



**Politecnico di Milano**  
CMIC Dept. "Giulio Natta"



**Sotacarbo SpA**

---

# Impianto pilota AG2S: progetto di massima

---

## Report Attività

**Andrea Bassani**  
**Anna Dell'Angelo**  
**Flavio Manenti<sup>1</sup>**  
**Eliseo Ranzi**

**Caterina Frau<sup>2</sup>**  
**Enrico Maggio**  
**Alberto Pettinau**

POLITECNICO DI MILANO  
Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica "Giulio Natta"  
Centre for Sustainable Process Engineering Research (SuPER)  
Building 6, Piazza Leonardo da Vinci, 32 - I-20133 Milano, ITALY  
<sup>1</sup>Phone: +39.(0)2.2399.3273; Fax: +39.(0)2.2399.3273; Email: [flavio.manenti@polimi.it](mailto:flavio.manenti@polimi.it)

SOTACARBO SPA  
c/o Grande Miniera di Serbariu, 09013 Carbonia, ITALY  
<sup>2</sup>Phone: +39 (0)781 1863071; Fax: +39 (0)781 670552; Email: [c.frau@sotacarbo.it](mailto:c.frau@sotacarbo.it)

Cagliari e Milano, 22/Novembre/2018



Index .....	3
1 Introduzione .....	5
2 Strumenti .....	7
2.1 <i>Libreria cinetica</i> .....	7
2.2 <i>Simulatore di reti di reattori</i> .....	7
2.3 <i>Libreria numerica</i> .....	8
2.4 <i>RTR simulation package</i> .....	8
3 Bilanci di massa ed energia (H&MB) .....	10
4 Confronto tecno-economico .....	11
4.1 <i>Tecnologia tradizionale, impianto chiavi-in-mano</i> .....	12
4.2 <i>AG2S™, impianto chiavi-in-mano</i> .....	14
4.3 <i>AG2S™ Refurbishing</i> .....	17
4.4 <i>Comparative scheme</i> .....	19
5 Conclusioni e sviluppi futuri .....	20
6 Pubblicazione scientifica .....	21



# 15

## 1 Introduzione

Il report illustra un confronto tecno-economico comparativo tra la tecnologia tradizionale (a seguire, Traditional Technology) per le Unità di Recupero Zolfo (Sulfur Recovery Units, SRUs) e la nuova tecnologia Acid Gas to Syngas™ (AG2S™).

Il confronto svolto permette pertanto di risolvere le attività definite per l'anno in corso, ovvero:

1. Bilanci di massa ed energia, utili per definire i carichi relativi delle varie unità;
2. Data Sheet delle operazioni.

Inoltre, al fine di istruire le attività di revamping per l'impianto IOSTO, entrambi gli studi di Grassroots e Refurbishing sono stati effettuati e sono parte integrante del confronto.

Il confronto è attualmente strutturato per una taglia industriale d'impianto, in modo da sfruttare appieno le competenze del gruppo di ricerca nella definizione preliminare dei carichi relativi (bilanci) delle varie operazioni unitarie e sezioni di processo. Tale studio, permetterà poi di dimensionare al meglio il pilota AG2S™ da predisporre presso Sotacarbo.

I dati selezionati corrispondono a correnti di processo tipiche di raffineria:

Description		H2S-AMINE	H2S-SWS
<b>Composition</b>			
H2	kmol/h	8.30	0.00
H2O	kmol/h	16.20	34.15
CO	kmol/h	0.00	0.00
N2	kmol/h	0.00	0.00
O2	kmol/h	0.00	0.00
CO2	kmol/h	11.00	0.00
H2S	kmol/h	403.50	42.05
SO2	kmol/h	0.00	0.00
COS	kmol/h	0.00	0.00
CS2	kmol/h	0.00	0.00
S2	kmol/h	0.00	0.00
S3	kmol/h	0.00	0.00
S4	kmol/h	0.00	0.00
S5	kmol/h	0.00	0.00
S6	kmol/h	0.00	0.00
S7	kmol/h	0.00	0.00
S8	kmol/h	0.00	0.00
NH3	kmol/h	0.00	33.60
C1	kmol/h	1.40	0.00
C2	kmol/h	0.70	0.00
C3	kmol/h	0.90	0.00
Molar Flow	kmol/h	442.00	109.80
Mass Flow	kg/h	14627.92	2620.647
Temperature	C	40.000	85.000
Pressure	barg	1.82	1.82
MW	kg/kmol	33.09	23.87

Il report include, pertanto:

- una breve introduzione degli strumenti utilizzati per lo studio di confronto (Paragrafo 2);
- i bilanci di massa ed energia, così come definito nell'offerta, per un progetto Grassroots (chiavi-in-mano) di Traditional Technology e di AG2S™ (Paragrafo 3);
- i bilanci di massa ed energia, così come definito nell'offerta per l'impianto IOSTO, per un progetto di Refurbishing (Paragrafo 4);
- le conclusioni e i prossimi sviluppi.

