

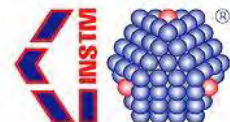
# Nuovi Catalizzatori per la sostenibilità



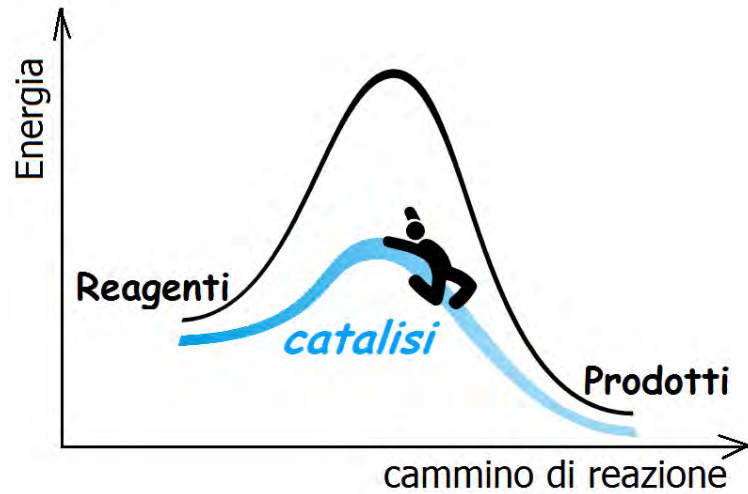
**Silvia Bordiga**

**Dipartimento di Chimica**

**Università di Torino, NIS e INSTM**



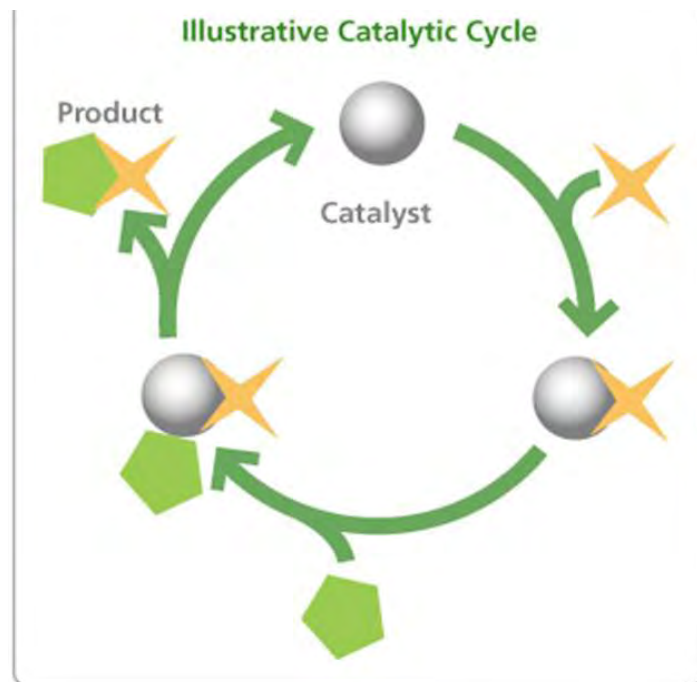
# L'intuizione di Berzelius e il termine "catalisi"



La stragrande maggioranza dei prodotti dell'industria chimica e non solo, deriva da processi che fanno uso di catalizzatori. Fu Berzelius il primo ad intuire l'esistenza di sostanze in grado di influire sulla velocità di certe reazioni chimiche.

Nel 1836 Berzelius ideò il termine catalisi combinando due parole Greche κατά (giù) e λύσις (sciogliere)

Secondo **Berzelius** (chimico Svedese) il *catalizzatore è una sostanza che permette l'avvio di una reazione senza prenderne parte e quindi senza consumarsi...*



*"[...] the catalytic power seems actually to consist in the fact that substances are able to **awake affinities**, which are asleep at a particular temperature, by their mere presence and not by their own affinity."*



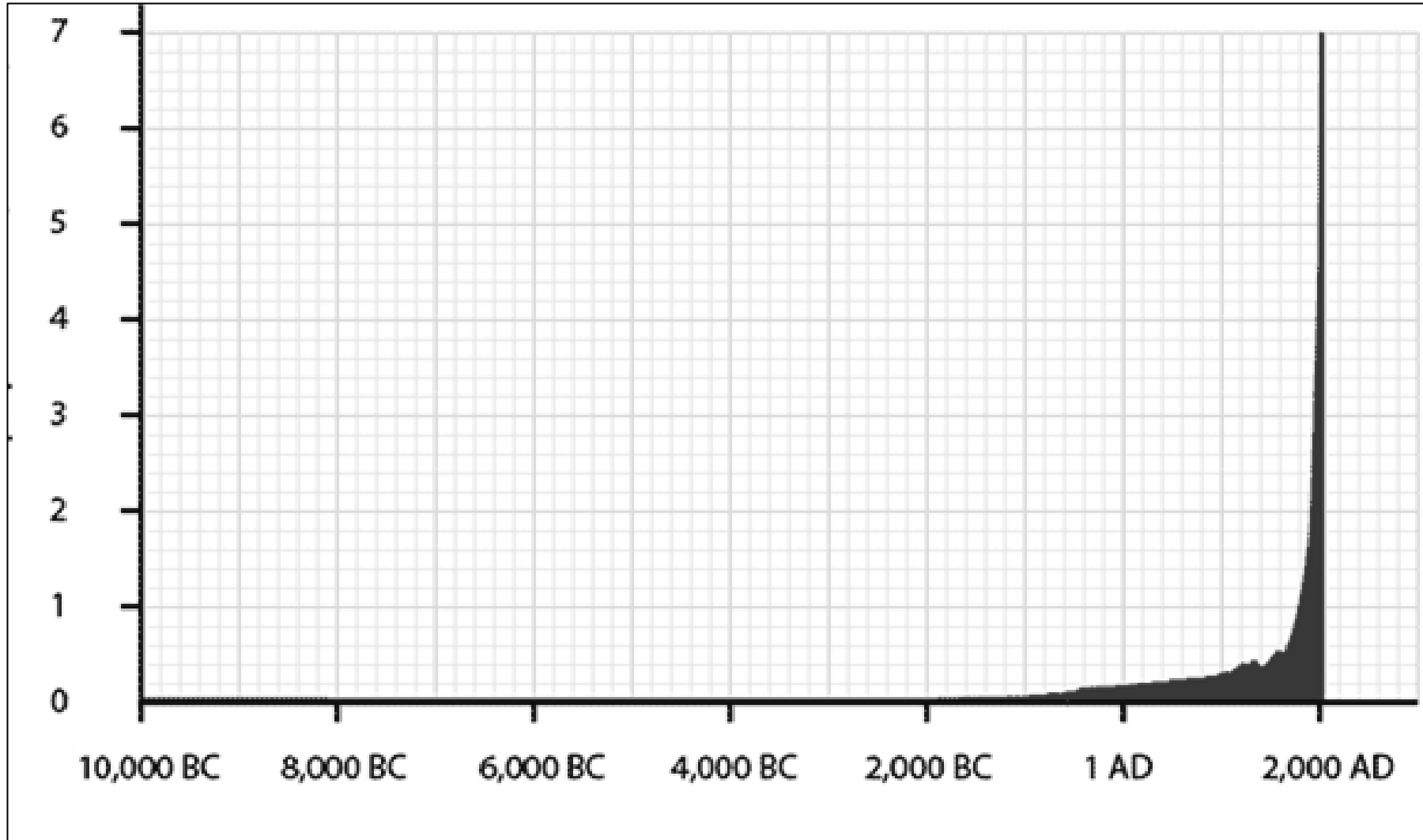
*J. J. Berzelius*

**A settembre 2015 i governi di 193 Paesi membri dell'ONU, hanno trovato un accordo su quali siano gli obiettivi comuni, da raggiungere entro il 2030, per garantire a tutti un futuro sostenibile.**



