

di Gabriele Centi
Coordinatore Network di Eccellenza Europeo IDECAT
Co-Direttore ELCASS (European Lab. of Catalysis and
Surface Science)

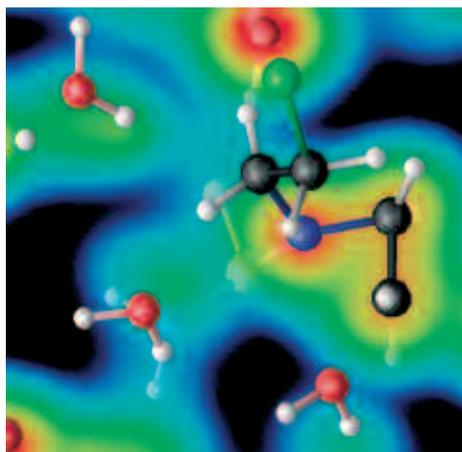


CATALISI ALL'AVANGUARDIA

“**D**er Katalysator-Mann” (L'uomo-catalizzatore) intitolava lo “Spiegel”, uno dei principali giornali tedeschi, nell'annunciare l'attribuzione del Premio Nobel per la Chimica 2007 a Gerhard Ertl del Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft (FHI-MPG), in coincidenza del suo 71° compleanno. Come spesso accade, i titoli dei giornali sono imprecisi, ma hanno il pregio di sintetizzare in poche parole i concetti. In realtà il premio Nobel è stato

attribuito a Ertl “for thorough studies of fundamental molecular processes at the gas-solid interface” (per gli studi dettagliati dei processi molecolari fondamentali all'interfaccia gas-solido), ma nella descrizione seguente delle implicazioni pratiche di questi studi si descrive il ruolo fondamentale della catalisi eterogenea, a partire dal processo Haber-Bosch di sintesi dell'ammoniaca ai catalizzatori attuali per emissioni da autoveicoli ed alle celle a combustibile. Vengono anche citati i precedenti premi assegnati alla catalisi e processi catalitici superficiali, a partire dal 1912 (P. Sabatier, a cui per inciso è intitolata la conferenza periodica europea di catalisi, giunta alla quinta edizione - 19-21 settembre 2007, Strasburgo, Francia), passando per F. Haber, I. Langmuir, C.N. Hinshelwood e N.N. Semenov, per finire con il premio a D.R. Herschbach, Y.T. Lee and J.C. Polanyi (1981) per la dinamica dei processi chimici elementari, una tematica molto vicina a quella per cui è stato assegnato il premio a Ertl. In realtà, occorrerebbe citare anche il premio Nobel per la chimica del 2005 assegnato a Yves Chauvin dovuto al suo contributo allo sviluppo dei catalizzatori eterogenei e relativi processi industriali per la reazione di metatesi.

Il contributo scientifico di Ertl inizia dalla descrizione quantitativa della localizzazione dell'idrogeno sulla superficie dei metalli, che lo ricollega ai lavori di P. Sabatier. Le implicazioni vanno dalle reazioni di idrogenazione di molecole organiche alla comprensione dei processi sugli elettrodi per celle a combustibile. Successivamente Ertl



ha dato un contributo fondamentale alla comprensione dei meccanismi elementari e processi micro-cinetici, della reazione di sintesi dell'ammoniaca. Quindi nuovamente l'attività di Ertl è collegabile a quella di precedenti premi Nobel (F. Haber), ma affrontando in maniera nuova il problema ed utilizzando le tecniche di indagine più avanzate per collegare gli studi delle superfici e del meccanismo di reazione al comportamento macro-cinetico di catalizzatori reali di sintesi dell'ammoniaca. Questa tematica di superare il divario tra

studi superficiali e comportamento reale (“bridging the pressure and material gap”) è ancora tra quelle fondamentali di ricerca della catalisi ed ad esempio una delle tematiche centrali del Network Europeo di Eccellenza IDECAT (Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production - www.idecat.org) a cui partecipa l'Istituto Fritz-Haber diretto per molti anni da G. Ertl.

