

### Summary

Il gruppo di ricerca SusCheOpe si dedica allo sviluppo di tematiche di ricerca innovative di potenziale interesse industriale nel campo della reattività chimica, in particolare promossa tramite catalisi eterogenea, delle separazioni e della simulazione di processo.

- La reattività chimica viene studiata in diverse tipologie di reattori (batch, semibatch e continuo) e si dedica alla produzione di combustibili o materiali cercando materie prime e strategie con ricadute ambientali minori rispetto i processi tradizionali.
- I processi di separazione riguardano tecnologie quali distillazioni (batch e continuo), assorbimenti e separazioni solido-gassose (adsorbimento).
- La simulazione di processo è basata su innovativi software tramite i quali potere riprodurre svariati tipi di processi o parti di essi. La simulazione di processo, a volte accoppiata con l'attività sperimentale, consente analisi e ottimizzazione di nuove tecnologie e schemi di impianto.

LE TEMATICHE DI TIROCINIO TRIENNALE RICOPRIRANNO UNA PARTE CONGRUA E DESIDERATA DALLO STUDENTE ALL'INTERNO DELLE LINEE DI RICERCA QUI ILLUSTRATE

### Keywords

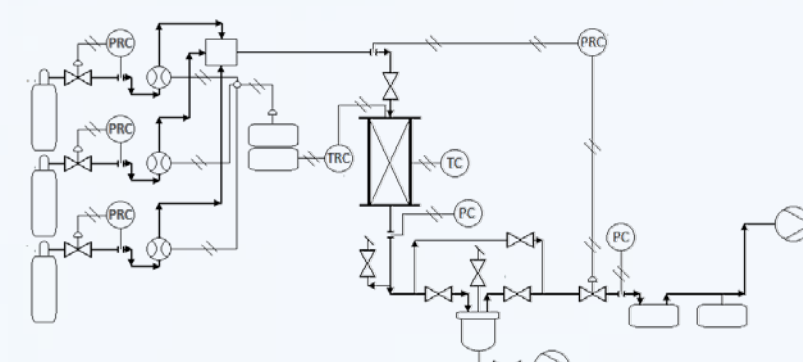
- Chimica Industriale
- Catalisi eterogenea
- Reattori chimici
- Colonne di separazione
- Simulazione di Processo

**Description:** Studio di nuovi materiali catalitici per la conversione di syngas o syngas + CO<sub>2</sub> (Biosyngas) in prodotti utili come metanolo o idrocarburi. In questa tesi il candidato utilizzerà l'impianto in continuo riportato nella figura, basato su un reattore a letto impaccato in grado di esercire fino a 30 bar e 400°C. Parte importante del lavoro sarà la preparazione e caratterizzazione (TEM, SEM, XPS, TPR, ICP) dei catalizzatori, che avverrà con diverse procedure di sintesi. La quantificazione analitica sarà effettuata mediante micro-GC, GC, TOC, HPLC. Inoltre, verrà eseguita la modellazione e simulazione del reattore, anche in collaborazione con un gruppo di ricerca di ingegneria del Politecnico di Milano.

**Keywords:** biosyngas, heterogeneous catalyst, methanol, Fisher-Tropsch, characterization, simulation

**Activities:** plant management and use (40%); catalyst preparation and characterization (30%); analytical activities (10%); literature research, data analysis, modeling and simulation (20%)