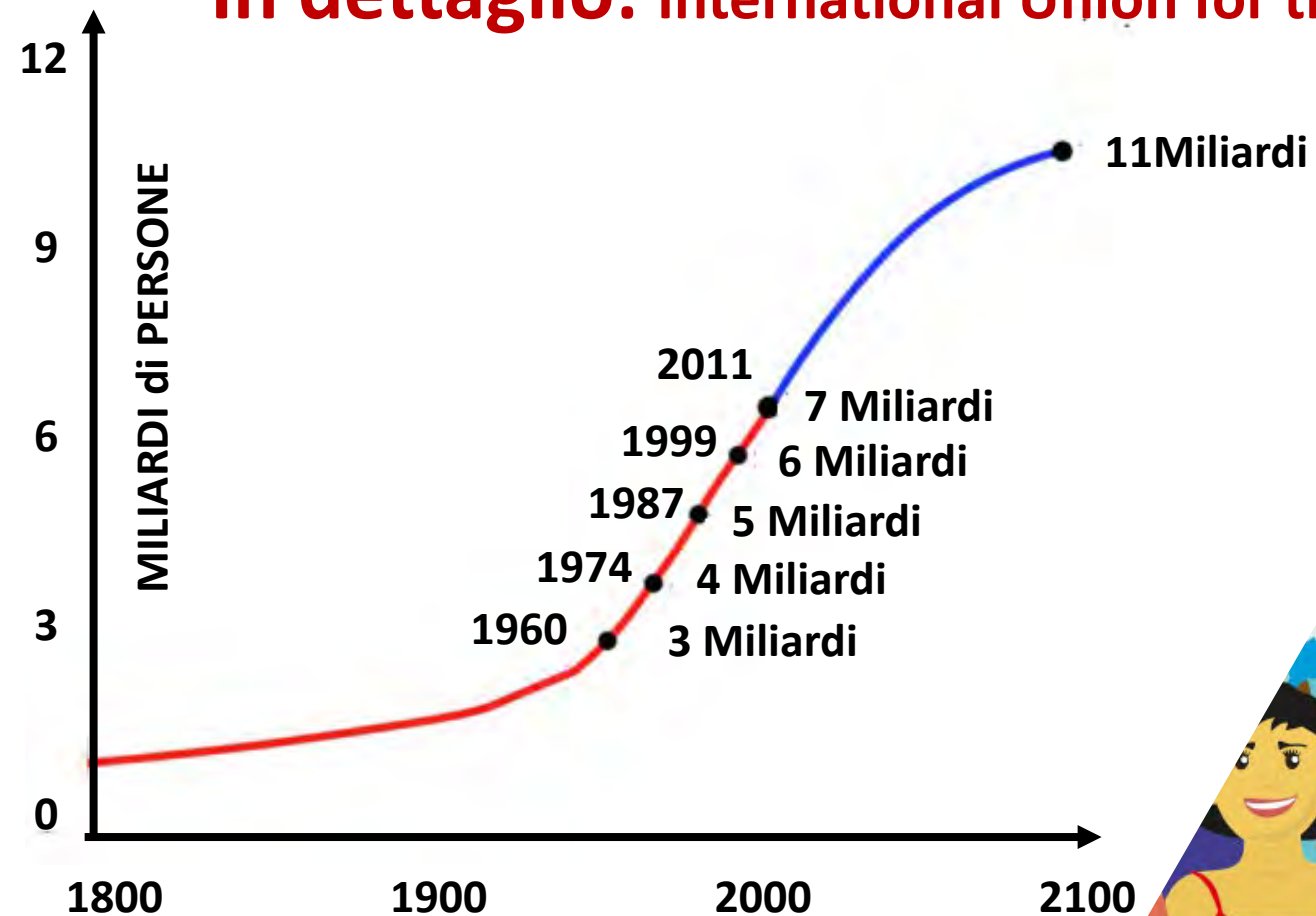
**La sostenibilità non è solo una questione ambientale  
Si afferma una visione globale che considera aspetti sociali ed economici**

# La popolazione aumenta per numerosità ed esigenze, mentre la terra si impoverisce



Siamo in un  
periodo  
speciale

# In dettaglio: International Union for the Scientific Study of Population



Fonte: dal 1950 «World population prospective»  
(versione del 2015)



