

CUP : C39J24000050007

INTERVENTO : 1.1.1.1

DETERMINAZIONE : N° 53/DPH006



REACTED

RECONVERSIONE AVANZATA DI COMBUSTIBILI FOSSILIPER LA MOBILITA' IN VETTORI ENERGETICI DECARBONIZZATI

Sviluppo e Ingegnerizzazione di un processo di produzione di idrogeno attraverso l'accoppiamento di gassificazione umida e reazione di Water-Gas Shift per la massimizzazione della resa in idrogeno e cattura criogenica della CO₂, con l'obiettivo di ottenere vettori energetici decarbonizzati di valore in ambito di mobilità sostenibile

“ FINANZIATO CON IL CONTRIBUTO DELLA REGIONE ABRUZZO A VALERE SUL PR FESR ABRUZZO 2021-2027 ”

Avviso Pubblico Intervento 1.1.1.1 : “Sostegno a progetti di Ricerca e Innovazione delle imprese afferenti ai Domini tecnologici della Startegia Regionale di Specializzazione Intelligente RIS3 Abruzzo 21-27 ”



Cofinanziato
dall'Unione europea



REGIONE ABRUZZO

DIPARTIMENTO LAVORO E ATTIVITÀ PRODUTTIVE SERVIZIO PROGRAMMAZIONE, POLITICHE DELL'INNOVAZIONE E DELLA COMPETITIVITÀ

PROGRAMMA REGIONALE ABRUZZO FESR 2021-2027

Priorità: I. RICERCA, COMPETITIVITÀ E SVILUPPO

OBIETTIVO DI POLICY 1 – UN'EUROPA PIÙ COMPETITIVA E INTELLIGENTE

Obiettivo specifico 1.1 – Sviluppare e rafforzare le capacità di ricerca e di innovazione e l'introduzione di tecnologie avanzate

Azione 1.1.1. Sostegno a processi di ricerca, innovazione, sviluppo e trasferimento tecnologico

Avviso Pubblico

INTERVENTO 1.1.1.1

“Sostegno a progetti di Ricerca e Innovazione delle imprese afferenti ai Domini tecnologici della Strategia Regionale di Specializzazione Intelligente RIS3 Abruzzo 21-27”

“Regolamento (UE) n. 651/2014 del 17 giugno 2014 che dichiara alcune categorie di aiuti compatibili con il mercato interno in applicazione degli articoli 107 e 108 del Trattato.”

MODELLO 9: RELAZIONE DESCRITTIVA FINALE

(art. 21 comma 3 dell'Avviso)

Modello 9

RELAZIONE DESCRITTIVA FINALE

Denominazione impresa beneficiaria	QUALITY ENGINEERING S.R.L.
Partita IVA	01530300688
Sede legale	PIAZZA SALVADOR ALLENDE, 20 – 65128 PESCARA (PE)
Sede operativa	VIA CARAVAGGIO, S.N.C. – 66020 SAN GIOVANNI TEATINO (CH)
Titolo Progetto	CONVERSIONE DI COMBUSTIBILI FOSSILI PER LA MOBILITÀ SOSTENIBILE IN VETTORI ENERGETICI DECARBONIZZATI (REACTED)
Data inizio progetto	16/01/2024
Data fine progetto	10/01/2026
Costo totale del progetto	812.513,00 €
Contributo richiesto	641.385,64 €
Localizzazione del progetto	SAN GIOVANNI TEATINO
<p>Attività implementate</p> <p><i>Sintesi delle attività svolte durante l'intera durata del progetto evidenziando le soluzioni e le metodologie adottate per conseguire gli obiettivi previsti ex ante.</i></p> <p><i>In particolare evidenziare, ove ricorra, le innovazioni che hanno consentito l'introduzione di nuove tecnologie/prodotti/servizi per l'impresa e/o per il mercato.</i></p>	<p>Nel corso dell'intero progetto è stata sviluppata un'analisi tecnico-scientifica completa finalizzata alla definizione, ottimizzazione e validazione di un processo avanzato per la produzione di idrogeno e la contestuale rimozione della CO₂. In una prima fase, sono stati esaminati e confrontati diversi schemi di processo presenti in letteratura, con l'obiettivo di individuare l'architettura impiantistica più performante in termini di efficienza energetica, affidabilità operativa e potenziale di integrazione con tecnologie emergenti. Questo studio preliminare ha consentito di selezionare la configurazione più idonea, fungendo da base per le successive attività di sviluppo.</p> <p>La fase successiva ha riguardato l'ottimizzazione energetica del sistema. Sono state progettate soluzioni di recupero termico mirate a ridurre i consumi energetici e aumentare il rendimento complessivo del processo. L'analisi termodinamica ha permesso di massimizzare le sinergie tra le varie unità operative, in particolare integrando scambiatori e sistemi di trasferimento di calore in grado di ridurre le perdite e migliorare il bilancio energetico a livello d'impianto.</p>

Parallelamente, è stata sviluppata un'accurata selezione dei materiali, sia catalitici sia strutturali.

Per quanto riguarda la sezione di catalizzatori per la reazione di Water-Gas Shift (WGS) a bassa temperatura, sono stati scelti catalizzatori rame-zinco, noti per l'elevata attività e stabilità, affiancati da adsorbenti innovativi a base di grafene ossido funzionalizzato. L'introduzione degli adsorbenti inter-stadio rappresenta uno degli elementi chiave di innovazione del progetto: la loro applicazione permette di migliorare la conversione complessiva del reattore WGS, controllare in modo più efficace l'equilibrio di reazione e, al contempo, incrementare la purezza del flusso di gas in uscita.

Sull'altro fronte, la valutazione dei materiali costruttivi, ha portato alla selezione dell'AISI 316 per le apparecchiature principali, grazie alla sua elevata resistenza meccanica e alla compatibilità con condizioni operative in presenza di idrogeno e ambienti potenzialmente corrosivi.

Un ulteriore contributo innovativo è rappresentato dall'integrazione di un sistema di separazione criogenico avanzato, progettato per ottenere un'efficiente rimozione e purificazione della CO₂. Questa soluzione, oltre a garantire elevati livelli di recupero, costituisce un elemento di notevole interesse sia per lo sviluppo aziendale sia per il potenziale impatto sul mercato, poiché abilita la produzione di CO₂ ad alta purezza idonea a utilizzi industriali o a processi di sequestro e stoccaggio. L'integrazione della sezione criogenica con il processo principale ha richiesto un approccio metodologico specifico, orientato alla minimizzazione dei consumi energetici e alla gestione ottimale delle temperature operative.

La progettazione meccanica delle apparecchiature ha costituito un'altra componente fondamentale dello sviluppo. Sono stati dimensionati gli spessori delle pareti dei reattori e delle altre unità in pressione in conformità alle normative tecniche vigenti, assicurando adeguati margini di sicurezza rispetto alle sollecitazioni previste durante il funzionamento. Tale attività ha garantito la robustezza e l'affidabilità complessiva dell'impianto, anticipando potenziali criticità operative.

Infine, il progetto è stato validato attraverso prove sperimentali che hanno confermato la coerenza tra i risultati reali e le previsioni modellistiche. Le sperimentazioni hanno mostrato un'elevata resa nella produzione di idrogeno e un'efficace rimozione della CO₂, dimostrando la validità delle soluzioni progettuali adottate e confermando il contributo innovativo del processo sia dal punto di vista scientifico sia industriale.

Il progetto ha portato alla definizione di un sistema ad alta efficienza, caratterizzato da soluzioni tecnologiche innovative che rappresentano un significativo

avanzamento per l'impresa e un potenziale valore aggiunto per il mercato di riferimento.

Eventuali variazioni e modifiche rispetto al progetto iniziale, già formalmente approvate (ex-Art. 22 dell'Avviso pubblico)

Descrivere le eventuali modifiche che si sono rese necessarie.

In particolare:

- specificare se sono state richieste e concesse eventuali **proroghe** (ex-Art. 15, comma 3 dell'Avviso pubblico);
- precisare se sono state apportate **variazioni di budget rispetto al progetto inizialmente approvato**

In data 31/03/2025 è stata richiesta proroga di 6 mesi protocollata con il nr. 0132201/25 in data 31/03/2025.

E' stata concessa la proroga di mesi sei fino al 10/01/2026 con determinazione n. DPH006/52 del 01/04/2025.

La proroga, a causa di diversi fattori di mercato e tecnici/burocratici ha riguardato solo una rimodulazione del cronoprogramma ma non sono state apportate variazioni di budget rispetto al progetto inizialmente approvato.

Descrizione sintetica del progetto di R&S

Evidenziare gli obiettivi e le finalità del progetto, specificando gli output e i risultati conseguiti.

Il contenuto di tale paragrafo potrà essere reso pubblico dalla Regione Abruzzo attraverso il proprio sito internet e/o altri idonei strumenti di comunicazione.

Il progetto punta allo sviluppo di tecnologie per lo sviluppo di idrogeno che favoriscano la transizione energetica e la riduzione dell'impatto ambientale dei processi industriali. L'obiettivo principale è stato quello di trasformare il carbone in una risorsa energetica strategica attraverso un processo innovativo capace di produrre idrogeno ad elevata purezza con decarbonizzazione. Tale scelta consente di valorizzare al massimo un materiale fossile riducendo il suo impatto ambientale. Il processo sviluppato integra in modo efficiente le fasi di gassificazione, produzione di syngas e conversione delle specie reattive, ottimizzando il recupero del calore generato e riducendo i consumi energetici complessivi.

