



ALMA MATER STUDIORUM  
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA



ORGANIZZATO DA



Bologna: un hub di ricerca per lo sviluppo  
dell'idrogeno - 9 ottobre 2024

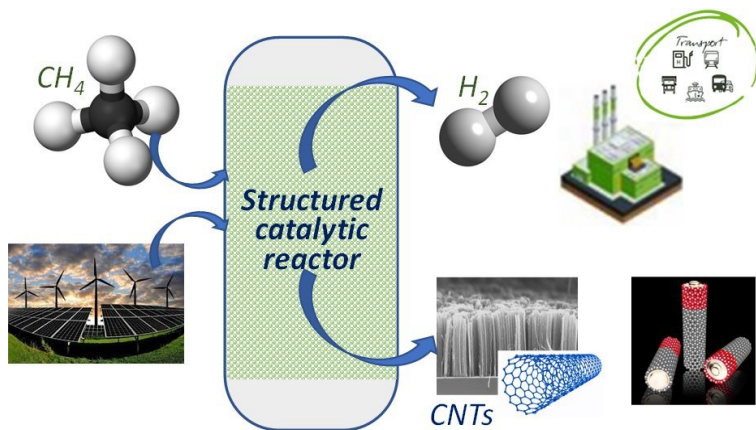
# Simulare la produzione di Idrogeno mediante dissociazione di Metano con Dinamica Molecolare ab initio e Machine Learning

Vito Foderà & M.C. Righi

Dipartimento di Fisica e Astronomia "A. Righi"  
Università di Bologna

**BolognaFiere 9-11 ottobre**

# Structured unconventional reactors for CO<sub>2</sub>-free Methane catalytic crackiNG

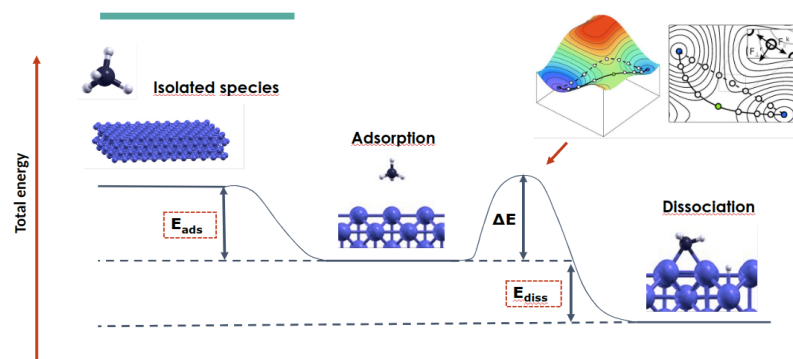


Sviluppare reattori catalitici innovativi per la dissociazione di metano e la produzione simultanea di **idrogeno** e **nanotubi di carbonio**.  
Processo CO<sub>2</sub>- free.

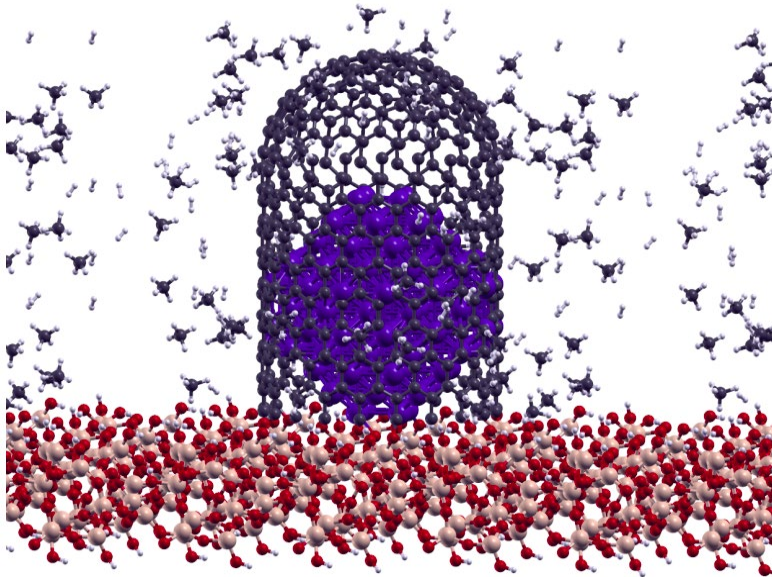


L'obiettivo principale del **WP2** è la **modellizzazione multiscala** per guidare lo sviluppo di catalizzatori e tecnologie catalitiche.  
Le task del nostro gruppo:

