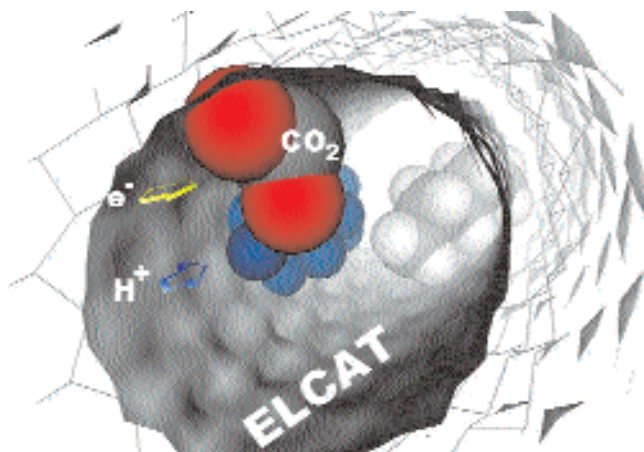


di *Gabriele Centi*
Presidente della Federazione
Europea delle Società di Catalisi
gabriele.centi@unime.it



QUALE FUTURO PER LA CATALISI

L'analisi del supporto della Comunità Europea al settore della catalisi nell'ambito del 6° Programma Quadro evidenzia che questo settore è caratterizzato da una capacità notevole di innovazione ed eccellenza ed è considerato uno degli elementi strategici dello sviluppo sostenibile.

Il contributo della ricerca italiana in questo settore è significativo. Sono inoltre individuate alcune tematiche generali di tipo fondamentale in questo settore con notevoli potenziali ricadute, non solo nel settore specifico, ma in tutto quello generale dei materiali nanostrutturati e nanocompositi, e dei materiali funzionali.

Una domanda che recentemente viene spesso posta è se esiste e quale possa essere il futuro per la catalisi. Infatti si ha l'impressione che a livello europeo la catalisi sia considerata un "tool" più che una scienza, e quindi un qualcosa che aiuta a raggiungere uno scopo, ma non di per sé un elemento centrale all'innovazione. Inoltre, spesso nell'ambiente scientifico la catalisi viene considerata un'arte più che una scienza, ovvero ancora un qualcosa che permette di ottenere un risultato più che contribuire allo sviluppo della scienza. Si potrebbe obiettare che in molti vi è ancora confusione tra alchimia e chimica, ma la risposta richiede certamente una risposta più articolata.

La catalisi, e mi riferisco in particolare alla catalisi eterogenea, dato che oltre il 90%

dei processi industriali chimici su larga scala utilizza catalizzatori solidi, è stata legata in modo stretto allo sviluppo dei processi di raffinazione e petrolchimici nell'ultimo secolo. Risulta facile dimostrare che lo sviluppo industriale in questi settori e, per ricaduta, l'attuale nostra qualità della vita è legata in maniera diretta allo sviluppo di nuovi catalizzatori. Ad esempio, la catalisi è essenziale alla produzione economica della maggior parte dei monomeri per polimerizzazione (e quindi di tutti i materiali polimerici), ed altresì alla produzione di tutti i prodotti energetici ed in molti dei processi di depurazione e trattamento emissioni. Come esempio si potrebbe citare che senza l'introduzione degli attuali catalizzatori zeolitici per il cracking catalitico di frazioni del petrolio (attorno agli anni 1960-

1970) occorrerebbe processare attualmente oltre il doppio del petrolio per ottenere una produzione analoga di frazioni energetiche pregiate (benzine, gasolio ecc.).

Tuttavia, sebbene sia nella raffinazione sia nella produzione chimica esistano ancora notevoli esigenze di miglioramento (ad esempio, nella raffinazione per processare nuove cariche, produrre nuovi vettori energetici, ridurre l'impatto ambientale dei prodotti e della produzione, e nella produzione chimica per utilizzare nuove materie prime, migliorare l'efficienza e selettività dei processi spesso ancora bassa, e ridurre la complessità e rischio), l'effetto combinato dello spostamento progressivo di queste produzioni fuori dall'area europea, della continua ristrutturazione dell'industria chimica europea ed in parte anche di scelte non

legate ad attenta valutazione tecnico-economica, ha determinato la riduzione significativa del supporto dell'industria europea a ricerche a medio lungo-termini, quali quelle nel settore della catalisi. Questo ha portato alla rottura del legame tra catalisi e produzione chimica con conseguente progressiva riduzione dell'interesse industriale (e finanziamento) verso la catalisi. In Italia la situazione è analoga, ed in parte ancora più negativa.