# La catena produttiva attuale

Today

Raw Materials and  
Energy Sources



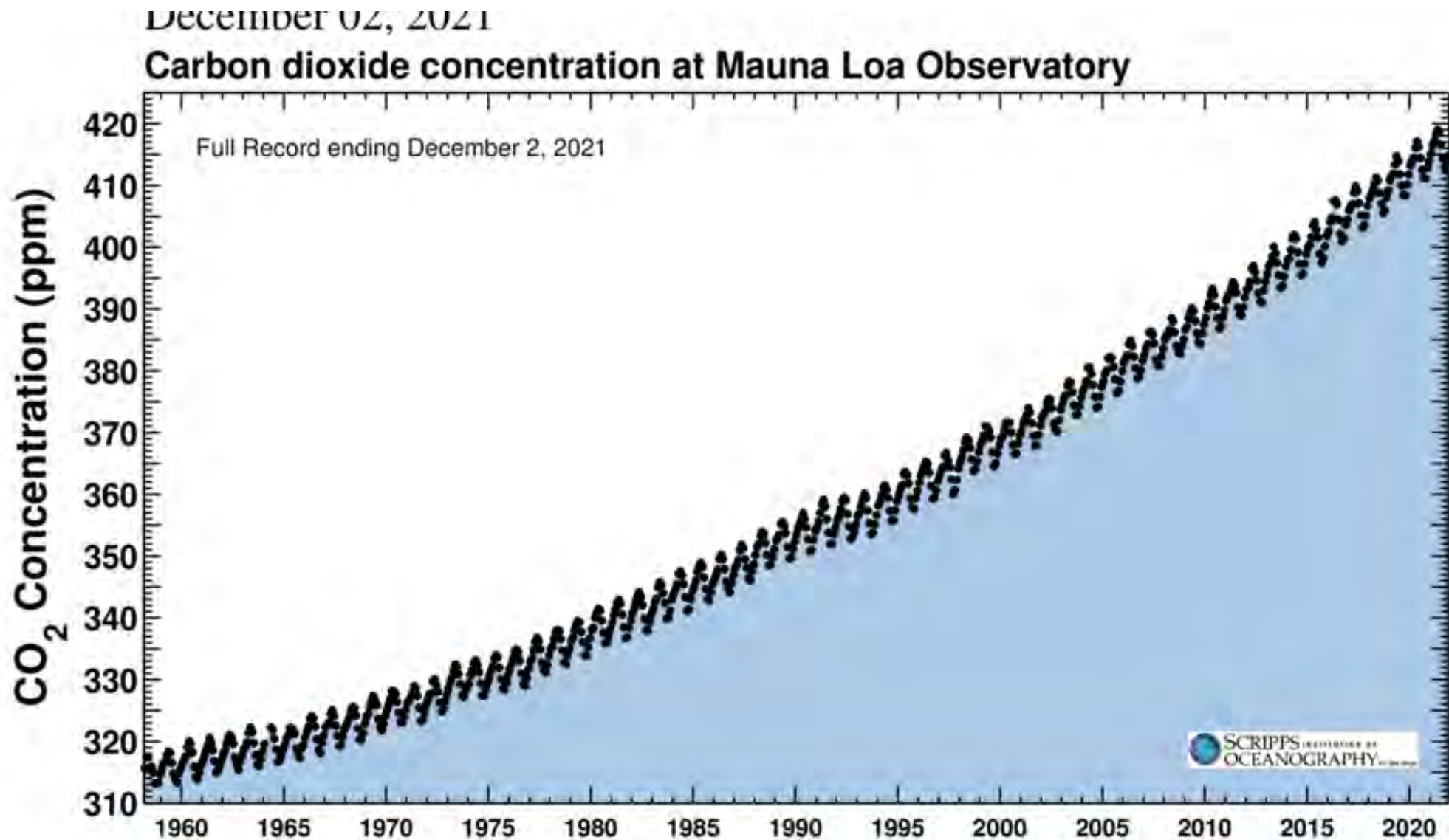
Catalysis

Products

Waste

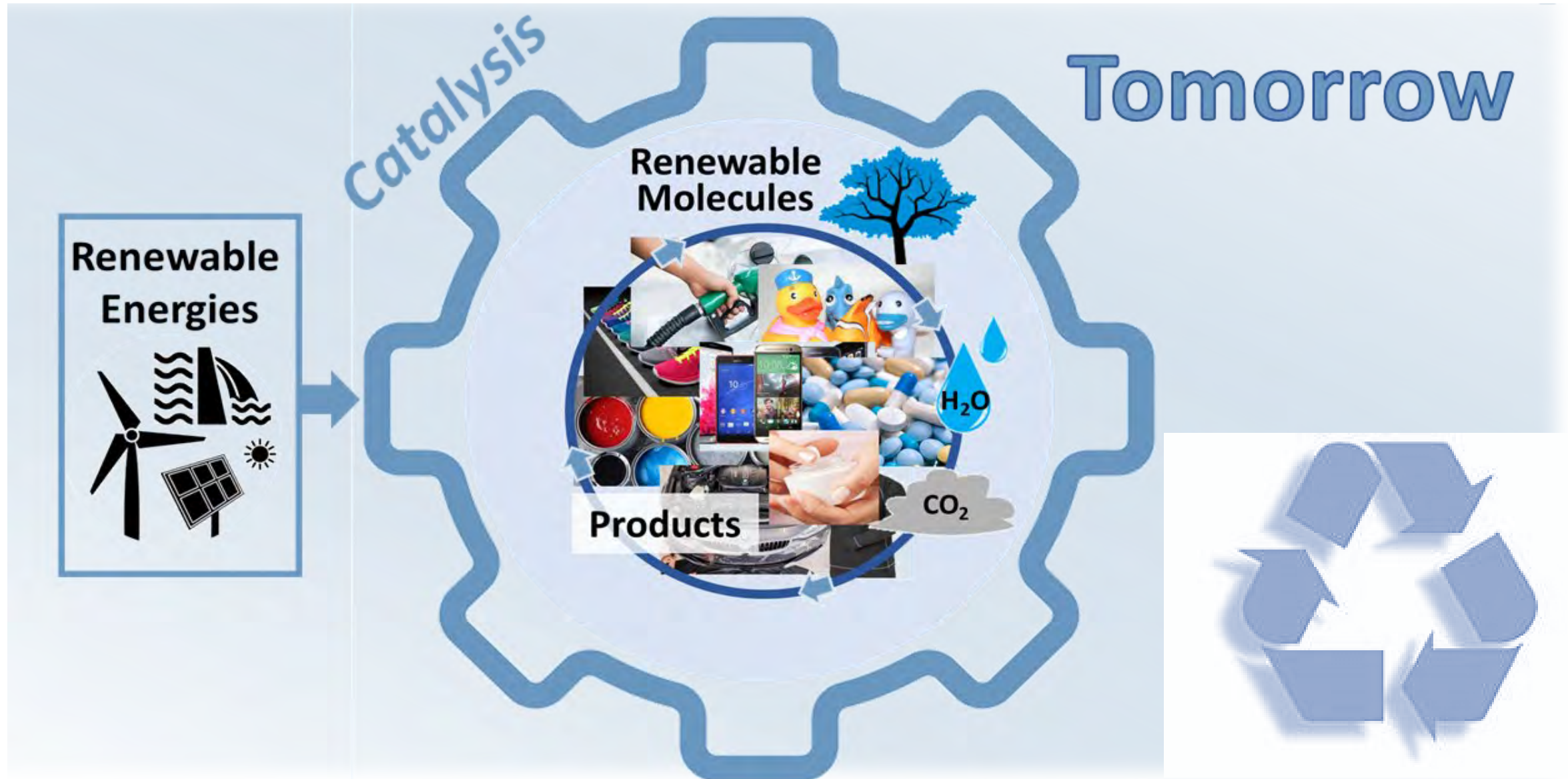


# Inoltre la CO<sub>2</sub> cresce oltre misura.

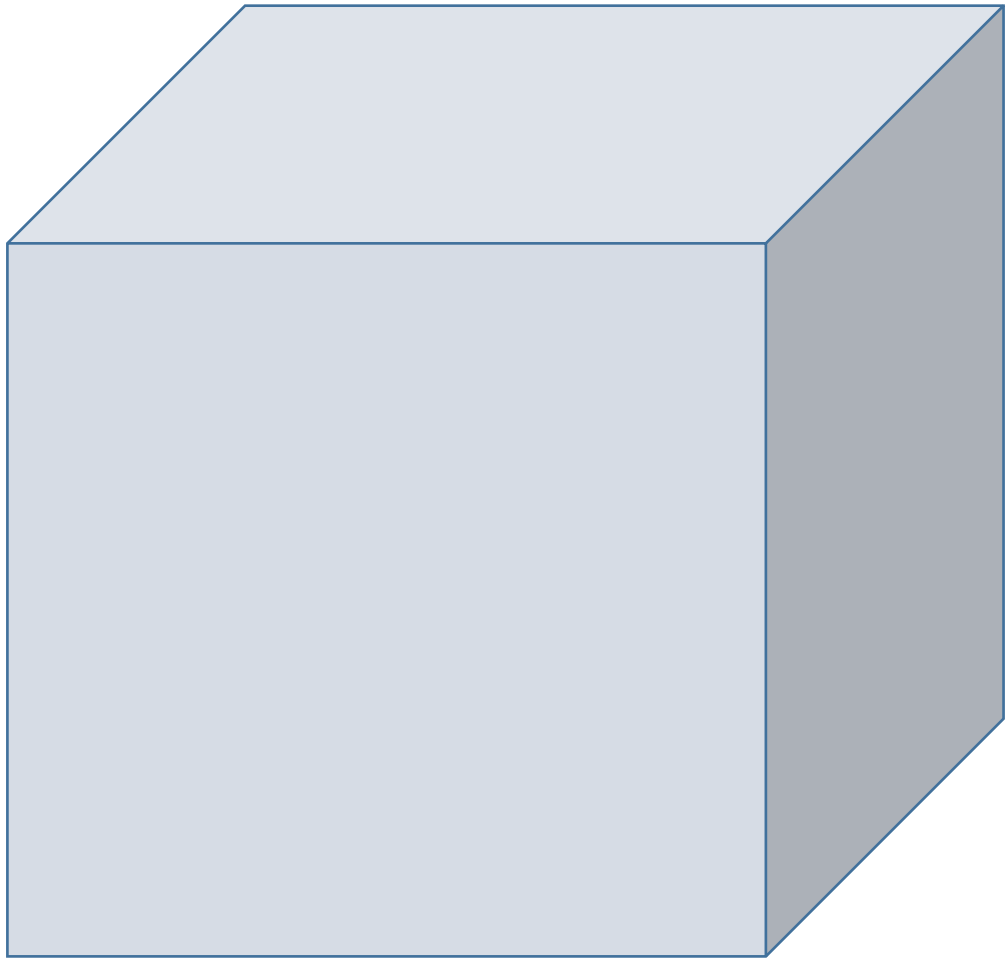


Bisogna  
intervenire  
al più presto

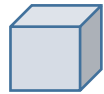
# Attraverso una catena produttiva circolare