**Collaborations in this topic:** Politecnico di Milano, Polytechnique of Montreal, Università di Perugia



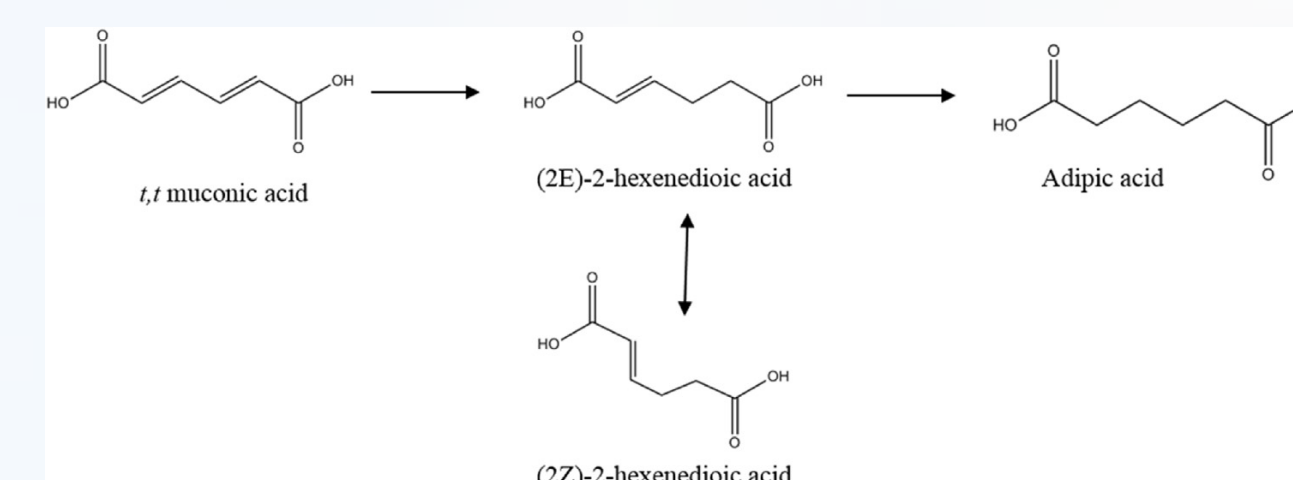
### 1. Fischer-Tropsch and methanol synthesis by heterogeneous catalysis

**Description:** L'acido adipico è un elemento costitutivo importante per la produzione del Nylon 6. Oggi viene prodotto a partire da fonti fossili con un processo caratterizzato da un impatto molto negativo dal punto di vista ambientale. Nuove ricerche vengono condotte in tutto il mondo per la sua produzione a partire da biomasse con processi green. In questo contesto, una possibilità è quella di produrre acido adipico in un processo a due fasi. Nel primo la biomassa viene trasformata in acido muconico mediante processi fermentativi e nel secondo l'acido muconico viene ridotto ad acido adipico in un reattore di idrogenazione con catalizzatore eterogeneo. Il nostro gruppo sta lavorando in questa seconda fase con diversi reattori e diversi catalizzatori.

**Keywords:** adipic acid, biomass, heterogeneous catalysis, reactor, simulation, LCA

**Activities:** literature research, data analysis, modeling and simulation (30%); experimental activities (70%)

**Collaborations:** Politecnico di Milano,



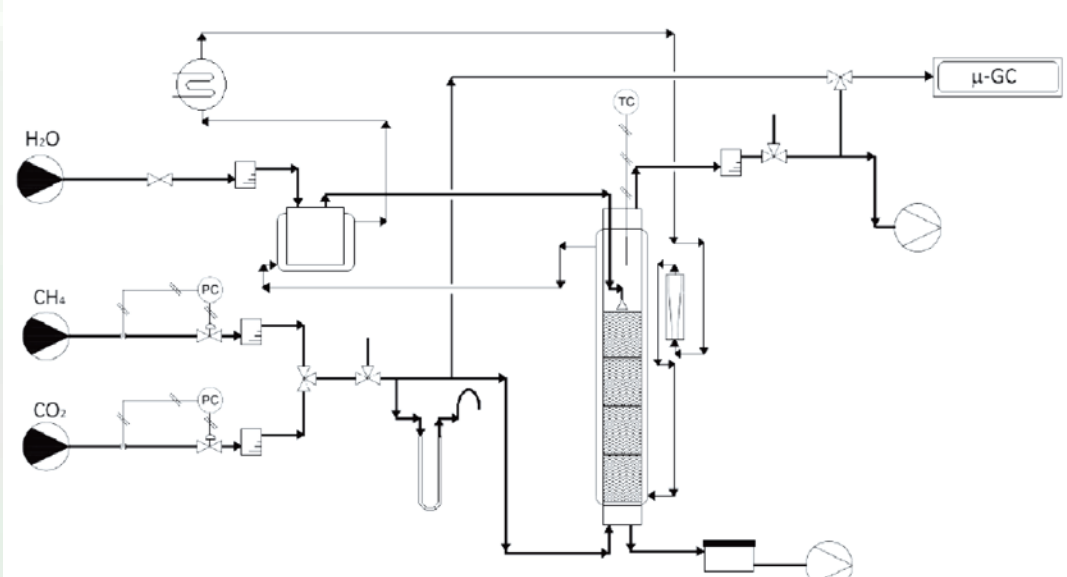
### 2. Production of adipic acid from biomass

