

----- **Scheda di sub-task** -----

TE2.1

**Riciclo di materiali critici per l'energia e l'ambiente:
fondamenti chimici dei processi di recupero**

WP E - Energia e Green Economy

TE2 - Economia Circolare e Riciclo

Contribuisce al raggiungimento dei seguenti obiettivi:

Agenda ONU 2030



Piano Nazionale per la Ripresa e la Resilienza



Missioni e componenti PNRR:
M2c1, M4c2

La Commissione europea (CE) ha definito Critical Raw Materials, elementi chimici strategicamente importanti e con un alto rischio associato alla loro disponibilità. Numerosi CRM sono strettamente legati a settori industriali considerati strategici dalla CE, come evidenziato in un recente report “Critical Raw Materials for Strategic Technologies and Sectors in the EU, A Foresight Study” 09/2020. Attualmente, l'industria europea dipende in gran parte dalle importazioni di molte materie prime, molte non sostituibili nel breve periodo, e in alcuni casi è altamente esposta a vulnerabilità lungo la catena di approvvigionamento.

Tra gli elementi chimici considerati CRM ad elevato rischio si trovano svariate materie prime metalliche, in particolare: le terre rare (REE, “very high risk”), i metalli del gruppo del platino (PGM), Mg, Co, Sc, Sr, Nb. Il riciclo e riutilizzo di CRM a partire da componenti a fine vita è altamente auspicabile in un'economia circolare. Per riciclare un metallo da campioni liquidi derivanti dalla dissoluzione dei materiali costituenti dispositivi a fine vita, è necessario trasferirlo selettivamente dalla fase acquosa ad una seconda fase. Per quanto riguarda quest'ultima strategia, negli ultimi anni i liquidi ionici (sali liquidi a temperatura ambiente, o “room temperature ionic liquids”, RTIL) hanno dimostrato un grande potenziale come solventi “green” in numerose applicazioni in quanto presentano volatilità trascurabile, non infiammabilità, elevata stabilità termica, bassa tossicità, capacità di disciogliere specie neutre e cariche, e un'ampia finestra elettrochimica. Quest'ultima caratteristica è fondamentale, in quanto un metallo estratto selettivamente, può essere recuperato per elettrodeposizione. L'acquisizione di dati strutturali e termodinamici sulla natura dei metalli (struttura, speciazione) disciolti in RTIL costituisce un passaggio fondamentale nella comprensione e miglioramento dei processi di riciclo.

Il gruppo di Termodinamica e Modellizzazione (TherMo), attualmente costituito dai prof. Melchior e prof.ssa Tolazzi, oltre che a una dottoranda e un assegnista, applicherà la sua esperienza in metodi sperimentali e computazionali già sviluppati nello studio degli ioni metallici e della formazione di complessi in IL.

Il progetto si focalizza su CRM legati alle applicazioni nei settori dell'energia e ambiente: a) metalli del gruppo del platino (PGM) e b) elementi delle terre rare (REE). Il TE2.1 mira a ottenere dati-chiave sugli ioni metallici delle suddette categorie in IL e i risultati avranno potenziali ricadute nel miglioramento da un punto di vista della sostenibilità economica e ambientale delle attuali tecnologie di riciclo, al fine di ridurre la dipendenza dai materiali primari.

Le metodologie computazionali applicate saranno simulazioni di dinamica molecolare classica, sia sfruttando il cluster acquisito nel precedente PSD e cofinanziato dal gruppo TherMo, sia tramite accesso a centri di calcolo ad alte prestazioni (CINECA). Inoltre, verranno applicati calcoli quantomeccanici (DFT, AIMD) per l'ottenimento di proprietà elettroniche e lo studio della reattività dei metalli in RTIL. Da un punto di vista sperimentale, i laboratori e le strumentazioni (microcalorimetro, spettrofotometro, titolatori, dry box) verranno messi a disposizione per lo studio delle proprietà termodinamiche relative alla formazione di complessi tra metalli e ioni/molecole al fine di comprendere le specie che si formano in tali liquidi. Gli studi teorici e

sperimentali verranno condotti sia tramite collaborazioni interne all'ateneo che nazionali ed internazionali che il gruppo ha attive.

La struttura allo stato liquido verrà definita tramite l'uso di diverse tecniche, come per esempio l'assorbimento di raggi X tramite l'accesso a macchine di luce di sincrotrone. Tramite le collaborazioni si intende anche studiare le proprietà elettrochimiche di tali metalli/complessi e loro elettrodeposizione per il loro recupero dopo estrazione in RTIL.