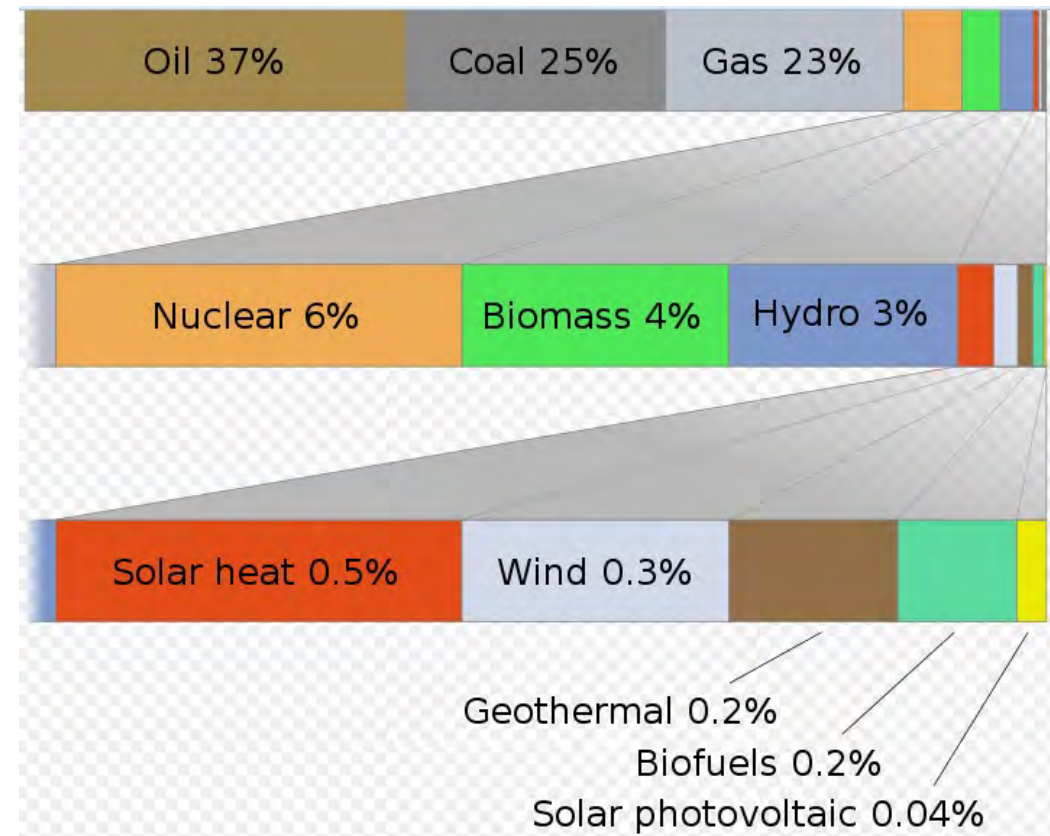
**Solare**  
**86.000 TW**



**Eolico**  
**870 TW**



**Geotermico**  
**37 TW**



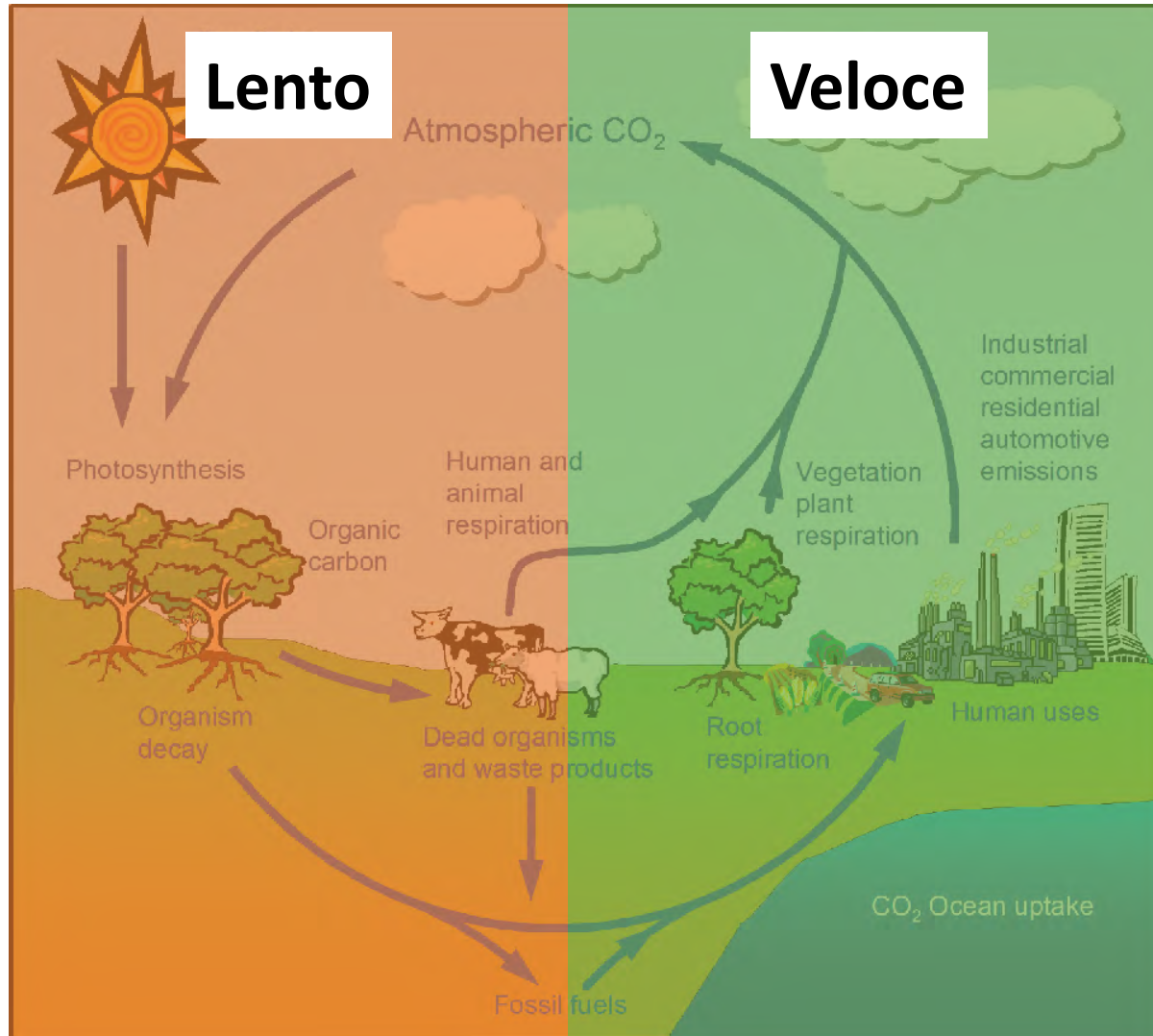
**Consumi**  
**15 TW**

# Il ciclo naturale del Carbonio

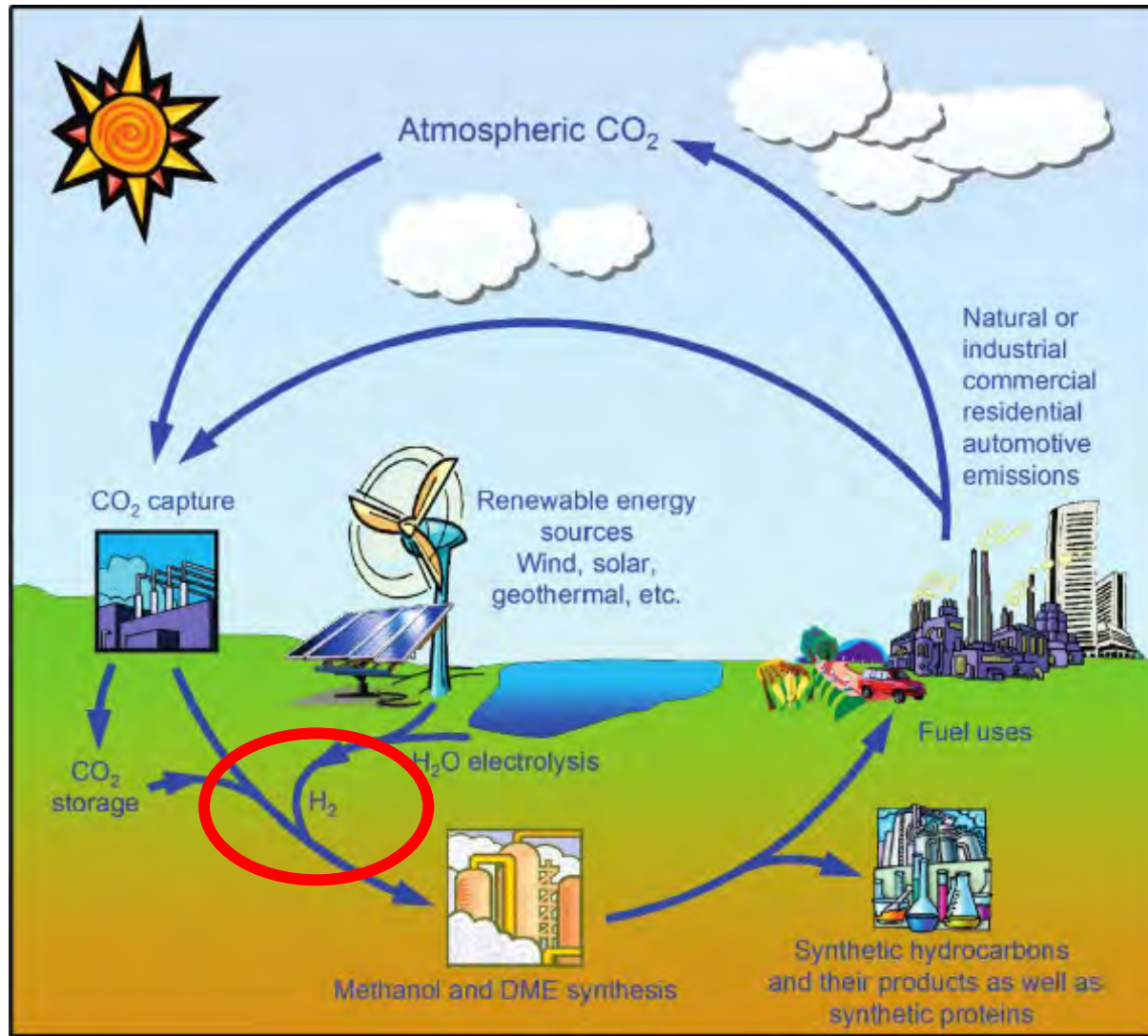
Prendiamo spunto dalla natura che attua processi circolari .

