

# QUALI SCELTE PER IL FUTURO ENERGETICO? IL DILEMMA DEL TRASPORTO

Le previsioni indicano che le emissioni gassose da parte dei mezzi di trasporto possano raggiungere un livello tale da rendere inefficaci i tentativi di imporre limiti ragionevoli alla concentrazione di anidride carbonica nell'atmosfera. Inoltre le diverse caratteristiche dell'inquinamento locale e globale impongono una differenziazione fra i mezzi di trasporto impiegati nei centri abitati e nei larghi percorsi extraurbani. Vengono quindi approfondite alcune opportune iniziative in proposito sia nel settore della ricerca che in quello operativo.

## Una minaccia incombente

Più dell'80% della produzione totale di energia proviene da combustibili fossili e più del 30% di essa viene impiegata nel settore dei trasporti, in particolare a livello terrestre, dal miliardo di autovetture circolanti sul pianeta. Anche se i carburanti offrono elevate prestazioni grazie ai progressi realizzati nella raffinazione, mentre le marmite catalitiche permettono di rimuovere dai gas di combustione buona parte degli inquinanti locali (CO ed NO<sub>x</sub>), lo sviluppo del settore lascia presagire che l'emissione di anidride carbonica potrebbe raggiungere un livello tale da rendere impossibile l'imposizione di ogni limite accettabile alla sua concentrazione nell'atmosfera [1].

Dall'inizio del secolo scorso i modelli delle autovetture si sono avvicinati sino a consolidarne la struttura e le caratteristiche dei motori impiegati. Le attuali autovetture provengono, attraverso diverse iterazioni, da un comune antenato dotato di un motore a combustione interna alimentato nelle sue versioni iniziali da alcool etilico, rapidamente sostituito dagli idrocarburi estratti dal petrolio [2]. L'alleanza fra petrolio e automobile, decollata agli inizi del secolo scorso, si è sviluppata in modo vertiginoso, condizionando profondamente il comportamento umano e dando origine ad una delle maggiori attività produttive esistenti sul pianeta, tetragona quindi a radicali cambiamenti. Tuttavia, anche se l'automobile si presenta come un prodotto maturo, i problemi originati dall'inquinamento atmosferico, sia a livello locale che globale, non possono prescindere da modifiche coinvolgenti non solo le loro caratteristiche, ma anche la natura delle fonti energetiche ed infine la logistica della circolazione urbana e regionale.

Nell'ottobre 2015 si è verificata una crisi nel settore automobilistico, contraddistinta con il significativo acronimo "VW gate", che ha costituito l'oggetto di discussioni il cui tono è riassunto dall'espressione "Dirty secrets of the car industry" che è apparso sulla copertina del fascicolo dell'*Economist* del 26 settembre 2015 (n. 8957), ospitante articoli dedicati a tali problemi. Fra le diverse argomentazioni affiora un'affermazione che apre a ventaglio le problematiche sottostanti: "Volkswagen

*falsification of pollution tests opens the door to a very different car industry".* Ma quale, fra le diverse opzioni che stanno affiorando, sarà l'automobile del futuro?

- l'elettrica?
- quella della Google senza conducente?
- quella della Apple di cui l'*Economist* ci anticipa l'avvento?
- quelle alimentate ad idrogeno?
- quelle con celle a combustibili?
- quelle con alimentazione solare?

Sotto indagine viene comunque messo il motore diesel, originariamente destinato ad impianti di grandi dimensioni e al trasporto navale, ma successivamente adattato alle autovetture valorizzando la possibilità di ottenere più elevati rendimenti e quindi minor consumo di combustibile. A scapito però dell'ambiente su scala locale, osservando: "Diesel vehicle can be very economical on fuel (and thus emit relatively little carbon dioxide but often at the cost of increased NO<sub>x</sub> emissions) generating smog and damaging plants".

