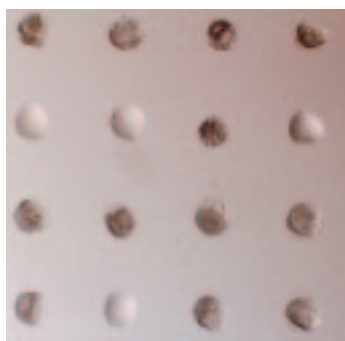


## Dalle molecole al design dei prodotti



Con la scomparsa della grande industria nel nostro Paese e lo sviluppo di tante medie e piccole aziende, la chimica italiana sta diventando sempre di più una chimica dei prodotti a comportamento. Le prestazioni finali di questi prodotti dipendono, oltre che dalla loro struttura molecolare, anche dalla presenza di ausiliari (additivi, coadiuvanti o promotori), ossia dalla formulazione. Nel descrivere le diverse fasi della formulazione non è facile individuare le reazioni chimiche coinvolte, e quindi si potrebbe pensare che in questa attività si esca dalla chimica. In realtà ci troviamo completamente immersi in essa, con la forte esigenza di competenze di termodinamica delle miscele, di chimica-fisica delle soluzioni, delle sospensioni, degli aerosol e dei colloidi, di chimica delle superfici, di conoscenza degli equilibri di fase. Ma l'aspetto che caratterizza maggiormente un'attività di formulazione, è la capacità di utilizzare tali competenze per prevedere proprietà come adesione, biodegradabilità, vita, resistenza alle intemperie, proprietà allergeniche, infiammabilità, e tante altre. Questi sono gli aspetti più significativi della formulazione. Attualmente una gran parte di queste ricerche è realizzata per *trial and error*, anche se le grandi aziende stanno cercando di creare propri criteri previsionali su basi scientifiche. L'Accademia è scoraggiata a collaborare dall'apparente mancanza di basi scientifiche e dall'impossibilità di pubblicare, essendo questi criteri punti di forza aziendale.

Di seguito esporrò un esempio di come un classico problema tecnologico, l'allungamento della vita da un anno a più di due di un catalizzatore di deidrogenazione di alcani leggeri, possa essere affrontato basandosi su aspetti di reattività chimica.

La metodologia di formulazione utilizzata, esaminando i numerosi brevetti, sembra apparentemente simile a tutte le altre, dove l'obiettivo viene raggiunto con l'introduzione di una "manciata" di ausiliari al componente principale (la specie attiva) e mescolando bene. La vita di un catalizzatore di deidrogenazione è condizionata dalla necessità di eliminare ciclicamente per combustione i residui carboniosi, sottoprodotti della reazione, che rimangono adsorbiti sulla sua superficie. L'alta temperatura necessaria e la presenza di acqua formatasi nella combustione causano la sinterizzazione del supporto e le trasformazioni di fase. Un primo approccio ad una ricerca di formulazione si basa sullo studio degli effetti di aggiunte di promotori nella fase di preparazione del supporto o successivamente, sulla sua velocità di sinterizzazione, in prove condotte in laboratorio a temperatura superiore a quella industriale in presenza di vapore, allo scopo di realizzare in poche ore fenomeni che nella pratica industriale avvengono in mesi o anni. Un secondo approccio si basa sullo studio del tipo e quantità di residui carboniosi, la cui eliminazione porta alla lenta disattivazione del catalizzatore. Utilizzando reattori da laboratorio in prove di deidrogenazione si può studiare l'effetto della miscelazione all'alcano di molecole diverse, sulla quantità di residui carboniosi formati e soprattutto sulla loro natura, se grafite, fullerenica o altra (natura che determina la loro maggiore o minore facilità ad essere distrutti).

Quindi la formulazione di un catalizzatore industriale di deidrogenazione può essere ricondotta ad uno studio di chimica dello stato solido in condizioni idrotermali o di chimica supramolecolare sul meccanismo di formazione di prodotti condensati ad alta temperatura.

Credo che non solo in questo esempio, ma in tutti i problemi di formulazione, nascosto ci sia sempre un problema di reattività chimica, che, se individuato, può diventare la chiave per sviluppare criteri previsionali più scientifici.

Si è passati dal design della struttura molecolare a quella del prodotto, ma non c'è da impensierirsi, basta un po' di attenzione e ci troviamo ancora all'interno della chimica.