## 2 Strumenti

Per lo studio del processo AG2S™ ci si è avvalsi delle attività precedentemente sviluppate ed affinate (report 2015-2016) attraverso la collaborazione tra il Centro Ricerche SOTACARBO e il Centre for Sustainable Process Engineering Research (SuPER) del Politecnico di Milano.

Gli strumenti sono:

- Libreria cinetica con circa 30'000 reazioni;
- Simulatore di Reti di Reattori (DSmoke 7.0);
- Libreria numerica per la simulazione e l'ottimizzazione dei processi (BzzMath 7.1);
- CAPE solutions per l'integrazione dei modelli dettagliati di simulazione del Regenerative Thermal Reactor (RTR) della tecnologia AG2S™ all'interno del software di simulazione commerciale AspenHysys® (by AspenTech) and PRO/II® (by Schneider-Electric).

### 2.1 Libreria cinetica

La libreria cinetica è sviluppata presso il Centre for SuPER dal 1969<sup>1</sup>. La parte della libreria che comprende i meccanismi di pirolisi è il nucleo del programma SPYRO, per la simulazione dei forni di cracking, commercializzato da Technip-Pyrotec (NL) da diverse decadi.

La parte di libreria cinetica adottata per gli studi dell'AG2S comprende i meccanismi per l'ossidazione parziale del carbonio<sup>2</sup>, i meccanismi per le specie solforate<sup>3</sup> e i meccanismi per le specie azotate<sup>4</sup>. La libreria è convalidata attraverso un vasto database che include sperimentazioni ad hoc, esperimenti di letteratura e campagne sperimentali pilota (test run) e industriali.

La libreria cinetica dell'AG2S™ non è dischiusa alle comunità scientifica e tecnica.

### 2.2 Simulatore di reti di reattori

Il Reattore Termico Rigenerativo (RTR) della tecnologia AG2S™<sup>5</sup> è riportato in Figura 2.1. Si tratta di un reattore non ideale che include una camera termica, un waste heat boiler e uno scambiatore gas/gas di tipo feed/effluent per recupero energetico.

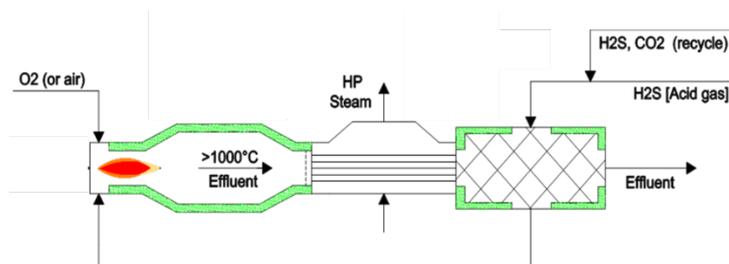


Figura 2.1. Reattore Termico Rigenerativo (RTR) per la tecnologia AG2S™.

<sup>1</sup> Ranzi, E., Faravelli, T., Manenti, F.; Pyrolysis, Gasification, and Combustion of Solid Fuels, *Advances in Chemical Engineering*, 49, 1-94, 2016.

<sup>2</sup> Ranzi, E., Frassoldati, A., Grana, R., Cuoci, A., Faravelli, T., Kelley, A. P., & Law, C. K.; Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels, *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(4), 468-501, 2012.

<sup>3</sup> Manenti, F., Papisidero, D., & Ranzi, E.; Revised kinetic scheme for thermal furnace of sulfur recovery units. *Chemical Engineering Transactions*, 32, 1185-129, 2013.

<sup>4</sup> Frassoldati, A., Faravelli, T., & Ranzi, E.; Kinetic modeling of the interactions between NO and hydrocarbons at high temperature. *Combustion and Flame*, 135(1), 97-112, 2003.

<sup>5</sup> Manenti, F., Pierucci, S., Molinari, L.; Process for reducing CO2 and producing syngas, WO2015/015457A1.

Il reattore RTR è simulato mediante la Suite DSmoke. Tale Suite permette di sviluppare simulazioni costituite da una serie più o meno complessa di reattori ideali, ognuna contenente specifiche cinetiche, in modo da caratterizzare al meglio il comportamento di reattori non ideali. DSmoke permette di simulare il reattore RTR con singola o doppia (solo se in presenza di ammoniaca) camera di combustione e con calcolo degli effetti di ricombinazione tipici della prima parte del waste heat boiler.

La Suite DSmoke è associata alla tecnologia AG2S™, inclusive di schemi cinetici, per permettere la progettazione e il calcolo preventivo delle performance e delle rese. Il codice non è discusso alle comunità scientifica e tecnica.