Un ruolo fondamentale è stato svolto dall'introduzione di materiali adsorbenti avanzati all'interno del reattore di Water-Gas Shift, che hanno permesso di incrementare la produzione di idrogeno in linea con gli obiettivi europei di incremento dei vettori energetici puliti.

Un altro risultato di rilievo è rappresentato dall'adozione di un sistema criogenico avanzato per la separazione dei gas in uscita, tecnologia che consente di ottenere flussi ad alta purezza e apre nuove prospettive per la gestione sostenibile dei sottoprodotti del processo.

Lo sviluppo e realizzazione di un reattore dimostrativo su scala pilota ha permesso poi di validare il processo e valutarne sperimentalmente parametri, efficienza ed affidabilità. Lo schema messo a punto rappresenta un approccio alternativo integrabile nei futuri scenari della mobilità sostenibile e della produzione energetica.

Il progetto ha raggiunto l'obiettivo di sviluppare una tecnologia pulita, efficiente e replicabile, in grado di contribuire alla strategia europea di decarbonizzazione e

alla costruzione di un sistema energetico competitivo e rispettoso dell'ambiente.

Descrizione analitica dell'ampia diffusione dei risultati dell'attività

(attraverso conferenze, incontri on line, pubblicazioni, banche dati di libero accesso, o software open source o gratuito).

I risultati del progetto sono stati resi ampiamente accessibili alla comunità scientifica e industriale attraverso la pubblicazione di un articolo su una banca dati ad accesso aperto, il repository CERN Zenodo.

(DOI: [10.5281/zenodo.17936236](https://doi.org/10.5281/zenodo.17936236))

L'articolo raccoglie in dettaglio i principali esiti dell'attività progettuale, le tecnologie innovative introdotte, le opportunità di scale-up industriale e i possibili ambiti applicativi della soluzione proposta. La scelta di un archivio open access garantisce la massima visibilità dei risultati, favorendo la condivisione delle conoscenze e l'interazione con ricercatori, imprese e stakeholder interessati a implementazioni industriali o ulteriori sviluppi tecnologici. In questo modo il progetto contribuisce a promuovere la diffusione di tecnologie low-carbon, stimolare collaborazioni promuovendo il tessuto produttivo del territorio e sostenere l'adozione di soluzioni innovative in linea con gli obiettivi europei.

Descrizione sintetica dell'impatto del progetto sull'ambiente con riferimento agli obiettivi del Green Deal europeo.

Il progetto genera un impatto ambientale pienamente coerente con gli obiettivi del Green Deal europeo, contribuendo alla transizione verso un sistema energetico più pulito, efficiente e circolare. La tecnologia sviluppata consente di trasformare il carbone in una risorsa energetica ad alto valore aggiunto attraverso un processo che produce idrogeno ad elevata purezza con un'impronta emissiva ridotta. Ciò supporta direttamente l'obiettivo europeo di diminuire le emissioni climalteranti, in linea con il pacchetto *Fit for 55*, e favorisce la diffusione dell'idrogeno come vettore energetico strategico nei settori energivori e mobilità. L'integrazione di materiali adsorbenti avanzati e del sistema criogenico per la separazione della CO₂ costituisce un contributo concreto all'accelerazione delle tecnologie per l'idrogeno pulito e all'innovazione low-carbon, mentre la possibilità di ottenere flussi concentrati di CO₂ facilita la futura integrazione in un'infrastruttura europea dedicata al suo trasporto e stoccaggio. Inoltre, l'ottenimento di syngas da processi di gassificazione di matrici carboniose, risulta applicabile anche al riutilizzo di residui industriali e, unitamente alle strategie di recupero termico interno al processo, rafforza la coerenza del progetto con i principi dell'economia circolare e dell'efficienza energetica, riducendo l'uso di risorse primarie e minimizzando gli scarti. Nel complesso, il progetto si configura come un intervento capace di contribuire in modo tangibile alla decarbonizzazione, alla competitività sostenibile e all'innovazione tecnologica promosse dal Green Deal.

Dichiarazione relativa al rispetto del principio DNSH, con particolare riferimento ai seguenti punti:

- **Mitigazione dei cambiamenti climatici**
(Un'attività progettuale non deve portare a significative emissioni di gas serra (GHG)).
- **Adattamento ai cambiamenti climatici**
(Un'attività progettuale non deve determinare un maggiore impatto negativo al clima attuale e futuro, sull'attività stessa o sulle persone, sulla natura o sui beni.)
- **Uso sostenibile e protezione delle risorse idriche e marine**
(Un'attività progettuale non deve essere dannosa per il buono stato dei corpi idrici -superficiali, sotterranei o marini- e determinare il deterioramento qualitativo o la riduzione del potenziale ecologico.)
- **Transizione verso l'economia circolare, con riferimento anche a riduzione e riciclo dei rifiuti**
(Un'attività progettuale non deve portare a significative inefficienze nell'utilizzo di materiali recuperati o riciclati, ad incrementi nell'uso diretto o indiretto di risorse naturali, all'incremento significativo di rifiuti, al loro incenerimento o smaltimento, causando danni ambientali significativi a lungo termine.)
- **Prevenzione e riduzione dell'inquinamento dell'aria, dell'acqua o del suolo**
(Un'attività progettuale non deve determinare un aumento delle emissioni di inquinanti nell'aria, nell'acqua o nel suolo.)
- **Protezione e ripristino della biodiversità e della salute degli ecosistemi**
(Un'attività progettuale non deve essere dannosa per le buone condizioni e resilienza degli ecosistemi o per lo stato di conservazione degli habitat e delle specie, comprese quelle di interesse per l'Unione.)

Il progetto rispetta pienamente il principio DNSH poiché le soluzioni tecnologiche adottate non comportano impatti ambientali significativi e sono state impostate secondo criteri di sostenibilità coerenti con le priorità del Green Deal europeo. Le attività di sviluppo del processo di produzione di idrogeno da carbone non determinano incrementi rilevanti di emissioni climalteranti, grazie all'ottimizzazione delle fasi reattive, al recupero sistematico del calore e all'integrazione di tecnologie avanzate che migliorano l'efficienza energetica complessiva. L'impianto è stato inoltre progettato per garantire piena resilienza ai cambiamenti climatici, evitando condizioni operative suscettibili a stress ambientali e non introducendo vulnerabilità per persone, beni o attività circostanti. Il processo non comporta prelievi idrici significativi, non altera lo stato dei corpi idrici e non genera scarichi potenzialmente dannosi per acque superficiali o sotterranee. Coerentemente con i principi dell'economia circolare, valorizza matrici carboniose residuali, riduce l'impiego di risorse primarie e limita la produzione di rifiuti attraverso il riutilizzo interno delle correnti energetiche e dei flussi termici. Le tecnologie adottate non introducono nuove fonti di inquinamento atmosferico, del suolo o dell'acqua, poiché il processo è chiuso, controllato e dotato di sistemi di trattamento idonei.

Infine, l'installazione e l'operatività del pilota dimostrativo non interferiscono con habitat naturali o aree sensibili, garantendo l'assenza di impatti su biodiversità ed ecosistemi. Per tali motivi, l'intervento nel suo complesso non arreca danni significativi all'ambiente e risulta pienamente conforme al principio DNSH.



