

Identita' del chimico industriale nella societa' produttiva moderna

Sergio Carra'
Politecnico di Milano





“Per gli studenti di oggi la chimica rappresenta una professione e non si vede già più una sola fabbrica la cui direzione non sia affidata ad un uomo istruito in questa scienza”.

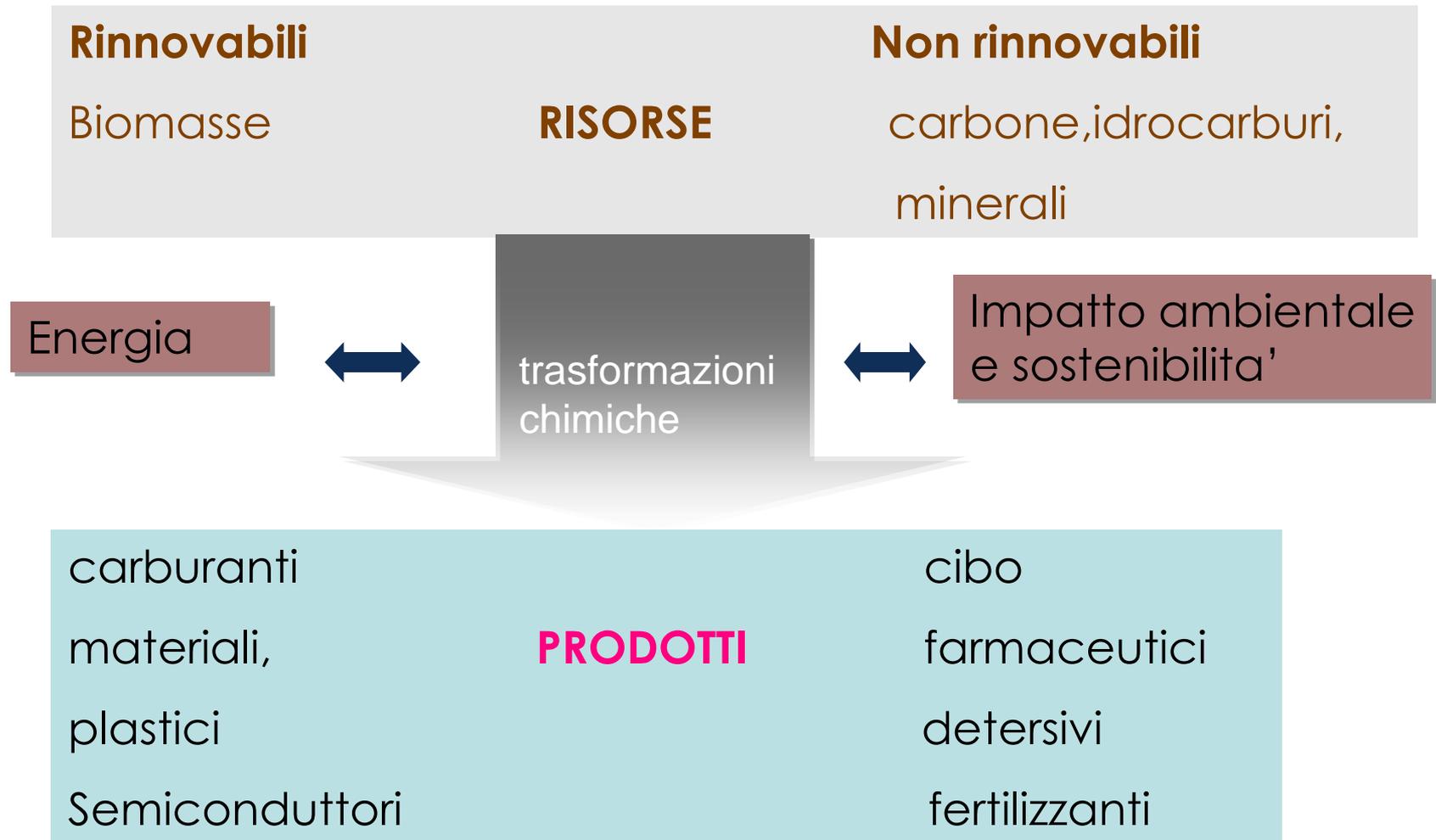
Queste parole pur essendo state pronunciate nel remoto 1819 da Jean-Antoine Chaptal, scienziato ed economista francese, appaiono rinfrescanti. Con lungimiranza si prevedeva che le scienze chimiche che stavano acquistando una posizione centrale nell'interpretazione della struttura della materia e delle sue trasformazioni, avrebbero anche costituito un fattore trainante dello sviluppo economico.