### 2.3 Libreria numerica

La libreria numerica BzzMath<sup>6</sup> è utilizzata in oltre 70 paesi per il calcolo scientifico. Essa include classi per la risoluzione di sistemi algebrici lineari/non-lineari, sistemi differenziali ed algebrico-differenziali, ottimizzazioni on/off-line, riconciliazione dati, design of experiments, regressioni e stima di parametri.

La libreria risolve in maniera efficiente e performante la rete di reattori sviluppata in DSmoke e permette una rapida convergenza dei calcoli di progettazione e di gestione per la tecnologia AG2S™.

Il codice della libreria BzzMath non è discusso alle comunità scientifica e tecnica. La libreria è direttamente implementata e operante nella Suite DSmoke.

### 2.4 RTR simulation package

I modelli cinetici e la libreria numerica sono pienamente integrati e interagenti nella Suite DSmoke, in modo da ottenere una simulazione “friendly” del reattore RTR. Tale pacchetto integrato (RTR Simulation Package) è a sua volta integrato all’interno dei principali software commerciali di simulazione dettagliata di processo (AspenTech® and PRO/II®) utilizzati a livello mondiale per le attività di ingegneria di base, di fattibilità economica e processistica e di convalida dei processi.

Il pacchetto RTR Simulation Package include le proprietà termodinamiche delle specie coinvolte e interpreta gli schemi cinetici secondo i formati CHEMKIN, restituendo in continuazione i risultati dei calcoli in file ASCII interpretabili dai simulatori di processo.

Nel caso specifico della presente attività, il reattore RTR è simulato mediante la seguente rete di reattori (Figure 2.2):

- 1) PFR adiabatico (Prima camera termica RTR);
- 2) PFR adiabatico (Seconda camera termica RTR);
- 3) PFR non isoterma (Waste Heat Boiler).

Si considerano due camere termiche assumendo, nella peggiore delle ipotesi, che vi sia presenza di ammoniaca nelle correnti di ingresso.

Lo scambiatore di calore gas/gas è direttamente simulato all’interno dei pacchetti commerciali di simulazione di processo.

<sup>6</sup> Buzzi-Ferraris, G., Manenti, F., Differential and Differential-Algebraic Systems for the Chemical Engineer: Solving Numerical Problems, WILEY-VCH, Weinheim, Germany, 2015 (VOL. 4)

Buzzi-Ferraris, G., Manenti, F., Nonlinear Systems and Optimization for the Chemical Engineer: Solving Numerical Problems, WILEY-VCH, Weinheim, Germany, 2014 (VOL. 3)

Buzzi-Ferraris, G., Manenti, F., Data Interpretation and Correlation, KIRK-OTHMER ENCYCLOPEDIA of CHEMICAL TECHNOLOGY, JOHN WILEY, 5th Ed., New York, USA, 2011. Online ISBN: 9780471238966.

Buzzi-Ferraris, G., Manenti, F., Interpolation and Regression Models for the Chemical Engineer: Solving Numerical Problems, WILEY-VCH, Weinheim, Germany, 2010 (VOL. 2)

Buzzi-Ferraris, G., Manenti, F., Fundamentals and Linear Algebra for the Chemical Engineer: Solving Numerical Problems, WILEY-VCH, Weinheim, Germany, 2010 (VOL. 1)

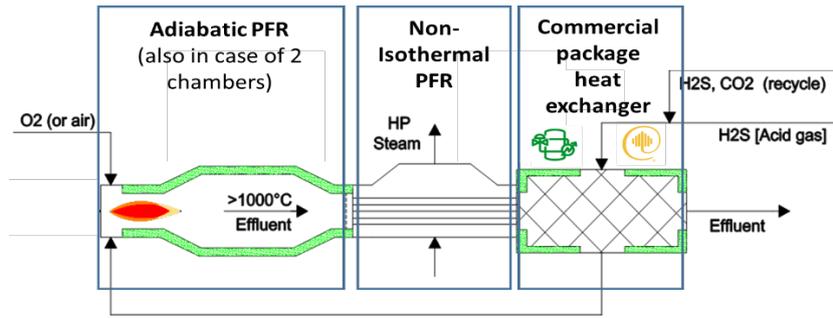


Figura 2.2. Struttura di simulazione per il reattore RTR.

### 3 Bilanci di massa ed energia (H&MB)

Si veda l'allegato no. 1.