Essendo il settore della catalisi significativo in termini di ricercatori (oltre 10.000 in Europa e circa un 400-500 in Italia), la domanda che deriva da questa analisi è quindi se esiste capacità di innovazione ed

una chiara tendenza a "mutuare" la ricerca nazionale da quella europea. Per limitare l'analisi, tuttavia, farò riferimento specifico a solo due sotto-programmi finanziati dalla EU nell'ambito del 6° PQ, essendo questi quelli che possono dare le migliori indicazioni riguardo ai concetti di innovazione ed eccellenza: (i) il Programma NEST (Nuove ed emergenti scienze e tecnologie) e (ii) i Network di Eccellenza (limitatamente alla priorità 3, ovvero sulla tematica delle nanotecnologie e nanomateriali).

Il programma NEST è particolarmente rivolto all'innovazione, in quanto prevede il finanziamento a "ricerche visionarie e non convenzionali che possano aprire nuovi

(Electrocatalytic Conversion in gas Phase of CO_2 in Confined Catalysts), prevede lo sviluppo di catalizzatori a base di nanoparticelle di metallo nobile in nanotubi di carbonio e l'applicazione come elettrocatalizzatori (in sistemi analoghi a celle a combustibile PEM o SOFC) per la conversione della CO_2 a combustibili. Il progetto è coordinato dall'Italia (Univ. Messina) e vede la partecipazione di vari centri di ricerca europei di catalisi quali il Max Planck Gesell (Fritz-Haber Institute di Berlino, Germania) ed il

eccellenza in questo settore, e come questa capacità debba essere utilizzata per passare da una concezione della catalisi legata al processo chimico ad una visione più estesa.

Il supporto della Comunità Europea alla ricerca sulla catalisi

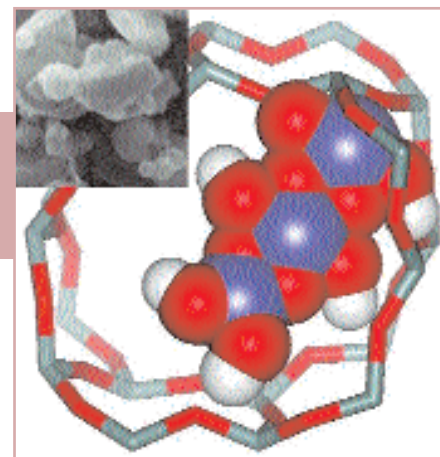
La prima questione (innovazione ed eccellenza) può essere affrontata facendo riferimento ai progetti approvati nell'ambito del 6° Programma Quadro (6° PQ) della Comunità Europea (EU), in quanto permette un confronto più omogeneo tra diverse aree di ricerca. Inoltre, anche in Italia vi è



campi di sviluppo per la scienza e la tecnologia in Europa" (<http://www.cordis.lu/nest>). In particolare, i progetti ADVENTURE riguardano "tematiche ambiziose e che rappresentano una sfida scientifica tecnologica, con lo scopo di sviluppare nuove conoscenze scientifiche e capacità tecnologiche con un potenziale impatto molto elevato, usando approcci non convenzionali ed innovativi" (<http://www.cordis.lu/nest/adventure.htm>).

Nella prima chiamata NEST-ADVENTURE (i progetti in fase di avvio in questo periodo) sono stati selezionati solamente dieci progetti di ricerca in tutti i settori della scienza, tra i circa 200 presentati. I progetti vertono su diversi argomenti, dalla diagnosi delle malattie, alla difesa da armi batteriologiche, all'impatto dei composti chimici sulla salute, a nuove tecniche di microscopia atomica ed all'utilizzo di nuovi processi catalitici non convenzionali per la conversione di CO_2 ad idrocarburi.