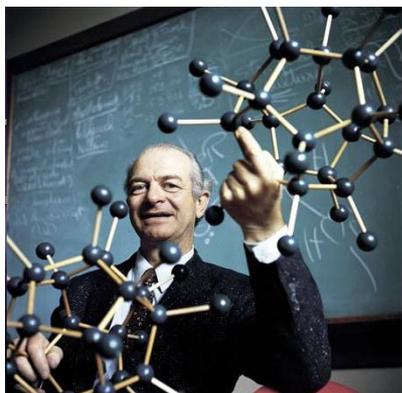


Con la professionalizzazione del chimico sarebbe emersa una generazione di tecnici in grado di porre la scienza al servizio dell'industria riconoscendone il suo ruolo sociale.

Si tratta di una tradizione che si e' consolidata sino ai tempi nostri nei quali la presenza dei chimici nelle attivita' produttive industriali costituisce un fattore indispensabile per il benessere e lo sviluppo economico della moderna societa'.

In un processo chimico industriale le materie prime naturali **non rinnovabili**, quali gli idrocarburi, il carbone, il gas naturale, i minerali, e **rinnovabili** quali le biomasse, alimentano le unita' degli impianti in modo tale da poter formare i prodotti di importanza applicativa.

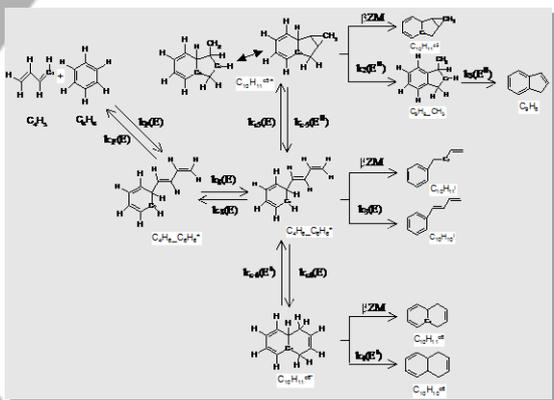




Per perseguire tali risultati oltre alle conoscenze sui temi tradizionali della chimica sintetica, della chimica fisica e della biochimica, attualmente e' possibile fruire della meccanica quantistica per prevedere, con cautela, dati utili per orientare le indagini, in particolare nei seguenti settori:

