







EFCATS Summer School - 2012
 and
1st Italian-Spanish School on Catalysis
"Recent Advances and New Trends in Catalysis"
11-15 September 2012



- Fundamentals on homogeneous and heterogeneous catalysis
- Catalyst characterization: approaches, methods and techniques
- Modelling, Mechanisms and reactivity
- Catalysis role in "Horizon 2020" challenges

<http://gic.istm.cnr.it/EFCATS2012> efcats2012@istm.cnr.it












Hotel Castagnola - Via al Collegio 16 - 28922 Verbania-Pallanza

di **Alberto Naldoni, Nicola Scotti**
ISTM-CNR
Milano
alberto.naldoni@istm.cnr.it
nicola.scotti@istm.cnr.it

SCUOLA EFCATS 2012 "RECENT ADVANCES AND NEW TRENDS IN CATALYSIS"

La scuola europea ha affrontato le principali tematiche della catalisi in maniera approfondita e critica ed infine sono stati discussi gli aspetti più innovati connessi al ruolo della catalisi nel panorama Horizon 2020.

Dall'11 al 15 settembre 2012 si è tenuta a Pallanza-Verbania la scuola di catalisi "Recent advances and new trends in catalysis", patrocinata da EFCATS (European Federation of Catalysis Societies), la federazione costituita da 25 società europee di catalisi. La scuola è stata organizzata unitamente alla prima scuola di catalisi Italo-Spagnola, grazie allo sforzo congiunto del Gruppo Interdivisionale di Catalisi (GIC) appartenente alla Società Chimica Italiana e della Sociedad Española de Catálisis (SECAT). La realizzazione della Scuola

EFCATS è stata resa possibile anche grazie al contributo degli sponsor istituzionali quali Società Chimica Italiana-Divisione di Chimica Industriale e Associazione Italiana Zeoliti (AIZ), nonché da sostanziali contributi provenienti dal settore privato (Elsevier Srl, Micromeritics Srl, Siad SpA, Assing SpA, Risam Gas Srl, eni SpA). Grazie anche al contributo economico degli sponsor sopra citati e del GIC molti partecipanti alla scuola hanno potuto usufruire di borse di studio premio, che coprivano totalmente o in parte i costi di iscrizione e di alloggio della scuola.

Il comitato scientifico della scuola era costituito da Fabrizio Cavani (Università di Bologna), Gabriele Centi (Università di Messina), José Manuel López Nieto (Istituto de Tecnología Química, UPV-CSIC), Claude Mirodatos (Università di Lyon, CNRS), Hans Niemantsverdriet (Università di Eindhoven), José Antonio Odriozola (Università di Sevilla), Paolo Pollesel (eni SpA), Nicoletta Ravasio (ISTM-CNR) e Juan Ramón González Velasco (Università del País Vasco, UPV/EHU), mentre quello organizzatore da Rinaldo Psaro (Chairman), Vladimiro Dal Santo, Claudio Evangelisti, Matteo Guidotti, Nicola Scotti e Federica Zaccheria dell'ISTM-CNR (Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari del CNR). Bisogna però rimarcare l'indispensabile contributo organizzativo svolto da tutti i componenti del gruppo di catalisi eterogenea dell'ISTM-CNR di Milano ed in particolare da Matteo Mariani, Alberto Naldoni, Federica Santoro e Cristina Tiozzo.

Il programma della scuola ha toccato tutti gli argomenti della catalisi, soprattutto quella eterogenea, con una particolare attenzione agli aspetti più recenti e innovativi, con un taglio didattico ma sempre critico e attuale. Le 20 invited lectures che si sono susseguite nel corso della scuola hanno avuto un ampio respiro, passando da lezioni dedicate all'applicazione di tecniche avanzate, come la microscopia elettronica ad alta risoluzione per la catalisi, ad altre focalizzate su sviluppo e impiego di tecniche computazionali per arrivare ad un design efficiente di catalizzatori di nuova generazione.