- Identificare il **sistema catalitico ottimale** mediante approcci **High-Throughput** degli effetti della composizione, delle dimensioni e del supporto delle nanoparticelle catalitiche.
- Fornire una **descrizione atomistica** della decomposizione del CH<sub>4</sub> e delle prime fasi di crescita dei nanotubi di carbonio (CNT) mediante **simulazioni multiscala** (MD, basate su **Force Fields** generati **ab initio** e ML).



## Processo di produzione di idrogeno e nanotubi di carbonio catalizzato da nanoparticelle



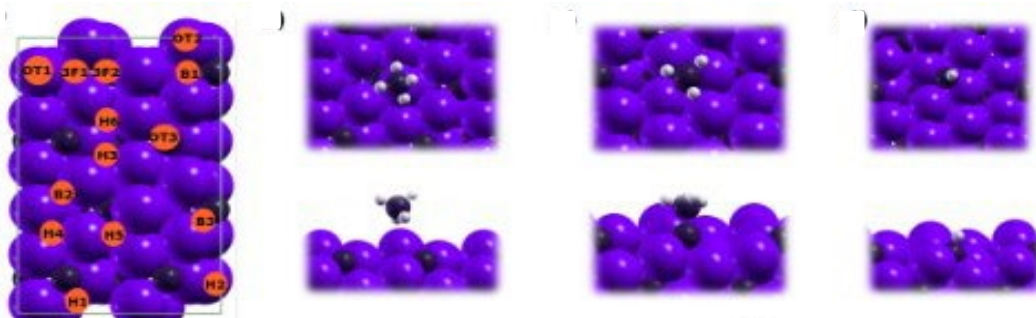
 ~700°C  
 1-5 bar  
 CH<sub>4</sub>

- Metano adsorbe sulla nanoparticella (NP) di ferro e dissocia liberando idrogeno.
- Gli atomi di carbonio diffondono all' interno della NP, convertendo il ferro in carburo di ferro.
- Raggiunta la supersaturazione, gli atomi di carbonio rimangono in superficie formando un "cap" grafítico che cresce con la forma di un nanotubo (CNT).

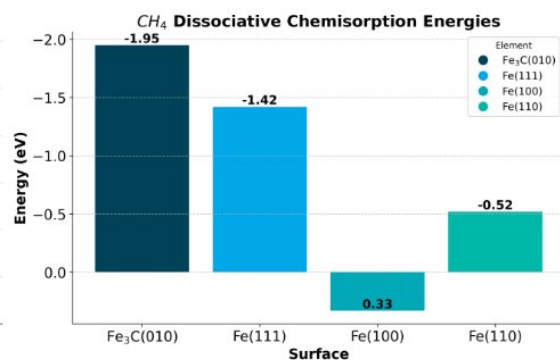
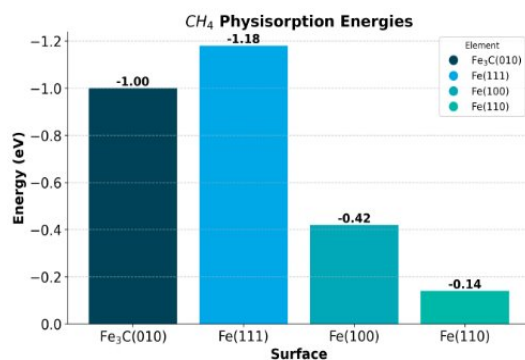
### Aspetti da chiarire:

- ruolo dei "promoters" nel favorire il processo di catalisi
- meccanismi atomistici che determinano "base growth" o "tip growth"
- meccanismi per ottenere il distacco del CNT dalla NP