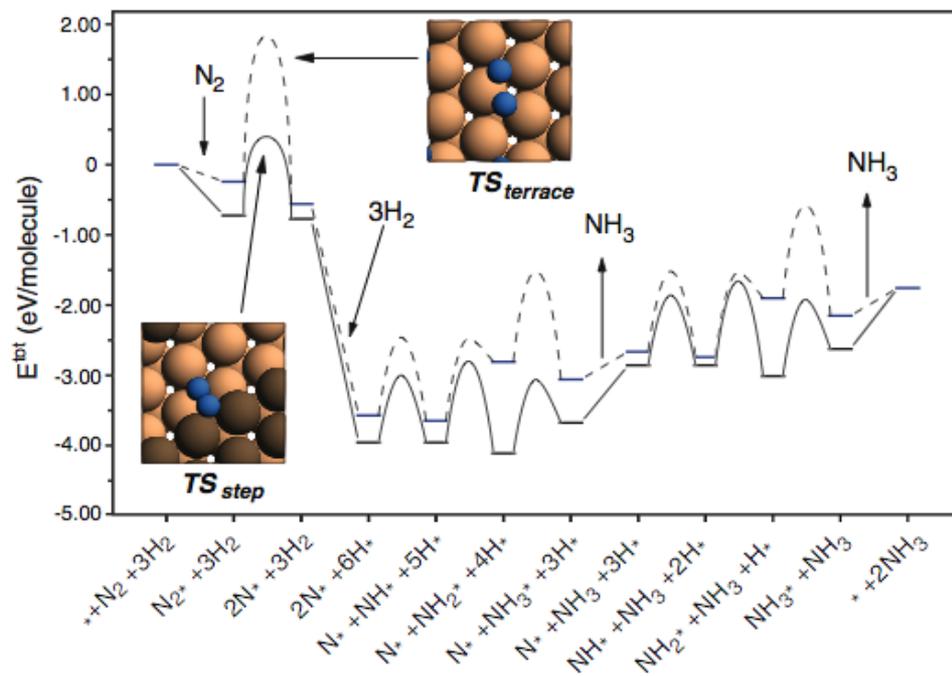
- **sintesi chimiche**
- **combustione**
- **catalisi**
- **chimica ambientale ed atmosferica**
- **preparazione di materiali**
- **biologia molecolare**