Ma hanno un difetto..... Sono lenti e noi abbiamo fretta

*Facciamo come dice Leonardo "Dove la Natura finisce di produrre le sue specie, comincia l'uomo, in armonia con le leggi della Natura, a creare una infinità di altre specie".*



# ... una possibile via di scampo



**Sviluppare catalizzatori che permettano di accelerare la parte lenta del ciclo del carbonio**

**Una direzione di sviluppo:**

- Produrre H<sub>2</sub> sostenibile
- Usare catalizzatori che si basino su elementi «non critici»
- Sviluppare processi che operino a temperature e pressioni moderate

# IUPAC Periodic Table of the Elements

1 <b>H</b> hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]																	18 <b>He</b> helium 4.0026
3 <b>Li</b> lithium 6.94 [6.938, 6.947]	4 <b>Be</b> beryllium 9.0122											5 <b>B</b> boron 10.81 [10.806, 10.821]	6 <b>C</b> carbon 12.01 [12.009, 12.012]	7 <b>N</b> nitrogen 14.01 [14.006, 14.009]	8 <b>O</b> oxygen 15.999 [15.999, 16.000]	9 <b>F</b> fluorine 18.998	10 <b>Ne</b> neon 20.180
11 <b>Na</b> sodium 22.990	12 <b>Mg</b> magnesium 24.305 [24.304, 24.307]											13 <b>Al</b> aluminium 26.982	14 <b>Si</b> silicon 28.086 [28.084, 28.089]	15 <b>P</b> phosphorus 30.974	16 <b>S</b> sulfur 32.06 [32.059, 32.076]	17 <b>Cl</b> chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	18 <b>Ar</b> argon 39.95 [39.792, 39.963]
19 <b>K</b> potassium 39.098	20 <b>Ca</b> calcium 40.078(4)	21 <b>Sc</b> scandium 44.956	22 <b>Ti</b> titanium 47.867	23 <b>V</b> vanadium 50.942	24 <b>Cr</b> chromium 51.996	25 <b>Mn</b> manganese 54.938	26 <b>Fe</b> iron 55.845(2)	27 <b>Co</b> cobalt 58.933	28 <b>Ni</b> nickel 58.693	29 <b>Cu</b> copper 63.546(3)	30 <b>Zn</b> zinc 65.38(2)	31 <b>Ga</b> gallium 69.723	32 <b>Ge</b> germanium 72.630(8)	33 <b>As</b> arsenic 74.922	34 <b>Se</b> selenium 78.971(8)	35 <b>Br</b> bromine 79.904 [79.901, 79.907]	36 <b>Kr</b> krypton 83.798(2)
37 <b>Rb</b> rubidium 85.468	38 <b>Sr</b> strontium 87.62	39 <b>Y</b> yttrium 88.906	40 <b>Zr</b> zirconium 91.224(2)	41 <b>Nb</b> niobium 92.906	42 <b>Mo</b> molybdenum 95.95	43 <b>Tc</b> technetium	44 <b>Ru</b> ruthenium 101.07(2)	45 <b>Rh</b> rhodium 102.91	46 <b>Pd</b> palladium 106.42	47 <b>Ag</b> silver 107.87	48 <b>Cd</b> cadmium 112.41	49 <b>In</b> indium 114.82	50 <b>Sn</b> tin 118.71	51 <b>Sb</b> antimony 121.76	52 <b>Te</b> tellurium 127.60(3)	53 <b>I</b> iodine 126.90	54 <b>Xe</b> xenon 131.29
55 <b>Cs</b> caesium 132.91	56 <b>Ba</b> barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 <b>Hf</b> hafnium 178.49(2)	73 <b>Ta</b> tantalum 180.95	74 <b>W</b> tungsten 183.84	75 <b>Re</b> rhenium 186.21	76 <b>Os</b> osmium 190.23(2)	77 <b>Ir</b> iridium 192.22	78 <b>Pt</b> platinum 195.08	79 <b>Au</b> gold 196.97	80 <b>Hg</b> mercury 200.59	81 <b>Tl</b> thallium 204.38 [204.38, 204.39]	82 <b>Pb</b> lead 207.2	83 <b>Bi</b> bismuth 208.98	84 <b>Po</b> polonium	85 <b>At</b> astatine	86 <b>Rn</b> radon
87 <b>Fr</b> francium	88 <b>Ra</b> radium	89-103 actinoids	104 <b>Rf</b> rutherfordium	105 <b>Db</b> dubnium	106 <b>Sg</b> seaborgium	107 <b>Bh</b> bohrium	108 <b>Hs</b> hassium	109 <b>Mt</b> meitnerium	110 <b>Ds</b> darmstadtium	111 <b>Rg</b> roentgenium	112 <b>Cn</b> copernicium	113 <b>Nh</b> nihonium	114 <b>Fl</b> flerovium	115 <b>Mc</b> moscovium	116 <b>Lv</b> livermorium	117 <b>Ts</b> tennessine	118 <b>Og</b> oganesson

Key:  
atomic number  
**Symbol**  
name  
conventional atomic weight  
standard atomic weight



57 <b>La</b> lanthanum 138.91	58 <b>Ce</b> cerium 140.12	59 <b>Pr</b> praseodymium 140.91	60 <b>Nd</b> neodymium 144.24	61 <b>Pm</b> promethium	62 <b>Sm</b> samarium 150.36(2)	63 <b>Eu</b> europium 151.96	64 <b>Gd</b> gadolinium 157.25(3)	65 <b>Tb</b> terbium 158.93	66 <b>Dy</b> dysprosium 162.50	67 <b>Ho</b> holmium 164.93	68 <b>Er</b> erbium 167.26	69 <b>Tm</b> thulium 168.93	70 <b>Yb</b> ytterbium 173.05	71 <b>Lu</b> lutetium 174.97
89 <b>Ac</b> actinium	90 <b>Th</b> thorium 232.04	91 <b>Pa</b> protactinium 231.04	92 <b>U</b> uranium 238.03	93 <b>Np</b> neptunium	94 <b>Pu</b> plutonium	95 <b>Am</b> americium	96 <b>Cm</b> curium	97 <b>Bk</b> berkelium	98 <b>Cf</b> californium	99 <b>Es</b> einsteinium	100 <b>Fm</b> fermium	101 <b>Md</b> mendelevium	102 <b>No</b> nobelium	103 <b>Lr</b> lawrencium

For notes and updates to this table, see [www.iupac.org](http://www.iupac.org). This version is dated 1 December 2018.  
Copyright © 2018 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.



# IUPAC Periodic Table of the Elements

1 H hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]																	18 He helium 4.0026
3 Li lithium 6.94 [6.938, 6.937]	4 Be beryllium 9.0122											13 B boron 10.81 [10.806, 10.821]	14 C carbon 12.01 [12.009, 12.012]	15 N nitrogen 14.01 [14.006, 14.009]	16 O oxygen 15.99 [15.999, 16.000]	17 F fluorine 18.998	18 Ne neon 20.180
11 Na sodium 22.990	12 Mg magnesium 24.31 [24.304, 24.307]											13 Al aluminium 26.982	14 Si silicon 28.09 [28.084, 28.086]	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 [32.059, 32.076]	17 Cl chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	18 Ar argon 39.95 [39.792, 39.963]
19 K potassium 39.098	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.956	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.996	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.693	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904 [79.901, 79.907]	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.906	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.95	43 Tc technetium 98.906	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.91	46 Pd palladium 106.42	47 Ag silver 107.87	48 Cd cadmium 112.41	49 In indium 114.82	50 Sn tin 118.71	51 Sb antimony 121.76	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.90	54 Xe xenon 131.29
55 Cs caesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.95	74 W tungsten 183.84	75 Re rhenium 186.21	76 Os osmium 190.23(2)	77 Ir iridium 192.22	78 Pt platinum 195.08	79 Au gold 196.97	80 Hg mercury 200.59	81 Tl thallium 204.38 [204.36, 204.39]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 208.98	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	113 Nh nihonium	114 Fl flerovium	115 Mc moscovium	116 Lv livermorium	117 Ts tennessine	118 Og oganesson

Key:  
atomic number  
Symbol  
name  
conventional atomic weight  
standard atomic weight