Il contributo di Ertl sulla “possibilità di collegare il comportamento macroscopico nella produzione dell'ammoniaca con la cinetica dei processi individuali” rimane un esempio di eleganza intellettuale per la catalisi e tutta la chimica. Più recentemente l'attenzione di Ertl si è soffermata su aspetti che sono ancora più affascinanti, ovvero sulle conseguenze nei processi superficiali di dinamiche non-lineari, a partire dai fenomeni di cinetiche oscillanti. Questo collega il lavoro di Ertl ad un altro premio Nobel, ovvero al contributo di I. Prigogine (1977) sulla termodinamica di non-equilibrio. Partendo dalla comprensione delle cause microscopiche delle cinetiche oscillanti (ad esempio la dinamica della ricostruzione superficiale del Pt nell'ossidazione del CO, collegata a meccanismi di erosione e ricostruzione superficiale), sono stati sviluppati modelli che descrivono il comportamento spazio-temporale di superfici, quando sono presenti cinetiche non-lineari e/o quando uno singolo stadio elementare non è quello cineticamente determinante. La Figura a fronte mostra alcuni esempi di organizzazione spazio-temporale nel caso di ossidazione del CO sul Pt (110).

Il profilo scientifico di G. Ertl è quindi complesso e può essere descritto come un lavoro pioneristico sulla struttura, dinamica e reattività delle superfici (cristalli singoli, ma anche cluster, colloidali, film sottili e catalizzatori reali) in contatto con una fase liquida o gassosa. I suoi studi abbinano meccanismo di reazione a micro-cinetica. Oltre all'eleganza e al rigore scientifico, abbinano spesso anche una bellezza artistica. Ricordo ancora con vivo piacere una conferenza ad un simposio organizzato nel 2003 dall'Accademia delle Scienze Francese sulla relazione tra superfici ed arte, ove si evidenziava il lato artistico dei fenomeni caotici nell'ossidazione catalitica del CO.

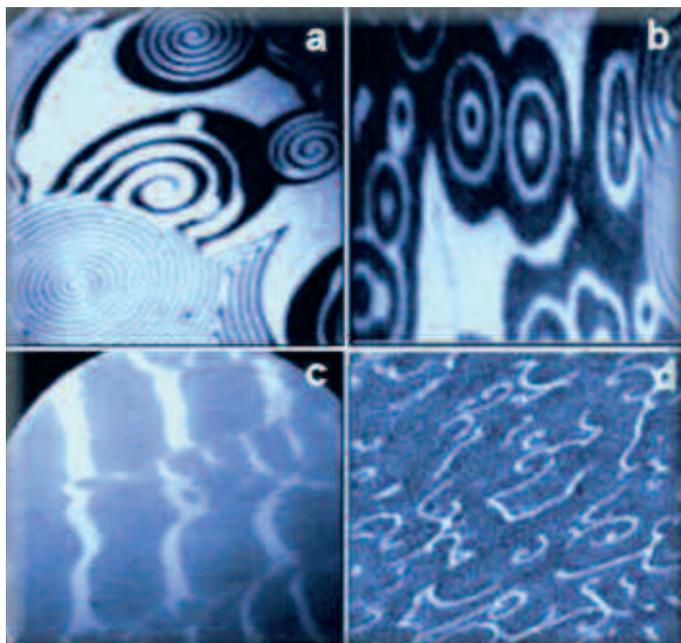
Tuttavia, il premio Nobel a G. Ertl vuole essere anche un premio alla catalisi ed al suo ruolo nello sviluppo dei processi chimici e per la protezione dell'ambiente. Non è corretto affermare che il Nobel per la Chimica 2007 è stato assegnato a "Ertl, papà delle marmitte catalitiche" (*Repubblica*), ma certamente il lavoro di Ertl ha contribuito in maniera significativa alla comprensione dei processi catalitici superficiali che hanno permesso di migliorare le prestazioni delle "marmitte catalitiche", delle celle a combustibile ed in genere di tutta la catalisi eterogenea. La catalisi eterogenea ha un ruolo centrale nello sviluppo della chimica (oltre il 90% dei processi industriali chimici utilizza catalizzatori), e per la sua complessità coinvolge contributi interdisciplinari che vanno dalla comprensione dei fenomeni superficiali, alla scienza dei materiali, alla chimica organi-