## Appello alla termodinamica

Il rendimento  $\eta$  della trasformazione dell'energia termica  $q$  nel lavoro meccanico  $w$  di una macchina che riceve energia a temperatura  $T_1$  e la scarica a temperatura  $T_2$ , può essere valutato mediante la seguente relazione che compendia il primo e il secondo principio della termodinamica [3]:

$$\eta = w/q = [(1 - T_2/T_1)] - T_1(\sigma_{irr}/q)$$

dove  $\sigma_{irr}$  è la velocità di produzione dell'entropia. Se fosse nulla il secondo termine al secondo membro si annullerebbe a sua volta, ricuperando così la relazione esprime il teorema di Carnot, impiegato per calcolare il rendimento di una macchina termica operante in condizioni di reversibilità.

Il miglior uso dell'energia viene conseguito aumentando la differenza fra le due temperature in gioco e diminuendo la velocità di generazione di

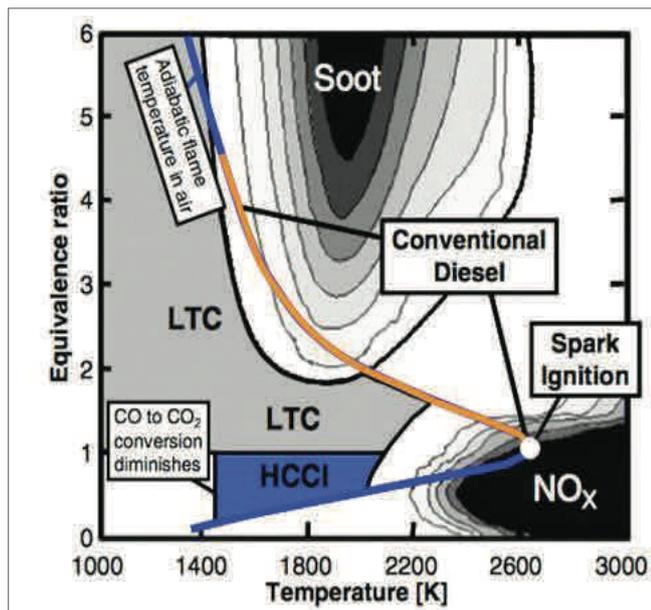


Fig. 1 - Produzione degli inquinanti da parte dei motori a combustione interna. LTC: Low Temperature Combustion, HCCI: Homogeneous Charge Compression Ignition

entropia. La macchina a vapore di Newcomen del 1712 aveva un rendimento uguale a 0,01, quella di Watt del 1764 di 0,1 mentre i motori a combustione interna hanno raggiunto un rendimento dell'ordine dello 0,25-0,30. Valori ragionevoli delle temperature di combustione e dei gas di scarico di un motore a combustione interna ammontano rispettivamente a 2.500 °C e 350 °C, con un corrispondente rendimento di Carnot pari a 0,78, quindi nettamente superiore a quello attualmente realizzato. In realtà questo valore rappresenta il limite superiore del rendimento, che può essere valutato più realisticamente tenendo conto delle velocità dei processi di trasferimento di calore che si svolgono in tempi finiti, mediante la relazione di Curzon-Ahlborn [4] in base alla quale risulta che:

$$\eta = 1 - (T_2/T_1)^{1/2} = 0,53$$

Pur essendo minore del precedente, il rendimento è comunque il doppio di quello che si ottiene dalle attuali autovetture perché risulta severamente penalizzato dalle irreversibilità connesse con la fluido-dinamica, dalla combustione incompleta, dai limiti della resistenza dei materiali ad alte temperature dei gas di combustione e dal valore relativamente elevato della temperatura del fluido freddo scaricato.

