

PIANO TRIENNALE DI REALIZZAZIONE 2019-21 - RICERCA DI SISTEMA ELETTRICO NAZIONALE
Progetti di ricerca di cui all'art. 10 comma 2, lettera a) del decreto 26 gennaio 2000

AFFIDATARIO CNR

Tema - Titolo del progetto: - Sistemi di accumulo, compresi elettrochimico e power to gas, e relative
interfacce con le reti

Durata: 36 MESI

Semestre n. 1 – Periodo attività: 01/01/2020 – 31/06/2020

ABSTRACT ATTIVITA' SEMESTRALE:

La programmazione dell'attività scientifica prevista per la I^a semestralità 2020 all'interno del progetto "Sistemi di accumulo, compresi elettrochimico e power to gas, e relative interfacce con le reti" ha subito un forte rallentamento dovuto allo stop nazionale causato dall'emergenza COVID. La fase post-lock-down, ha visto l'attuazione di misure restrittive in tema di rientro del personale presso le proprie sedi operative; pertanto, soprattutto le attività sperimentali di laboratorio, hanno subito un avvio lento e programmato, dettato dagli accessi limitati e da misure di sicurezza e distanziamento sociale. Nonostante ciò, grazie alla proroga di quattro mesi concessa al progetto, si è fortemente confidenti che sarà possibile stabilire un riallineamento delle attività previste nella annualità di progetto. Il I SAL 2020, ha visto la partecipazione alle attività di importanti università italiane quali: POLIMI, POLITO, UNIBO, UNIPA, UNIME, UNIRC, tutte coinvolte come co-beneficiari di progetto, a supporto ed implementazione dell'attività di ricerca condotta all'interno dei WP dal gruppo affidatario, CNR. Si tratta soprattutto di attività di sviluppo di modelli attraverso tecniche di machine learning applicate ai sistemi di accumulo elettrochimico, di indagini computazionali su proprietà strutturali e di reazione su catalizzatori specifici per applicazioni in processi di metanazione finalizzate all'ottimizzazione dello stesso per applicazioni power to gas. Ed ancora, studi di cinetica di reazione per l'intensificazione del processo di metanazione finalizzati alla messa a punto di equazioni cinetiche per la creazione di un modello di simulazione. Studi di life cycle analysis (LCA) di materiali catalitici costituenti sia i sistemi di accumulo elettrochimico che del sistema integrato di metanazione/SOEC, fino ad arrivare alla definizione di missioni d'uso dei sistemi d'accumulo a supporto delle reti di trasmissione e distribuzione.

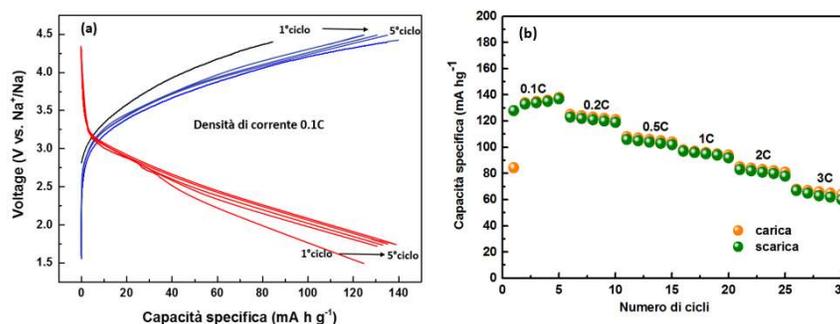
Di seguito si riporta quanto è stato svolto nei primi mesi antecedenti al lockdown e nella fase di rientro dallo stesso, suddiviso per linea di attività (LA) internamente ad ogni WP.

ATTIVITA' SVOLTE	
AFFIDATARIO / COBENEFICIARI O	SINTESI DELLE ATTIVITÀ DI RICERCA SVOLTE, RISULTATI CONSEGUITI E RICADUTE SUL SETTORE PRODUTTIVO