## Risultati di simulazioni quantomeccaniche: adsorbimento e dissociazione

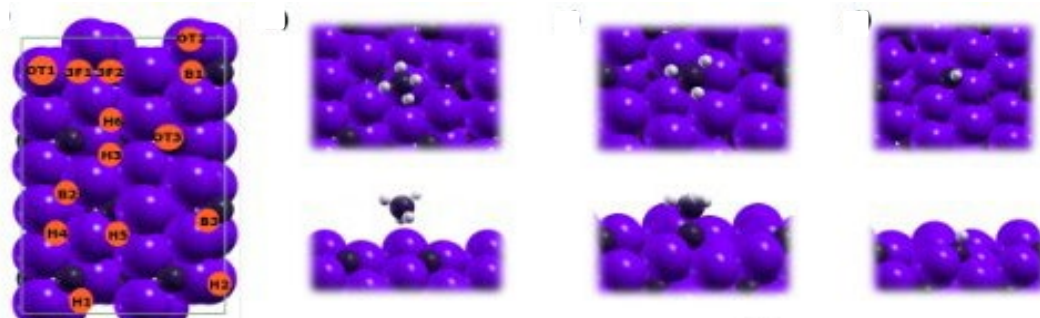


Effetto dell'orientazione delle superfici di ferro e carburo di ferro. Il processo è esoergonico per entrambi i materiali, ma più marcato per il carburo di ferro

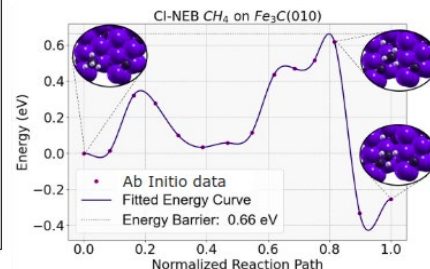
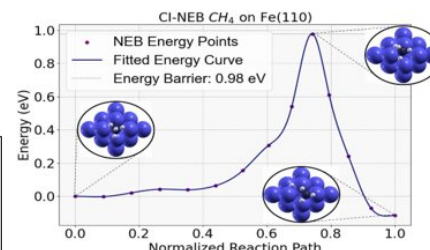
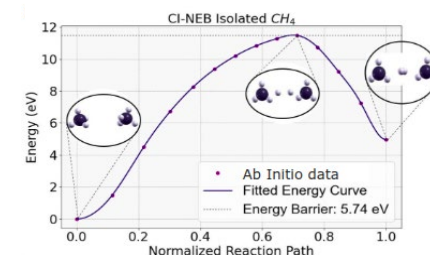
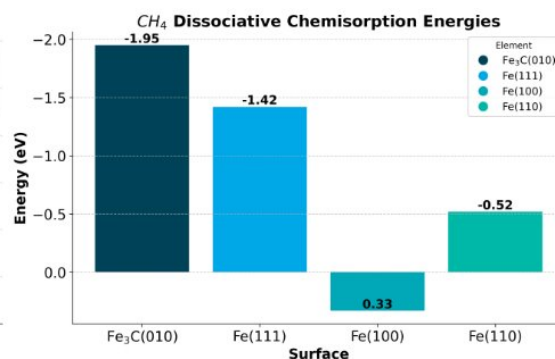
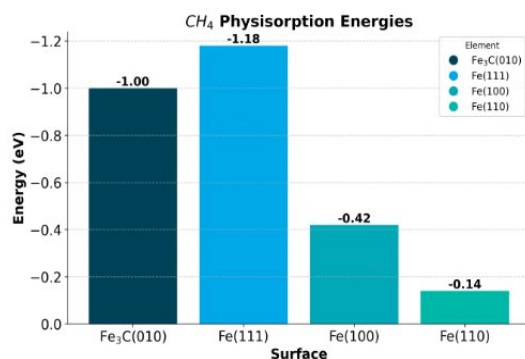




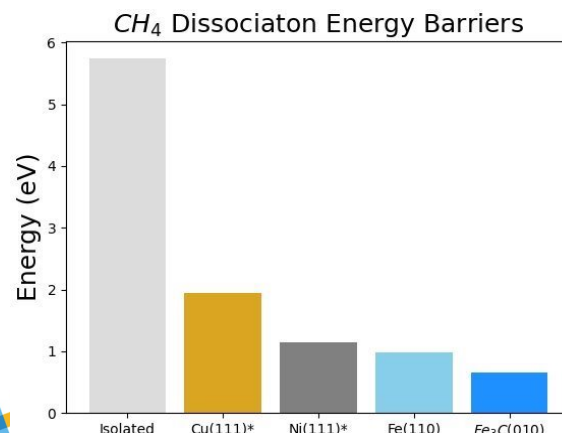
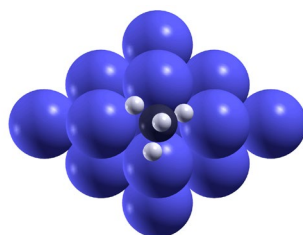
# Risultati di simulazioni quantomeccaniche: adsorbimento e dissociazione