I motori attualmente operanti si possono dividere in due categorie: quelli ad accensione, che riportano alla loro invenzione originale, e quelli ad ignizione introdotti successivamente. La descrizione del loro funzionamento mediante la termodinamica si riconduce ai cicli di Otto (1862) e di Diesel (1897). A parità della differenza fra le temperature estreme, il primo ha rese superiori al secondo, il quale può però operare a temperature più alte e quindi raggiungere rese più elevate del 20% circa. Pertanto il motore diesel appare privilegiato per quanto concerne il consumo di combustibile, ma la temperatura più elevata favorisce la formazione di composti inquinanti localmente, incluse le polveri carboniose, dovuti alla presenza di reazioni secondarie nella combustione, oltre agli ossidi

di azoto  $\text{NO}_x$ . Le condizioni operative corrispondenti alla loro generazione sono illustrate nella Fig. 1 dove appare anche la curva virtuosa HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) che si riferisce ad un motore ideale in grado di operare a temperature relativamente basse grazie alla presenza di un elevato mescolamento dei gas di combustione.

In sostanza se si vuole realizzare una riduzione del consumo di carburante si devono impiegare motori con migliori prestazioni, materiali innovativi per ridurre il peso della vettura ed un design in virtù del quale l'autovettura presenti minori resistenze aerodinamiche. Un'indagine intesa ad approfondire tali condizioni ha messo in evidenza che lo scopo può essere perseguito solo attraverso un aumento dei costi delle autovetture, come viene illustrato nel diagramma di Fig. 2. Risulta che esiste spazio per migliorare le prestazioni dei motori grazie anche ai risultati conseguiti, o in corso di sviluppo, nel settore della termo-fluidodinamica, che fruiscono della modellazione matematica e del calcolo elettronico, grazie ai quali si può affrontare realisticamente i problemi connessi con l'influenza sul rendimento dei motori della dissipazione irreversibile di energia nelle miscele fluide in moto turbolento soggette a trasformazioni chimiche [5].

Un esempio ci viene offerto dal settore aeronautico, nel quale si prevede di poter raggiungere una significativa diminuzione del combustibile, e quindi un'altrettanto significativa diminuzione degli inquinanti prodotti, se si impiega un elevato rapporto di bypass nei motori del tipo *turbofan*. Si presume che l'obiettivo venga raggiunto attraverso una migliore comprensione delle instabilità presenti nel moto turbolento, grazie all'avanzamento dei metodi di calcolo e dei modelli della turbolenza, fra i quali riveste particolare importanza quello indicato con l'acronimo LES (Large Eddy Simulation). Si presume che tale obiettivo venga raggiunto nel giro di qualche anno, coerentemente con l'evoluzione delle capacità di calcolo, come illustrato nella Fig. 3 [6].

In sostanza, anche se i mezzi di trasporto circolanti nel mondo hanno raggiunto un certo livello di maturità esistono ancora interessanti prospettive per il miglioramento delle rese dei motori termici e dei *turbojet* per aerei, anche se le modifiche contemplate comportano un aumento di costo dei veicoli stessi.

Ovviamente i motori a combustione interna possono essere alimentati con idrogeno, con opportune modifiche poiché la sua gestione va esercitata con cura. Questo approccio presenta interesse per quanto

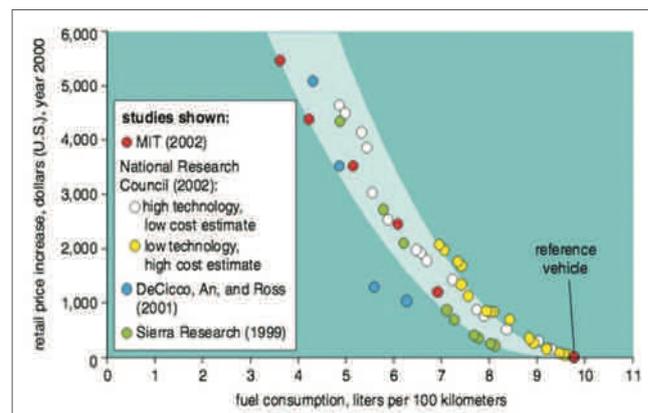


Fig. 2 - Valutazione da parte di diverse fonti dell'aumento del costo di una autovettura al diminuire del consumo di combustibile (da [1])

