



Michela Signoretto<sup>a</sup>, Paolo Fornasiero<sup>b</sup>, Rinaldo Psaro<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Dipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi, Università Ca' Foscari Venezia

<sup>b</sup>Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Trieste

<sup>c</sup>CNR - Istituto di Scienze e Tecnologie Chimiche "Giulio Natta", Milano

# CATALISI

**La giornata dedicata alla catalisi ha avuto il contributo di tre keynote dall'industria (Polynt Group, Eni e Basell Poliolefine Italia Srl), delle conferenze dei vincitori di: Medaglia Mangini, Premio GIC Grasselli e Chini Lecture, e di alcune selezionate comunicazioni orali. Si sono anche tenute due stimolanti tavole rotonde sui contributi della catalisi per la transizione energetica e lo sviluppo sostenibile.**

Mercoledì 28 agosto 2024, nel corso del XXVIII Congresso della Società Chimica Italiana, giornata dedicata alle sessioni parallele, la numero 7 è stata interamente dedicata alla catalisi. La mattinata è stata organizzata dalla Divisione di Chimica Industriale (delegati Michela Signoretto e Rinaldo Psaro), e la sessione pomeridiana è stata curata dalla Divisione di Chimica Inorganica (delegato Paolo Fornasiero). Ai fini della definizione del programma hanno inoltre partecipato i delegati delle seguenti divisioni: Chimica Teorica (Giovanni Di Liberto), Chimica Organica (Enrico Marcantoni), Chimica Ambientale e dei Beni Culturali (Davide Vione), Chimica per le Tecnologie (Maria Michele Dell'Anna e Gianguido Ramis), e dei gruppi interdivisionali: Chimica organometallica (Walter Baratta), Green Chemistry - Chimica Sostenibile (Carmine Capacchione e Federica Zaccheria).

La struttura della giornata ha previsto delle keynote di esperti industriali, delle assegnazioni di premi relativamente allo sviluppo di catalizzatori e processi catalitici e di selezionate comunicazioni, nonché di due tavole rotonde. Un programma molto denso sui vari aspetti della catalisi con importanti indicazioni sulle sfide su cui la ricerca di base e applicata dovrà cimentarsi con successo per il bene della collettività.

La sessione della mattinata (chairman Marcella Bonchio) è iniziata con la premiazione di Valeria Conte dell'Università di Roma Tor Vergata, vincitrice della prestigiosa medaglia d'oro Angelo Mangini. Nel suo intervento dal titolo *"The Oxygen Paradox, a lifelong challenging dance"*, l'oratrice ha ripercorso la sua carriera scientifica in cui si è occupata principalmente dell'ossidazione di

composti organici con composti perossidici e metallo perossidici derivanti da acqua ossigenata o idroperossidi alchilici in presenza di ioni metallici di transizione in elevato stato di ossidazione. In particolare, la sua attività di ricerca si è focalizzata sulla comprensione dei meccanismi di reazione, sia eterolitici che omolitici. Più recentemente i suoi interessi si sono concentrati sullo studio delle proprietà e della reattività di sistemi ossidanti basati su perosso-complessi di vanadio, in soluzione acquosa, poiché tali sistemi rivestono un notevole interesse dal punto di vista biologico. Da anni si interessa anche di temi di ricerca vicini alla chimica sostenibile, in particolare di nuove molecole organiche policicliche di sintesi, studiate per le interessanti proprietà fotochimiche, elettroniche ed elettrochimiche in soluzione e depositate su superfici metalliche o semiconduttrici.

Tommaso Tabanelli ha presentato la prima keynote della mattina a cura di Carlotta Cortelli di Polynt Group dal titolo *"Contribution of catalysis and process optimization to improve sustainability in thermoset materials"*. Tra i polimeri termoindurenti, le resine poliestere insature sono i polimeri più importanti utilizzati nella produzione di articoli fibro-rinforzati. Due materie prime molto importanti sono le anidridi maleiche e ftaliche, prodotte industrialmente da reazioni di ossidazione catalizzata in fase gassosa di *n*-butano e *o*-xilene. Anche se i processi industriali per la produzione delle anidridi sono ben consolidati e utilizzati in tutto il mondo da decenni, si cercano miglioramenti continui e incrementali nelle prestazioni dei catalizzatori per migliorare i rendimenti del processo e contemporaneamente diminuire le emissioni di CO<sub>2</sub>, riducen-



do così l'impronta di carbonio dell'intera catena di produzione dei materiali compositi. Parallelamente, le attività di ricerca si concentrano sull'utilizzo di materie prime rinnovabili e sullo sviluppo di processi a basso consumo energetico per migliorare ulteriormente la sostenibilità di questi monomeri. È importante sottolineare che nello sviluppo di nuove soluzioni, la disponibilità e il costo delle materie prime rinnovabili, così come i costi di investimento necessari per implementare nuovi processi sostenibili, devono essere considerati con attenzione, in quanto potrebbero rappresentare delle barriere al raggiungimento degli obiettivi di sostenibilità.

