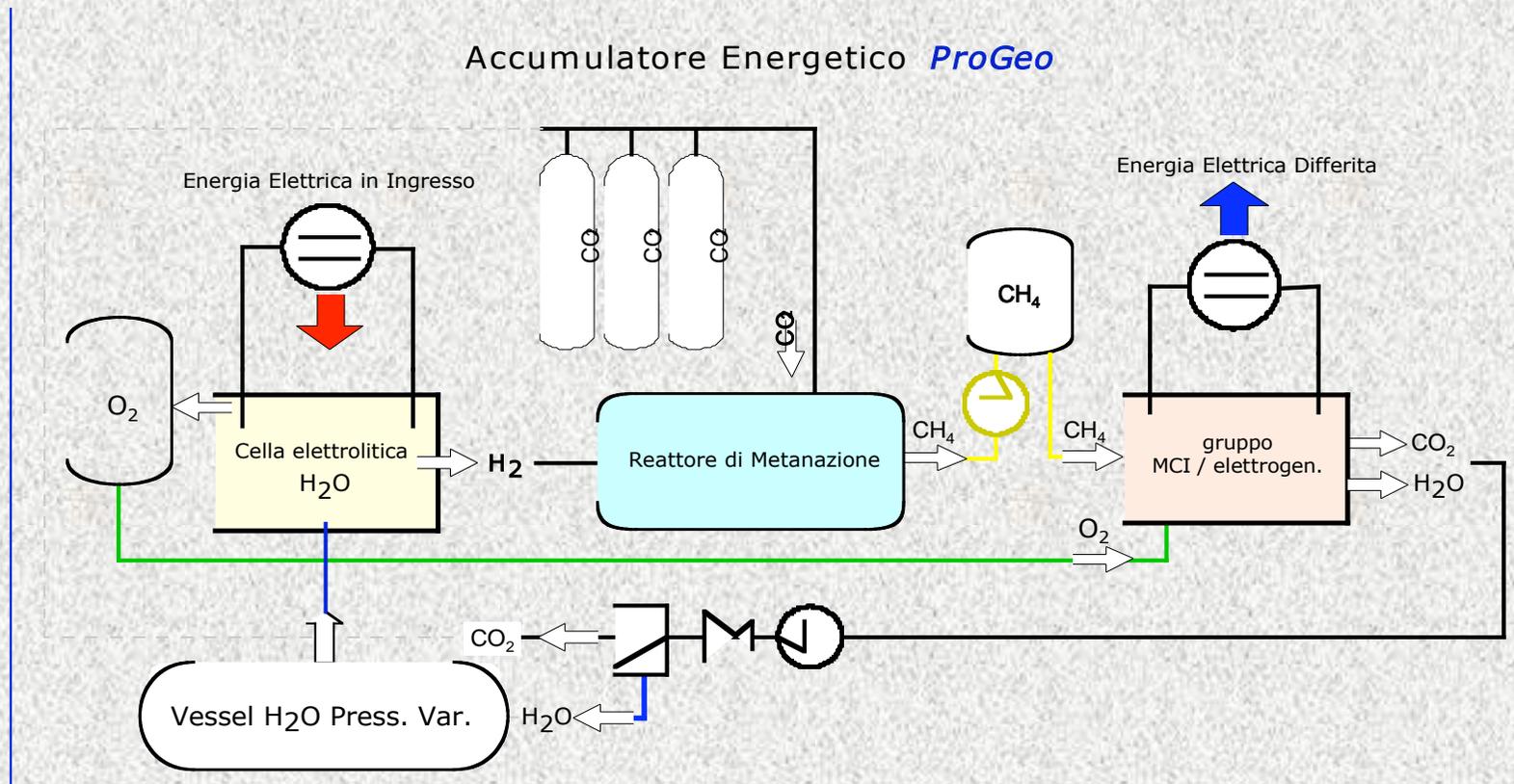
# 1) IL GIALLO: IMMAGAZZINARE ENERGIA RINNOVABILE SEQUESTRANDO ANIDRIDE CARBONICA

Utilizzare le energie rinnovabili per immagazzinare energia sotto forma chimica (es. metano) da utilizzare per riottenere energia a compensare l'eccesso di domanda