Effetto dell'orientazione delle superfici di ferro e carburo di ferro. Il processo è esoergonico per entrambi i materiali, ma più marcato per il carburo di ferro



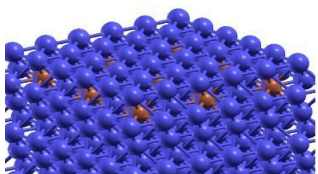
Energie di attivazione per il processo di dissociazione: materiali ferrosi migliori dei catalizzatori convenzionali



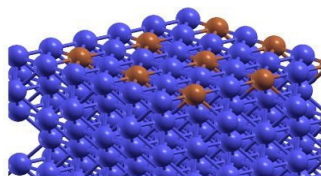
# Risultati ottenuti con la DFT e ab-initio MD

Effetto dei “promoters”. I promoters agiscono sul rate di dissociazione del metano e sulla diffusività del carbonio.

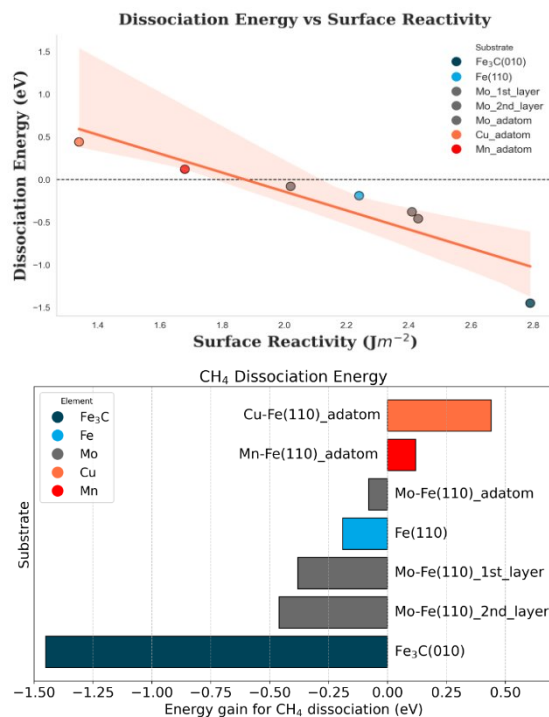
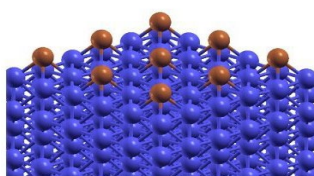
Cu exchange in Fe(110) 2nd layer



Cu exchange in Fe(110) 1st layer



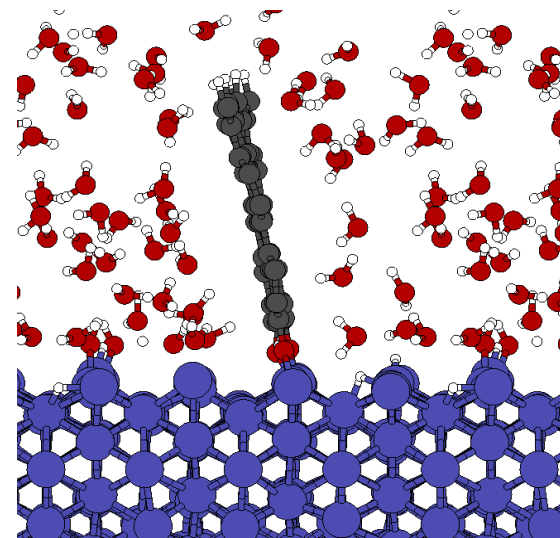
Cu adatom on Fe(110) surface



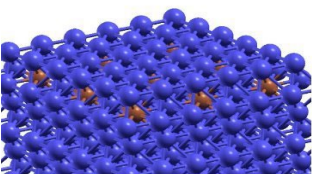
# Risultati ottenuti con la DFT e ab-initio MD

Effetto dei “promoters”. I promoters agiscono sul rate di dissociazione del metano e sulla diffusività del carbonio.