Elena Groppo ha presentato le due comunicazioni tenute rispettivamente da Nicola Di Fidio (Università di Pisa), con *"Chemical and enzymatic hydrolysis of waste wheat bran to sugars and their simultaneous biocatalytic conversion to valuable carotenoids and lipids"*, e da Nicoletta Rusta (Università di Cagliari), con *"Cerium Oxide-based catalysts for direct synthesis of dimethyl carbonate from methanol and CO<sub>2</sub>"*.

Si è quindi passati alla premiazione del premio GIC 2024 intitolato alla memoria del Prof. Robert K. Grasselli, durante la quale il coordinatore del Gruppo di Catalisi Alessandro Trovarelli ha invitato Eva-Maria Hauck Grasselli, che dal 2020 per

onorare la memoria del marito sostiene finanziariamente il premio, alla consegna delle targhe ai vincitori: Gianvito Vilè del Politecnico di Milano e Andrea Fasolini dell'Università di Bologna (Fig. 1). Federica Menegazzo ha brevemente illustrato la carriera scientifica di Grasselli e ha invitato i due vincitori a presentare i risultati delle loro ricerche in catalisi. Vilè ha esposto la relazione dal titolo: *"Single-atom catalysis for greener chemical synthesis"*, a seguire Fasolini con l'intervento: *"Ce and Zr based oxides as useful supports and materials for gas phase H<sub>2</sub> production and utilization"*.

Rinaldo Psaro ha introdotto la seconda keynote a cura di Roberto Millini di Eni dal titolo: *"CO<sub>2</sub>: from a waste to a resource in the energy sector"*. L'obiettivo emissioni zero è molto impegnativo, soprattutto se si considera che la principale fonte di CO<sub>2</sub> è il settore energetico che, nel 2022, era responsabile delle emissioni di 36,8 Gtonn CO<sub>2</sub>, l'1% in più rispetto al livello pre-COVID. Per raggiungere questo obiettivo, è necessario mettere in atto azioni che portino alla progressiva riduzione dell'uso delle fonti fossili: l'aumento dell'efficienza energetica, lo sviluppo delle fonti rinnovabili, l'elettrificazione dei trasporti e degli edifici sono tra le azioni più richieste, ma queste necessitano di un radicale adeguamento delle infrastrutture, lungo e costoso.

Per questo motivo, gli scenari attribuiscono un ruolo importante alla cattura e allo stoccaggio del carbonio (Carbon Capture Utilization and Storage, CCUS), cioè alle modalità che prevedono la limitazione delle emissioni di CO<sub>2</sub> attraverso la sua cattura, ad esempio dai gas di scarico, e il sequestro permanente in formazioni geologiche adeguate (CCS) o il suo utilizzo per la produzione di beni o servizi con valore di mercato (CCU). A questo proposito, il riutilizzo della CO<sub>2</sub> come fonte di carbonio sta attirando sempre più attenzione e ampie attività di ricerca e sviluppo si stanno concentrando sulla sua conversione in materiali da costruzione, polimeri e prodotti chi-



Fig. 1 - Premiazione Grasselli GIC2024, da sx: Gianvito Vilè, Eva-Maria Hauck Grasselli e Andrea Fasolini