Alla Scuola EFCAT 2012 erano presenti 90 partecipanti (per lo più dottorandi) provenienti da tutto il mondo: Italia e Spagna sono stati, come logico aspettarsi, i Paesi più rappresentati, ma non sono mancati studenti arrivati da Polonia, Olanda, Grecia, Svezia, Svizzera, Francia, Finlandia, Austria, Bulgaria, Ungheria, Repubblica Ceca, Slovacchia, Turchia e perfino Colombia ed Indonesia. Il continuo scambio di idee ed opinioni tra studenti e professori ha contribuito a creare un ambiente piacevole ed informale. Questi aspetti, uniti all'interdisciplinarietà del programma scientifico e l'alto livello di internazionalizzazione, hanno determinato il grande successo della scuola, oltre che la nascita di nuove collaborazioni.

L'evento si è aperto martedì sera, con la conferenza di E. Iglesia (Università della California, Berkeley) che ha messo in evidenza l'impatto delle dimensioni delle nanoparticelle nell'attività e nella selettività di catalizzatori nanostrutturati eterogenei.

Il mattino seguente è invece iniziato con un excursus storico di A. Zecchina (Università di Torino) sull'evoluzione della catalisi negli ultimi 100 anni grazie al contributo di 16 premi Nobel. Questa lezione ha messo in evidenza la natura dinamica della catalisi e la sua rilevanza in numerosi campi della chimica pura e applicata. Di seguito, C. Coperet (ETH di Zurigo) ha illustrato alcuni esempi in cui lo studio del meccanismo di reazione in catalisi eterogenea ha permesso la determinazione di importanti dettagli strutturali e di attività, aspetti fondamentali per ottenere catalizzatori sempre più efficienti ed utilizzabili a livello industriale.

Successivamente, K.P. de Jong (Università di Utrecht) ha condotto una lezione in cui ha illustrato le diverse strategie di preparazione di



supporti e di catalizzatori solidi e le proprietà che questi materiali dovrebbero avere per poter essere attivi e conservare la loro attività nel corso di una reazione. Diversamente, il pomeriggio è stato dedicato alla catalisi omogenea e nello specifico ai polimeri con due case-history sulla polimerizzazione controllata tenuti da B. Milani (Università di Trieste).

Il terzo giorno della scuola EFCATS è stato dedicato principalmente alla caratterizzazione e alla modellizzazione dei catalizzatori.

Quest'ultimo argomento è stato trattato in particolare da P. Sautet (CNRS di Lione), che, riassumendo le basi quanto-meccaniche su cui si basano gli attuali metodi di calcolo, ha elucidato alcuni esempi di modellizzazione e simulazione di sistemi attivi rilevanti per la catalisi eterogenea. La mattina è proseguita con un'interessante lezione di H. Niemantsverdriet (Università di Eindhoven) che ha illustrato come un approccio combinato e intelligente delle tecniche di caratterizzazione avanzata sia fondamentale per comprendere il proprio sistema catalitico. Più nello specifico G. Busca, J. Llorca e A. Sepulveda hanno approfonditamente discusso della spettroscopia infrarossa e dell'utilizzo di molecole sonda, delle più moderne tecniche HRTEM e delle isoterme di adsorbimento dei gas, rispettivamente.

Nel primo caso, Busca (Università di Genova) ha messo in evidenza la versatilità e la capacità informativa della spettroscopia infrarossa nell'analisi e studio della superficie di catalizzatori eterogenei. J. Llorca (Università Politecnica di Catalogna-BarcelonaTech), invece, ha spiegato le basi della microscopia elettronica (HRTEM, STEM, ecc.) mostrando immagini ad alta risoluzione di catalizzatori solidi utilizzati in reazioni cruciali per la produzione sostenibile di idrogeno (steam reforming, water splitting foto catalitico). Per finire, A. Sepulveda (Università di Alicante) ha mostrato diverse metodologie sperimentali che permettono la determinazione dimensionale dell'area superficiale e dei pori presenti nella struttura di catalizzatori eterogenei.