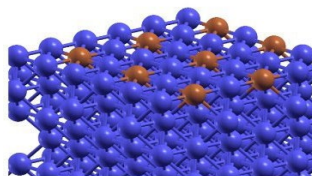
Meccanismi atomistici per il distacco controllato dei CNT attraverso “forbici chimiche”



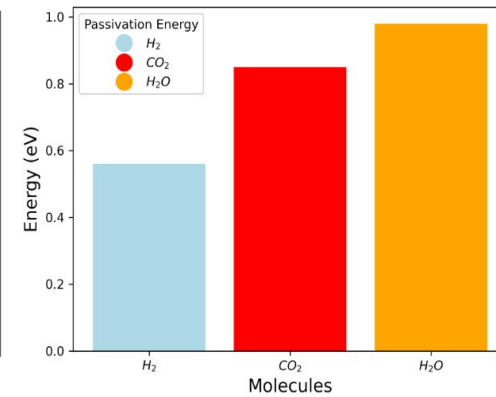
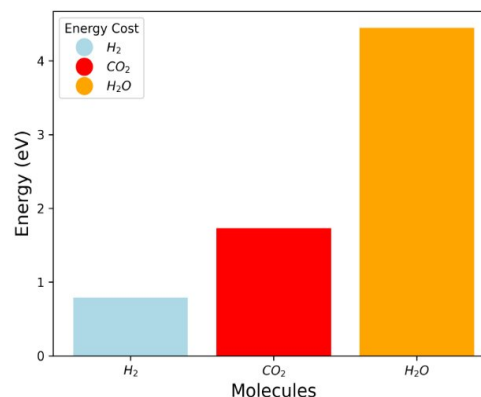
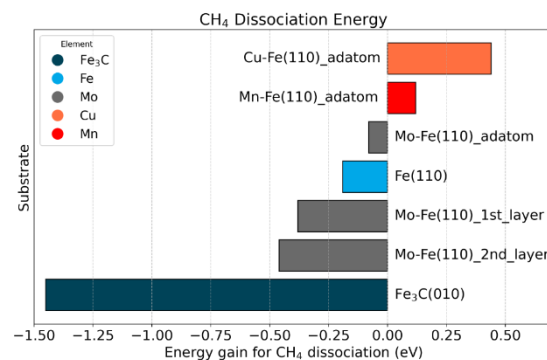
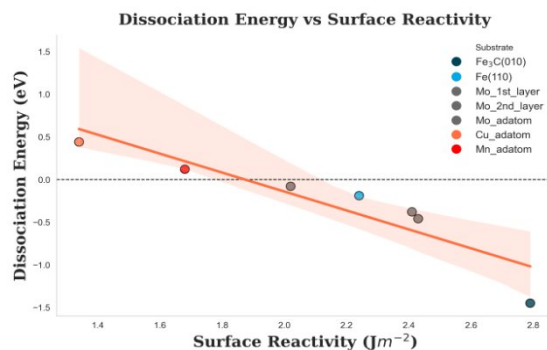
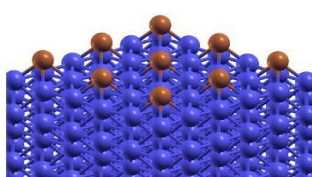
Cu exchange in Fe(110) 2nd layer