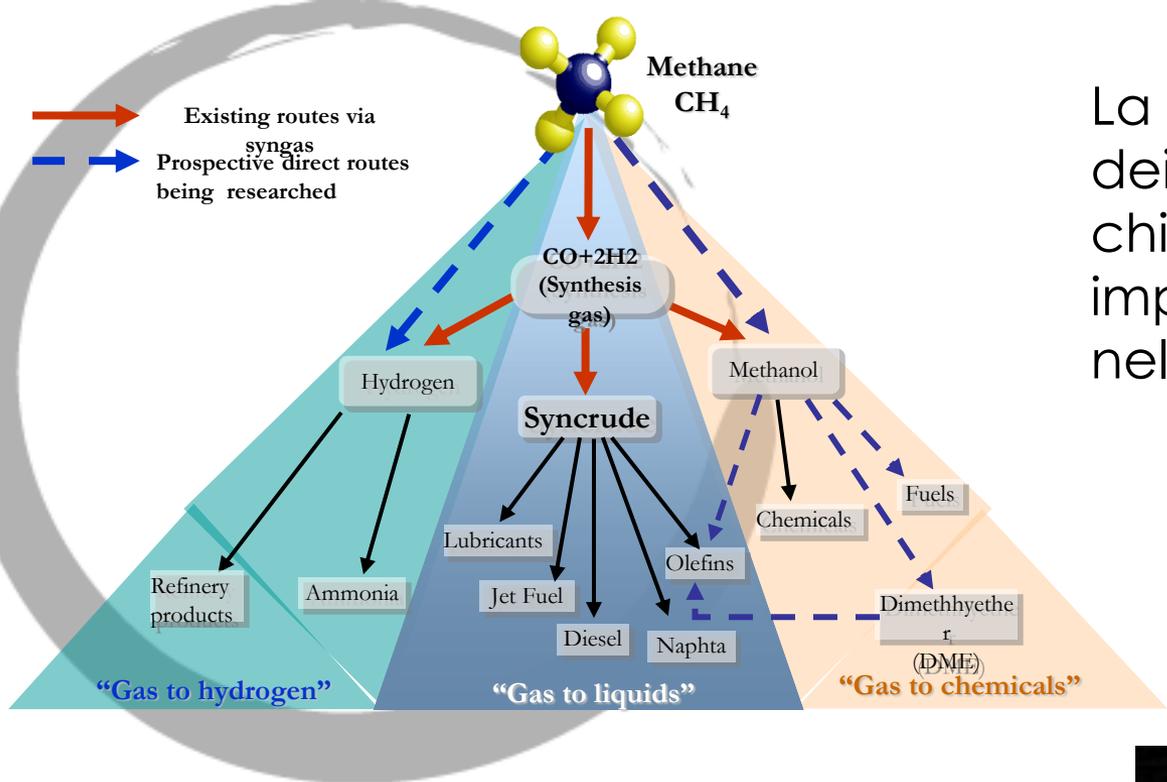




Con questa impostazione si possono approfondire le trasformazioni che hanno luogo attraverso complesse reti di reazioni accoppiate.

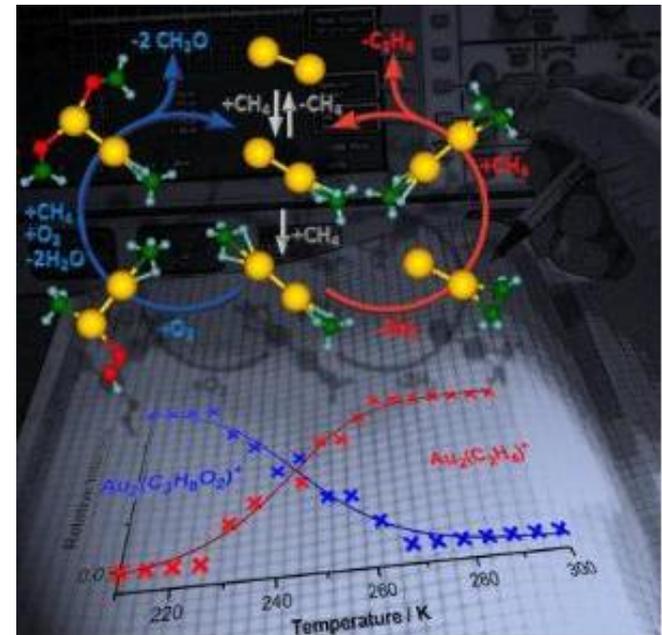
La catalisi eterogenea puo' essere investigata valutando le superfici di energia potenziale che definiscono il cammino per passare dai reagenti ai prodotti.





La catalisi costituisce uno dei punti di forza della chimica industriale con importanti ricadute anche nel settore energetico .

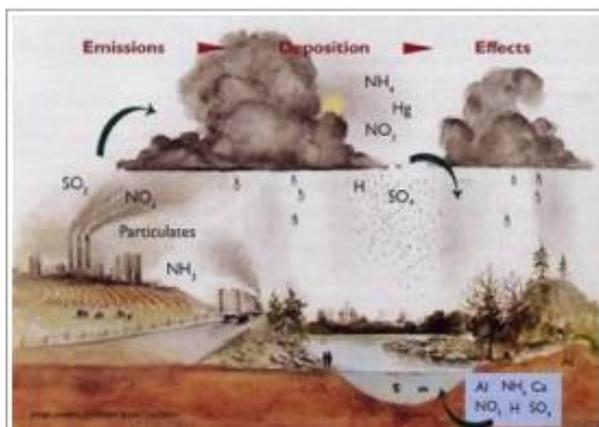
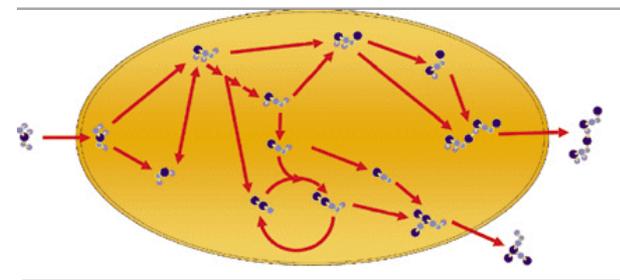
Essa riserva sempre interessanti sorprese , come ad esempio la capacita' di un catalizzatore con due atomi di oro di convertire il metano ad etilene e formaldeide a temperatura ordinaria.