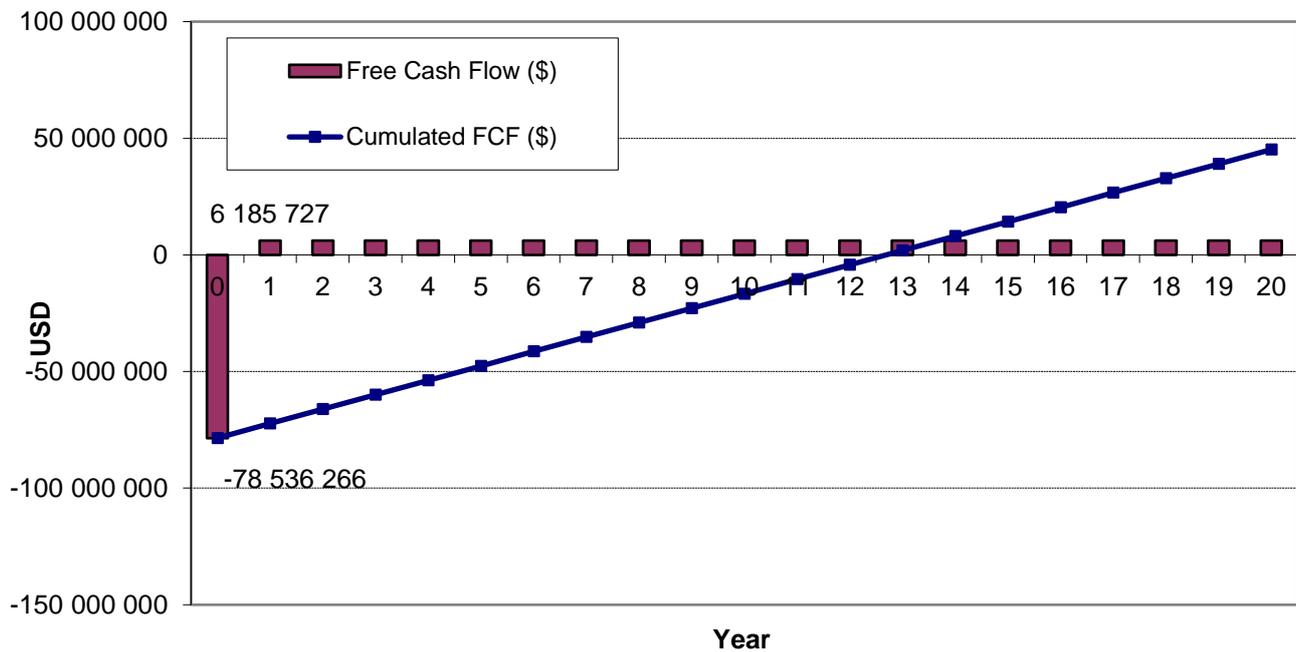
## 4.1 Tecnologia tradizionale, impianto chiavi-in-mano

Main streams	Hours per day 24				Days per year 347	
	Process inlet (t/h)	Process outlet (t/h)	Process inlet (t/d)	Process outlet (t/d)	Process inlet (t/y)	Process outlet (t/y)
H2S in the feed stock	15.17		364		126 369	
Fuel gas consumption at the incinerator	0.86		21		7 162	
CO2 released at the incinerator stack		2.85		68		23 760
Steam recovered (net of steam reused)		34.46		827		286 941
Liquid sulfur produced		14.28		343		118 957

Free Cash Flow (year > 0)	Quantity (t/y)	Unit price (\$/t)	Amount (\$/y)	Notes
<b>REVENUES (NET SALES)</b>			<b>8 616 261</b>	
Steam recovered (net of steam reused)	286 941	16.42	4 710 555	
Liquid sulfur produced	118 957	32.83	3 905 707	
<b>COST OF GOODS SOLD</b>			<b>2 330 535</b>	
Fuel gas consumption at the incinerator	7 162	284.55	2 037 982	
CO2 released at the incinerator stack	23 760	6.79	161 221	
Personnel			109 443	Hp. 2 operators
Electric power			21 889	
Maintenance			0	Hp. Performed by personnel once per year during shut-down
<b>GROSS MARGIN</b>			<b>6 285 727</b>	
Operating expenses (General, administrative and selling)			100 000	
<b>EBITDA</b>			<b>6 185 727</b>	
Depreciation and Amortization		9.75%	7 657 286	
<b>EBIT</b>			<b>-1 471 559</b>	
Interest charges			0	Hp. Issues related to project financing and capital structure are neglected
<b>EBT</b>			<b>-1 471 559</b>	
Taxes		40.00%	0	
<b>NOPAT (Net Operating Profit After Taxes)</b>			<b>-1 471 559</b>	
+ Depreciation and Amorization			7 657 286	
- Capital expenditure			0	Hp. All initial outlay is paid at year = 0
- Increase in Net Working Capital			0	Hp. Issues related to credit/debit management are neglected
<b>= FREE CASH FLOW</b>			<b>6 185 727</b>	