CNR ITAE	<p>Le attività condotte dal gruppo affidatario CNR e dalle diverse università italiane coinvolte vengono riportate di seguito con maggiore dettaglio. <i>La tematica di progetto contribuisce allo sviluppo di sistemi di accumulo ad integrazione delle tecnologie rinnovabili e dell'efficiamento energetico, toccando tutta la catena del valore, dalla produzione dei materiali e componentistica fino ai sistemi finali e loro integrazione, guardando al miglioramento della rete, contribuendo ad importanti ricadute in tutti i settori produttivi di riferimento con conseguente sviluppo di nuove figure professionali in emergenti settori dell'energia; ad oggi, il rapporto dell'IRENA stima per il settore energetico circa 100 milioni di nuovi posti di lavoro al 2050 (IRENA (2020) Measuring the socio-economics of transition: Focus on jobs).</i></p> <p>WP1 – Accumulo elettrochimico</p> <p>All'interno dell'attività LA 1.2, batteria sodio-metallo cloruro, sono stati sintetizzati parte dei nuovi materiali catodici caratterizzati dalla diminuzione di nichel nella formulazione, ovvero: Na-NiCl₂/ Na-FeCl₂. Nello specifico sono stati preparati campioni con % di Fe metallico in sostituzione di Ni, compresi tra il 10 -20%. Tutti i campioni preparati sono stati caratterizzati attraverso misure in situ mediante l'uso di caratterizzazioni strutturali, termiche e di vari strumenti sperimentali tra cui la diffrazione a raggi X (XRD), calorimetria differenziale a scansione (DSC), microscopia elettronica a scansione (SEM-EDX), spettroscopia fotoelettronica (XPS), adsorbimento di molecole gassose su una superficie solida (BET). I dati chimico-fisici, insieme a quelli che verranno registrati nei prossimi mesi, ad ultimazione attività, consentiranno di mettere a punto un protocollo di test elettrochimici in semi-cella, che verranno attuati a chiusura della II^a semestralità.</p> <p>Relativamente alla LA 1.6, è stato condotto uno studio approfondito su quanto ad oggi riportato in letteratura riguardo gli elettroliti impiegati nelle redox flow battery allo scopo di individuare nuove coppie redox in grado di sviluppare un elevato potenziale di cella ed elevate prestazioni in termini di capacità ed efficienza energetica. In letteratura sono state investigate una enorme mole di coppie redox potenzialmente promettenti. Il nostro interesse è stato rivolto in particolare su coppie redox non ancora investigate o scarsamente investigate, quali Ti/Ce, Ni/Ce e Ni/Mn. Le coppie indicate sono in grado di sviluppare potenziali di cella teorici pari a circa 1.5 V, 1.8 V e 1.7 V rispettivamente. Per quanto riguarda la scelta dei precursori elettrolitici ed i solventi da impiegare si è stabilito di procedere effettuando una serie di prove di solubilità di sali metallici quali solfati (M(SO₄)_n), ossisolfati (MOSO₄) e/o metansolfonati (M(CH₃SO₃)_n) in soluzioni concentrate di acido solforico (H₂SO₄) e/o acido metansolfonico (CH₃SO₃H). La scelta di tali precursori e solventi è stata fatta sulla base di considerazioni correlate ad impatto economico ed ambientale. I materiali scelti infatti sono facilmente reperibili e a basso costo, ed il vantaggio aggiuntivo di una tossicità relativamente bassa e facilità di smaltimento. Sono in corso test elettrochimici quali analisi di voltammetria ciclica (CV) e spettroscopia di impedenza complessa (EIS) e test di carica scarica necessari a stabilire la realizzabilità dei sistemi redox proposti sia in termini di potenziale sviluppato che di risultati relativi ai</p>
----------	---

principali parametri elettrochimici quali coulomb efficiency (CE), voltage efficiency (VE) e energy efficiency (EE).

L'attività prevista per la LA 1.9, batteria sodio-ione, ha visto lo svolgimento di attività di analisi di tipo chimico-fisico ed il primo avvio ai test elettrochimici sui materiali composti a base di fosfati e ossidi metallici di sodio su nanofibre di carbonio ($\text{NaFePO}_4\text{-CNF}$, $\text{NaMnPO}_4\text{-CNF}$, $\text{NaFeO}_2\text{-CNF}$, $\text{NaMnO}_2\text{-CNF}$). Nello specifico, test di carica-scarica sono stati eseguiti sul campione $\text{NaFePO}_4\text{-CNF}$ a differenti valori di densità di corrente (0.1C, 0.2C, 0.5C, 1C, 2C, 3C). Nella figura sottostante sono riportati i primi cinque profili di carica-scarica a 0.1 C. Si noti che per i primi cinque cicli è stato riscontrato un trend crescente di capacità specifica, che è attribuibile all'ingresso graduale della soluzione elettrolitica all'interno delle particelle della materia elettrodica attiva e quindi all'aumento dei siti elettrochimicamente attivi sulla superficie di elettrodo. Di conseguenza, la capacità specifica di scarica dopo cinque cicli è pari a 140 mAh g^{-1} .