La capacita' di trasferire le conoscenze acquisite dalla scala di laboratorio a quella industriale, costituisce un importante aspetto della professionalita' di un chimico industriale.

L'approccio puo' essere esteso anche a problemi non specifici dell'industria chimica nei quali siano presenti sistemi soggetti a reazioni chimiche.

Livello microscopico: nelle cellule e' presente una complessa rete di reazioni la cui interconnessione costituisce la peculiarita' dei sistemi viventi.

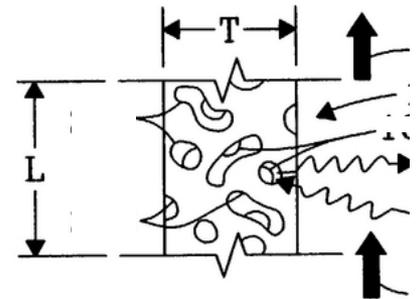


Livello planetario : la zuppa atmosferica costituisce un macroreattore le cui inquietanti evoluzioni, connesse con il riscaldamento globale della terra, mettono a dura prova le capacita' predittive della scienza.

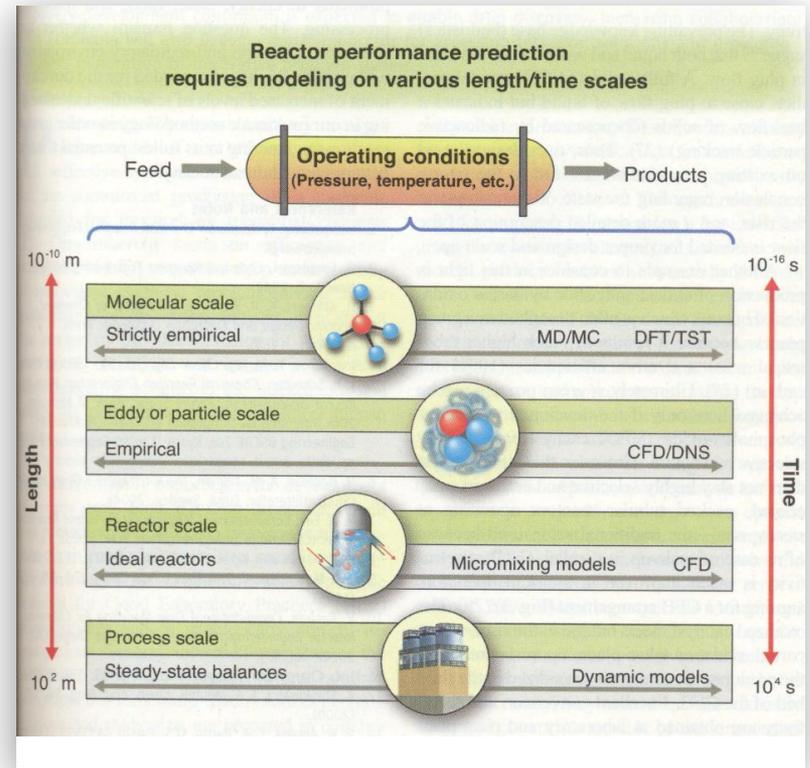


I banchi di un laboratorio chimico ed un impianto industriale hanno diversi punti in comune poiché a livello molecolare in entrambi i casi ha luogo la rottura dei legami fra gli atomi presenti nelle molecole. Negli impianti industriali è richiesto anche il controllo dei processi di trasporto di calore e materia sia alla scala dell'intero reattore che alla mesoscala riguardante la struttura porosa di un catalizzatore.

Attualmente sono disponibili gli strumenti di modellazione e calcolo grazie ai quali è possibile simulare il comportamento di reattori industriali fruendo delle conoscenze dei fenomeni che si svolgono su scala microscopica.