Cofinanziato
dall'Unione europea



Nome Cinzia

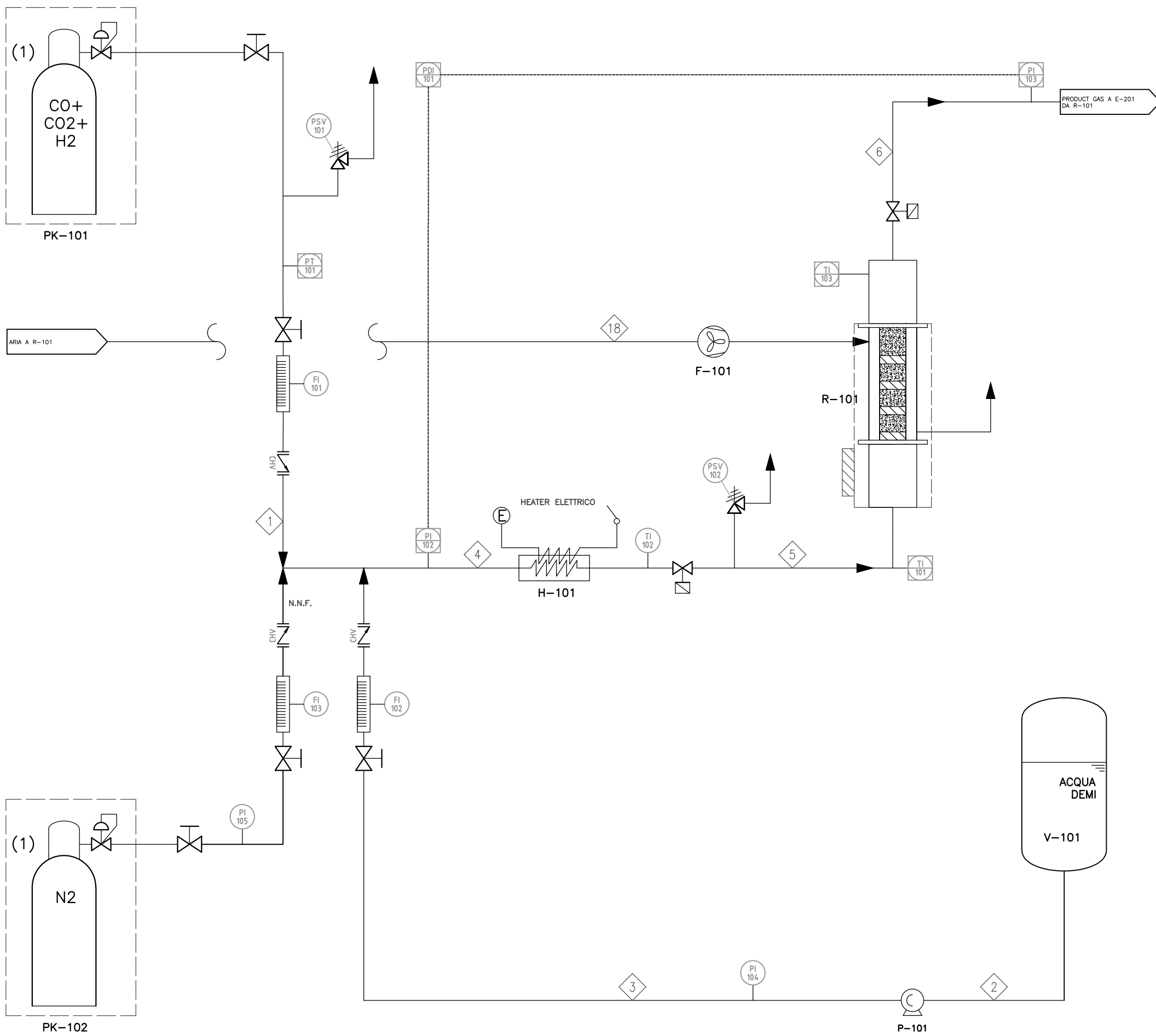
Cognome Battaglia

In qualità di Legale Rappresentante

Legale rappresentante o altra persona delegata a rappresentare

Sottoscrizione digitale

.....



1- First pressure reduction group included in the gas cylinder package



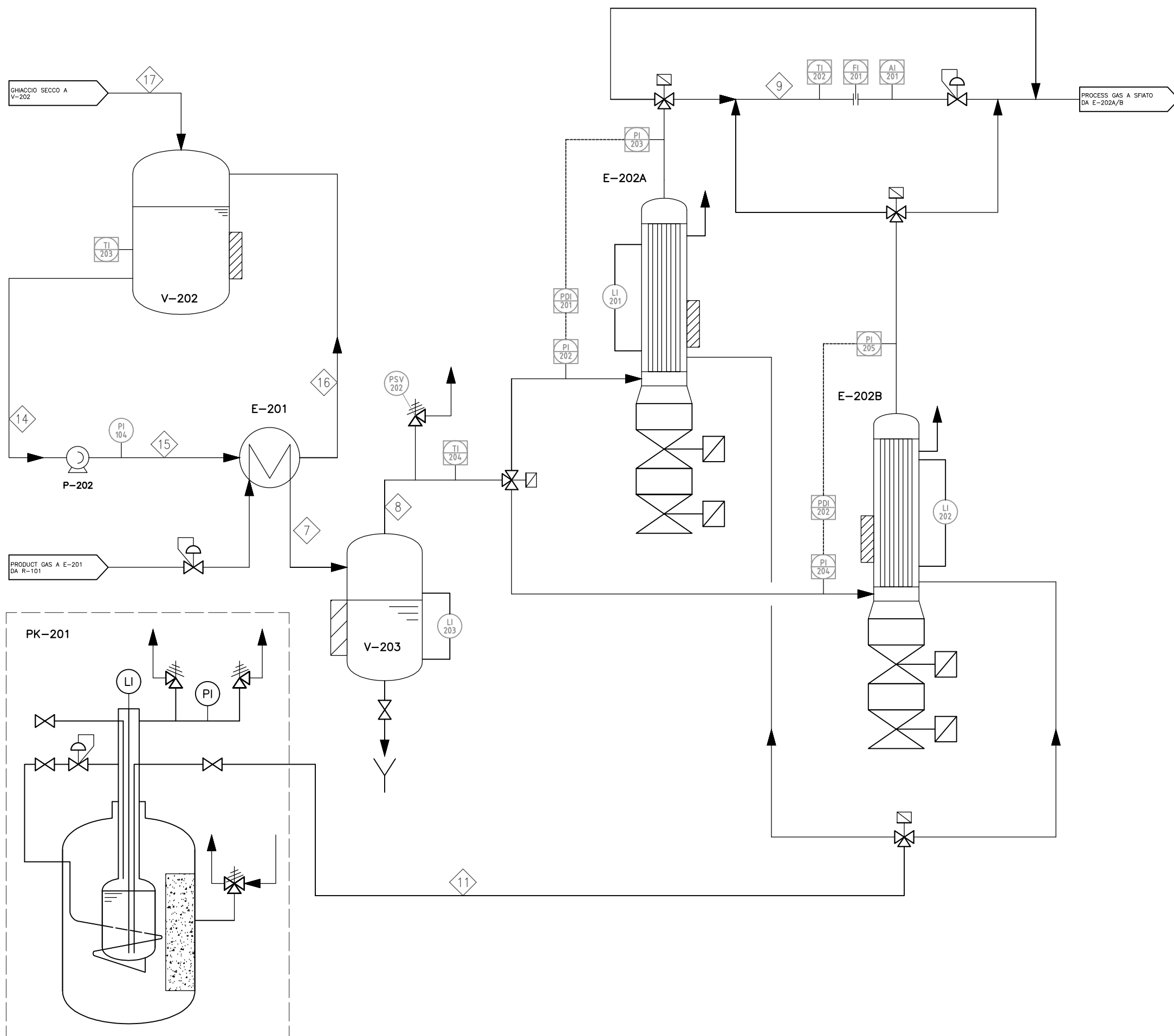
Intervento 1.1.1.1 - CUP: C39J24000050007 - Determinazione N. 53/DPH006

Programma Regionale Abruzzo FESR 2021-2027



00	13.05.2025	Prima Emissione	GP	SC	AB
REV.	DATE	DESCRIPTION	DRAWN	CHECK	APPROV.
PROPOSITOR		MAIN PROPOSITOR		DOC. N°	
				RIS3A-PRO-PFD-001	
PLANT		Impianto Pilota		SHEET	1 DP 2
				SCALE	FORMAT A3

Schema di marcia dell' impianto



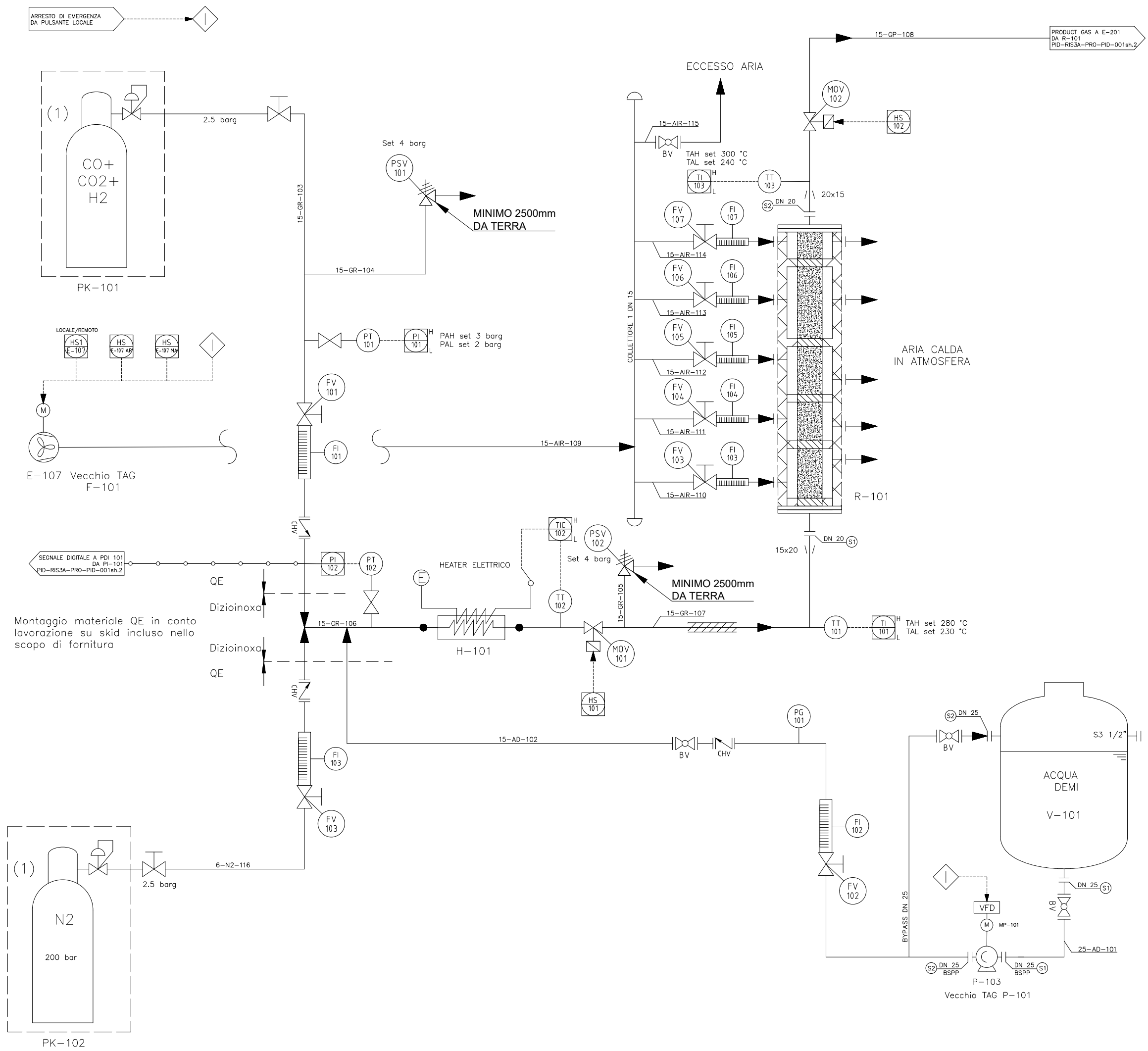
Intervento 1.1.1.1 - CUP: C39J24000050007 - Determinazione N. 53/DPH006