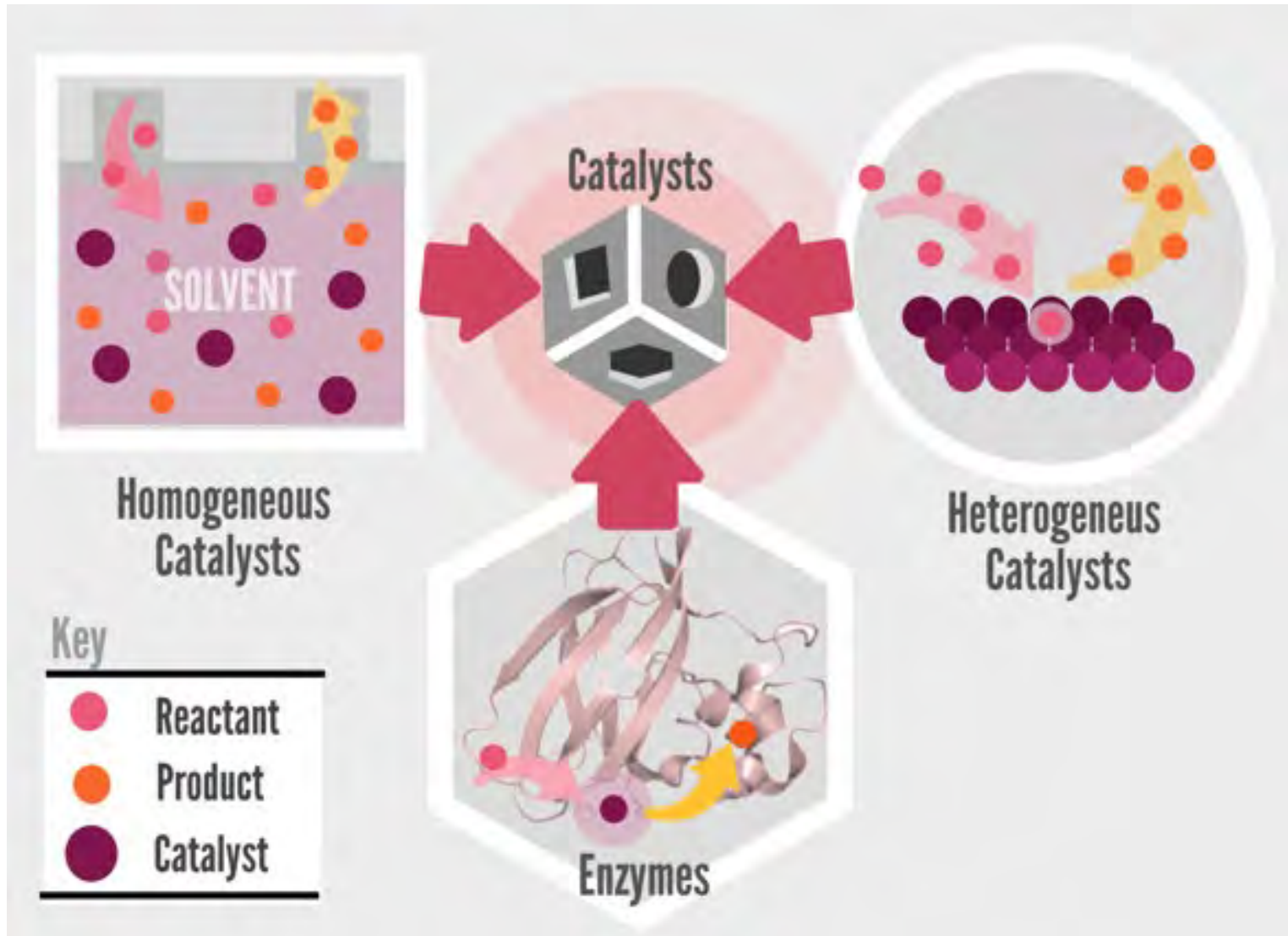
57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.93	66 Dy dysprosium 162.50	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.05	71 Lu lutetium 174.97
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

For notes and updates to this table, see [www.iupac.org](http://www.iupac.org). This version is dated 1 December 2018.  
Copyright © 2018 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.



**X** critical (for EU) raw materials    **X** high-concern elements    **X** conflict elements    **X** more toxic

# Il fantastico mondo dei catalizzatori



**Attività.** Possibilmente valutata come TON.  
Quantità di specie prodotte per il numero di specie attive.

**Selettività.** Quantità del prodotto voluto rispetto al totale dei prodotti

**Economia atomica**

(massa molare del prodotto desiderato / massa molare di tutti i reagenti)  $\times$  100%

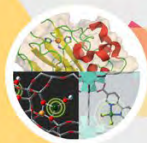
**Economia energetica**

Pressione e Temperatura della reazione.

**Tempo di vita del catalizzatore**

Valutazione dei tempi di disattivazione, possibilità e costi di effettuare una rigenerazione.

—SYNERGY—



Synthesis

Modelling & Design

Spectroscopic & Structural Characterization

Catalyst Functionality

Incident beam

SAMPLE

Transmission

Absorption processes

IR: vibrations/phonons

VIS/UV: electronic transitions

UV/X-rays: photoelectrical absorption

Scattering processes

Elastic scattering

Inelastic scattering

Infrared

Raman

UV-Vis

VUV

Soft X-rays

Hard X-rays

0

1 eV

5 eV

100 eV

1000 eV

100 000 eV

Vibrations

Valence shell

Core Levels

“Photon-in spectroscopy”

The response of the system is probed by photons and depends on the photon energy

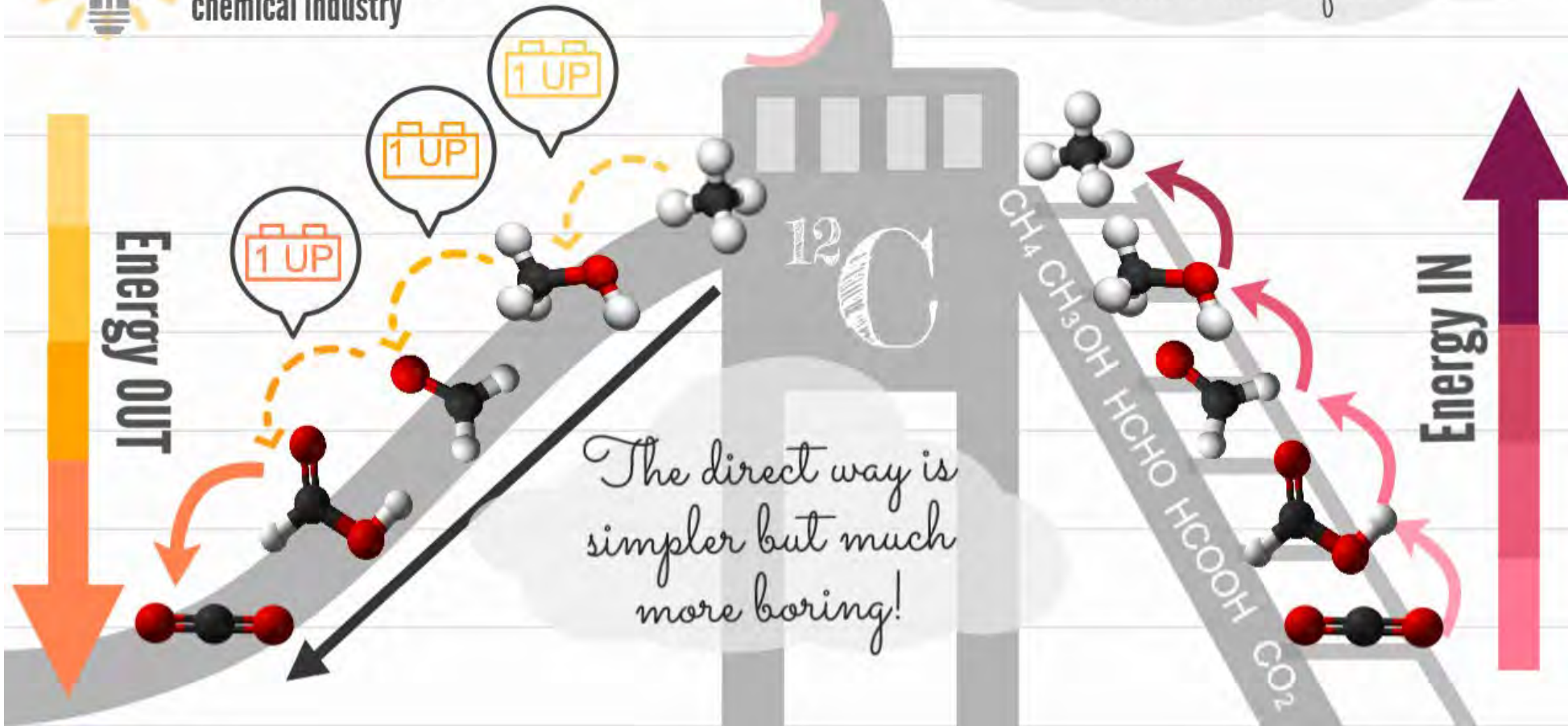


Carbon-based building blocks will always be of primary importance for society



Efficient interconversions of these key compounds is the key to an efficient chemical industry