**Description:** La purificazione dell'aria dai Composti Organici Volatili (VOC) è un problema industriale da affrontare in numerosi processi. Tra le varie tecnologie, la rimozione di questi composti mediante una colonna di assorbimento è una possibilità molto interessante. Nel lavoro, saranno considerati diversi composti VOC o miscele di essi in due diverse colonne di assorbimento, di altezza 1 m, per valutare la loro rimozione in diverse condizioni di esercizio e trovare la migliore soluzione tecnologica tra le svariate possibili. Saranno effettuate attività sperimentali e studi di simulazione per ottimizzare la tecnologia sia dal punto di vista chimico che economico.

**Keywords:** absorption columns, VOC, water-oil mixtures, simulation, LCA

**Activities:** literature research, data analysis, modeling and simulation (30%); experimental activities (70%)

**Collaborations:** Politecnico di Milano,



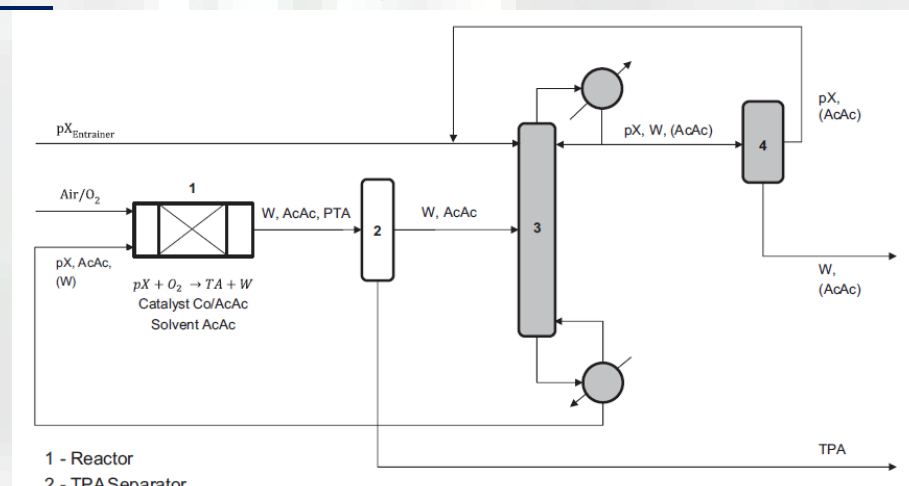
### 3. Purification of VOC by absorption columns

**Description:** La produzione di acido tereftalico avviene per reazione catalitica del p-xilene con ossigeno (o aria), utilizzando acido acetico come solvente, con la produzione di acqua come co-prodotto principale. La miscela acido acetico-acqua così prodotta deve poi essere separata mediante una costosa colonna di distillazione. Il nostro gruppo ha proposto una nuova configurazione di distillazione basata sull'uso dello stesso p-xilene come solvente estrattore. Tale tecnologia è stata ottimizzata tramite attività sperimentale, simulazione di processo e ottimizzazione tecno-economica. Ora, dovremmo verificare l'intera configurazione di impianto dell'acido tereftalico. Nuove prove sperimentali e nuove simulazioni di processo sono necessarie per proseguire nello studio applicativo della nuova tecnologia. Questa tematica è da considerare come un esempio del metodo di lavoro e degli argomenti di tesi a disposizione, da discutere oralmente, in questa linea.