Cu exchange in Fe(110) 1st layer

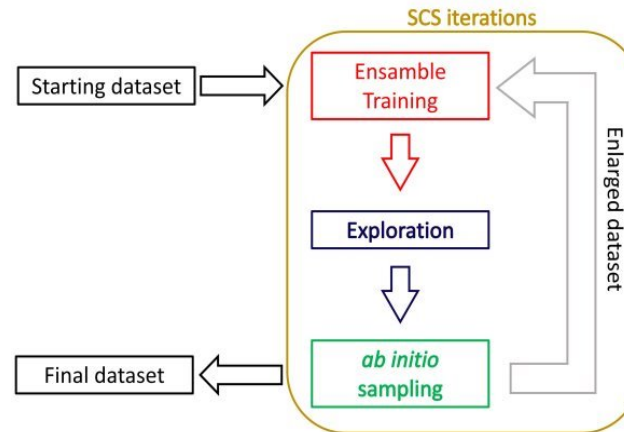
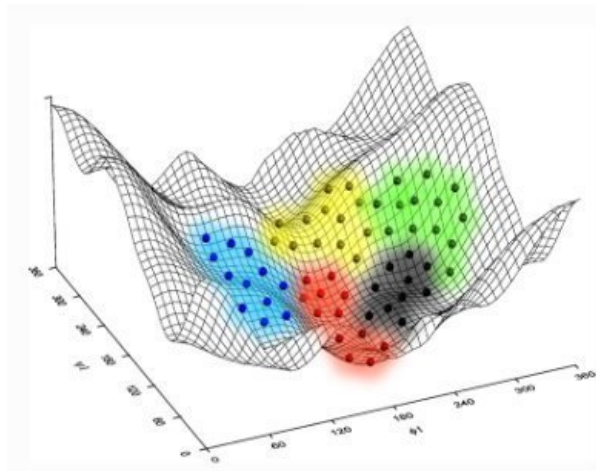


Cu adatom on Fe(110) surface



## Simulare i processi atomistici all' interno del reattore con il Machine Learning

- Dinamica molecolare basata su un approccio quantomeccanico -> computazionalmente molto onerosa
- Potenziali generati con Machine Learning -> permettono di aumentare la scala dei sistemi e gli intervalli di tempo simulati
- Potenziali addestrati utilizzando dati di simulazioni quantomeccaniche -> accuratezza comparabile ai calcoli ab initio



Software sviluppato dal nostro gruppo per training con approccio “active learning”

Pacini, A. *et al.* Advancing tribological simulations of carbon-based lubricants with active learning and machine learning molecular dynamics. *Eur. Phys. J. Plus* **139**, 549 (2024).



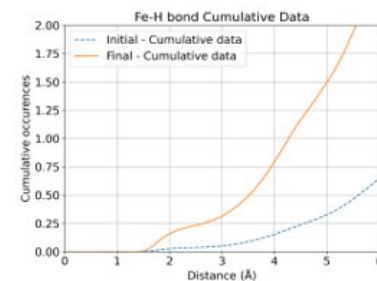
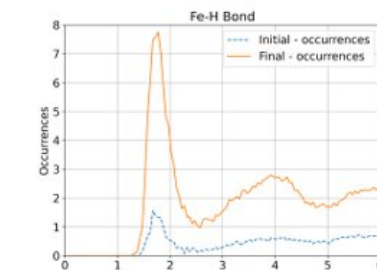
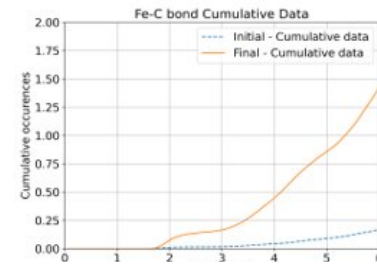
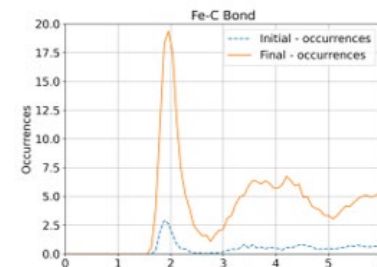
# Machine Learning Force Field Molecular Dynamics

Fe NP ~ 10.400 atoms

CH<sub>4</sub> ~ 2.000 molecules

T = 1200 K

Diametro NP ~ 7 nm





ALMA MATER STUDIORUM  
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

## Bologna: un hub di ricerca per lo sviluppo dell'idrogeno - 9 ottobre 2024

Credits:

**Vito Foderà & M.C. Righi**

Dipartimento di Fisica e Astronomia A. Righi  
Univerità di Bologna

[vito.fodera3@unibo.it](mailto:vito.fodera3@unibo.it)  
[clelia.righi@unibo.it](mailto:clelia.righi@unibo.it)

**BolognaFiere 9-11 ottobre**

[www.unibo.it](http://www.unibo.it)