Investment	
A. Capital investment (\$)	78 536 266
B. Time horizon (y)	20
C. Annual Free Cash Flow (\$)	6 185 727
KPI of investment	
D. Payback period (=A/C) (y)	12.7
E. Cumulated Cash-Flow (=B*C-A) (\$)	45 178 269
F. ROI (=E/A)	57.53%
G. NPV (discount rate=WACC=6%) (\$)	-7 157 045
H. IRR (Internal Rate of Return) (NPV(IRR)=0)	4.78%
I. Profitability Index (=G/A)	-9.11%

### Annual Free Cash Flow and Cumulated Free Cash Flow



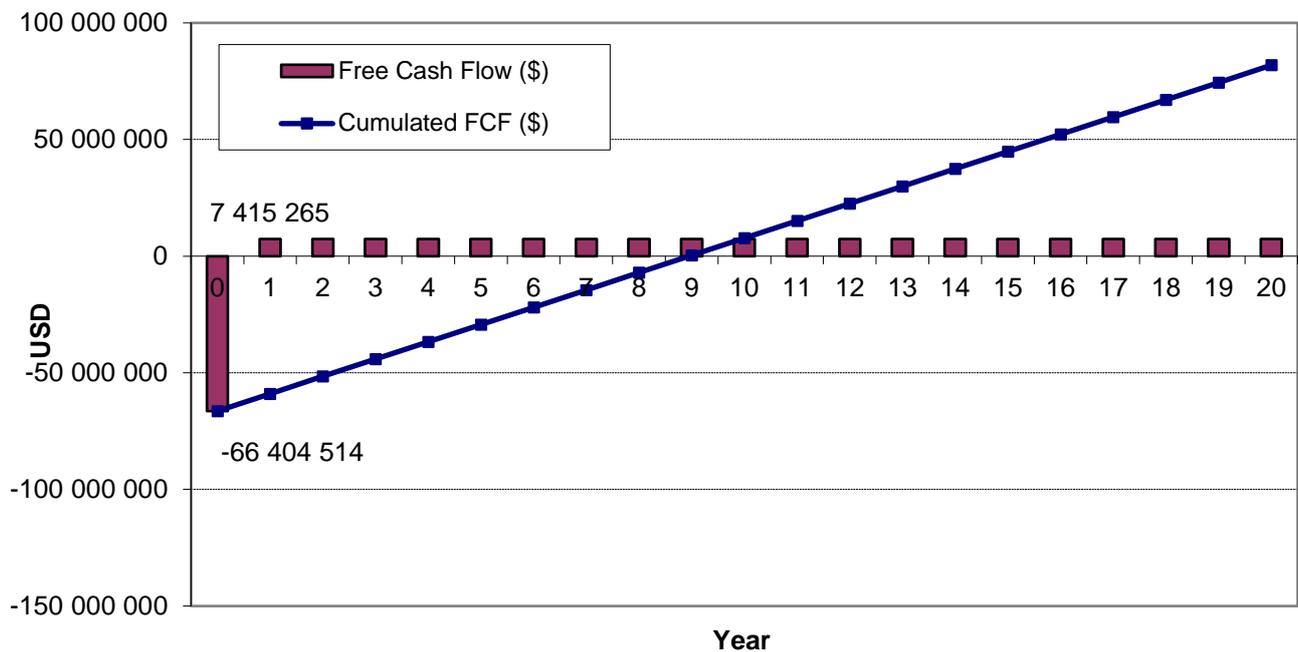
## 4.2 AG2S™, impianto chiavi-in-mano

Main streams	Process inlet (t/h)	Process outlet (t/h)	Hours per day		Days per year	
			24	24	347	347
H2S in the feed stock	15.17		364		126 336	
Fuel gas consumption at the incinerator	0					
CO2 released at the incinerator stack		0.02				
Oxygen injection	4.63		111		38 559	
CO2 reused in the reaction	0.00		0		0	
Hydrogen produced		0.47		11		3 914
Steam recovered (net of steam reused)		0.00		0		0
Liquid sulfur produced		14.28		343		118 924

Free Cash Flow (year > 0)	Quantity (t/y)	Unit price (\$/t)	Amount (\$/y)	Notes
<b>REVENUES (NET SALES)</b>			<b>9 901 894</b>	
Saved CO2 emissions (CO2 reused)	0	6.79	0	
Hydrogen produced (H2)	3 914	1532.20	5 997 281	
Steam recovered (net of steam reused)	0	16.42	0	
Liquid sulfur produced	118 924	32.83	3 904 613	
<b>COST OF GOODS SOLD</b>			<b>1 777 120</b>	
Oxygen injection	38 559	42.68	1 645 789	
Personnel			109 443	Hp. 2 operators
Electric power			21 889	Hp. +220k\$ neglected due to syngas compression
Maintenance			0	Hp. Performed by personnel once per year during shut-down
<b>GROSS MARGIN</b>			<b>8 124 774</b>	
Operating expenses (General, administrative and selling)			100 000	
<b>EBITDA</b>			<b>8 024 774</b>	
Depreciation and Amortization		9.79%	6 501 002	
<b>EBIT</b>			<b>1 523 772</b>	
Interest charges			0	Hp. Issues related to project financing and capital structure are neglected
<b>EBT</b>			<b>1 523 772</b>	
Taxes		40.00%	609 509	
<b>NOPAT (Net Operating Profit After Taxes)</b>			<b>914 263</b>	
+ Depreciation and Amortization			6 501 002	
- Capital expenditure			0	Hp. All initial outlay is paid at year = 0
- Increase in Net Working Capital			0	Hp. Issues related to credit/debit management are neglected
<b>= FREE CASH FLOW</b>			<b>7 415 265</b>	