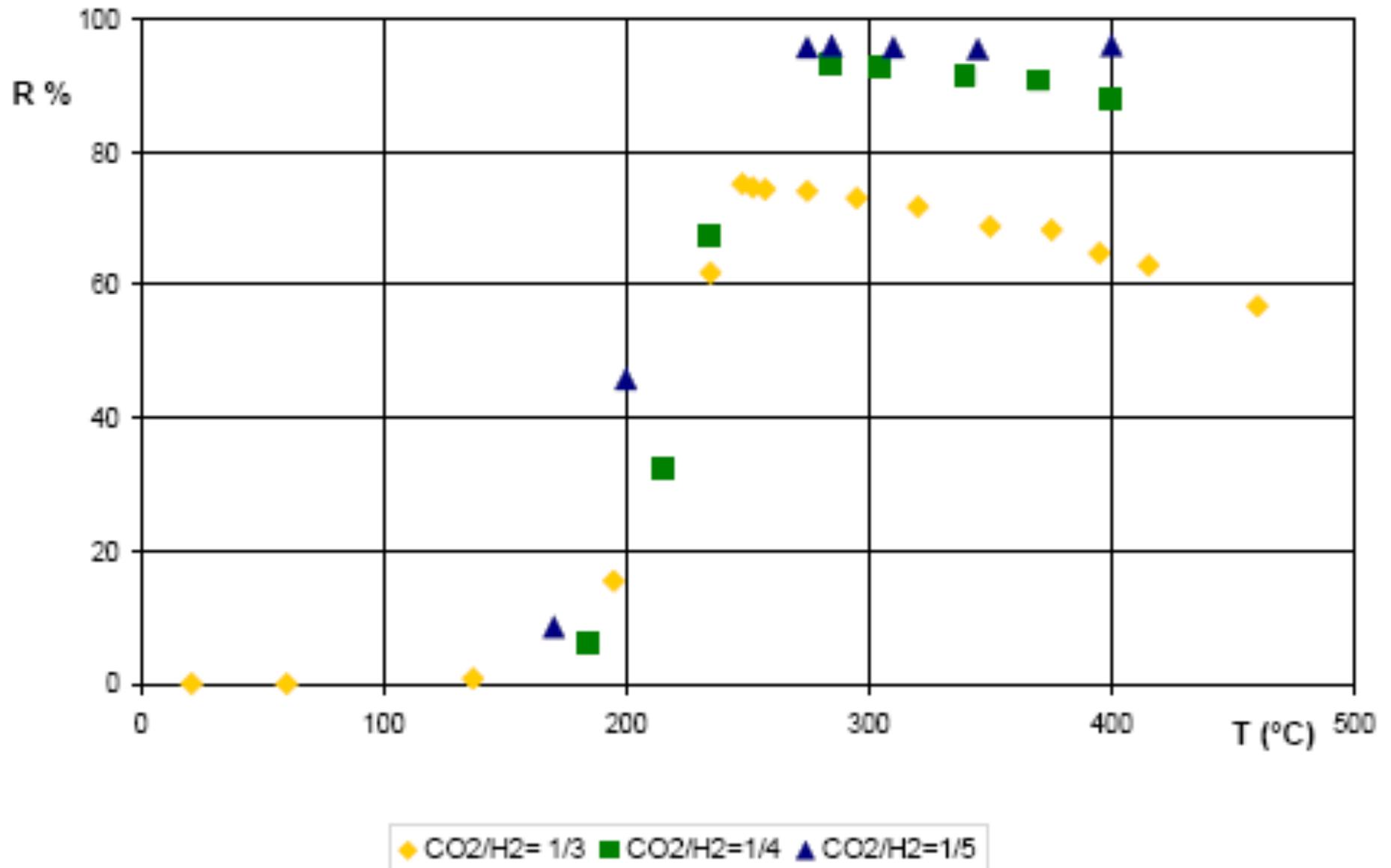


## 2) LA TRACCIA: **PRODUZIONE CH<sub>4</sub> DA CO<sub>2</sub>**

- 1) Elettrolizzatore → H<sub>2</sub>
- 2) METANATORE CO<sub>2</sub> → CH<sub>4</sub> (carbon neutro)
- 3) STOCCAGGIO e UTILIZZO DIFFERITO