Programma Regionale Abruzzo FESR 2021-2027



REV.	DATE	DESCRIPTION	DRAWN	CHECK	APPROV.
00	13.05.2025	Prima Emissione	GP	SC	AB
PROPOSITOR		MAIN PROPOSITOR		DOC. N°	
				RIS3A-PRO-PFD-001	
PLANT		Impianto Pilota		SHEET 2 OF 2	
				SCALE - FORMAT A3	

Schema di marcia dell' impianto



1- First pressure reduction group included in the gas cylinder package

- Riempimento inerte di Allumina
- Letto catalitico



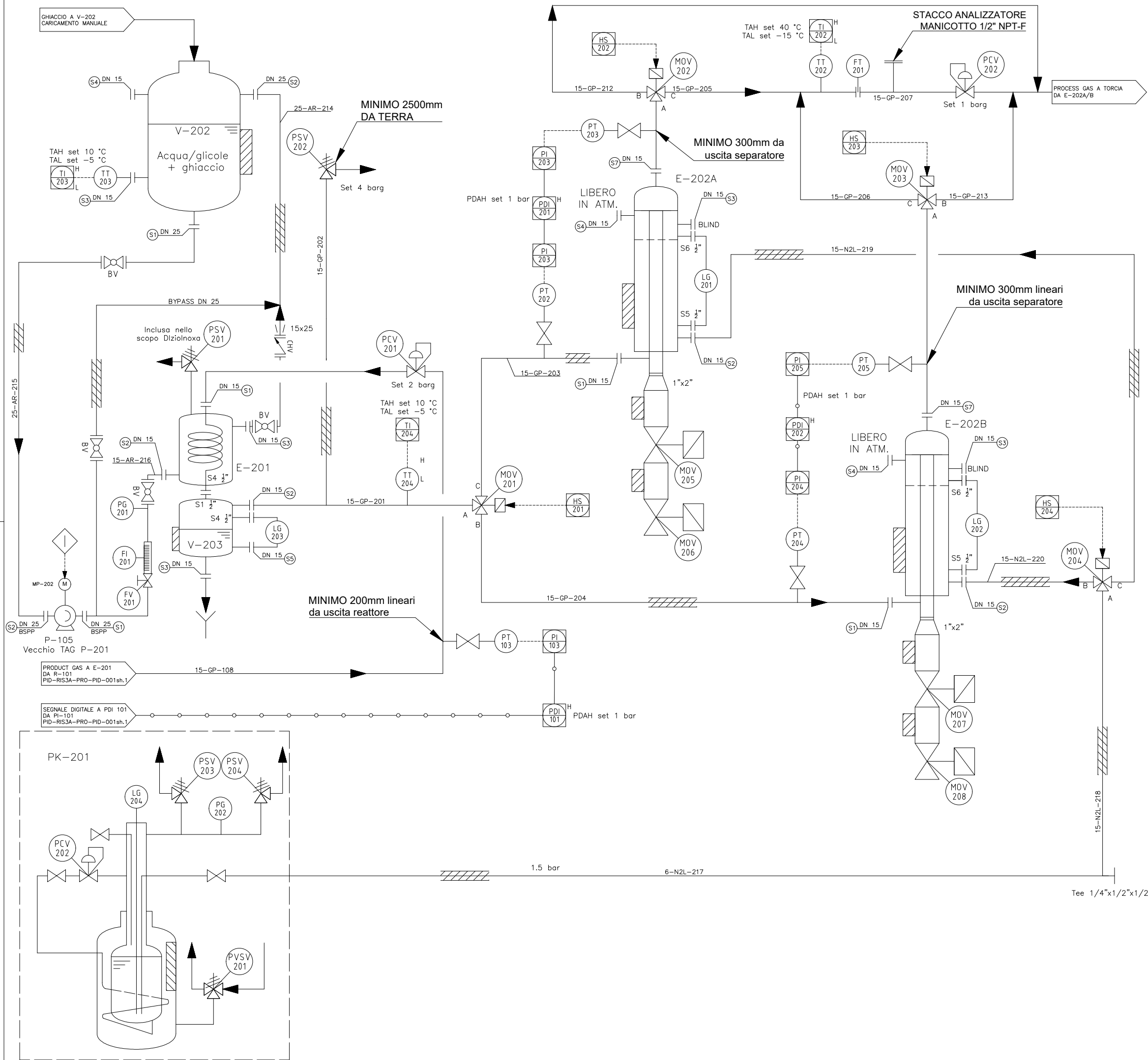
Intervento 1.1.1.1 - CUP: C39J24000050007 - Determinazione N. 53/DPH006

Programma Regionale Abruzzo FESR 2021-2027

02	29/10/2025	Terza Emissione Per approvazione	GP	CM	SC
01	30/09/2025	Seconda Emissione	GP	SC	AB
00	13.06.2025	Prima Emissione	GP	SC	AB
REV.	DATE	DESCRIPTION	DRAWN	CHECK	APPROV.

PROPONENT Quality Engineering AB <small>Head Office: Via Salaria Nord 417, 00197 Roma, Italy Quality Engineering AB 630255209 - info@reacted.it www.reactedsrl.it</small>		DOC. N° RIS3A-PRO-PID-001
PLANT Impianto Pilota		SHEET 1 OF 2 SCALE - FORMAT A3

Schema di marcia dell' impianto



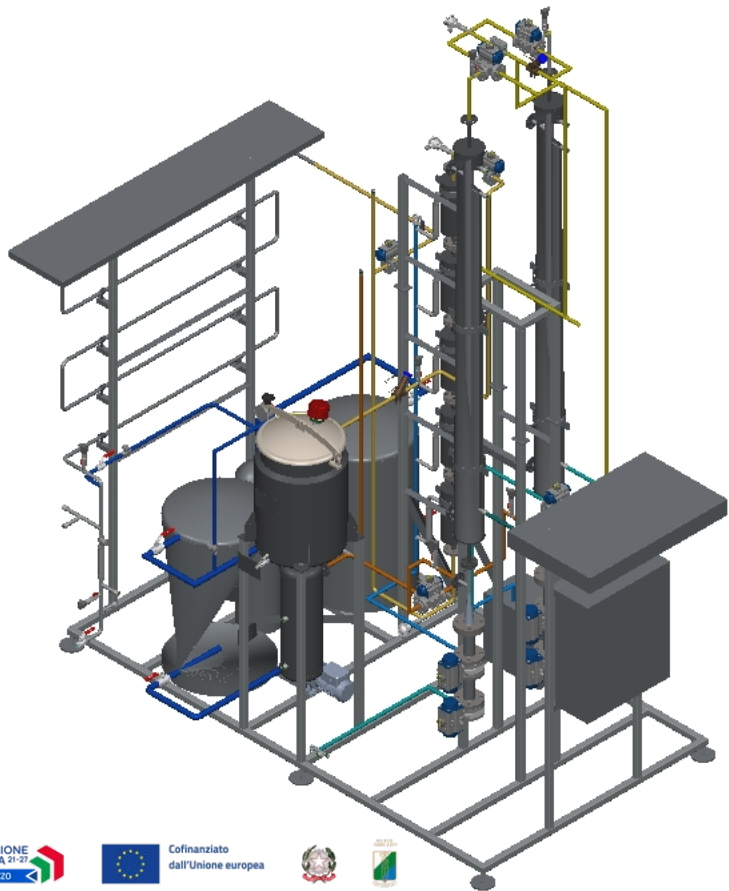
Intervento 1.1.1.1 - CUP: C39J24000050007 - Determinazione N. 53/DPH006

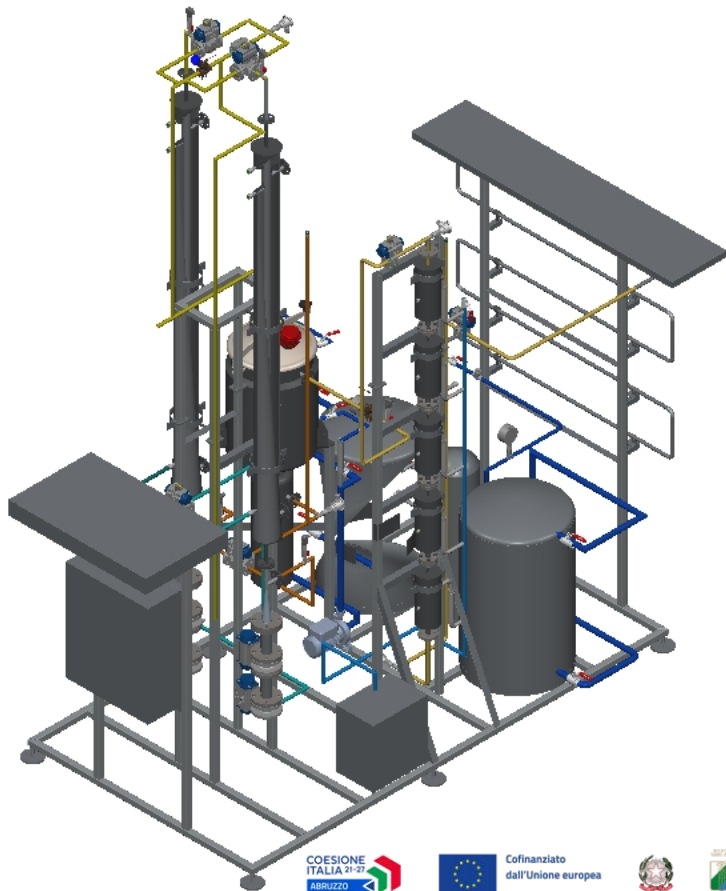
Programma Regionale Abruzzo FESR 2021-2027