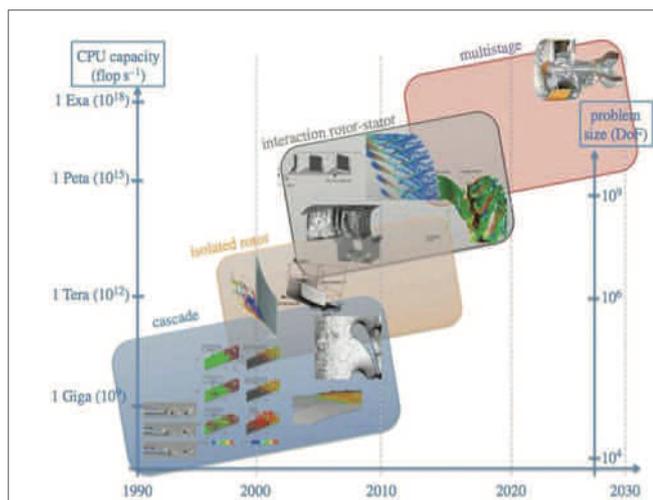


Fig. 3 - Evoluzione nel tempo del miglioramento nella progettazione degli aerei con motore turbofan in connessione con il previsto aumento delle capacità di calcolo (da [4])

concerne l'inquinamento locale poiché non vengono prodotte polveri sottili carboniose, mentre sul piano globale la sua affermazione dipende dall'economia dell'idrogeno poiché attualmente viene prodotto a basso costo mediante reforming del metano unitamente all'anidride carbonica.

### Nuove prospettive

L'intreccio fra i problemi concernenti l'utilizzo dell'energia e la tutela dell'ambiente, pur avendo risvegliato la convinzione emotiva di dover agire con urgenza, ha nel contempo fatto affiorare la consapevolezza che la loro complessità rende difficile l'individuazione di percorsi privi di contraddizioni. In questo quadro risulta di interesse un'indagine sulle misure richieste per ridurre l'impiego dei combustibili fossili del 20% entro il 2050, prendendo come riferimento la California [7]. I risultati ottenuti (Fig. 4) mettono in evidenza che per raggiungere l'obiettivo è necessario effettuare una profonda revisione dell'impiego dell'energia, includendo:

- un significativo miglioramento dell'efficienza dei processi coinvolti nella produzione e gestione dell'energia;
- un esteso impiego delle energie "carbon free";
- un'estesa elettrificazione dei trasporti.

Per quanto concerne l'ultimo punto emerge la necessità di aumentare l'impiego dell'energia elettrica ottenuta da sorgenti "carbon free", inclusa la nucleare che probabilmente avrà un rilancio, unitamente alla solare attraverso il processo fotovoltaico che in questi ultimi anni ha avuto un significativo sviluppo, ma comunque non tale da superare l'1% dell'energia totale prodotta nel mondo.

Le caratteristiche del processo fotovoltaico sono state profondamente investigate dal punto di vista teorico con lo scopo di individuare quali fattori chimico-fisici ne influenzino il rendimento, analogamente a quanto fatto da Carnot per le macchine termiche. In un importante lavoro [8] è stato messo in evidenza che impiegando materiali semiconduttori nei quali è presente una sola giunzione (ad esempio silicio drogato positivamente e negativamente) si raggiunge al massimo un rendimento teorico del 32%. Può essere superato impiegando celle con giunzioni multiple o nelle quali siano presenti quantum dots, quindi più costose.

Per questa ragione nella produzione dei pannelli fotovoltaici predomina l'utilizzo del silicio che ha rendimenti dell'ordine del 12%, ma che in virtù del basso costo e della sua stabilità domina il mercato (93%). Sono in corso molte ricerche con risultati di indiscutibile interesse, ma non tali da scalzare il silicio. La curva di apprendimento prevede che entro il 2023 il costo dell'energia elettrica ottenuta mediante i pannelli fotovoltaici risulterà competitivo con quella prodotta da combustibili fossili. Tuttavia il suo esteso impiego è penalizzato dalla periodicità operativa, poiché i pannelli fotovoltaici mediamente operano per circa 7 ore giornaliere, con fluttuazioni dovute alle condizioni atmosferiche, mentre l'energia deve essere prodotta in modo continuo, in ogni luogo e alla potenza desiderata. Questi fatti ne escludono l'impiego nel trasporto, per cui gli esemplari di automobili alimentate da celle fotovoltaiche sino ad ora costruite sono destinate a rimanere una curiosità.