Investment	
A. Capital investment (\$)	66 404 514
B. Time horizon (y)	20
C. Annual Free Cash Flow (\$)	7 415 265
KPI of investment	
D. Payback period (=A/C) (y)	9.0
E. Cumulated Cash-Flow (=B*C-A) (\$)	81 900 789
F. ROI (=E/A)	123.34%
G. NPV (discount rate=WACC=6%) (\$)	17 592 446
H. IRR (Internal Rate of Return) (NPV(IRR)=0)	9.27%
I. Profitability Index (=G/A)	26.49%

### Annual Free Cash Flow and Cumulated Free Cash Flow



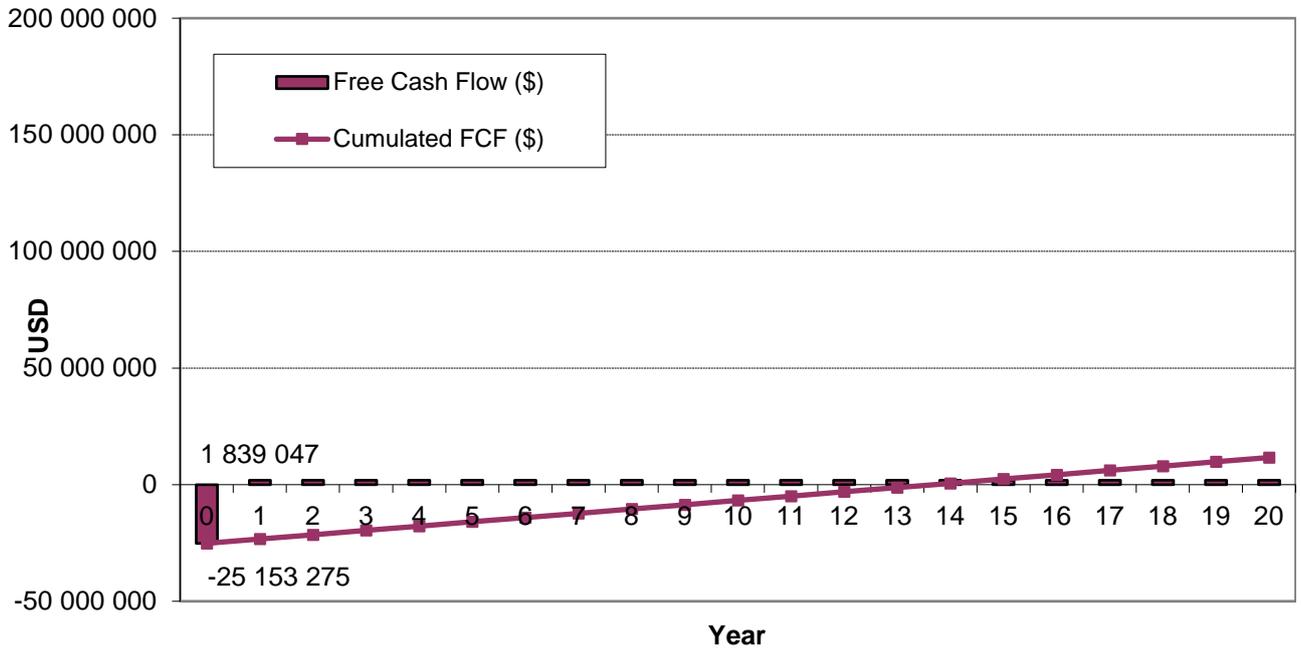


## 4.3 AG2S™ Refurbishing

Free Cash Flow (year > 0)	Trad tech plant	AG2S Refurbished plant	Delta	Notes
<b>REVENUES (NET SALES)</b>	<b>8 616 261</b>	<b>9 901 894</b>	<b>1 285 633</b>	
Saved CO2 emissions (CO2 reused)		0		
Hydrogen produced (H2)		5 997 281		
Steam recovered (net of steam reused)	4 710 555	0		
Liquid sulfur produced	3 905 707	3 904 613		
<b>COST OF GOODS SOLD</b>	<b>2 330 535</b>	<b>1 777 120</b>	<b>-553 414</b>	
Fuel gas consumption at the incinerator	2 037 982			
CO2 released at the incinerator stack	161 221			
Oxygen injection		1 645 789		
Personnel	109 443	109 443		
Electric power	21 889	21 889		
Maintenance	0	0		
<b>GROSS MARGIN</b>	<b>6 285 727</b>	<b>8 124 774</b>	<b>1 839 047</b>	
Operating expenses (General, administrative and selling)	100 000	100 000		
<b>EBITDA</b>	<b>6 185 727</b>	<b>8 024 774</b>	<b>1 839 047</b>	
Depreciation and Amortization	7 657 286	10 191 478	2 534 192	Hp: Amortization of refurbished plant = Amortization Trad tech plant + Amortization of capital invested for refurbishing
<b>EBIT</b>	<b>-1 471 559</b>	<b>-2 166 704</b>	<b>-695 145</b>	
Interest charges	0	0		
<b>EBT</b>	<b>-1 471 559</b>	<b>-2 166 704</b>	<b>-695 145</b>	
Taxes	0	0		
<b>NOPAT (Net Operating Profit After Taxes)</b>	<b>-1 471 559</b>	<b>-2 166 704</b>	<b>-695 145</b>	
+ Depreciation and Amortization	7 657 286	10 191 478	2 534 192	
- Capital expenditure	0	0		
- Increase in Net Working Capital	0	0		
<b>= FREE CASH FLOW</b>	<b>6 185 727</b>	<b>8 024 774</b>	<b>1 839 047</b>	<b>Cash Flow of refurbished plant does not change if the Trad tech plant is completely amortized (as amortization is first subtracted and then readded)</b>

Investment	
A. Capital investment (\$)	25 153 275
B. Time horizon (y)	20
C. Annual Free Cash Flow (\$)	1 839 047
KPI of investment	
D. Payback period (=A/C) (y)	13.7
E. Cumulated Cash-Flow (=B*C-A) (\$)	11 627 669
F. ROI (=E/A)	46.23%
G. NPV (discount rate=WACC=6%) (\$)	-3 829 762
H. IRR (Internal Rate of Return) (NPV(IRR)=0)	3.93%
I. Profitability Index (=G/A)	-15.23%