Nei reattori industriali intervengono entrambe le scale dei tempi e delle lunghezze, coinvolte nelle trasformazioni chimiche e nei processi fisici. Pertanto partendo dalle interazioni fra le molecole si risale a quelle fra i flussi dei reagenti sino al bilancio dell'intera unita' reagente.

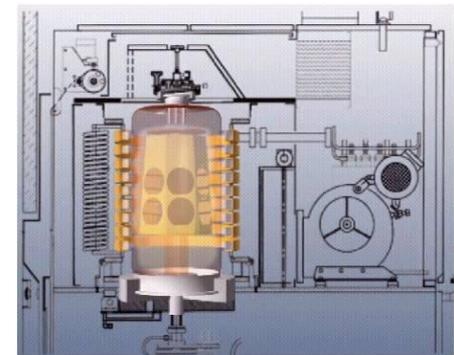
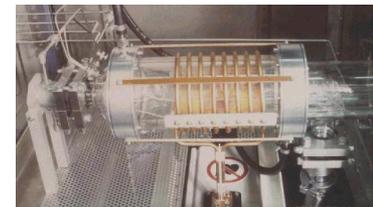
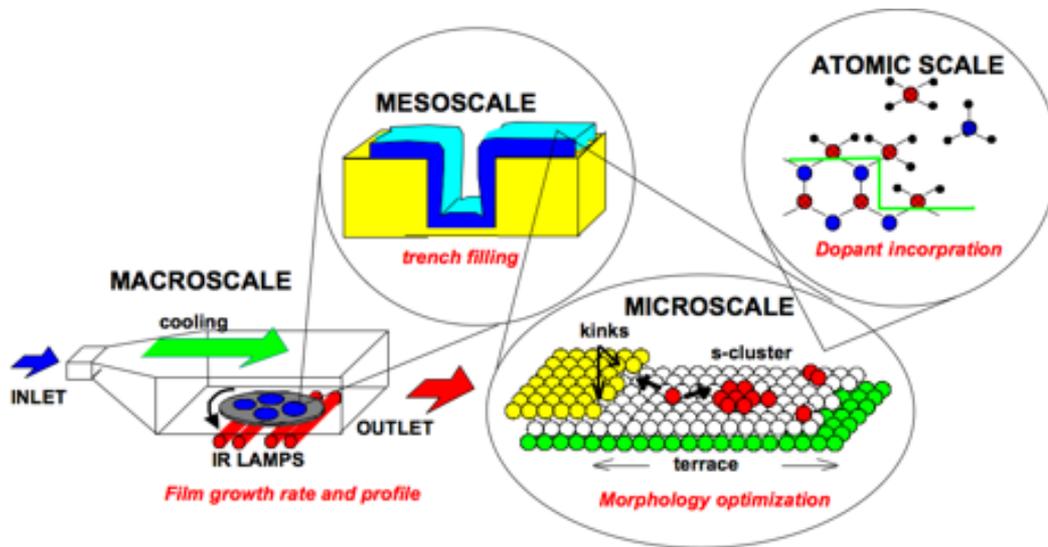


Sono disponibili modelli computerizzati per simulare i diversi fenomeni, indicati con particolari acronimi quali:

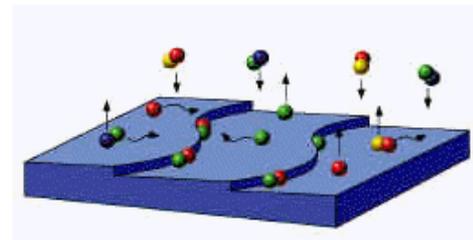
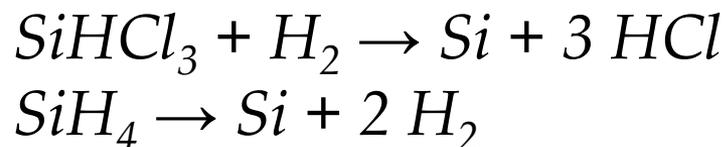
- MD/MC = Molecular dynamics / Monte Carlo simulation
- DFT/TST= density functional theory/ transition state theory
- CFD= Computational fluid dynamics

Per la preparazione dei materiali che vengono impiegati nella costruzione di dispositivi elettronici e pannelli fotovoltaici, attraverso reazioni di **deposizione chimica da fase vapore**, vengono utilizzati nuovi tipi di reattori chimici.