### Propulsione elettrica

Le strategie sulla limitazione dei gas serra pongono l'accento sulla transizione verso una maggiore fruizione dell'energia elettrica; questo fatto richiede infrastrutture che facilitino la ricarica, oltre al miglioramento della tecnologia e alla diminuzione del costo delle batterie elettriche. Oltre ovviamente all'impiego di fonti a basso tenore di carbonio (nucleare, solare, eolico).

L'uso di auto elettriche costituisce un ottimo approccio per diminuire l'inquinamento locale che minaccia i centri abitati, ma non è ancora decollato per le difficoltà che si incontrano nell'immagazzinamento dell'energia elettrica. Pertanto viene richiesta una nuova generazione di batterie perché quelle tradizionali sono costose e poco efficienti, per quanto riguarda l'energia immagazzinata per unità di peso. È stato osservato che l'individuazione di una buona batteria è simile alla ricerca di un ago nel pagliaio costituito da tutti i materiali possibili. In questo quadro sono emerse le batterie a base di nichel (NiMH) contraddistinte con l'acronimo ZEBRA (*Zero Emission Battery Research Activities*) il cui scopo è l'aumento della densità di energia accumulata.

Le indagini in corso, generosamente finanziate, sono volte all'impiego di materiali contenenti ioni litio, che, in virtù della loro mobilità, presentano eccellenti prestazioni nelle applicazioni ai dispositivi elettronici, in particolare i calcolatori portatili, ma richiedono un non semplice passaggio di scala per poter essere applicati con profitto e senza difficoltà sulle autoveature. Lo stato attuale è riassunto nel diagramma della Fig. 5 [9], mentre nella Fig. 6 vengono riportate le previsioni relative all'impiego specifico delle

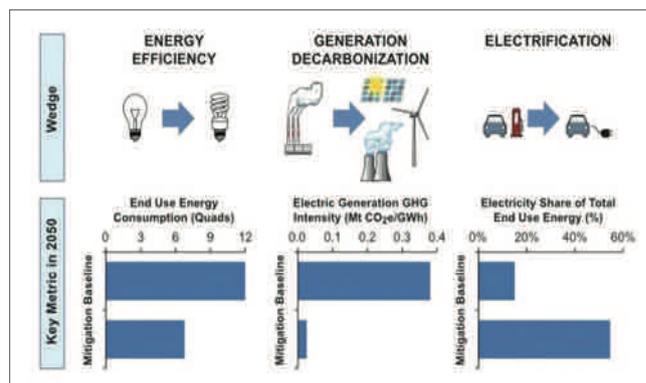


Fig. 4 - Modifiche proposte per ridurre l'emissione di CO<sub>2</sub> nei tre principali sistemi di trasformazione dell'energia (da [6])

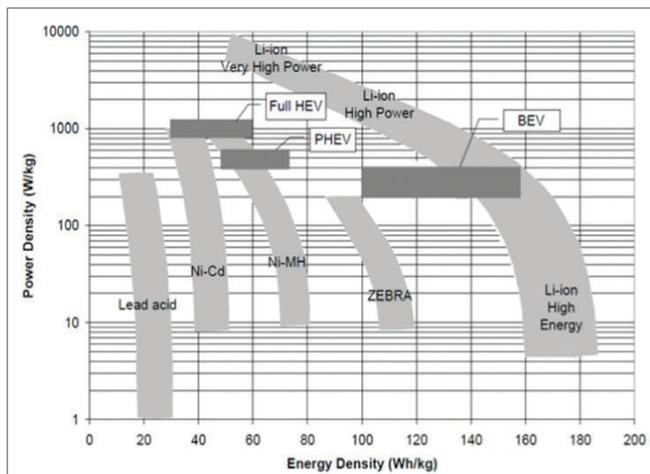


Fig. 5 - Confronto fra i valori delle densità di energia caricabili su diversi tipi di batterie (da [8]): Full HEV = Hybrid Electric Vehicle; PHEV = Pure Hybrid Electric Vehicle; BEV = Battery Electric Vehicle