### Annual Free Cash Flow and Cumulated Free Cash Flow

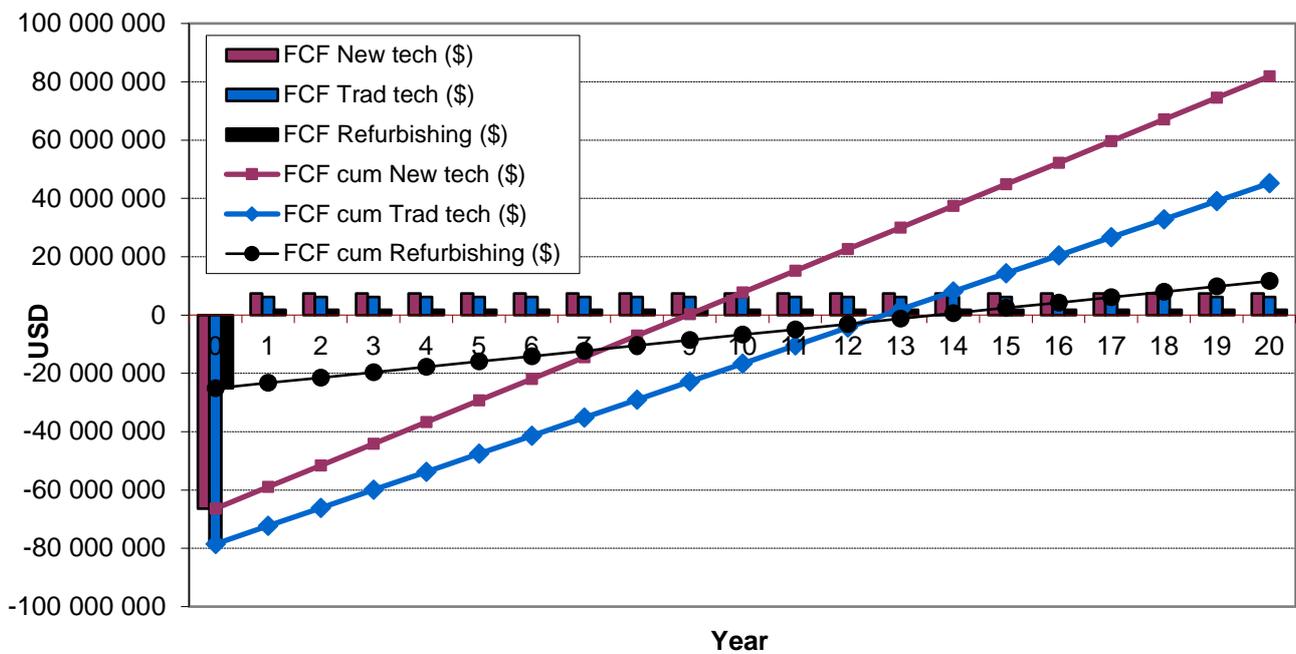


# 19

## 4.4 Comparative scheme

Investment	Traditional technology plant	AG2S™ technology plant	Refurbishing
A. Capital investment (\$)	78 536 266	66 404 514	25 153 275
B. Time horizon (y)	20	20	20
C. Annual Free Cash Flow (\$)	6 185 727	7 415 265	1 839 047
<b>KPI of investment</b>			
D. Payback period (=A/C) (y)	12.7	9.0	13.7
E. Cumulated Cash-Flow (=B*C-A) (\$)	45 178 269	81 900 789	11 627 669
F. ROI (=E/A)	57.53%	123.34%	46.23%
G. NPV (discount rate=WACC=6%) (\$)	-7 157 045	17 592 446	-3 829 762
H. IRR (Internal Rate of Return) (NPV(IRR)=0)	4.78%	9.27%	3.93%
I. Profitability Index (=G/A)	-9.11%	26.49%	-15.23%

### Annual Free Cash Flow and Cumulated Free Cash Flow



## 5 Conclusioni e sviluppi futuri

Per il caso specifico di questo primo confronto tecno-economico si è scelto un tipico impianto di raffineria con necessità di recuperare l'idrogeno dalla corrente ricca in H<sub>2</sub>S. La tecnologia selezionata è quella di Tecnimont-KT, utilizzata per la progettazione di diverse unità di recupero zolfo (SRU).

Si sono stimati i bilanci di massa ed energia per la tecnologia AG2S™ senza alcun tipo di ottimizzazione di processo. Inoltre, si è selezionato l'idrogeno come unico vero prodotto a discapito del potenziale (più elevato) in termini di syngas come prodotto complessivo della tecnologia AG2S™.

Pur in questo contesto, la tecnologia AG2S™ risulta economicamente più appetibile della tecnologia tradizionale sia in termini di CapEx che di OpEx per impianti chiavi-in-mano. Il Refurbishing, invece, è decisamente più sensibile agli aspetti di ottimizzazione non ancora implementati e, tra le altre, questa attività rientra nei potenziali sviluppi futuri.

Le principali attività di sviluppo a seguire, sulla base del presente report, riguarderanno:

- L'analisi dettagliata del processo IOSTO con scale-down di simulazione a partire dal deliverable della presente attività.