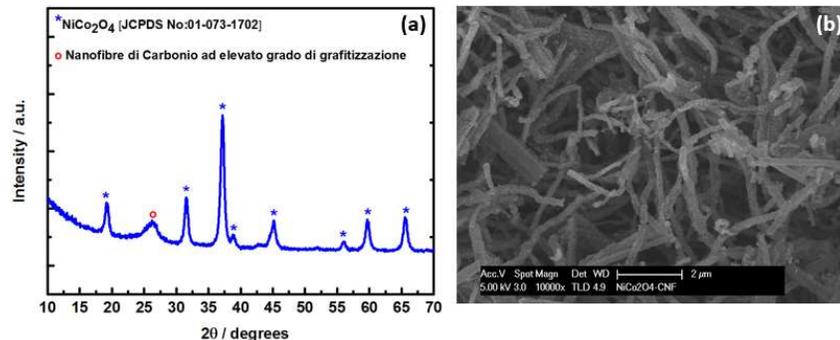


Cicli di carica-scarica a 0.1C; (b) Capacità specifica in funzione della densità di corrente del campione $\text{NaFePO}_4\text{-CNF}$.

I dati di capacità in funzione della densità di corrente (rate capability) sono caratteristici di un materiale avente un'elevata area attiva in cui le nanoparticelle di NaFePO_4 sono uniformemente distribuite sulle nanofibre di carbonio e pertanto sono facilmente accessibili all'elettrolita e adatti ad una più rapida diffusione degli ioni Na^+ ed elettroni durante i processi di carica-scarica. Inoltre, l'elevata conducibilità elettrica dovuta alle nanofibre di carbonio, favorisce il trasporto ionico/elettronico migliorando ulteriormente le prestazioni elettrochimiche. I risultati ottenuti sono di grande interesse per l'applicazione del materiale $\text{NaFePO}_4\text{-CNF}$ come catodo per batterie sodio-ione tenuto conto che si tratta di un materiale "binder free" ottenuto mediante tecnica a basso costo e che consente di ottenere buone prestazioni elettrochimiche senza l'utilizzo di carbonio aggiuntivo e leganti poiché il carbone è già inserito nel materiale durante il processo di sintesi.

Come previsto da progetto, la LA 1.11, focalizzata su batterie sodio-aria, si è concentrata sulla sintesi di materiali idonei a favorire il processo di ORR in fase di scarica al compartimento catodico, laddove viene alimentata aria. Ad oggi è stato sintetizzato e caratterizzato chimicamente il materiale composito a base di nickel cobalto ossido spinello con nanofibre di carbonio ($\text{NiCo}_2\text{O}_4\text{-CNF}$) mediante tecnica di electrospinning. Analisi XRD, SEM e BET sono state eseguite preliminarmente alla valutazione elettrochimica allo scopo di determinarne le caratteristiche strutturali e morfologiche del materiale. Le immagini riportate nella figura sottostante mostrano la qualità del campione ottenuto, caratterizzato da una struttura a spinello e da una adeguata distribuzione delle particelle lungo le nano fibre sintetizzate. Un'elevata percentuale di

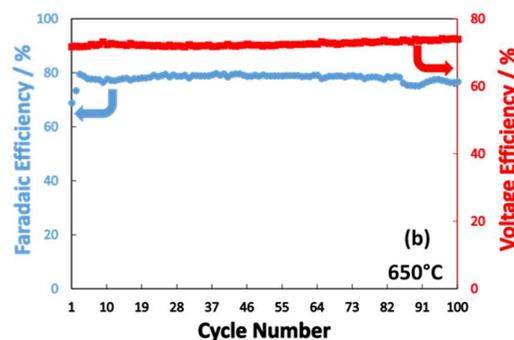
mesopori (circa 60%) ed un valore dell'area superficiale pari a $153 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ rappresentano proprietà importanti al fine di favorire il processo di evoluzione e riduzione dell'ossigeno (OER ed ORR).



Spettro XRD (a) e analisi SEM (b) del campione NiCo_2O_4 -CNF.

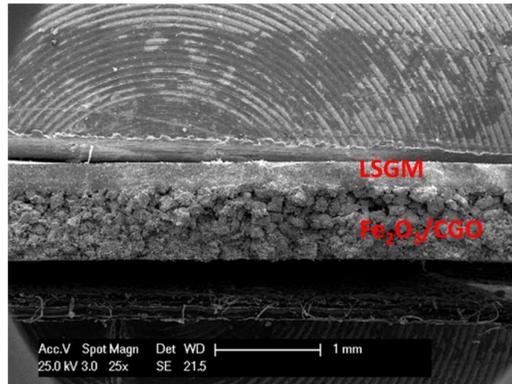
L'attività sulle batterie metallo-aria alcaline (a bassa temperatura) (LA 1.14) ha riguardato principalmente la valutazione di altri metalli per l'utilizzo all'elettrodo negativo al posto del Ferro, quali Zinco, Alluminio, etc. E' stata analizzata la letteratura corrente su queste tipologie di batterie (a base di Zn e Al) che presentano una differenza di potenziale teorica superiore a quella del Ferro (1.28 V per il Fe, 1.65 V per lo Zn e 2.71 V per l'Al), permettendo di aumentare la densità di energia della batteria, anche se da questa analisi risulta che l'Al è principalmente utilizzato in batterie primarie (non ricaricabili elettrochimicamente). Sono state progettate configurazioni di cella in grado di allocare l'elettrodo di Zn e un separatore polimerico tra i due compartimenti elettrolici, visto che la reazione di ossidazione dello Zinco prevede la formazione di idrossido di Zn che è solubile in soluzione acquosa (al contrario dell'idrossido di Fe). Ancora, a causa delle restrizioni in atto, si è in attesa di poter realizzare i prototipi ed avviare i test presso i laboratori.