batterie al litio. Ambiziosi progetti di sviluppo riguardano in particolare la società Tesla che promette di mettere sul mercato, entro il 2020, mezzo milione di vetture alimentate con batterie al litio.

### Biocarburanti

Dopo una prima fase che si è protratta fino al 2007, basata sulla fermentazione delle colture zuccherine (canna, mais, frumento), si è preso atto che l'intensificazione dell'impiego dei biocarburanti rischiava di compromettere la produzione di cibo, per cui a partire da tale anno è subentrata una seconda fase che fa impiego di raccolti dedicati all'energia, con particolare attenzione verso le masse cellulosiche.

La situazione richiede però un approfondimento dei fattori che influiscono sull'efficienza dei processi fotosintetici che stanno all'origine della produzione delle biomasse stesse. L'energia dei fotoni solari che vengono assorbiti nella fase *light* del processo dalla membrana tilacoide presente sulle foglie, viene impiegata per produrre adenosintrifosfato ATP che interviene quale vettore energetico nella successiva fase *dark* in cui vengono sintetizzati i carboidrati, i quali sono alla base delle attività dell'uomo (Fig. 7).

In questo quadro il processo fotosintetico può essere assimilato ad una macchina termica [10]. Il suo rendimento, espresso dalla frazione di energia di ciascun fotone assorbito, avente frequenza  $\nu_0$ , che non viene dissipata ma viene invece impiegata per produrre carboidrati, può essere espresso come segue:

$$\eta \approx [(1-T_2/T_1)] - (k_B T_2/h\nu_0) \ln[1/(1-\phi)]$$

essendo  $k_B$  la costante di Boltzmann.

Il primo termine al secondo membro esprime la resa di Carnot, prossima all'unità poiché la temperatura della sorgente calda è quella della superficie solare che ammonta a circa 6.000 K, mentre quella della sorgente fredda è dell'ordine di 300 K. Il secondo termine esprime l'influenza della irreversibilità delle trasformazioni chimiche in gioco che aumentano al crescere della resa quantica  $\phi$ , poiché con essa aumenta la loro velocità. In sostanza, paradossalmente, la resa globale della foto-

sintesi viene penalizzata dall'efficienza nell'assorbimento dei fotoni, che, in base alle recenti ricerche nel settore della *Quantum Biology* [11], risulta molto elevata, convalidando il fatto che globalmente il rendimento del processo risulta dell'ordine di qualche per cento.

Il fatto precedente, anche se mette in evidenza che la fotosintesi costituisce una mediocre macchina termica, non penalizza la produzione planetaria di biomassa per la quale è sufficiente la fruizione di una piccola parte (90 TW) del flusso di energia libera che proviene sulla terra dal sole (100.000 TW). Tuttavia mette in discussione l'utilità di tecnologie che costituiscono un ibrido fra la natura e l'industria, come la fotosintesi artificiale. Confermando che per sfruttare l'energia solare è opportuno cogliere i vantaggi della fotosintesi attraverso la produzione di biocarburanti.

In questo quadro appaiono viceversa di grande interesse le ricerche e gli sviluppi delle biotecnologie intesi ad impiegare batteri ingegnerizzati i cui circuiti metabolici vengono geneticamente modificati in modo da orientare la loro attività verso la produzione di biocarburanti [12]. Poiché i combustibili fossili sono il prodotto delle trasformazioni di sostanze organiche sepolte nel terreno, avvenute in centinaia di milioni di anni per l'azione di batteri, diventa quanto mai allettante raggiungere tale obiettivo modificando alcuni batteri esistenti.