**Keywords:** terephthalic acid, distillation column, azeotropic distillation, reactor, simulation, economical analysis

**Activities:** literature research, data analysis, modeling and simulation (50%); experimental activities (50%)

**Collaborations:** Politecnico di Milano



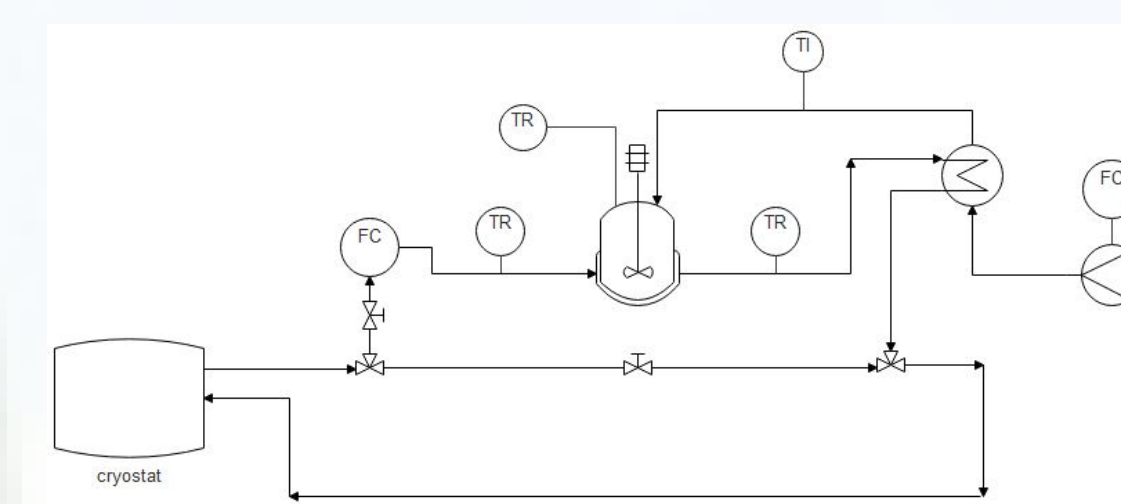
### 4. Terephthalic acid optimization process by improvement in distillation column

**Description:** Un reattore semi-batch (SBR) è una variante di reattore batch in cui un reagente viene aggiunto in modo intermittente o continuo a un altro contenuto come batch in un recipiente. Il reattore messo a punto nel gruppo di ricerca può essere condotto in modalità batch o semibatch e si presta alla raccolta di dati cinetici e alla verifica di bilanci di calore tra il calore prodotto dalla reazione e quello smaltito nella camicia esterno di scambio.

E' possibile prendere in considerazioni nel lavoro di ricerca diversi tipi di reazioni per le raccolte di dati che saranno alla base del design del reattore industriale e alla sua ottimizzazione.