Relativamente alla LA 1.17, sono stata ottimizzati gli studi di caratterizzazione in termini di durata, 100 cicli e 85 h. E' stata dimostrata una elevata stabilità, una "round efficiency" del 53.7% con una efficienza faradica dell'80%. Questi risultati sono estremamente promettenti e si ritiene che un ulteriore avanzamento potrà essere ottenuto assemblando celle ad elettrolita sottile.



Parallelamente, è stata realizzata una cella da 1 cm^2 ad elettrodo supportante, in linea con quanto pianificato per il SAL 2020. Le prime prove elettrochimiche hanno messo in evidenza problemi di perdite faradiche (scarica spontanea) causati da una non ottimale densificazione dell'elettrolita che in queste prove preliminari non è riuscita ad essere una

barriera ottimale alla percolazione dell'ossigeno. Queste criticità potranno essere superate con ulteriori prove di deposizione e densificazione.



All'interno della LA 1.20, inerente studi su batterie litio-ione, sono stati definiti i protocolli di prova per l'avvio della campagna di test d'invecchiamento e identificate le batterie da testare. I campioni di batteria al litio ione sono stati acquisiti. Sono stati effettuati i set-up di prova, operando contestualmente sulla programmazione del ciclatore. Parallelamente, sono state valutate preliminarmente possibili metodologie d'implementazione di un modello d'invecchiamento semi-empirico.

Test su alcuni algoritmi di machine learning (LA 1.21) sono stati eseguiti a seguito di dati preliminari forniti dal CNR ed inerenti misure di impedenza delle batterie al variare dello stato di carica. A seguito di tale analisi preliminare è stato osservato che la rappresentazione dell'impedenza in forma polare permette di ottenere modelli più accurati rispetto a quelli estratti da una rappresentazione in forma rettangolare. Allo stato attuale dell'attività si ritiene che le tecniche più congeniali per gli obiettivi del progetto siano le tecniche di tipo Random Forest poiché rispetto ad altre tecniche (es. Support Vector Machines e reti neurali) portano a modelli più facilmente interpretabili e presentano una ridotta complessità computazionale.

WP2- Accumulo Termico

Al fine di condurre uno studio sulle proprietà e caratteristiche delle microfibre per l'accumulo termico (LA 2.2), l'attività è stata rivolta verso materiali adsorbenti che andranno a costituire la componente attiva delle microfibre. I materiali adsorbenti individuati per la sintesi delle microfibre sono: 1) la zeolite Y a struttura allumino-silicosa, 2) la zeolite SAPO-34 a struttura alumino-fosfo-silicosa e 3) il gel di silice.

Parte della zeolite Y ad alto contenuto di silicio è stata poi utilizzata per trattamenti di scambio ionico a base di ioni di terre rare (La(III), Ce(III), Pr(III), Nd(III) e Sm(III)) al fine di introdurre modifiche nella struttura del materiale e quindi nel suo comportamento all'adsorbimento. La zeolite SAPO-34 è stata sintetizzata a partire dalla formulazione di base ottimizzata per l'adsorbimento di acqua (Al₂O₃:1P₂O₅:0.6SiO₂:0.7TEA₂O:70H₂O) variando la composizione e le condizioni di reazione in modo da ottenere un materiale con diversa dimensione delle particelle. Sono state ottenute zeoliti SAPO-34 con granulometria grande (dimensioni particelle > 10 μm), medie (dimensioni tra 5 e 1 μm) e piccole (dimensioni < 0.5 μm).