### 3) LE PROVE: RESA IN CH<sub>4</sub>



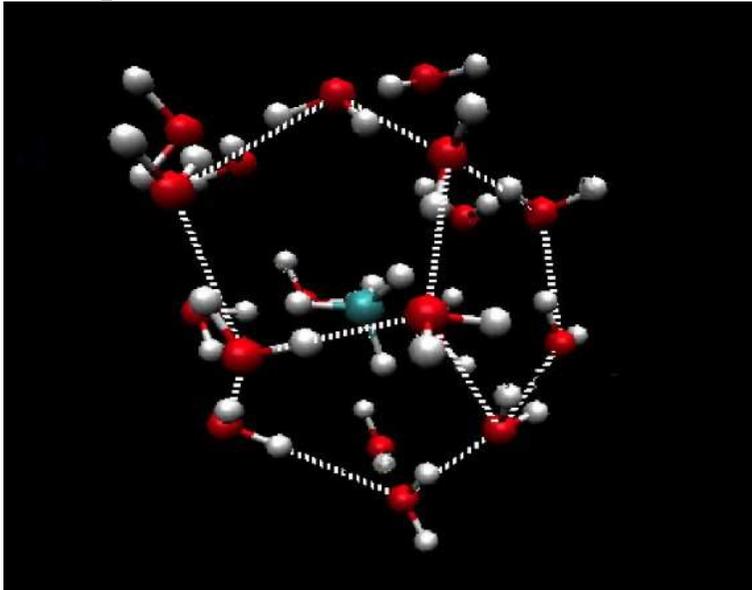
**4a) TOOL:  
MODELLISTICA  
DEL SISTEMA  
CINETICO DI  
RIDUZIONE  
CATALIZZATA  
DI CO<sub>2</sub>**

	Energy barrier		Ref
	Direct(kJ/mol)	Reverse (kJ/mol)	
CO <sub>2</sub> + * ↔ CO <sub>2</sub> *	0	27,3	1
H <sub>2</sub> + 2* ↔ 2H*	4	81,588	1
CO + * ↔ CO*	0	115	1
H <sub>2</sub> O + * ↔ H <sub>2</sub> O*	0	64,4	1
CO <sub>2</sub> * + H* ↔ COOH* + *	113,1	155,6	2
CO <sub>2</sub> * + 2H* ↔ C(OH) <sub>2</sub> * + 2*	292,3	217,8	2
CO <sub>2</sub> * + * ↔ CO* + O*	93,7	169,3	2
COOH* + * ↔ CO* + OH*	306,8	308,7	2
C(OH) <sub>2</sub> * + H* ↔ CH <sub>2</sub> O* + OH*	98,7	125,7	2
CH <sub>2</sub> O* + H* ↔ CH <sub>2</sub> * + OH*	163,7	154,1	2
CO* + * ↔ C* + O*	237,4	111,8	2
CO* + 2H* ↔ CH* + OH*	221,4	146,1	2
2CO* ↔ CO <sub>2</sub> * + C*	326		1
C* + H* ↔ CH* + *	69,2	154,1	2
CH* + H* ↔ CH <sub>2</sub> * + *	68,2	61,9	2
CH <sub>2</sub> * + H* ↔ CH <sub>3</sub> * + *	71,4	105,6	2
O* + H* ↔ OH* + *	137,9	116	2
OH* + H* ↔ H <sub>2</sub> O* + *	124,6	99,9	2
CH <sub>3</sub> * + H* ↔ CH <sub>4</sub> + 2*	137,4	178,7	2
H* + * ↔ * + H*	13	13	1
CO* + * ↔ * + CO*	10	10	1
O* + * ↔ * + O*	48	48	1
OH* + * ↔ * + OH*	21	21	1