ca ed industriale, ed all'ingegneria chimica. Quindi la catalisi è inter- e multi-disciplinare e la scienza delle superfici è uno degli aspetti necessari per il suo sviluppo, ma non l'unico.

È interessante infine osservare che dopo vari anni il premio per la chimica è stato attribuito ad un'unica persona europea. Spesso si è assistito infatti ad un lavoro di bilanciamento più geo-politico che motivato scientificamente. Storicamente, le assegnazioni dei premi Nobel per la Chimica a scienziati operanti nel settore della catalisi (od affine) è stata dominata dall'Europa. Anche attualmente la ricerca in Europa sulla catalisi è riconosciuta essere all'avanguardia nel mondo, forse per l'attenzione sempre data alla comprensione dei processi catalitici. Risulta tuttavia ulteriormente necessario ridurre la frammentazione spesso esistente in molteplici gruppi di ricerca, per creare quelle macro-strutture che permettano di affrontare ricerche di avanguardia.

Il Premio Nobel 2007 per la Chimica afferma anche la capacità della Max-Planck-Gesellschaft (Germania) di creare una struttura (Fritz-Haber-Institut) dedicata a ricerche di avanguardia sulla catalisi. L'Istituto ha un budget attorno a 25 M€, di cui solo circa la metà per personale (rispetto a valori molto più alti tipicamente per istituti di ricerca in Italia). Oltre ai cinque Direttori dei Dipartimenti, vi sono 42 ricercatori (di cui 24 senior) e 148 di personale tecnico (oltre a quello amministrativo). Anche questi numeri sono significativamente differenti rispetto a quelli tipici in Italia, e dovrebbero far riflettere.

Ovviamente oltre al personale strutturato, sono presenti vari studenti e specialmente ricercatori ospiti da tutto il mondo. Sono numerosi anche gli studenti e ricercatori italiani che hanno trascorso periodi di ricerca o sono attualmente presso il FHI-MPG, a testimoniare l'attenzione sempre dedicata a cercare collaborazioni internazionali. Da citare a questo riguardo, che da sei anni, il FHI-MPG ha creato assieme al CNRS - Laboratoire des Matériaux, Surfaces et Procédés pour la Catalyse (LMSPC - Starburgo, Francia), all'Università L. Pasteur (ULP) di Starburgo (Francia) ed all'Università di Messina (Italia) uno dei primi Laboratori Associati Virtuali: ELCASS (European Laboratory of Catalysis and Surface Science). Questo evidenzia come un centro di ricerca così prestigioso come il FHI-MPG senta l'esigenza di collaborazioni più strette a livello internazionale, proprio per l'inerente complessità dei problemi da affrontare per una ricerca di avanguardia nel settore della catalisi. Anche questo dato dovrebbe far riflettere, ma si può concludere che la partecipazione attiva italiana in questo Istituto Virtuale è anche testimonianza della qualità della ricerca sulla catalisi in Italia, nonostante nel nostro Paese sia assente un centro di ricerca specificatamente dedicato alla catalisi, a differenza di quasi tutti i maggiori Paesi europei.



Immagini al microscopio elettronico in fotoemissione di una superficie di Pt durante l'ossidazione del CO: (a) spirali, (b) trama a bersaglio, (c) onde, e (d) turbolenza. Aree in scuro: ricche di CO. Aree in chiaro: ricche in O₂. (Rielaborata da foto del "Surface Imaging Group, Dept. of Physical Chemistry, Fritz-Haber-Institut of the Max-Planck-Society, www.fhi-berlin.mpg.de/surimag")