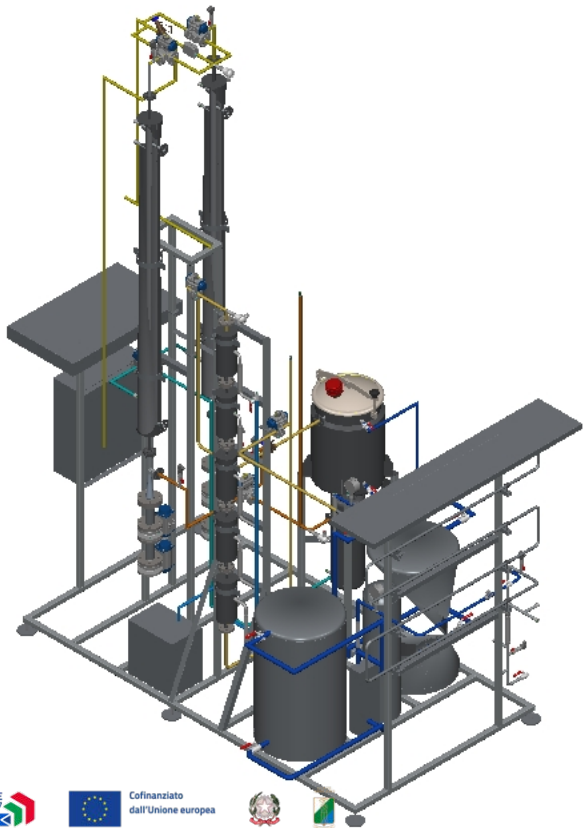
02	29/10/2025	Terza Emissione Per approvazione	GP	CM	SC
01	30/09/2025	Seconda Emissione	GP	SC	AB
00	13.06.2025	Prima Emissione	GP	SC	AB
REV.	DATE	DESCRIPTION	DRAWN	CHECK	APPROV.

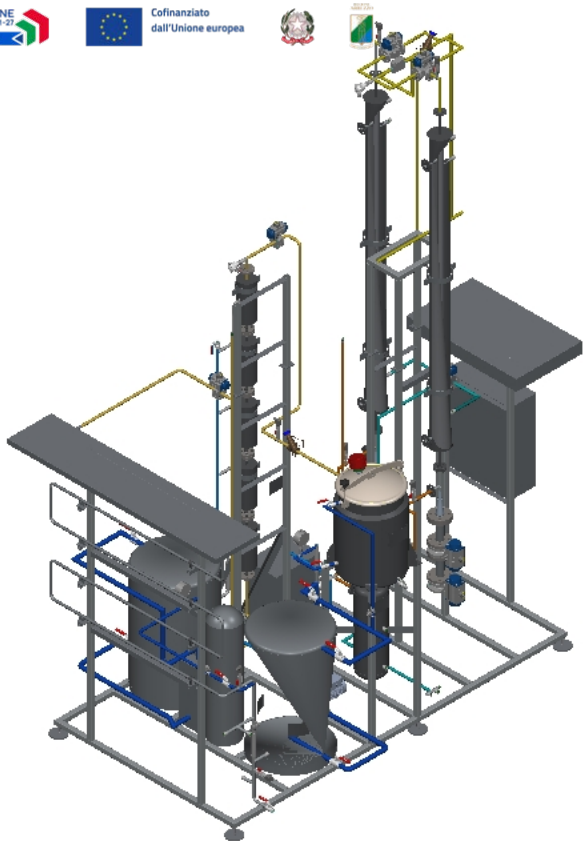
PROPONENTE Engineering and Consulting Services Head Office: Via Salaria Km 1,5, 00197 Roma (RM) - Italy Quality Engineering: Via Salaria Km 1,5, 00197 Roma (RM) - Italy		DOC. N° RIS3A-PRO-PID-001
PLANT Impianto Pilota		SHEET 2 OF 2 SCALE - FORMAT A3

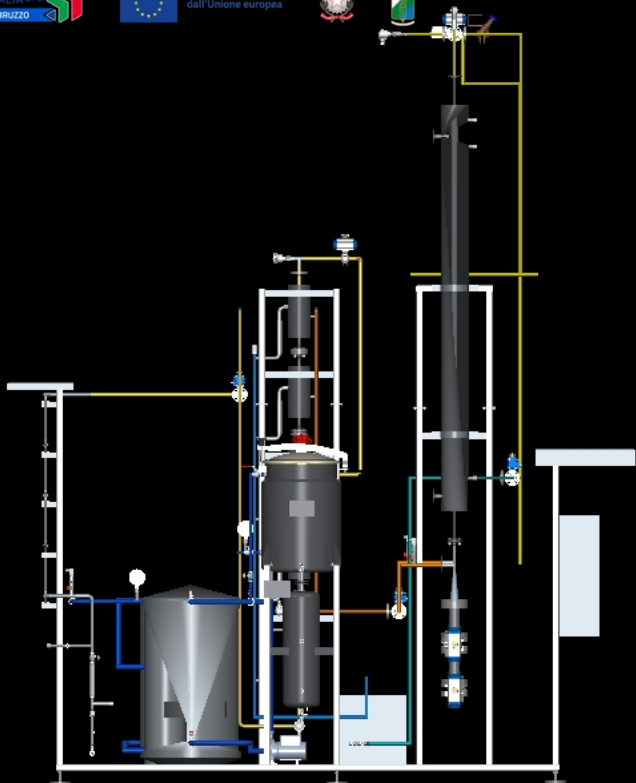
Schema di marcia dell' impianto

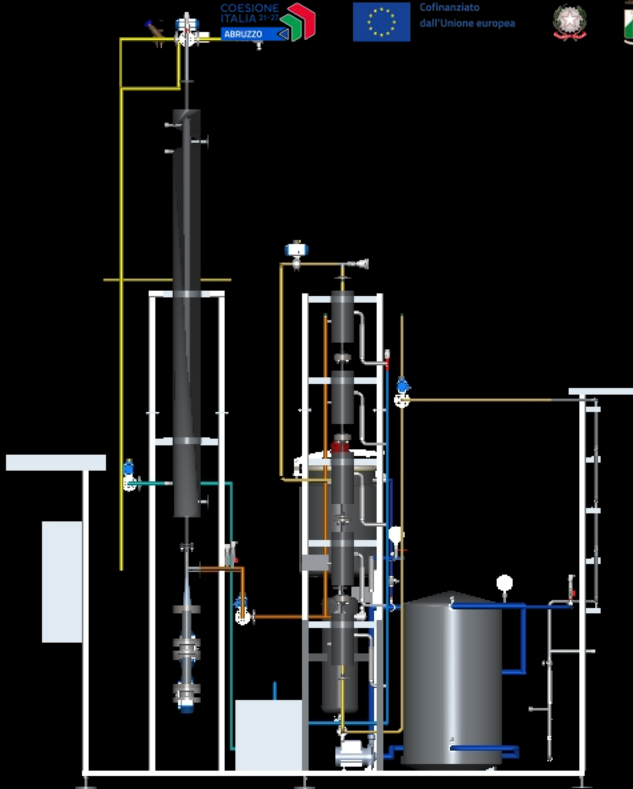


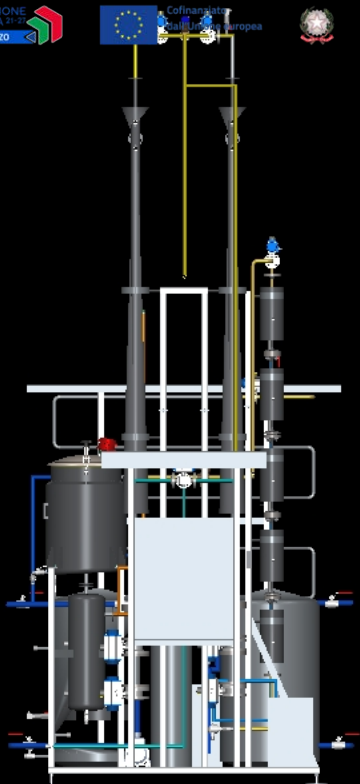


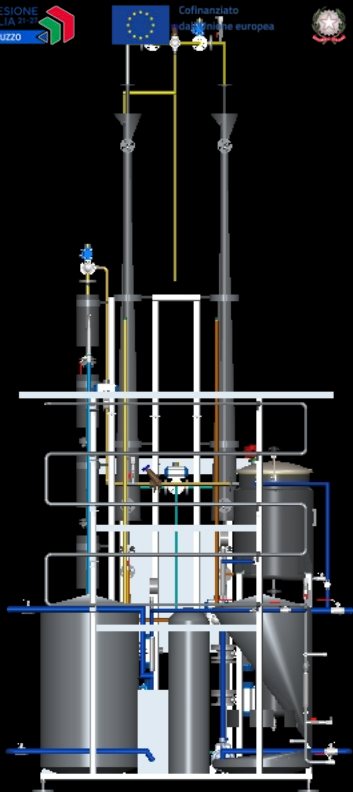




























Industrial Assessment and Design of a Graphene-based Sorbent Process for CO₂ Removal from Syngas