Il tema centrale di venerdì riguardava lo studio del meccanismo di azione di un catalizzatore allo scopo di prevederne l'attività catalitica.



In questo contesto B.C. Gates (Università della California, Davis) ha illustrato la sua strategia per preparare catalizzatori supportati con siti attivi uniformi e omogenei, mettendo in evidenza lo stato dell'arte nella microscopia elettronica a scansione (STEM) e il suo utilizzo nella visualizzazione a dettaglio atomico di tali catalizzatori.

I. Hermans (ETH di Zurigo) ha sottolineato la rilevanza industriale ricoperta dalle reazioni di ossidazione, in particolare di quelle selettive, e si è soffermato su alcuni significativi esempi, spiegandone il meccanismo, mentre G. Rothenberg (Università di Amsterdam) ha catturato l'attenzione dei presenti proponendo un software in grado di predire l'attività di un catalizzatore.

Il successo di un sistema catalitico va però ripartito equamente tra l'attività del catalizzatore, la sua strutturazione all'interno dell'impianto (sotto forma, ad esempio, di honeycoms, foams ecc.) e la geometria del reattore, come ha messo in luce in maniera chiara E. Tronconi (Politecnico di Milano).

Siamo così arrivati all'ultimo giorno, che è stato dedicato soprattutto agli aspetti più innovativi che riguardano il ruolo della catalisi nello sviluppo industriale e sostenibile e nella ricerca di nuove vie di produzione dell'energia.

Lo sviluppo di catalizzatori eterogenei enantioselettivi, problema di grande attualità, è stato affrontato da J.A. Mayoral (Università di Saragozza), mentre il ruolo fondamentale delle biomasse nella socie-

tà moderna, sia come materie di partenza per la produzione di chemicals, che come risorse da utilizzare per la produzione di carburanti alternativi, è stato descritto da C. Pinel (CNRS di Lione) e M. Ricci (eni). Infine G. Centi (Università di Messina) ha parlato del nuovo Programma Europeo per la ricerca e l'innovazione "Horizon 2020", illustrandone gli obiettivi e indirizzando la platea verso quelli che saranno i cambiamenti, le problematiche e le innovazioni tecnologiche che la produzione industriale europea dovrà affrontare.

Inoltre, durante la scuola EFCATS si sono svolte due interessanti lezioni focalizzate sulla presentazione dei dati scientifici, tema fondamentale per diffondere e valorizzare i propri risultati di ricerca.

Nella prima lezione, svoltasi giovedì, H. Niemantsvedriet ha spiegato come preparare ed esporre una presentazione orale in maniera efficace e produttiva, cercando di tracciare delle linee guida da seguire per ottenere un risultato finale che riesca a catturare l'attenzione dell'ascoltatore e a rendere incisivo il proprio intervento.

La seconda sessione tematica, tenuta da G. Rothenberg nella giornata di venerdì, è stata dedicata a come tradurre in maniera comunicativa e credibile i propri risultati scientifici in articoli scientifici, report, tesi di dottorato. Entrambi gli interventi sono stati affrontati con una grande interattività da parte degli oratori e un ampio coinvolgimento di pubblico, che ha apprezzato molto lo stile delle lezioni e i suggerimenti forniti.

Durante la scuola è anche stata organizzata una poster session molto seguita da studenti e professori che hanno avuto un'occasione in più per scambiarsi idee, contatti e per instaurare future collaborazioni. I professori presenti hanno avuto anche il piacere di assegnare tre premi forniti dall'Elsevier ai migliori poster ed i vincitori sono stati Cammella Oumahi (Università Pierre e Marie Curie, Parigi), Nuria J. Divins (INTE e CRnE, Barcellona) e Alberto Naldoni (ISTM-CNR, Milano).



Premiazione dei tre migliori poster, da sinistra a destra: Cammella Oumahi, Nuria J. Divins e Alberto Naldoni