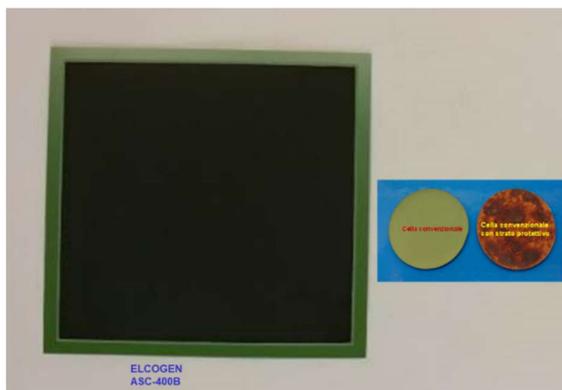
Tutte le zeoliti sintetizzate sono state caratterizzate mediante analisi diffrattometrica a Raggi X e microscopia elettronica a scansione SEM accoppiata con sonda per

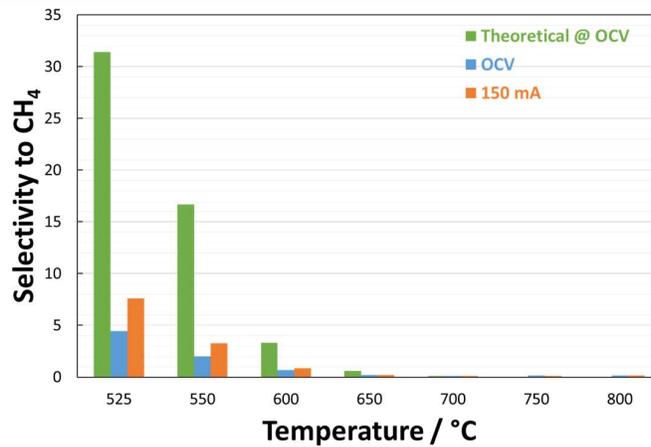
spettroscopia EDX al fine di determinarne composizione e grado di purezza. Sono in corso le misure per la determinazione delle isobare di adsorbimento dei materiali sintetizzati. I materiali sintetizzati che risulteranno più promettenti dal punto di vista della capacità di adsorbimento verranno utilizzati nelle attività successive per la produzione delle microfibre ibride.

LA2.3 - Le attività sono state indirizzate verso la caratterizzazione dei materiali ibridi microporosi costituiti da una fase polimerica ed una inorganica (alluminio fosfatici, e/o gel di silice impregnato con sali inorganici) ad elevata capacità di assorbimento tramite misure di spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier in riflettanza totale attenuata (ATR-FTIR). Nello specifico, l'analisi dello spettro FT-IR ha permesso lo studio del meccanismo con il quale i materiali polimerici (da soli o in miscela) influenzano la morfologia e le proprietà chimico-fisiche dei materiali ottenuti.

WP3- Power to Gas

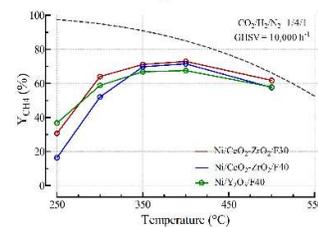
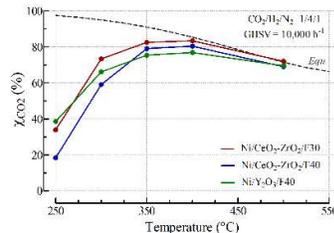
L'attività inerente la LA 3.2 è stata condotta verso la sintesi di un nuovo materiale per applicazioni in sistemi di co-elettrolisi su celle a larga area. In particolare è stata sviluppata una perovskite a base di ferro e lantanio drogata con cobalto e stronzio (LSFC) modificata con l'aggiunta di piccole quantità di Ni (3 % in peso). È stato dimostrato che proprio l'aggiunta di Ni ed i trattamenti termici necessari per la modifica del materiale in una perovskite exolved hanno costituito la "driving force" per la formazione di nuove fasi solide (struttura Ruddlesden-Popper che "incastona" particelle $\alpha\text{-Fe}_{100-y-z}\text{Co}_y\text{Ni}_z\text{O}_x$) con caratteristiche di elevata attività per il processo di metanazione. Per comodità, questo materiale viene identificato con Ni-LSFCO ed è stato adottato come pre-layer per una cella a larga area da 100 cm². Ne è seguita una fase di trattamento termico condotta a 900 °C per 2h all'uopo di migliorare l'adesione del coating sul supporto. La cella è stata successivamente tagliata in celle bottone da 5 cm² per adattarsi alla stazione di prova.





Lo studio di co-elettrolisi eseguito su questa cella ha mostrato che il processo elettrochimico tende a promuovere la conversione catalitica migliorando sensibilmente la qualità del gas in uscita, specie a temperature prossime a 500 °C laddove anche la termodinamica è più favorevole all’ottenimento diretto di metano.