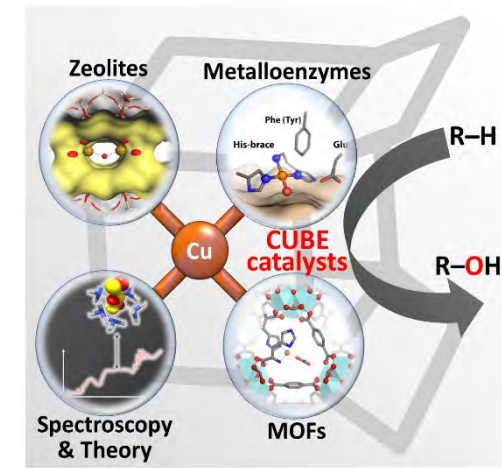
*Through the route  
I can collect  
the building blocks and have  
much more fun!*



*The direct way is simpler but much more boring!*



# Unravelling the secrets of **Cu-based** catalysts for C-H activation (**CUBE**)

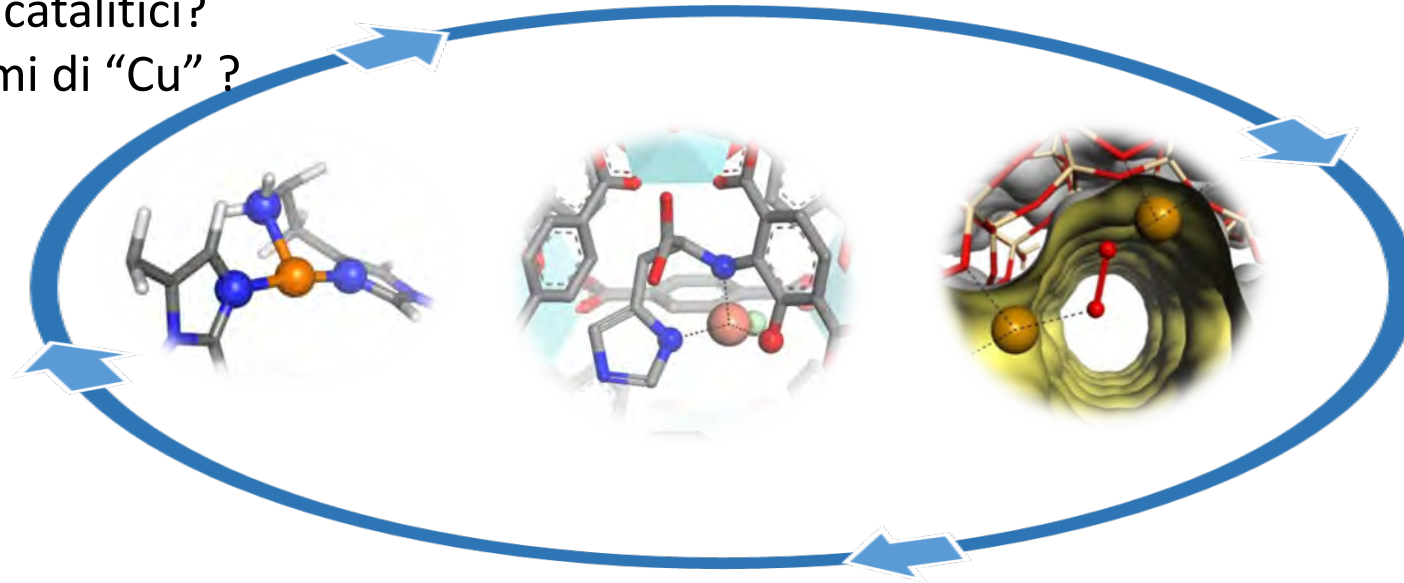


Catalizzatori	Cu-enzima - pMMO	Di sintesi - Cu-zeolite	Requisiti per l'industria
Velocità di conversione del Metano	✓ 16 min <sup>-1</sup>	✗ 0.0005 min <sup>-1</sup>	1 min <sup>-1</sup>
Selettività in metanolo <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Insieme CH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub></li> <li>▪ A step: prima O<sub>2</sub> e poi CH<sub>4</sub></li> </ul>	✓ 100%	✗ < 10%	70-100 %
		✓ > 90 %	
Stabilità	✗ fragile	✓ molto stabile	> 10.000

# La visione di CUBE

Capire come razionalmente si può progettare e realizzare un catalizzatore a base di «Cu» che attivi il legame C-H essendo, selettivo, attivo e stabile

**Q1:** Quale è la specie Cu-O<sub>xo</sub> attiva?  
È unica in tutti i sistemi catalitici?  
Contiene uno o più atomi di «Cu» ?

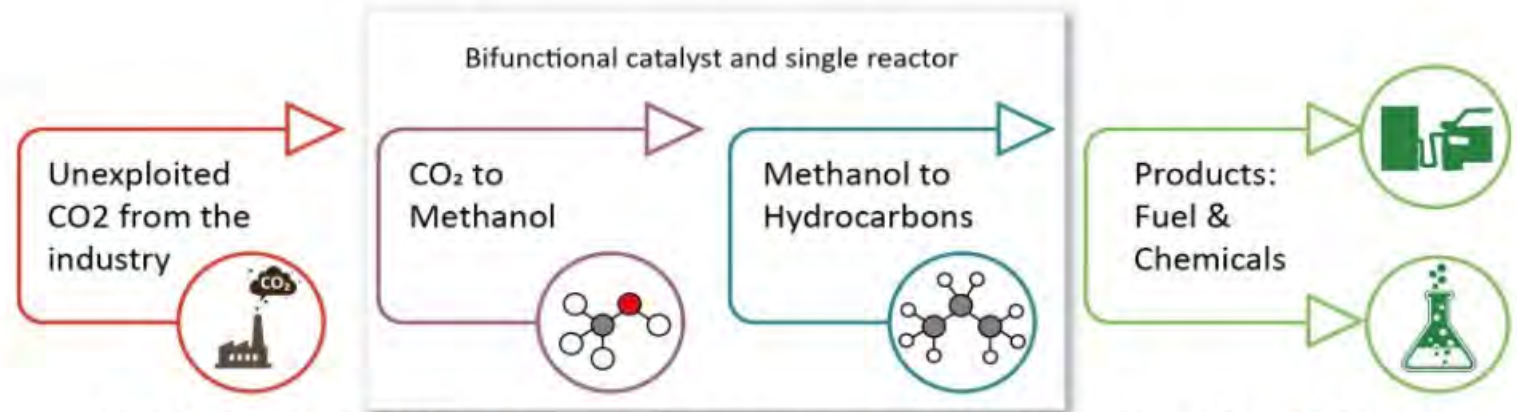
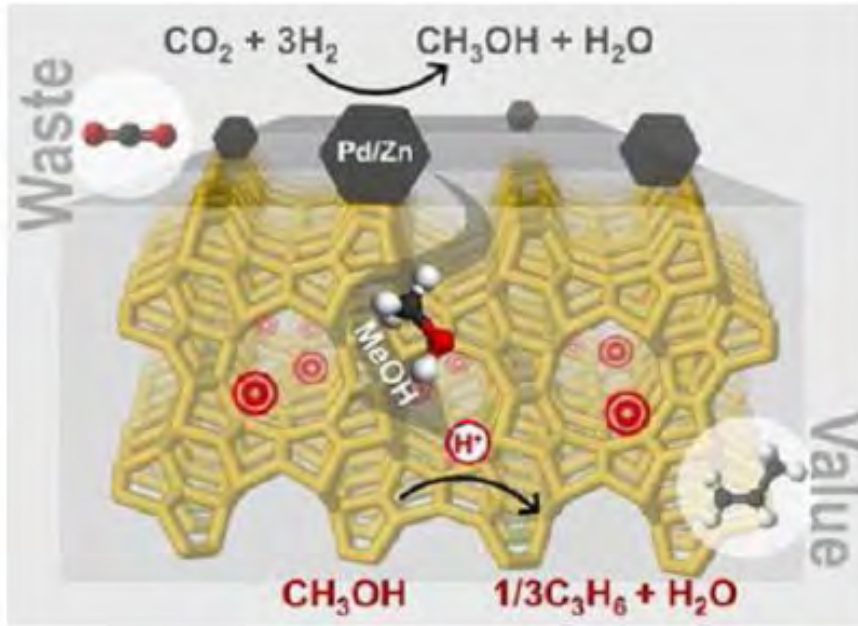


**Q2:** Quale è l'influenza della prima sfera di coordinazione del centro attivo a base di «Cu», nell'attivazione dell'ossidante ?

**Q3** Quale è il meccanismo di attivazione C-H e come agiscono i centri catalitici a base di «Cu» monomerici e dimerici ?