Quest'ultimo progetto, denominato ELCAT

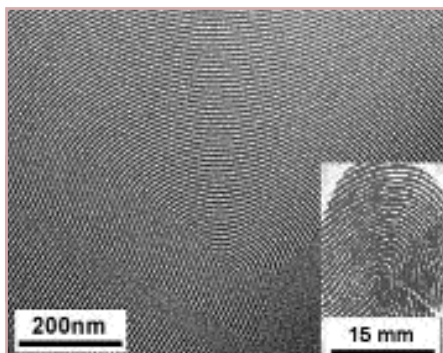


Nanoparticella di ossido di vanadio all'interno della cavità zeolitica

CNRS (Strasburgo, Francia).

I Network of Excellence (NoE) sono uno dei nuovi strumenti del 6° PQ della EU volti ad individuare aree di eccellenza in Europa. Attraverso l'integrazione delle attività delle istituzioni partecipanti, l'obiettivo finale è di sviluppare una struttura permanente (Istituto virtuale) capace di auto-finanziarsi diventando il punto di riferimento alla ricerca e sviluppo nel settore. Dato che il numero di NoE finanziabili è limitato, un elemento centrale nella scelta della tematiche finanziate dalla EU è la capacità innovativa del settore ed altresì il suo ruolo chiave nella promozione degli obiettivi comunitari (produzione sostenibile, qualità della vita e dell'ambiente ecc.).

Nella Priorità 3 (Nanotechnologies and nanoscience, knowledge-based multifunctional materials, and new production processes and devices) sono stati selezionati circa 20 NoE (17 nella prima call, e gli altri - 2° call - in fase di definizione). Il numero totale di NoE approvati nel 6PQ (tutte le priorità e programmi) è circa 60. Tra questi, è in fase finale di approvazione il network di eccellenza IDECAT (Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production) centrato appunto sulla catalisi. La catalisi entra in parte anche in altri NoE, quali INSIDE-PORES che studia lo sviluppo di solidi nanoporosi e nel progetto integrato (IP) CANAPE centrato sulla preparazione con tecniche essenzialmente catalitiche di nanotubi di carbonio. La coordinazione di



L'immagine principale presenta una microfotografia con il microscopio TEM di un catalizzatore (materiale mesoporoso SBA-15), mentre l'inset della figura rappresenta l'impronta di un dito

IDECAT è italiana (INSTM, Consorzio Interuniversitario di Scienza e Tecnologia dei Materiali) e vi partecipano varie Università italiane (Bologna, Milano, Torino, Messina) e gruppi del CNR, oltre ovviamente ai principali centri di eccellenza europei nel settore. L'obiettivo principale è l'integrazione tra catalisi eterogenea, omogenea e biocatalisi, per lo sviluppo della nuova generazione di nanomateriali catalitici. È utile anche evidenziare che il Consorzio INSTM coordina gli unici 3 NoE approvati (od in fase di approvazione) a coordinazione italiana nell'ambito della priorità 3, confermando ulteriormente il ruolo della catalisi

nello sviluppo di nanomateriali in Italia. Anche tra i progetti integrati (IP), è in fase di definizione finale un progetto specifico centrato sulla catalisi (TOPCOMBI) tra la ventina degli IP selezionati nell'ambito della priorità 3 (circa un centinaio quelli totali selezionati nel 6PQ). L'obiettivo di questo IP è lo sviluppo di nuovi catalizzatori con metodologie combinatoriali ed "high-throughput", e vede la partecipazione sia di varie Università (attraverso il Consorzio Interuniversitario di reattività e catalisi) sia di industrie italiane (Enitecnologie). La coordinazione di TOPCOMBI è francese (CNRS). Vi sono inoltre vari IP ove vi è una partecipazione significativa della catalisi (ad esempio, CHRISGAS per produrre H_2 da biomasse).