mici, carburanti sintetici sostenibili (e-fuels), questi ultimi con un impatto diretto sul settore energetico. In particolare, gli e-fuels sono destinati a svolgere un ruolo nel settore dei trasporti, soprattutto per i cosiddetti segmenti difficili da abbattere, l'aviazione e la marina, per i quali l'elettrificazione e l'uso dell' $H_2$  sono complessi, almeno nel medio-lungo termine. Gli e-fuels hanno caratteristiche molto simili ai corrispondenti combustibili fossili e questo li rende compatibili sia con le infrastrutture di trasporto, distribuzione e stoccaggio esistenti, sia con i motori attuali. Gli e-fuels, sia gassosi (metano) che liquidi (metanolo, dimetiletere, benzina, diesel, jet fuel), sono prodotti mediante riduzione diretta o indiretta della  $CO_2$  catturata da fonti concentrate (ad esempio, gas di scarico), dall'aria (Direct Air Capture, DAC) o di origine biogenica (ad esempio, dal biogas). Per la riduzione della  $CO_2$  a combustibile, sono necessari anche  $H_2$  verde proveniente dall'elettrolisi dell'acqua ed energia elettrica rinnovabile.

Denominatore comune degli interventi della giornata è stato l'impiego di approcci catalitici efficienti in grado di favorire al meglio la transizione verso l'economia circolare contestualizzata nel complesso panorama energetico attuale. In questa direzione è andata la discussione della tavola rotonda intitolata "Biomass and decarbonisation: challenges and opportunities in energy transition" che ha concluso nel migliore dei modi la sessione. Tra gli invitati

Fabrizio Cavani (Università di Bologna), Carlotta Cortelli (Polynt), Isabella De Bari (Enea), Federica Zaccheria (CNR-SCITEC), che si sono confrontati sulle principali sfide relative all'impiego di biomasse e materie prime di scarto per la produzione di energia nell'ottica della decarbonizzazione. I moderatori della tavola rotonda sono stati Michela Signoretto (ex coordinatrice del Gruppo di Catalisi) e Alessandro Trovarelli. La discussione aperta al pubblico in sala è stata coordinata da Gianguido Ramis (Università di Genova) (Fig. 2).

Questa prima parte della sessione dedicata alla catalisi ha, dimostrato, ancora una volta che la sinergia ed il confronto tra accademia ed impresa, la diversificazione degli approcci e la creazione di un ecosistema favorevole, dato dall'interazione e dal dialogo tra tecnici, scienziati, parti sociali, istituzioni ed industria, sono indispensabili per affrontare criticità e precarietà del momento storico che stiamo vivendo.

La sessione pomeridiana si è aperta con una tavola rotonda che combinava aspetti legati all'utilizzo dei "critical raw materials", lo sviluppo dei catalizzatori di tipo "single atom" e di quelli "metal free" all'uso dell'intelligenza artificiale in catalisi, per finire con le prospettive legate all'utilizzo della luce nella promozione delle reazioni chimiche.

La sessione ha attirato e coinvolto un ampio pubblico in una stimolante discussione con colleghi di primissimo piano scientifico. Erano infatti presenti Silvia Bordiga (Università di Torino ed Accademia dei Lincei), Gianfranco Pacchioni (Università di Milano Bicocca ed Accademia dei Lincei), Maurizio Prato (Università di Trieste, CIC biomaGUNE ed Accademia dei Lincei) ed Elena Selli (Università di Milano), i quali, stimolati da alcune considerazioni dei due coordinatori, Mario Chiesa (Università di Torino) e Paolo Fornasiero (Università di Trieste), sono riusciti a proporre punti di vista complementari, mai banali e supportati da personali esperienze concrete a partire dalla loro visione di una road map per la catalisi dei prossimi 10 anni, con un'analisi dei principali processi e delle sfide più rilevanti.

Il pubblico si è poi dimostrato attento, partecipativo e, a volte, anche costruttivamente critico quando sono stati affrontati temi attuali e controversi, quali la reale possibilità di sintetizzare catalizzatori reali con un vero approccio di progettazione con-

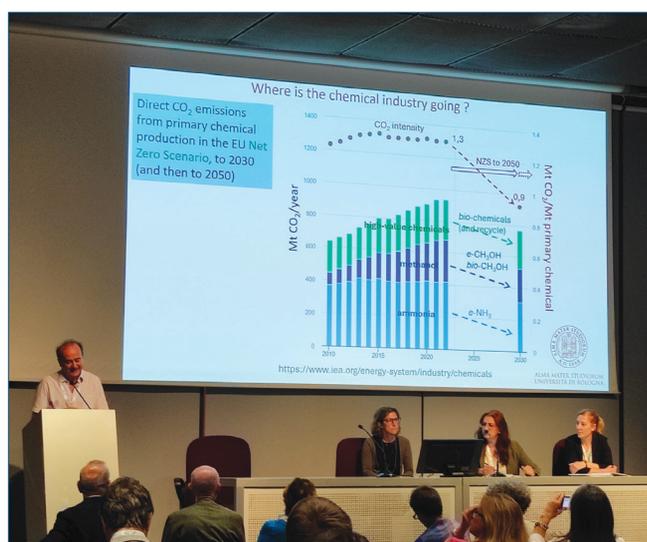


Fig. 2 - Tavola Rotonda, da sx: Fabrizio Cavani, Federica Zaccheria, Isabella De Bari, Carlotta Cortelli