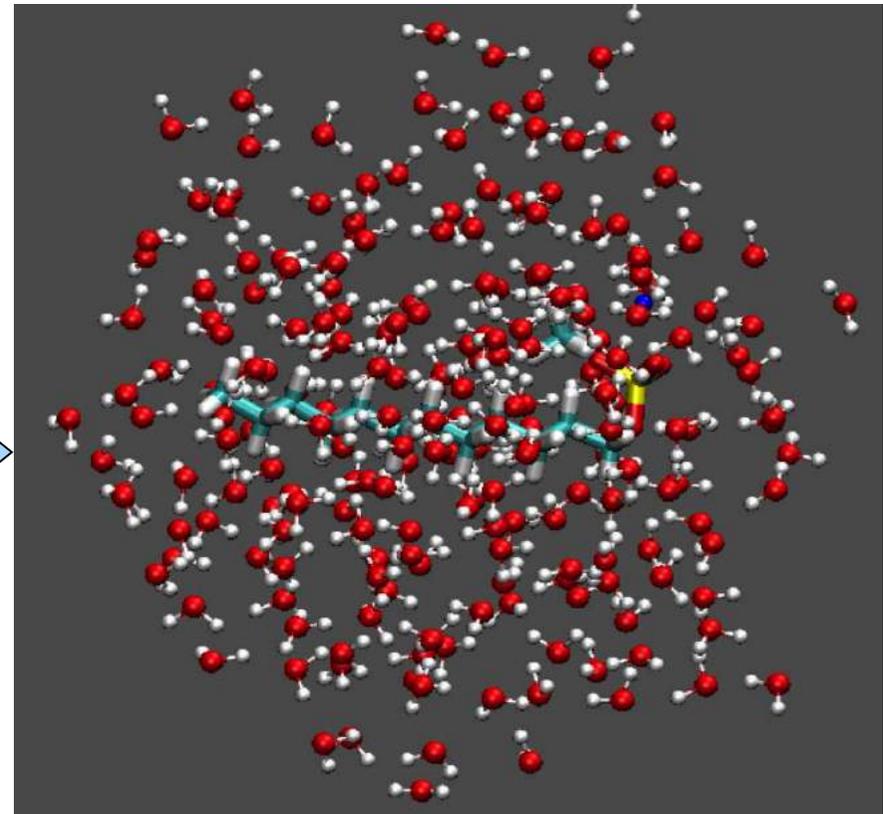
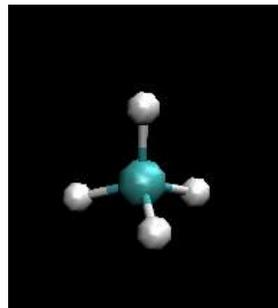
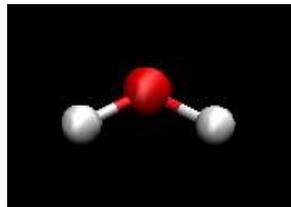
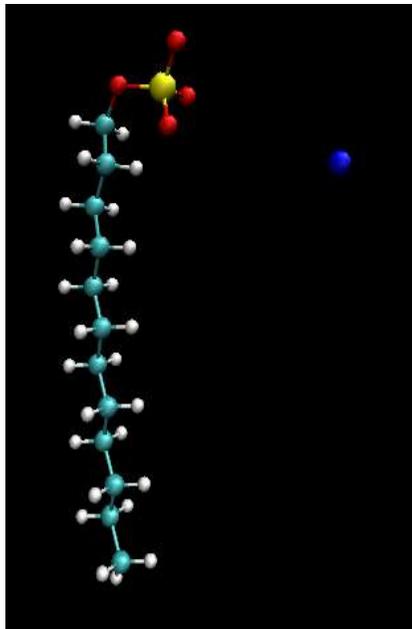
1 J. Phys. Chem. C, Vol. 113, No. 12, 2009

2 J. Ren et al. / Applied Surface Science 351 (2015) 504–516

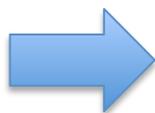
# 4b) TOOL: **DINAMICA MOLECOLARE**



- Interazioni modellate con force fields
- Uso di DL\_POLY per la dinamica molecolare
- Equilibratura della geometria
- Minimizzazione dell'energia
- Sampling esteso delle condizioni



Università di Perugia  
(DCBB, DICA)



ENEA  
(Frascati)



R.P.C srl (Roma)



## 5) GLI ATTORI

RDPower  
srl (Terni)



PLC SYSTEM (Acerra)