Poiché i risultati ottenuti si stanno rivelando soddisfacenti, l'ingegneria metabolica, che costituisce un particolare aspetto della biologia sintetica, sta aprendo una prospettiva rivoluzionaria non solo per l'energia, ma per l'intera chimica. Tanto da lasciar presagire che possa risultare il più significativo approccio per agevolare la transizione verso un'era post petrolifera.

### Conclusioni

L'analisi precedente conferma che il problema dell'inquinamento dovuto al trasporto presenta aspetti diversificati, se non contrastanti, per quanto concerne l'inquinamento globale, volto sostanzialmente alla diminuzione della CO<sub>2</sub> emessa, e quello locale che tende a diminuire se non ad annullare le emissioni di sostanza nocive per gli organismi, evidenziando l'opportunità di accentuare la distinzione fra i mezzi di trasporto impiegati in centri urbani (con motori elettrici, ibridi, ad idrogeno ed eventualmente a celle a combustibile) da quelli impiegati su lunghi percorsi extraurbani, per i quali continuerà a prevalere l'impiego di motori a combustione interna alimentati da idrocarburi.

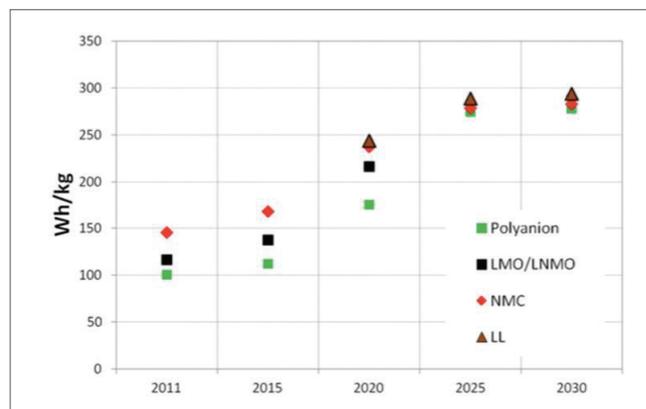


Fig. 6 - Previsioni dell'evoluzione della densità di energia caricabile su batterie al litio (da [8])

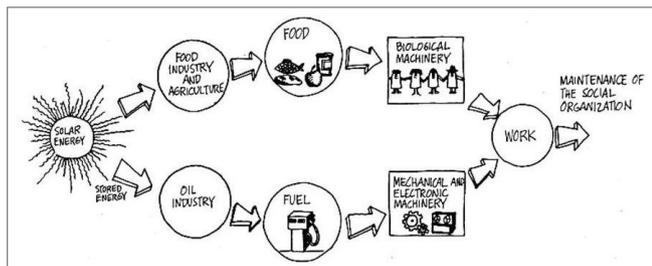


Fig. 7 - Rilevanza della fotosintesi in tutte le attività riguardanti dall'uomo e svolte dall'uomo

Comunque ogni ragionevole azione intesa a diminuire i danni sull'ambiente dovuti al trasporto non può fare a meno di promuovere iniziative di ricerca e sviluppo nei seguenti settori:

- termodinamica e fluido dinamica, per una rinnovata progettazione dei mezzi di trasporto basati su motori termici;
- scienza dei materiali ed elettrochimica, per la realizzazione di batterie innovative rispetto a quelle attualmente disponibili;
- biologia sintetica, per l'individuazione di sistemi batterici geneticamente modificati, in grado di orientare le sintesi chimiche industriali verso la produzione di biocarburanti di terza generazione.

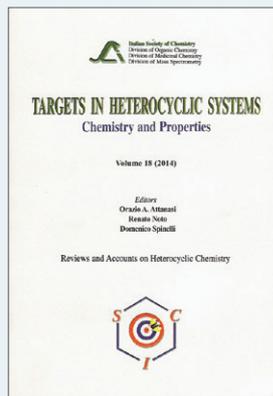
Nel contempo è richiesto un intervento in grado di introdurre un salto di qualità nell'efficienza energetica in generale dei processi produttivi industriali e nello sviluppo delle infrastrutture richieste per un'allargata transizione verso l'elettrificazione. Fallimenti in queste direzioni si dovranno attribuire solo ai politici.