- L'ottimizzazione CapEx/OpEx del Refurbishing dell'impianto IOSTO.

## 6 Staff e pubblicazione scientifica

Grazie alla collaborazione tra SOTACARBO e POLIMI è stato possibile attivare una nuova preziosa risorsa presso il POLIMI. La Dr.ssa Anna Dell'Angelo è ora parte integrante del gruppo di ricerca e sarà il diretto riferimento per le attività scientifiche lato POLIMI, sia per quanto concerne la simulazione ed ottimizzazione di Refurbishing dell'impianto IOSTO, sia per il supporto pratico all'Ing. Frau per la parte sperimentale.

Si prevede un periodo di visita di durata da definire per la Dr.ssa Dell'Angelo e per il Prof. Manenti per consolidare ed integrare ulteriormente le attività.

È, inoltre, in corso di ultimazione la pubblicazione scientifica:

*A. Dell'Angelo, A. Bassani, C. Frau, A. Pettinau, E. Maggio, G. Spigno, F. Manenti, Grassroots and refurbishing techno-economic assessment of AG2S™ technology for CO2 mitigation in traditional refineries, Journal of Cleaner Production, to be subm. in 2018.*

**Flavio Manenti**

Professor of Chemical Plants and Operations  
Executive board of EFCE (European Federation of Chemical Engineering)  
President-elect of the Computer Aided Process Engineering (CAPE), EFCE's Working Party  
UEFA-licensed and Federal Soccer Coach for FIGC SGS U15 Italia

**POLITECNICO DI MILANO**

Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica "G. Natta"  
Sustainable Process Engineering Research (SuPER) team  
Piazza Leonardo da Vinci, 32, 20133 Milano, ITALY

**TECHNISCHE UNIVERSITÄT BERLIN**

Alexander von Humboldt Professor  
DBTA (Dynamic und Betrieb Technischer Anlagen) Faculty  
Sekt. KWT 9, Strasse des 17. Juni, 135 - D-10623 Berlin, GERMANY

(Mobile) +39.338.5665817  
(Phone) +39.(0)2.2399.3273; +49.(0)30.31423418  
(Email) [flavio.manenti@polimi.it](mailto:flavio.manenti@polimi.it)  
(Web) <http://super.chem.polimi.it>