Occorre inoltre ricordare che è stato recentemente approvato anche il progetto ACE-NET ERA-NET (a coordinazione olandese) che ha l'obiettivo di strutturare la ricerca

- la catalisi ha una presenza significativa all'interno del 6PQ della Comunità Europea (il contributo totale per azioni a carattere generale (NoE, ERA-NET, CA (è circa 15 Meuro);
- la catalisi è riconosciuta come uno degli elementi centrali per l'innovazione ed è considerata un elemento strategico per lo sviluppo e promozione degli obiettivi europei. Facendo invece riferimento al panorama italiano, risulta difficile affermare che la catalisi abbia una rilevanza analoga nei programmi di ricerca nazionali sebbene, come dimostrato dall'analisi sopra esposta, la ricerca nel settore della catalisi in Italia ha un ruolo di primo piano in ambito europeo.

Prospettive per la ricerca nel settore della catalisi

Ma qual è l'evoluzione necessaria nel settore della catalisi? Come evidenziato in precedenza, limitare la catalisi al settore del processo chimico può essere limitativo.

applicata in catalisi e coordinare i programmi di ricerca a carattere innovativo in questo settore. I progetti ERA-NET finanziati dalla Comunità Europea nell'ambito dell'ERA (European Research Area) vogliono coordinare i vari programmi nazionali e regionali in specifici settori strategici per lo sviluppo europeo.

Infine occorre citare che anche tra i progetti denominati "Coordination action" (CA) vi è uno specifico programma che tratta di catalisi: CONCORDE (Coordination of Nanostructured Catalytic Oxides Research and Development in Europe), con coordinazione spagnola e partecipazione di numerosi gruppi di ricerca italiani (Enitecnologie, Univ. Trieste, Udine, Bologna, Messina).

Questo breve panorama sulla partecipazione della catalisi al 6PQ, seppure parziale per motivi di spazio, evidenzia i seguenti aspetti:

Negli ultimi anni vi è stato un interesse notevole verso l'applicazione della catalisi nel settore della protezione ambientale, ma occorre fare uno sforzo ulteriore per ampliare i settori di applicazione, da quelli tradizionali, come il trattamento delle emissioni di NO_x, ad altri quali la riduzione delle emissioni di gas ad effetto serra, il trattamento di emissioni liquide, la conversione ed "upgrading" di scarti solidi ecc. Il settore energetico richiede a sua volta lo spostamento da settori tradizionali, a nuove applicazioni (ad esempio il trattamento di biomasse), celle combustibili (tipo PEM e SOFC) e nuovi materiali fotoattivi (ad esempio TiO₂ attiva nel visibile per lo splitting dell' H_2O ad H_2/O_2 con luce visibile). Ma in generale, occorre considerare non più solo il catalizzatore come un elemento per velocizzare le reazioni industriali e/o influenzare la selettività, ma più in

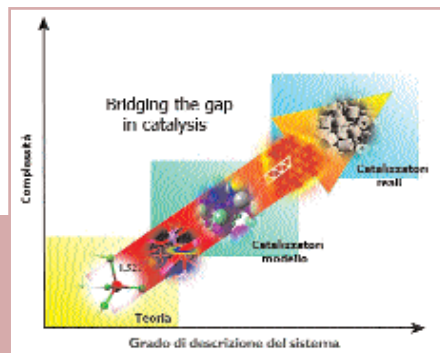
generale come una superficie a reattività controllata, applicando quindi le competenze di catalisi per lo sviluppo di materiali nanofunzionali a reattività controllata, dai sensori a materiali "smart" ecc.

Occorre tuttavia anche uno sforzo verso lo sviluppo di conoscenze di base che siano gli elementi chiave per uno sviluppo non evolutivo nel settore. Possono essere individuate almeno due "sfide", in accordo al citato NoE IDECAT:

a) *Sviluppare metodologie innovative per sintetizzare in maniera controllata ed ordinata nano-oggetti catalitici* (Synthesis and mastering of nano-objects)

Il controllo della "architettura" a livello nano e/o molecolare di solidi catalitici rappresenta una delle attuali sfide principali, che coinvolge un'interazione multidisciplinare tra chimica, fisica, scienza ed ingegneria dei materiali, chimica industriale ed ingegneria chimica ecc.

teristiche (incluso lo sviluppo di migliori tecnologie di caratterizzazione, anche durante la reazione catalitica) sia verso lo sviluppo di nuove classi di materiali. Un'altra sfida è l'integrazione tra sistemi inorganici e biologici, quali enzimi, microrganismi ecc., al fine di realizzare una sinergia nella loro preparazione, o ad esempio utilizzare i microrganismi per la crescita controllata di nuovi materiali catalitici. Un'altro settore in rapida espansione con prospettive molto interessanti anche dal punto di vista catalitico è quello dei sistemi ibridi, quale solidi organici-inorganici (ad esempio sistemi MOF - Metal-Organic Framework).