Le attività di scale-up di catalizzatori strutturati in forma di schiume a celle aperte (LA 3.4) ad alta conducibilità con proprietà bidirezionali si inseriscono nell’ambito dello sviluppo di un processo innovativo reversibile di co-elettrolisi (SOEC) ad alta temperatura con metanazione integrata per il riuso della CO₂ sequestrata e la produzione di energia elettrica (SOFC) da syngas prodotto dal reforming di gas. L’utilizzo di sistemi strutturati ad alta conducibilità (100-300 Wm⁻¹K⁻¹) è finalizzato quindi alla realizzazione di reattori di metanazione che consentano di operare simultaneamente con un adeguato controllo del trasferimento di massa e calore, basse cadute di pressione, elevata velocità spaziale e elevata superficie di reazione esposta ai reagenti in modo da superare alcune limitazione tipiche dei letti impaccati tradizionali (hot spot, disattivazione del catalizzatore, elevate cadute di pressione e difficile gestione del calore associato alla reazione). Parte dell’attività sperimentale prevista per il 1° semestre 2020 è stata rallentata dal “lock-down” dovuto alla pandemia di COVID-19, durante il quale, tuttavia, sono stati espletati tutti gli ordini relativi all’approvvigionamento di tutti i supporti strutturati (SiC, Alluminio, Fecralloy) necessari per la preparazione dei catalizzatori. Il limitato tempo a disposizione per le attività sperimentali è stato finalizzato quindi alla deposizione delle migliori formulazioni, identificate nei semestri precedenti per la metanazione a bassa temperatura, su schiume ceramiche. I risultati confermano le ottime performance dei catalizzatori a base di Ni/Y₂O₃ e Ni/CeO₂-ZrO₂ (figura 1a).



a)

b)



Figura 1: a) Attività catalitica delle schiume preparate; b) Risultati preliminari del pretrattamento di supporti in alluminio (deposizione di uno strato di Al_2O_3 tramite anodizzazione).

Una parte delle attività è stata orientata alla messa a punto e ottimizzazione (Amp./dm², durata del trattamento, concentrazione della soluzione) del sistema di pretrattamento dei supporti metallici tramite anodizzazione, per la deposizione di uno strato di allumina su superfici di alluminio (figura 1b) per migliorare il coating del catalizzatore. È stata anche allestita la stazione di prova per i test di metanazione a bassa temperatura in “bench-scale” per lo scale-up delle schiume metalliche. Le attività svolte e le informazioni ottenute consentiranno, tuttavia, di accelerare i tempi nel secondo semestre del 2020 per il raggiungimento degli obiettivi prefissati.

Il primo periodo di attività relativamente alla LA 3.6 è stato impiegato per la scrittura di un codice in linguaggio Fortran che permettesse l'individuazione degli stati di transizione su sistemi periodici nel campo della catalisi eterogenea. Il programma implementa l'approccio Nudged Elastic Band (NEB) in una variante che fa uso delle seguenti caratteristiche: 1) climbing image e descending image, per una accurata localizzazione degli stati di transizione e di eventuali intermedi non noti, rispettivamente, lungo il cammino di minima energia nell'ipersuperficie di energia potenziale; 2) image depending pair potential, un'interpolazione lineare sulle distanze interatomiche per una migliore creazione delle immagini relative al NEB; 3) dynamic springs, che garantiscono una connessione smussata delle immagini; 4) ottimizzatore Fast Inertial Relaxation Engine, unito a un uso intelligente della memoria del processo iterativo. Il codice di cui sopra è stato interfacciato con il programma Siesta, che si occupa del calcolo dell'energia e delle forze, e la sua validità è stata verificata tramite il confronto con cinetiche di reazioni note. La sua realizzazione ci ha permesso di cominciare ad investigare la reazione di metanazione della CO_2 catalizzata dal nichel. Il modello di catalizzatore scelto è uno slab di tre strati di nichel fcc (per un totale di 54 atomi, con costante di supercella uguale a 10,55 Å lungo le direzioni periodiche e 30 Å di vuoto nella direzione perpendicolare). Sono stati ottenuti risultati sul primo stadio della reazione: la CO_2 si chemisorbe fortemente sul nichel (energia d'interazione pari a 1,62 eV) e viene attivata verso la frammentazione, che avviene con il superamento di una barriera d'attivazione di 0,38 eV, per dare un prodotto (CO+O)/Ni con un rilascio di energia di 1,20 eV. Sono incorso le indagini degli stadi successivi e le possibili ramificazioni.