Fig. 3 - Premiazione Chini Lecture di Vincenzo Busico da parte di Alceo Macchioni della Divisione di Chimica Inorganica

trollata. L'implementazione su scala industriale di metodi sintetici tipicamente limitati a sistemi modello o ideali richiede, evidentemente, di rafforzare la sinergia tra teoria ed esperimento, aprendo la strada per possibili e ancora non scontate o tutt'altro che ovvie applicazioni dell'intelligenza artificiale. Il problema di affidabilità e riproducibilità dei dati, in particolare nel campo della fotocatalisi eterogenea, ha suscitato notevole attenzione.

Barbara Milani (Università di Trieste) ha introdotto la keynote lecture di Ugo Visentini di Basell Poliolefine Italia Srl dal titolo: "Ziegler Natta Catalyst: 70 years of continuous advancement" che ha visto una rivisitazione in chiave moderna con prospettive attuali e importanti riflessi sul futuro, della catalisi di polimerizzazione applicata alla sintesi di poliolefine, di cui l'azienda è punto di riferimento a livello mondiale. Le prospettive future hanno in particolare riguardato l'importante impegno di LyondellBasell nel riciclo delle materie plastiche. In questo contesto è stata illustrata l'innovativa tecnologia di depolimerizzazione alla base del processo MoReTec, i cui studi, iniziati nel sito di Ferrara nel 2018, e dopo la sperimentazione dell'impianto pilota, hanno portato l'azienda a decidere sulla costruzione del primo impianto di riciclo avanzato che verrà aperto nel 2025 in Germania, presso la sede di Wesseling.

In stretta connessione con la tematica, ma con un taglio più accademico, si è inserita la prestigiosa

Chini Lecture di Vincenzo Busico dell'Università Federico II di Napoli (Fig. 3) dal titolo "Ziegler-Natta Catalysis: a journey in the land of serendipity". L'intervento è stato introdotto da Alceo Macchioni dell'Università di Perugia. L'oratore ha ripercorso la sua carriera scientifica in cui si è occupato di catalisi di polimerizzazione rivolta, in particolare, alla sintesi stereocontrollata delle poliolefine. Gli sviluppi più recenti della sua ricerca riguardano l'applicazione della robotica alla catalisi di polimerizzazione con l'uso di *high throughput experimentation* quale strumento di grande efficacia per la scoperta di nuovi catalizzatori.

Giovanni Di Liberto e Rinaldo Psaro si sono alternati nella presentazione delle ultime quattro comunicazioni tenute rispettivamente da Umberto Raucci (IIT): "Unravelling the complex dynamical behavior of heterogeneous catalysts during reactants exposure"; da Tiziano Montini (Università di Trieste): " $H_2$  production by ethanol dehydrogenation on metal doped  $ZnIn_2S_4$  photocatalysts"; da Maria Michela Dell'Anna (Politecnico di Bari): "A virtuous cycle of wastes: iron oxides supported on steel slags as catalyst for the hydrogenation of nitroarenes"; da Samir Bensaid (Politecnico di Torino): "Effect of pre-treatment conditions on Fe-based catalyst for e-fuel production via modified Fischer-Tropsch synthesis".

A conclusione di questa intensa giornata, che ha visto la partecipazione del mondo accademico e industriale, rispetto alla domanda iniziale 'Quale futuro per la catalisi?', si può affermare che il settore della catalisi è ancora caratterizzato da una notevole capacità di innovazione e deve essere considerata uno degli elementi strategici dello sviluppo sostenibile.

### Catalysis

The catalysis day had the contribution of three keynotes from industry (Polynt Group, Eni and Basell Poliolefine Italia Srl), the Mangini Medal, Grasselli GIC Award and the Chini Lecture, and selected oral communications. There were also two stimulating panel discussions on the contributions of catalysis for the energy transition and sustainable development.