Gioele Primiterra ¹, Alessandra Battista ¹, Silvano Cimini ^{1*}, Alessia Savini ², Stefano Di Giacomo ², Pietro Di Profio ², Giulia Neri ³, Michele Ciulla ^{2**}

¹ Quality Engineering S.r.l., San Giovanni Teatino 66020, Italy

² University ‘G. d’Annunzio’ of Chieti – Pescara - Chieti 66100, Italy

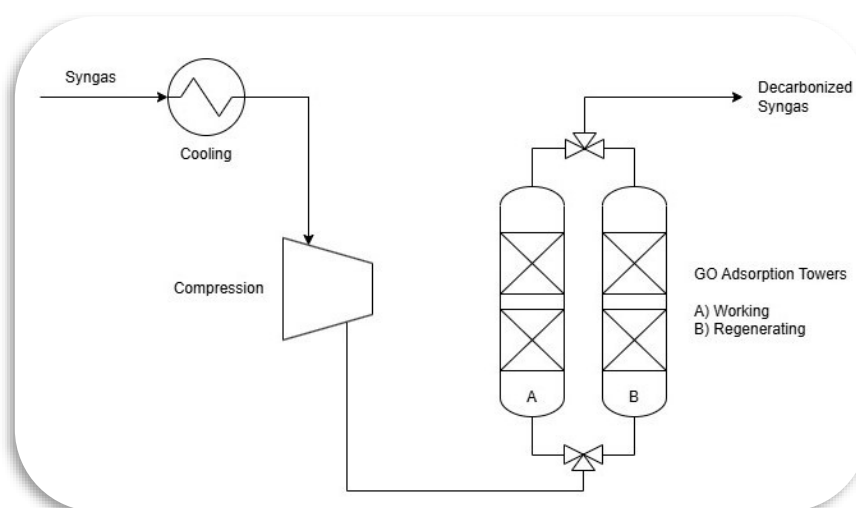
³ University of Messina – Messina 98168, Italy

* Correspondence: silvano.cimini@qesrl.it

** Correspondence: michele.ciulla@unich.it

DOI: [10.5281/zenodo.17936236](https://doi.org/10.5281/zenodo.17936236)

Graphical Abstract:



Abstract:

This work investigates CO₂ capture in syngas processing using graphene-based solid adsorbents, focusing on the link between adsorption kinetics and industrial unit design. Graphene oxide (GO) is evaluated under syngas-relevant conditions through equilibrium and kinetic studies to derive rate parameters essential for modelling adsorption dynamics. The resulting kinetic models support scale-up and enable the industrial design of adsorption towers based on GO performance. A conceptual adsorption unit is proposed, integrating mass-transfer data with tower geometry and operating conditions to optimize syngas decarbonization. The work was developed within the Research Project “REACTED”, funded by regional support programs.

Keywords: Carbon Capture; Adsorption; Graphene Oxide, Industrial design

1 Introduction

The progressive reduction of greenhouse-gas emissions mandated by the European Green Deal has accelerated the search for efficient and sustainable carbon-capture technologies capable of mitigating CO₂ release from industrial sources. Conventional post-combustion separation continues to be dominated by amine-based chemical scrubbing, a well-established and widely applied method; however, it is affected by significant drawbacks. These include solvent degradation over repeated cycles, high energy requirements for thermal regeneration, corrosion of process equipment, and the formation of environmentally harmful by-products [1,2]. Such limitations not only increase operational costs but also pose environmental and safety challenges, which can hinder the broad adoption of chemical scrubbing technologies in industrial settings. Consequently, there is growing interest in alternative strategies that can overcome these drawbacks while maintaining comparable capture efficiencies. Among these, solid-sorbent technologies have emerged as a promising solution, offering the potential to eliminate the use of corrosive aqueous chemicals, reduce energy penalties associated with regeneration, and simplify overall process operation [3].

Within the realm of solid adsorbents, Graphene Oxide (GO) has received considerable attention due to its intrinsic properties, including high surface area, excellent structural stability, and the presence of chemically versatile oxygenated functional groups that facilitate selective CO₂ adsorption [4]. In addition, GO can be produced from low-cost or waste-derived carbon sources, further enhancing its appeal for sustainable large-scale deployment in industrial processes [5]. Despite these promising characteristics, the performance of waste-derived GO in realistic industrial scenarios remains insufficiently explored. While extensive

research has demonstrated the CO₂ adsorption potential of various carbonaceous materials, often highlighting tenable sorption behaviours and notable uptake capacities [6], critical questions persist regarding the practical application of GO in fixed-bed adsorption systems. Specifically, it is not yet fully understood whether waste-derived GO can deliver the necessary adsorption capacity, selectivity, and kinetic response under conditions typical of industrial effluent treatment, nor whether such performance is sufficient to justify its replacement of conventional amine-based processes in applications such as syngas decarbonization [7].

The aim of the present study is therefore not to focus on the synthesis or chemical modification of GO, but rather to evaluate the adsorption performance of a waste-derived GO material under controlled laboratory conditions. By systematically linking measured equilibrium and kinetic parameters to engineering-scale modelling, the work provides a pathway to support the industrial design of an adsorption unit. This approach allows the assessment of whether GO-based solid sorbents could represent a viable, safer, and more sustainable alternative to chemical solvent technologies for CO₂ capture, thereby contributing to the decarbonization targets established by the European Green Deal [3,8]. The study thus bridges the gap between material-level adsorption performance and process-level feasibility, offering insights into the realistic application potential of waste-derived GO in industrial carbon-capture operations.

2 Materials and Methods

This section describes the experimental procedures, analytical methods, and engineering methodologies adopted to evaluate the adsorption performance of waste-derived graphene oxide and to design the corresponding industrial adsorption unit for syngas decarbonization. The approach integrates laboratory-scale kinetic characterization with process engineering calculations to ensure consistency between material behaviour and full-scale operational requirements. All materials, equipment, and computational methods used throughout the study are detailed below to provide full transparency and reproducibility of the work.

2.1 GO Synthesis

Graphene-based derivatives employed in this study were prepared through a modified Hummers protocol involving the oxidative exfoliation of graphite flakes in concentrated H_2SO_4 . Graphite was first mixed with $NaNO_3$ under continuous stirring, after which $KMnO_4$ was gradually added at controlled temperature to promote intercalation and oxidation of the graphitic layers. Subsequent dilution with deionized water and addition of H_2O_2 completed the oxidation process, yielding a yellow GO dispersion. The product was purified through repeated centrifugation with dilute HCl and deionized water and finally dried to obtain GO powder suitable for subsequent processing. Due to ongoing optimization and pending publication, specific procedural details related to further functionalization cannot be disclosed.

2.2 Sorbent characterization and Performance

For the sorption experiments, 250 mg of the sample was sieved and closed in a teabag which was later inserted inside the reactor [11-13]. The experiments were carried out in a 10 mL stainless-steel reactor rated for pressures up to 60 bar. This set-up was provided with temperature control, and the CO_2 feed was regulated using a thermal mass flow controller (Figure 2.1).

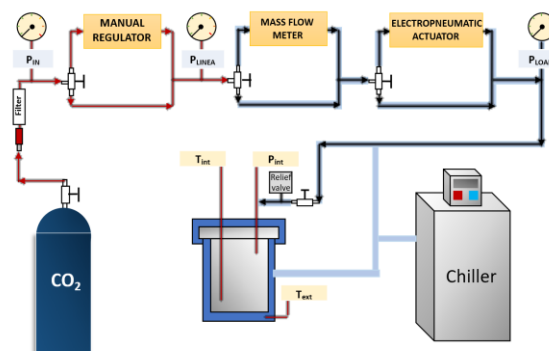


Figure 2.1: Schematics of the experimental apparatus.

After the reactor was sealed, sample was vacuumed to 0.4 bar. The chamber was then filled with CO_2 up to the target pressure (20 and 40 bar) and immersed in a thermally regulated water bath held at a constant setpoint temperature (20 or 40 °C).

After the adsorption, the amount of CO_2 adsorbed was quantified using reference experiments conducted with inert materials. Between the successive adsorption cycles the sample was regenerated under vacuum (0.10 bar) for 15 minutes to ensure the complete desorption of the gas.

The material density was determined through helium pycnometry.

2.3 Kinetic modelling of the adsorption process

The kinetic behaviour of CO_2 adsorption on the waste-derived graphene oxide adsorbent was modelled using a pseudo-first-order framework, augmented by considerations typical of the Elovich kinetic model to describe heterogeneous surface

chemisorption phenomena. The Elovich model is particularly appropriate when the adsorption sites are energetically non-uniform, which is often the case for carbon-based sorbents with a variety of functional groups and surface defects [9, 10].

From the experimental uptake data, the equilibrium adsorption capacity (q^*) and the rate constant (k) were determined by fitting the time-dependent adsorption curves to the model equation (Eq. 2.1):

$$(q^* - q_t) = q^* \cdot e^{-kt} \quad \text{Eq. 2.1}$$

These kinetic parameters enable the quantification of both the maximum adsorbable CO₂ on the sorbent and the speed at which adsorption proceeds toward equilibrium.