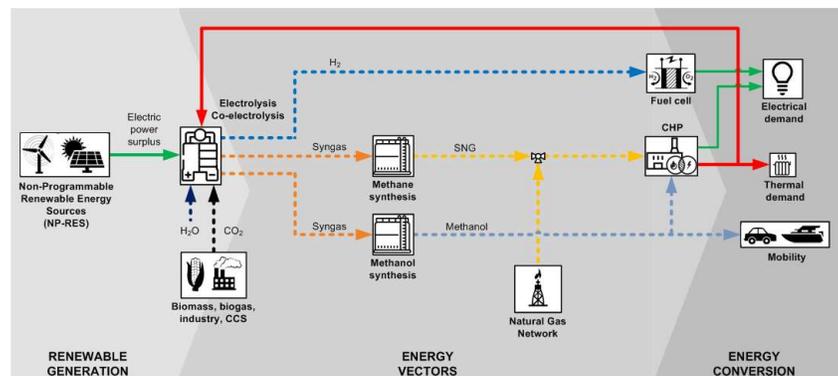
L'attività della LA 3.7 ha riguardato la valutazione della stabilità dei materiali catalitici per le reazioni di metanazione tramite test di durata. In particolare è stato avviato un test di durata su un catalizzatore strutturato in forma di monolite avente formulazione 25%Ni/GDC su supporto strutturato cordieritico. I risultati attualmente conseguiti dall'analisi, per un tempo di reazione di circa 50 h, mostrano un'attività catalitica stabile esibendo valori di conversione della CO_2 pari a 50 ± 3 % e di H_2 pari a 35 ± 3 %, la selettività valutata su base secca è al 100% per il metano.

L'analisi cinetica del processo reversibile di metanazione/reforming (LA 3.8) ha visto la definizione del piano di prove di attività catalitica richieste per il quale sono stati identificati opportuni modelli cinetici sulla base di un'analisi di letteratura. Sono stati inoltre approntati programmi di calcolo atti a stimarne i parametri adattivi mediante regressione non lineare di dati sperimentali.

All'interno della LA 3.10, è stata condotta una analisi delle tecnologie di accumulo esistenti, relazionandoli con i bisogni attuali e futuri del sistema elettro-energetico.

Sono stati trattati alcuni aspetti che debbono essere tenuti in conto nel dimensionamento del futuro sistema elettro-energetico (quali il mix di produzione, i tipi di servizi offerti dall'accumulo, il ruolo del carico) ed è stata presentata una disamina dei diversi tipi di accumulo. Infine, i diversi accumuli sono stati messi in relazione con i diversi servizi.

L'attività LA 3.12 è finalizzata all'analisi delle prestazioni di un innovativo sistema di accumulo di tipo Power-to-Gas (P2G), che presenta l'accoppiamento di un co-elettrolizzatore di tecnologia SOEC (Solid Oxide Electrolyte Cell) con una sezione di metanazione composta da reattori sia sperimentali che commerciali. L'obiettivo è quello di prevedere ed ottimizzare le prestazioni del sistema proposto in condizioni di input elettrico variabile, tipico della generazione da fonte rinnovabile non programmabile. A tal fine, è stato sviluppato un modello numerico del sistema complessivo, che incorpora specifici sotto-modelli per simulare il comportamento dei singoli componenti. In particolare, il modello termodinamico ed elettrochimico è stato implementato in ambienti software commerciali, integrando al suo interno curve predittive di comportamento e dati sperimentali relativi ai principali componenti innovativi (SOEC e sezione di metanazione), prevedendo sinergie tra i componenti ed includendo i principali ausiliari energivori del sistema. L'attività prevede l'utilizzo di profili di generazione elettrica rinnovabile e lo studio di diverse configurazioni del sistema di accumulo proposto, per valutare parametri tecnici di interesse, quali ad esempio il tempo di funzionamento del sistema, i flussi energetici e la produzione di gas naturale sintetico.



Sono stati elaborati gli schemi base del sistema di bio-produzione idrogeno (LA 3.15), figura 1. Lo schema messo a punto prende a riferimento impianti di produzione industriale a flusso continuo e definisce i parametri fondamentali di funzionamento per la realizzazione di un prototipo di laboratorio che sia in grado di dimostrare la validità e fattibilità del concetto. Nella fase di "lavoro agile" si è provveduto a disegnare un primo prototipo di reattore la cui realizzazione sarà oggetto dei prossimi mesi.