**Activities:** literature research, data analysis, modeling and simulation (30%); experimental activities (70%)

**Collaborations:** Università dell'Insubria



### 5. Semibatch reactors for kinetic data and heat balances

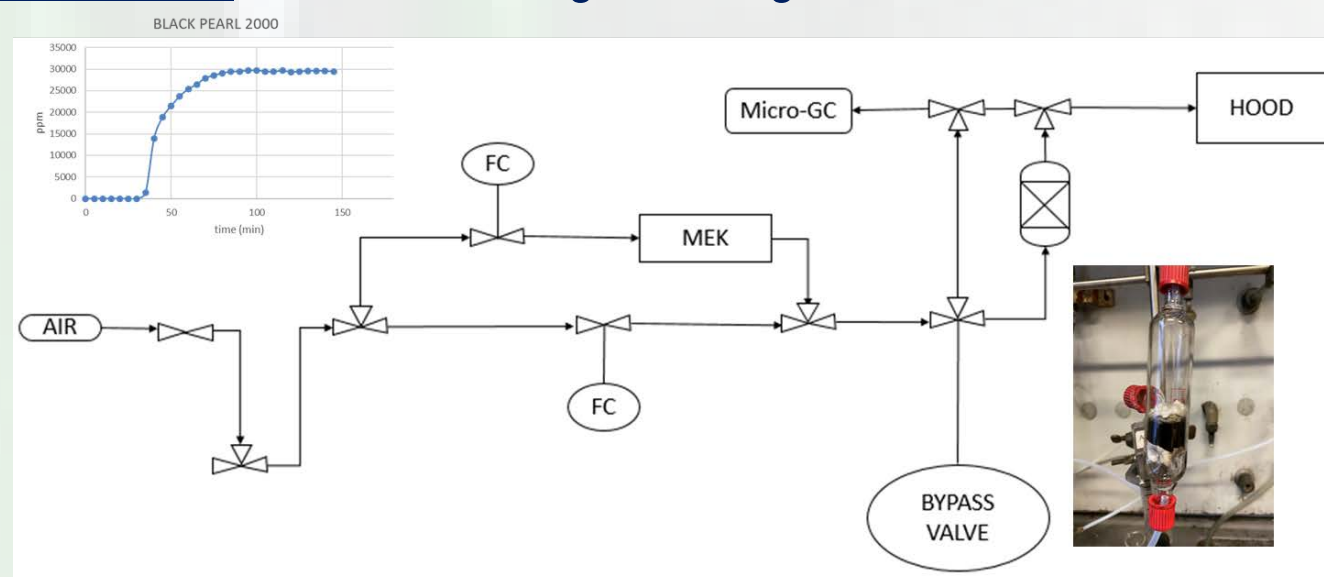


**Description:** Le normali cappe filtranti per la purificazione dell'aria sono limitate dalla necessità di rigenerazione o sostituzione periodica del materiale adsorbente. In questa tematica si vuole produrre un materiale adsorbente fotocatalitico capace di adsorbire le molecole inquinanti con elevata efficienza durante il funzionamento della cappa e entrare in rigenerazione fotocatalitica nel periodo di non attività della cappa. Il bilancio tra proprietà adsorbenti e presenza di materiale fotoattivo rappresenta il principale punto da ottimizzare nel lavoro.

**Keywords:** Adsorption processes, activated carbon, air purification, regeneration, titanium dioxide, photocatalysis.

**Activities:** literature research, data analysis, modeling and simulation (10%); experimental activities (90%)

**Collaborations:** Prof. Mariangela Longhi



### 6. Air purification by photoactive adsorption processes

### Collaborations

- Prof. Claudia Bianchi (Dip. Chimica)
- Prof. Ermelinda Falletta (Dip. Chimica)
- Prof. Ilenia Rossetti (Dip. Chimica)
- Prof. Mariangela Longhi (Dip. Chimica)
- Prof. Alberto Villa (Dip. Chimica)
- Prof. Flavio Manenti (Politecnico di Milano)
- Prof. Alessandro di Michele (Università di Perugia)
- Prof. Sabrina Copelli (Università dell'Insubria)
- Prof. Federico Galli, Daria Boffito (Polytechnique du Montreal, Canada)

### References

- Purification of air from volatile organic compounds by countercurrent liquid gas mass transfer absorption process, INTERNATIONAL JOURNAL OF THERMOFLUIDS (2020).
- Toward Scaling-Up Photocatalytic Process for Multiphase Environmental Applications, CATALYSTS (2021)
- Experimental Methods in Chemical Engineering: Process Simulation, THE CANADIAN JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING (2020)
- EYE4EDU: la realtà virtuale immersiva nell'impianto chimico ICP (2020).
- Sonophotocatalytic degradation of sodium diclofenac using low power ultrasound and micro sized TiO<sub>2</sub>, ULTRASONICS SONOCHEMISTRY (2020)
- Immersive virtual Crude Distillation Unit learning Experience: the Eye4edu project, COMPUTER CHEMICAL ENGINEERING (2020)