#### BIBLIOGRAFIA

- [1] A. Schafer *et al.*, *American Scientist*, 2009, **97**, 479.
- [2] S. Carrà, *Ricerca scientifica e tecnologia, L'incerta alleanza*, Il Mulino, Bologna, 2013.
- [3] S. Carrà, *Il percorso dello sviluppo: il ruolo costruttivo dell'energia*, Fondazione Mattei, 2013.
- [4] F.L. Curzon, B. Ahlborn, *Am. J. Phys.*, 1975, **43**, 22.
- [5] M. Safari *et al.*, *Entropy*, 2014, **16**, 5159.
- [6] N. Gourdain *et al.*, *Phil. Trans. R. Soc. A*, 2014, **372**, 20130323.
- [7] J.H. Williams *et al.*, *Science*, 2012, **335**, 53.
- [8] W. Shockley, H.J. Queisser, *J. of Applied Physics*, 1961, **32**, 510.
- [9] Element Energy Limited, Cambridge CB1 2JD, Cost and performance of EV batteries, 2012.
- [10] T. Markvart, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 2008, **205**(12), 2752.
- [11] Y.C. Cheng, G.R. Fleming, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 2009, **60**, 241.
- [12] O.H. Carlson, *Biology is Technology*, Harvard University Press, 2010.

#### Choices on the Future of Energy: the Transportation Dilemma

Forecasts suggest that the gaseous emissions from the means of transport could reach a level such as to render ineffective any attempt to impose reasonable limits on the concentration of carbon dioxide in the atmosphere. Moreover, the different characteristics of local and global pollution impose a sharp differentiation between the vehicles used in residential areas and in the wide open roads. Some appropriate actions are deepened.



#### Targets in Heterocyclic Systems

Vol. 18

È disponibile il 18° volume della serie

“Targets in Heterocyclic Systems”, a cura di Orazio A. Attanasi, Renato Noto e Domenico Spinelli.

Sono disponibili anche i volumi 1-17 della serie.

I seguenti volumi sono a disposizione dei Soci gratuitamente, è richiesto soltanto un contributo spese di € 10:

- G. Scorrano “La Storia della SCI”, Edises, Napoli, 2009 (pp. 195)
- G. Scorrano “Chimica un racconto dai manifesti”, Canova Edizioni, Treviso, 2009 (pp. 180)
- AA.VV. CnS “La Storia della Chimica” numero speciale, Edizioni SCI, Roma 2007 (pp. 151)
- AA.VV. “Innovazione chimica per l'applicazione del REACH” Edizioni SCI, Milano, 2009 (pp. 64)

Oltre “La Chimica e l'Industria”, organo ufficiale della Società Chimica Italiana, e “CnS - La Chimica nella Scuola”, organo ufficiale della Divisione di Didattica della SCI ([www.soc.chim.it/riviste/cns/catalogo](http://www.soc.chim.it/riviste/cns/catalogo)), rilevante è la pubblicazione, congiuntamente ad altre Società Chimiche Europee, di riviste scientifiche di alto livello internazionale:

- ChemPubSoc Europe Journal
- Chemistry A European Journal
- EURJOC
- EURJIC
- ChemBioChem
- ChemMedChem
- ChemSusChem
- Chemistry Open
- ChemPubSoc Europe Sister Journals
- Chemistry An Asian Journal
- Asian Journal of Organic Chemistry
- Angewandte Chemie
- Analytical & Bioanalytical Chemistry
- PCCP, Physical Chemistry Chemical Physics

**Per informazioni e ordini telefonare in sede, 06 8549691/8553968, o inviare un messaggio a [manuela.mostacci@soc.chim.it](mailto:manuela.mostacci@soc.chim.it)**