Using the determined q^* and k values, it was possible to derive the expression for the carbon capture flux as a function of time, defined as per (Eq. 2.2)

$$v(t) = v_{MAX} \cdot e^{-kt} \quad \text{Eq. 2.2}$$

Where v_{max} corresponds to the initial capture rate at $t = 0$.

This time-dependent flux relationship allows straightforward identification of the time window during which the adsorption rate remains above a predetermined operational threshold, a critical aspect for designing an industrial adsorption column where a minimum “capture velocity” must be maintained to meet process requirements.

By combining the kinetic model results with engineering design criteria, this approach provides a bridge between material-level performance and full-scale industrial design. In particular, knowing $v(t)$ allows sizing of the adsorption unit (e.g., bed volume, flow rates) based on realistic dynamic performance rather than static equilibrium capacity, thereby improving the reliability of scale-up and process integration.

2.4 Adsorption Unit Industrial Design

The industrial adsorption unit was designed based on the kinetic characterization of the waste-derived graphene oxide and the expected syngas feed flowrates derived from pilot plant measurements. A preliminary height-to-diameter (L/D) ratio of 3 was hypothesized to define the general geometry of the column. Using the kinetic results, a residence time was established corresponding to the minimum adsorption velocity required to achieve effective CO₂ capture. From this residence time and the syngas flowrate, the linear velocity of the gas through the column was calculated. Subsequently, the maximum allowable flowrate was estimated as the ratio of the column volume to the residence time. Applying the continuity equation (Eq. 2.3), the minimum cross-sectional area necessary to maintain the target residence time was determined. This preliminary numerical section was then compared with the geometric section calculated as the column volume divided by the column height (L). The design procedure was iterative: an initial column diameter (D) was assumed, and the calculation was repeated until convergence was achieved within a few steps. Among the various parameters, the residence time derived from the kinetic law was identified as the most critical, as it directly controls the minimum adsorption rate and ensures the operational efficiency of the unit.

$$F = v \cdot S \quad \text{Eq. 2.3}$$

3 Results

Results include the evaluation of the CO₂ uptake behaviour of waste-derived graphene oxide, the derivation of kinetic parameters from model fitting, and the analysis of the adsorption rate profiles relevant to industrial operation. These

experimentally determined parameters are then integrated into the engineering design framework to assess the feasibility, sizing, and performance of the proposed adsorption unit under representative syngas feed conditions. The following subsections report the results in a structured manner, highlighting both material performance and its implications for process-scale implementation.

3.1 GO Adsorption Capacity

The Graphene oxide (GO) derivatives were characterized and evaluated for their CO₂ adsorption performance under 40 °C and 40 bar. The materials exhibited a rapid uptake, reaching a maximum adsorption capacity of 581 mg CO₂/g GO within approximately one minute. Cycling experiments over three consecutive adsorption–desorption runs showed good stability, with only minimal variation between the second and third cycles, indicating no significant loss in performance, as shown in Figure 3.1.

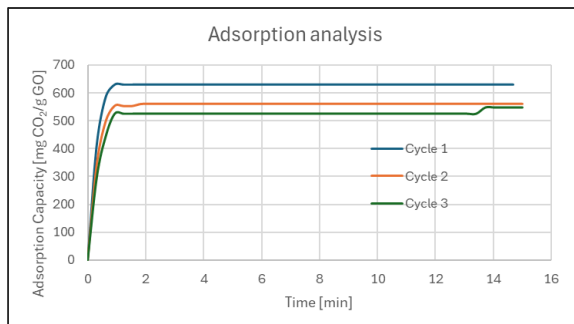


Figure 3.1: Adsorption capacity and cycling stability.

3.2 Kinetic parameters

The adsorption kinetic parameters were obtained by fitting the experimentally measured uptake curves to the first-order pseudo-Elovich model previously introduced. The model was applied to the time-resolved mass-specific adsorption data, and the parameters were estimated through nonlinear regression to minimize the deviation between predicted and

experimental profiles. This procedure yielded a kinetic constant k of 0.041 s^{-1} and an equilibrium saturation capacity q^* of $0.581 \text{ kg CO}_2 / \text{kg GO}$, indicating a relatively fast initial adsorption stage followed by an exponential approach to saturation. The quality of the fit demonstrates that the first-order pseudo-Elovich model was adequate. Figure 3.2 illustrates the agreement between experimental measurements and the model prediction.

From the fitted expression, the time-dependent adsorption rate, obtained as the temporal derivative of the uptake, was computed to evaluate the decay in capture velocity throughout the adsorption cycle. This derived profile, shown in Figure 3.3, highlights the characteristic exponential decline governed by the kinetic constant k and supports the identification of the minimum residence time required for maintaining an adequate CO₂ capture flux. These kinetic parameters constitute the basis for the subsequent process design calculations.

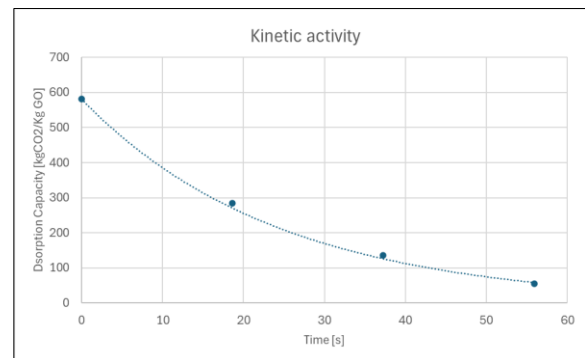


Figure 3.2: Fitting of the adsorption curves data.

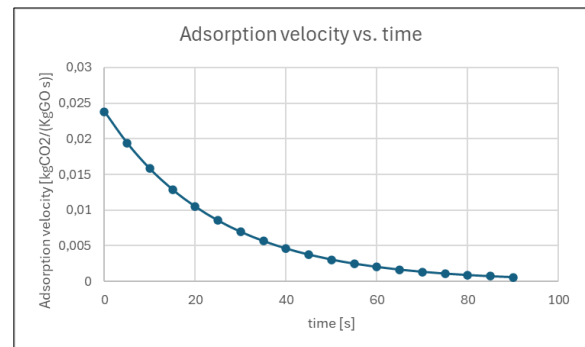


Figure 3.3: Adsorption Capacity differential form.

3.3 Adsorption Columns

The industrial-scale design of the adsorption column was developed through the scale-up of the dimensioning equations described in Chapter 2, using the process and material parameters determined from laboratory and pilot data. A reference Syngas stream, with a flowrate of 7140 kmol/h and a CO₂ concentration of 17.5 mol%, was targeted for CO₂ capture at an efficiency of 99.7%, matching the performance of conventional amine absorption processes. Based on the adsorption kinetics, a residence time of 80 s was adopted to ensure sufficient contact between the gas and the graphene oxide (GO) adsorbent, which has a maximum adsorption capacity of 0.581 kg CO₂/kg GO. The required mass of GO was then calculated to meet the capture target, and using the material density, the corresponding bed volume was estimated at approximately 60 m³. Applying the recursive design methodology outlined in the Methods section, the column was dimensioned with a diameter of 2.9 m and a height of 8.7 m, ensuring structural feasibility and an L/D ratio of 3. The maximum gas flowrate that the bed can handle without compromising adsorption performance was calculated as 2475 m³/h, confirming the design's suitability for continuous industrial operation.

4 Discussion

The kinetic and equilibrium results obtained in this study confirm the strong suitability of GO-derived sorbents for industrial CO₂ capture applications. The relatively high saturation capacity ($q^* = 0.581 \text{ kg CO}_2 / \text{kg GO}$) combined with a favourable kinetic constant ($k = 0.041 \text{ s}^{-1}$) indicates that the material can achieve rapid CO₂ uptake without requiring large adsorption volumes. When these parameters were incorporated into the design framework, the resulting column dimensions were significantly smaller than those typically associated with

carbon-based sorbents such as activated carbons or biomass-derived chars, which often require larger beds to compensate for slower kinetics or lower working capacities. This reduction in equipment size directly enhances industrial feasibility by lowering footprint, capital cost, and integration complexity. Overall, the GO material demonstrated a balance of adsorption rate and capacity that supports its potential as a high-performance alternative to conventional solid sorbents in next-generation carbon-capture units.

5 Industrial Design Considerations

The industrial design assessment demonstrates that the adsorption unit developed in this work aligns well with the dimensional ranges and engineering constraints typical of large-scale chemical production facilities. Benchmarking against established plant configurations revealed that the proposed technology can be integrated without requiring extensive redesign of existing process layouts. For instance, in conventional ammonia production plants, the reactor vessels associated with the low-temperature water-gas shift (LT-WGS) section may reach internal volumes of up to 90 m³, highlighting the substantial process intensities already managed within standard infrastructure. The carbon-capture module proposed here is suitable to be installed downstream of this section, where syngas properties and flow regimes are compatible with the operating envelope derived from the kinetic model. Importantly, this integration point allows the adsorption unit to replace or complement existing CO₂ removal technologies without imposing significant structural, civil, or utility-related modifications.

Figure 5.1 shows the main feature the adsorption unit shall have.