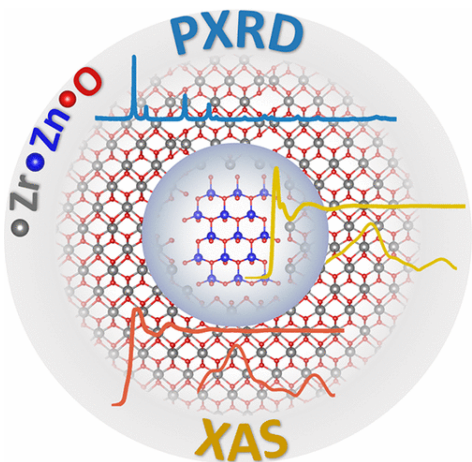
**Q4:** In che modo influisce la seconda sfera di coordinazione delle specie attive e quale è l'effetto di confinamento ?

**Q5** Come si disattiva il centro catalitico?

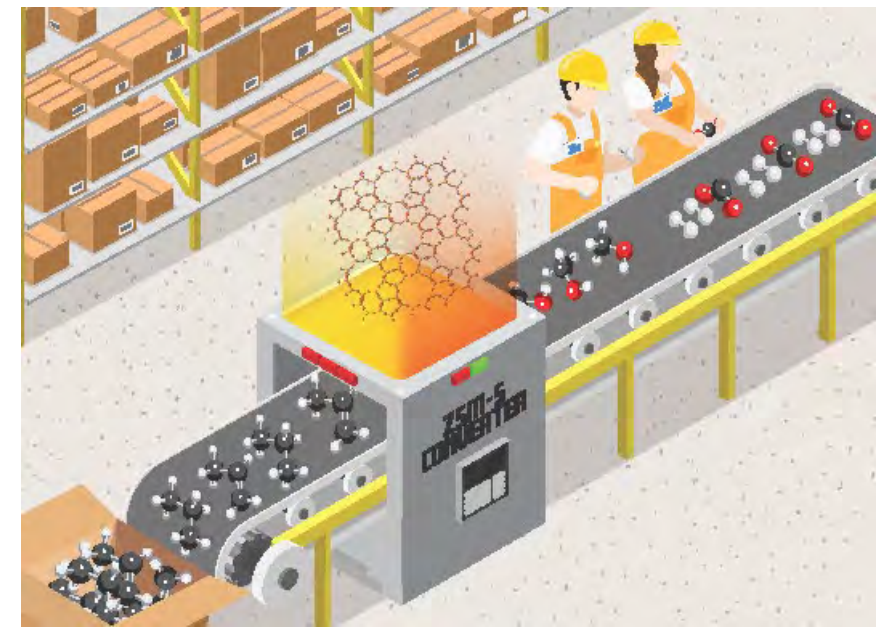


**Efficient CO<sub>2</sub> conversion over multisite Zeolite-Metal nanocatalysts to fuels and Olefins**

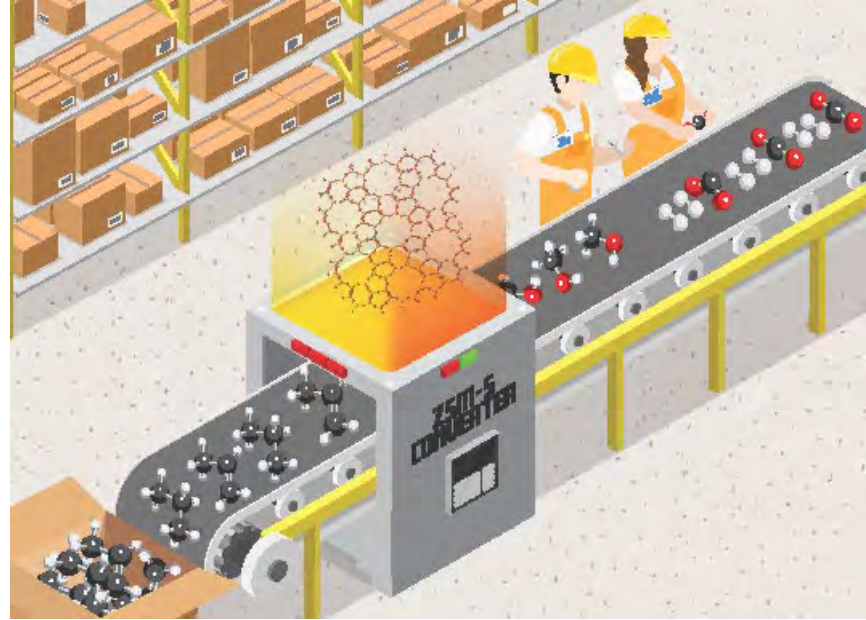
Pierfrancesco Ticali et al., *Catal. Sci. Technol.* 2021,11, 1249-1268



Abbiamo sviluppato un catalizzatore a base di **ZrO<sub>2</sub>** e **ZnO** (no leghe PdZn). Una volta che si ottiene CH<sub>3</sub>OH, il secondo catalizzatore (zeolite) lo converte in propilene.

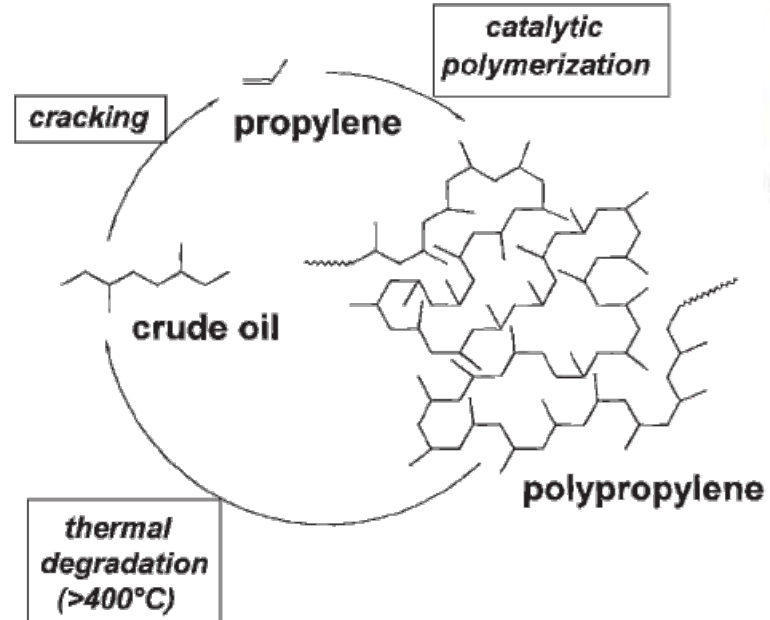


# Etilene e propilene sono i tra gli ingredienti più usati per fare le materie plastiche



CO2MOS

HORIZON 2020



Come ha dichiarato Giorgio Parisi :  
«dobbiamo valutare, insieme al PIL, anche di quanto impattiamo sull'ambiente»

Non è il possesso naturale delle materie prime che basta a dare la ricchezza, come non è il difetto delle stesse materie prime che produce la povertà: le uniche vere fonti capaci di dare ricchezze durature e di distribuirle nel mondo, annullandone le povertà, sono i commerci e gli scambi onesti di materie prime e di prodotti finiti, le industrie che consumano e che trasformano, i cervelli e le braccia che operano, gli uomini che fraternizzano e che collaborano.

**MARIO GIACOMO LEVI, *L'industria chimica italiana e le possibilità del suo avvenire*, in "La chimica e l'industria", Milano, novembre-dicembre 1945, anno XXVII, nn. 11-12, pp. 189-195**

**R. SCUOLA SUPERIORE DI CHIMICA INDUSTRIALE**

annessa alla R. Università ed alla R. Scuola d'Applicazione per gli Ingegneri

**DI BOLOGNA**

ANNO I

1921-1922

**INAUGURAZIONE**

**ATTI COSTITUTIVI - ORGANIZZAZIONE**



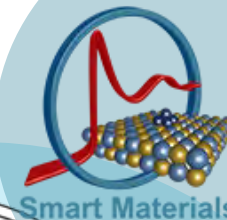
Mario Giacomo Levi

Padova, 16 aprile 1878 – Milano, 9 dicembre 1954

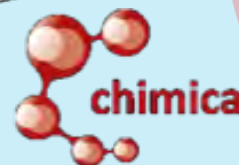
# Ringraziamenti



*Sempre con me*



*Grazie a Voi, per l'ospitalità*



*Ed ora... Tempo delle domande*



**The CuBE Project**

**Unravelling the secrets of Cu-based catalyst for C-H activation (CuBE)**