Occorre integrare conoscenze che vanno dalla modellistica e simulazione, alla scienza delle superfici e dello stato solido, all'utilizzo di tecniche non-convenzionali nella preparazione dei materiali, talvolta mutate da altri settori quali quello litografico, il tutto abbinato alla conoscenza sulla reattività e dinamica di questi materiali, ed all'analisi del meccanismo di reazione. Tra questi materiali catalitici nano-strutturati in fase attualmente di studio si possono citare (i) sistemi nanocompositi tipo "host-guest", quali ossidi di metalli, complessi o nanoclusters in materiali zeoliti e mesoporosi, e nanotubi, e (ii) nanocluster metallici e sistemi organizzati 2D/3D con funzionalità controllata. Questi materiali presentano interessanti proprietà e prospettive di applicazione, ma occorre uno sforzo ulteriore sia verso un miglior controllo delle carat-

b) *Colmare il divario tra teoria, scienza delle superfici, ed applicazione nello sviluppo di catalizzatori, così come tra catalisi omogenea, eterogenea e bio-catalisi* (Bridging the gap between theory and modelling, surface science, and kinetic/applied catalysis as well as between heterogeneous, homogeneous and bio-catalytic approaches) Occorre sviluppare strumenti, nuovi approcci, sviluppare e selezionare nuovi sistemi modello e reazioni catalitiche ed integrare lo sforzo per ridurre e superare il divario che ancora esiste tra applicazione della catalisi (catalisi applicata, cinetica ecc.) e capacità di caratterizzare in dettaglio i sistemi studiati attraverso le metodologie della scienza delle superfici ed approcci teorici di modellazione. Vi sono tre difficoltà da superare: (i) pressione, (ii) materiali e (iii) complessità. Vi sono risultati molto promettenti in questa direzione, ma è

necessario intensificare lo sforzo. Anche tra catalisi eterogenea, omogenea e bio-catalisi vi è un divario, che tuttavia è più culturale che tecnologico, sebbene egualmente critico. Anche in questo caso è necessario procedere all'interazione multidisciplinare su progetti specifici per valutare lo sviluppo di sistemi sinergici capaci di operare in condizioni di reazione più blande e/o con selettività molto più elevata (occorre sviluppare la sinergia non solo tra le discipline citate, ma anche tra e/o con numerose altre, ad esempio tra catalisi ed elettrocatalisi per lo sviluppo di nuove classi di dispositivi e/o materiali nel campo dell'energia sostenibile).

Conclusioni

Rispetto alla domanda iniziale (quale futuro per la catalisi), si può concludere che il settore della catalisi è ancora caratterizzato da una capacità notevole di innovazione ed a

livello europeo la catalisi è considerata uno degli elementi strategici dello sviluppo sostenibile. La ricerca in Italia su questo settore ha un indubbio riconoscimento ed è integrata in maniera strutturata con la rete di laboratori europei di eccellenza in questo settore. Tuttavia, non vi è un adeguato riconoscimento a livello nazionale di questa capacità innovativa e di eccellenza.

Possono essere individuate alcune tematiche generali di tipo fondamentale in questo settore con notevoli potenziali ricadute, non solo nel settore specifico, ma in tutto quello generale dei materiali nanostrutturati e nanocompositi, e dei materiali funzionali. D'altra parte è anche necessario un approccio auto-organizzante del settore della catalisi verso queste direzioni, per altro già in atto, e che tuttavia potrebbe essere significativamente stimolato da progetti specifici di ricerca nazionale su questi settori.