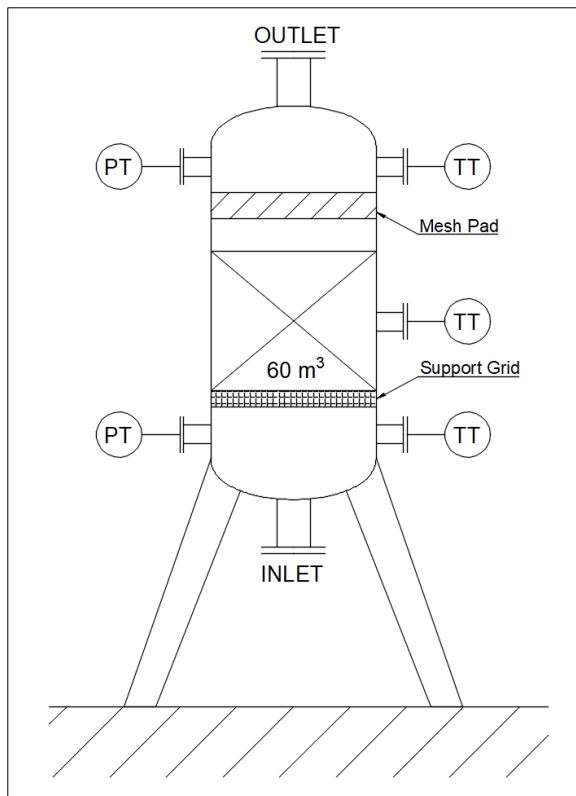


Figure 5.1: Adsorption Tower Sketch, main nozzles

Similar evaluations performed for urea and methanol plants confirm comparable compatibility: both process lines include well-defined syngas conditioning stages where a capture unit of the proposed size can be incorporated with minimal impact on the arrangement of heat-exchangers, compressors, or auxiliary service networks. The volumetric requirements derived from adsorption kinetics, particularly those linked to residence time and allowable superficial velocities, fall within the range of equipment routinely adopted in these industries, supporting the practical feasibility of full-scale deployment. Overall, the analysis indicates that the adsorption unit is not only technically adaptable but also operationally convenient, enabling integration into existing plants without major re-engineering efforts or disruption of established utility system.

A comparison between the proposed GO adsorption system and cryogenic CO₂ separation reveals that both technologies offer distinct advantages that can be

leveraged in a complementary manner. Cryogenic separation provides very high purity CO₂ streams and is well established in large-scale syngas conditioning. The temperature required for CO₂ sublimation with 99.99% removal from a gas stream has been calculated using Clapeyron relation (Eq. 5.1):

$$\ln \frac{P_2}{P_1} = -\frac{\Delta H_{Sub}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad \text{Eq. 5.1}$$

We start with a typical mixture of syngas, as described before, at 1 barg and 5 °C coming from a cooling section to remove water condensate. First, the partial pressure of CO₂ is calculated as the product of the total pressure and the composition (0.35 bar). The target residual fraction after removal corresponds to 0.01% of the original partial pressure (0.000035 bar), implying a required calculated temperature of -156 °C. Using liquid nitrogen as cryogenic refrigerant (-196 °C) allows achieving high product purity because its boiling temperature is below the temperature required for complete sublimation, as showed in Figure 5.2:

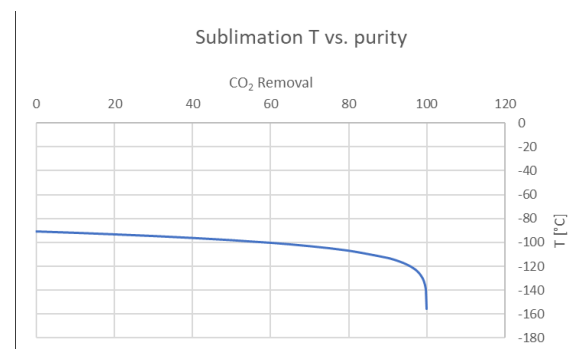


Figure 5.2: Complete sublimation Temperature.

The GO adsorption technology operates at milder conditions, offers lower energy demand during separation-regeneration cycles, and has the potential for reduced capital costs due to compact equipment design. While adsorption offers improved sustainability and flexibility, cryogenic units remain advantageous for deep CO₂ removal and handling large gas volumes.

For these reasons, the REACTED project envisions a synergistic integration of both approaches, where cryogenic systems ensure high-purity conditioning and GO-based adsorption provides efficient polishing or targeted decarbonization, ultimately maximizing performance while minimizing energy and cost footprints.

From an economic standpoint, functionalized GO adsorption offers substantial advantages over solvent-based capture, primarily by removing the need for solvent regeneration, thermal re-boiling, and continuous make-up of degraded amines. The reduced corrosion potential, lower maintenance requirements, and elimination of solvent-related emissions further contribute to long-term operational cost savings. Such features not only enhance environmental compliance but also strengthen the commercial competitiveness of the technology, especially in sectors where decarbonization pathways must be achieved with minimal process disruptions.

A qualitative comparison of operating costs across major CO₂ capture technologies (Figure 5.3) points out the economic benefit associated with functionalized GO adsorption, highlighting its suitability for large-scale deployment in modern industrial facilities, as well as the advantage induced with the integration with cryogenic separation, combining the two most economical and efficient technologies.

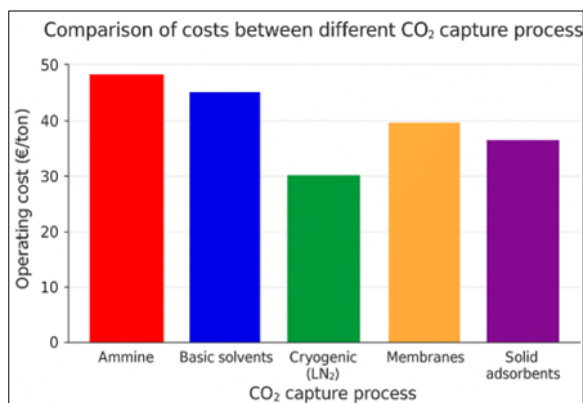


Figure 5.3: CO₂ Capture Technologies Costs

6 Conclusion

This study demonstrated the feasibility of employing GO-based sorbent materials for efficient CO₂ capture within industrial syngas-processing environments. Through kinetic evaluation and modelling, the pseudo-first-order Elovich approach provided essential parameters to design an adsorption unit capable of achieving rapid CO₂ removal while maintaining compact equipment size. The resulting column dimensions and operating conditions align well with typical industrial plant scales, confirming that this technology can be integrated into existing ammonia, methanol, and urea production lines without substantial structural modifications. Beyond the technical validation, these findings highlight the broader significance of GO-enabled adsorption systems as a valuable contribution to decarbonization pathways. By enabling cleaner syngas upgrading and facilitating the production of low-carbon hydrogen, this technology directly supports the development of sustainable energy vectors for mobility and aligns with the strategic objectives of the REACTED project. Moreover, this work lays the foundation for future development of multi-stage reactors that combine reaction and CO₂ adsorption in an integrated configuration, thereby maximizing hydrogen yield while continuously removing carbonaceous by-products. Such integrated process intensification fits seamlessly within the overarching goals of the REACTED initiative, advancing the design of next-generation systems capable of producing fully decarbonized energy carriers for sustainable mobility.

7 Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge the support provided by the **Region of Abruzzo** through the **FESR Abruzzo 2021–2027** funding program, under the call: *Avviso Pubblico Intervento 1.1.1.1: «Sostegno a progetti di Ricerca e Innovazione delle imprese afferenti ai Domini tecnologici della Strategia Regionale di Specializzazione Intelligente RIS3 Abruzzo 21-27»*.

8 References

- [1] Rochelle, G. T. (2009). *Amine scrubbing for CO₂ capture*. **Science**, 325(5948), 1652–1654.
- [2] Boot-Handford, M. E., et al. (2014). *Carbon capture and storage update*. **Energy & Environmental Science**, 7, 130–189.
- [3] Wang, Q., Luo, J., Zhong, Z., & Borgna, A. (2011). *CO₂ capture by solid adsorbents and their applications: current status and new trends*. **Energy & Environmental Science**, 4, 42–55.
- [4] Dreyer, D. R., Park, S., Bielawski, C. W., & Ruoff, R. S. (2010). *The chemistry of graphene oxide*. **Chemical Society Reviews**, 39, 228–240.
- [5] Sevilla, M., & Fuertes, A. B. (2012). *Chemical and structural properties of carbon-based materials for CO₂ adsorption*. **Energy & Environmental Science**, 5, 5638–5646.
- [6] Plaza, M. G., et al. (2010). *CO₂ capture by adsorption with nitrogen enriched carbon-based materials*. **Chemical Engineering Journal**, 163(3), 41–49.
- [7] Zhang, Z., et al. (2013). *Recent advances in graphene-based materials for gas adsorption and storage*. **Progress in Materials Science**, 59(3), 497–561.
- [8] Samanta, A., et al. (2012). *Post-combustion CO₂ capture using solid sorbents: a review*. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, 51(4), 1438–1463.
- [9] L. Largitte & R. Pasquier, A review of the kinetics adsorption models and their application to the adsorption of lead by an activated carbon, **Chemical Engineering Research and Design**, 109 (2016), pp. 495–504.
- [10] A. K. V. N. Pulakkat et al., Adsorption kinetic models: Physical meanings, applications, and solving methods, **Journal of Hazardous Materials**, 390 (2020), 122156.
- [11] Di Profio, P. et al. Separation of CO₂ and CH₄ from biogas by formation of clathrate hydrates: Importance of the driving force and kinetic promoters. **ACS Sustain Chem Eng** 5, 1990–1997 (2017).
- [12] Canale, V., Fontana, A., Siani, G. & Di Profio, P. Hydrate Induction Time with Temperature Steps: A Novel Method for the Determination of Kinetic Parameters. **Energy and Fuels** 33, 6113–6118 (2019).
- [13] Apparatus for preparing and studying clathrate hydrate. (2006). **Patent**, <https://hdl.handle.net/11391/147439>