

Approccio combinatoriale: miglioramento e sviluppo di catalizzatori per processi petrolchimici

I campi applicativi della chimica combinatoriale sono in continuo sviluppo. Dopo il successo ottenuto nel settore farmaceutico e biotecnologico l'approccio combinatoriale sta diventando una tecnica sempre più diffusa nelle attività di ricerca, in particolare nello stadio di screening e nella scoperta di nuovi materiali. Negli ultimi anni la nuova tecnica è stata applicata in diversi campi della catalisi eterogenea, con tutti i problemi ed i limiti derivanti dalle difficoltà di superare metodi di ricerca convenzionali collaudati da decenni di esperienza. La preparazione di un catalizzatore industriale è infatti un'attività molto complessa che ha un effetto enorme sulle sue proprietà (attività, selettività, durata ecc.) che rende difficile il trasferimento dei risultati alle condizioni di reazione industriali (*Chimica e Industria*, 2001, **83**(8), 51). Nonostante le difficoltà ed i limiti diverse società sono oggi impegnate sul fronte del miglioramento di processi petrolchimici.

Temi di ricerca fondamentale ad alto rischio e difficilmente affrontabili con i metodi tradizionali

Società	Area di ricerca
Thales Technologies AG, Zurich	Catalizzatori di polimerizzazione
Uop, Des Plaines	Nuovi catalizzatori di isomerizzazione di paraffine
Hte, Heidelberg	Fenolo da benzene, ossido di propilene mediante ossidazione diretta del propilene, conversione del metano a benzina
Symyx Technologies, Inc, Santa Clara	Acido acrilico da propano; acido acetico da etano; etilene da etano (ossidazione)
Avantium Technologies, Amsterdam	Ossidazione diretta del propano; catalizzatori di idrogenazione selettiva

Per capirne le motivazioni va ricordato che l'industria petrolchimica, con più di 150 processi, gran parte dei quali basati sull'impiego di catalizzatori eterogenei, presenta grandi potenzialità applicative (*C&EN*, July 21, 2003). È vero che decenni di ricerca profusa da importanti aziende industriali hanno portato le rese di reazione sopra il 90% per la maggior parte delle reazioni catalitiche coinvolte, rendendo poco attraenti sforzi di ricerca dedicati alla riduzione dei costi. Occorre tuttavia ricordare che l'incremento di un punto percentuale di resa, come pure l'aumento di vita del catalizzatore, possono dare ritorni significativi. Accanto agli obiettivi di miglioramento l'attenzione è anche rivolta all'individuazione di sistemi catalitici che aprano la strada allo sviluppo di processi basati su materie prime a minor costo e/o a ridotto impatto ambientale. Tipici esempi sono l'impiego di idrocarburi saturi in sostituzione di olefine in temi di ricerca fondamentale ad alto rischio e difficilmente affrontabili con i metodi tradizionali (v. riquadro).

Gli attori della chimica combinatoriale operano perlopiù come società di servizio facendo leva sulla disponibilità di ampie librerie di catalizzatori, tecniche di screening, modelli matematici di simulazione di reazione e competenze specialistiche. È proprio sui modelli di simulazione che Thales, creata nel 1999

da uno spinoff di Eth, fonda la sua attività di servizio per società petrolchimiche orientate a commissionare all'esterno ricerche di catalisi. Anche Uop, società fortemente presente nel campo del licensing di tecnologie nel settore petrolchimico, è entrato nel 2002 nel business della chimica combinatoriale applicata al miglioramento ed allo sviluppo di catalizzatori eterogenei. L'impegno prevalente è diretto allo sviluppo di tecniche in grado di simulare, nel miglior modo possibile, le condizioni di reazione di processi commerciali.

Uop ha anche sviluppato un metodo preparazione e di screening combinatoriale (Torial), in grado di provare 512 catalizzatori in 5 settimane. Tale sistema è stato utilizzato nel progetto di ricerca sull'isomerizzazione di paraffine con un enorme accorciamento dei tempi. Hte (High Throughput Experimentation), presente non solo in Europa ma anche negli Stati Uniti, è impegnata su tutto il fronte della chimica combinatoriale, dalla preparazione di librerie di catalizzatori, alla caratterizzazione ed al testing con l'impiego di multi-reattori (da 8 a 96) operanti 24 ore al giorno e 7 giorni per settimana. Anche Symyx, società che ha fatto parlare di sé per aver sviluppato in collaborazione con Dow Chemical nuovi catalizzatori per Ldpe (*Chimica e Industria*, 2003, **85**(6), 28) è fortemente impegnata, oltre che sul miglioramento di catalizzatori di processi commerciali, nello sviluppo, in collaborazione con Bp, ExxonMobil e Celanese, di nuovi sistemi catalitici per processi sui quali hanno lavorato per anni senza successo diverse aziende chimiche. Temi di ricerca innovativi sono nel portafoglio di Avantium Technologies che dispone di una vasta libreria

di catalizzatori e di tecniche avanzate di testing. Come si vede il ricorso alla chimica combinatoriale nel campo della catalisi non è più un caso isolato nonostante permangano scetticismi anche tra gli addetti ai lavori. Bisognerà attendere alcuni anni per vedere se i risultati saranno pari alle attese. Il successo dipenderà molto dai progressi in corso sullo sviluppo di metodi di testing più affidabili rispetto allo stato dell'arte. Fin da ora però è indubbio che l'idea del raggiungimento rapido dei risultati sta entrando nella mente di ricercatori e porterà a cambiare drasticamente il modo di far ricerca nel campo della catalisi. In questo contesto è da citare il progetto Combicat finanziato dalla Comunità Europea che coinvolge numerosi centri di ricerca industriali e accademici tra i quali EniTecnologie. Nel progetto sono stati affrontati diversi aspetti della catalisi combinatoriale, incluso lo sviluppo: a) di apparati sperimentali per la preparazione delle librerie di catalizzatori e il loro testing in multireattori; b) del software per la pianificazione della sperimentazione e l'elaborazione dei dati; c) di catalizzatori eterogenei per reazioni di interesse della petrolchimica e dell'industria chimica fine.

Dettagli sui centri coinvolti e sulle attività considerate sono disponibili nel sito Web: <http://www.ec-combicat.org/>.