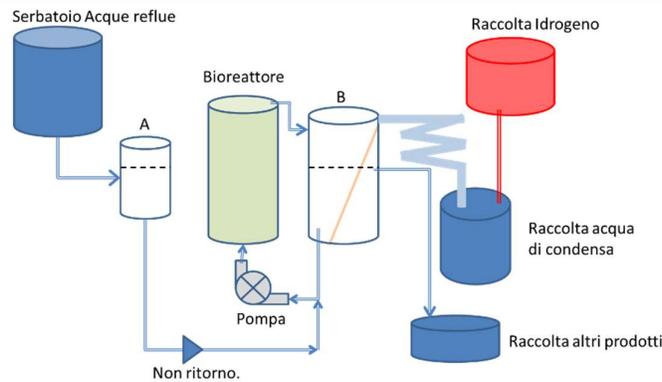


Fig.1

L'attività 4.2 è stata volta all'analisi degli eco-profilo (LCI) dei componenti di batterie Sodio-metallo cloruro e Flow-redox sviluppate in seno al progetto. Sono state condotte preliminari analisi dei database Ecoinvent e letteratura recente al fine di aggiornare gli LCI che sono stati utilizzati per l'analisi del ciclo di vita e gli impatti ambientali attesi. Sono stati raccolti di dati primari e creati i dataset utili alla definizione degli ecoprofilo. Come ulteriore attività sono stati definiti i processi di sintesi e le caratteristiche quantitative e funzionali di batterie sodio-aria e su semicoppie redox alternative al vanadio, avviata la raccolti i dati primari e creati i dataset utili alla definizione degli ecoprofilo di tali batterie.

La prima fase dell'attività LA 4.3 ha riguardato l'applicazione del primo step metodologico della Life Cycle Assessment (LCA), che riguarda la definizione degli obiettivi dello studio e del campo di applicazione.

In dettaglio, l'obiettivo dello studio è la quantificazione degli eco-profilo di batterie sodio-metallo cloruro e flow-redox lungo l'intero ciclo di vita tramite l'applicazione della metodologia LCA, in conformità agli standard internazionali della serie ISO 14040.

Successivamente è stata selezionata l'unità funzionale, sono stati selezionati i confini del sistema e sono stati definiti i vari aspetti metodologici connessi all'applicazione della LCA, quali ad es. regole di cut-off e potenziali procedure di allocazione. In dettaglio, con riferimento alla stima degli impatti energetico – ambientali connessi al ciclo di vita del sistema esaminato sono stati selezionati i seguenti metodi di calcolo:

- Cumulative Energy Demand (CED), per il calcolo dei consumi di energia primaria suddivisa in rinnovabile e non rinnovabile;
- ILCD 2011 Midpoint, sviluppato dalla Commissione Europea, Joint Research Centre nel 2012 per il calcolo degli impatti ambientali.

Nell'ambito della valutazione degli ecoprofilo dei processi di sintesi e formatura dei catalizzatori (LA 4.5) è stato effettuato l'inventario ossia la compilazione dei flussi in ingressi e in uscita dalla fase di estrazione delle materie prime alla fase precedente a quella di uso (cradle to gate). Da questa attività è emerso, in conformità con i limiti noti della tipologia di approccio, che la valutazione dell'ecoprofilo delle formulazioni dei catalizzatori impiegati è limitata alla scarsità dei dati nei database consultati (GaBi, Ecoinvent). I dati presenti sono inoltre presenti sotto forma di dati aggregati e non tengono conto della varietà compositiva dei materiali a base di elementi delle terre rare. Pertanto sono stati implementati dei modelli di processo considerando diversi scenari relativi alla produzione dell'ossido di cerio e dell'ossido di gadolinio. Inoltre, sono stati analizzati i possibili scenari relativi ai diversi metodi di sintesi e preparazione dei catalizzatori ed è stata effettuata un'analisi di sensibilità legata alla variazione del parametro compositiva dei catalizzatori.

	<p>In questa prima fase dell'attività (LA 4.6) è stata svolta un'indagine di letteratura sugli studi di analisi del ciclo di vita (Life Cycle Assessment – LCA) applicati ai sistemi integrati SOEC/reattore, al fine di identificare le pratiche più idonee alla gestione delle principali criticità connesse all'applicazione della metodologia LCA ai suddetti sistemi, in accordo con gli standard internazionali ISO 14040 e ISO 14044 del 2006. L'analisi si è focalizzata sugli aspetti principali relativi alla fase di definizione dell'obiettivo e del campo di applicazione (Goal and Scope Definition).</p> <p>L'analisi ha avuto come obiettivo l'identificazione della tipologia di studio LCA più idonea alla valutazione degli impatti energetico – ambientali connessi al sistema investigato e all'obiettivo dello studio. In secondo luogo, si è proceduto con l'identificazione dell'unità funzionale più idonea per rappresentare le caratteristiche prestazionali del sistema in esame, sulla base della funzione principale svolta dallo stesso. Un altro aspetto metodologico ha riguardato la definizione dei confini del sistema e le regole di cut-off, attraverso i quali sarà possibile identificare le fasi del ciclo di vita, le unità di processo e i flussi in ingresso o in uscita da includere nella LCA. Infine, sono stati analizzati i metodi di valutazione degli impatti ambientali, allo scopo di selezionare tutte le categorie di impatto ambientale su cui il sistema in esame potrebbe potenzialmente contribuire.</p> <p>I risultati di questa prima fase sono propedeutici allo svolgimento dell'attività successiva per la stima delle prestazioni energetico-ambientali di un sistema integrato SOEC/reattore.</p>