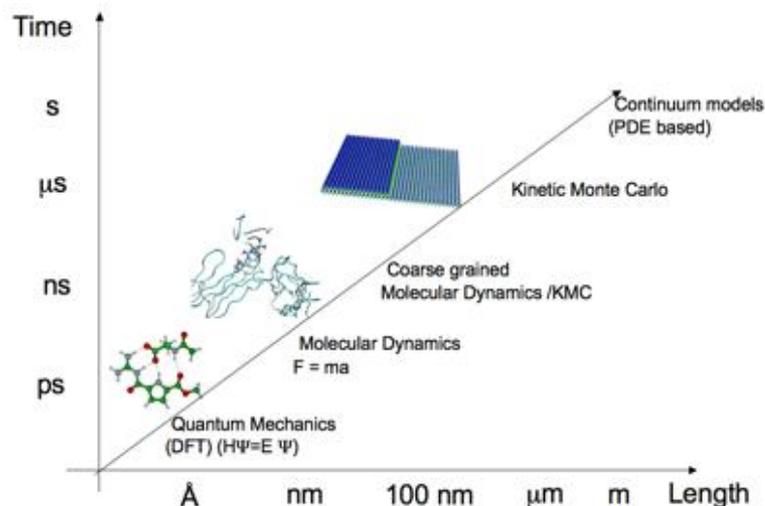
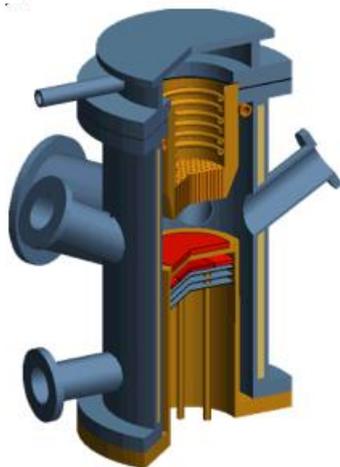
Ad essi vengono date particolari configurazioni geometriche grazie alle quali, controllando il percorso e la velocità di flusso dei reagenti gassosi che lambiscono la superficie di deposizione, e' possibile conferire al materiale stesso le caratteristiche strutturali desiderate.



Dalla deposizione del silicio a partire da silano o clorosilani si ottengono solidi monocristallini, policristallini o amorfi.



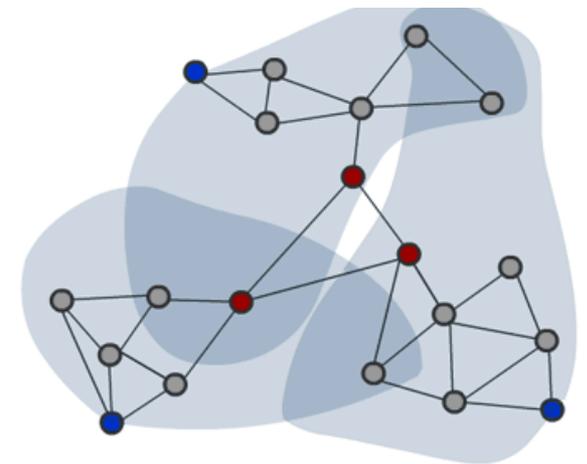
La progettazione dei reattori di deposizione fruisce della simulazione molecolare che permette di evidenziare le caratteristiche degli stadi coinvolti.

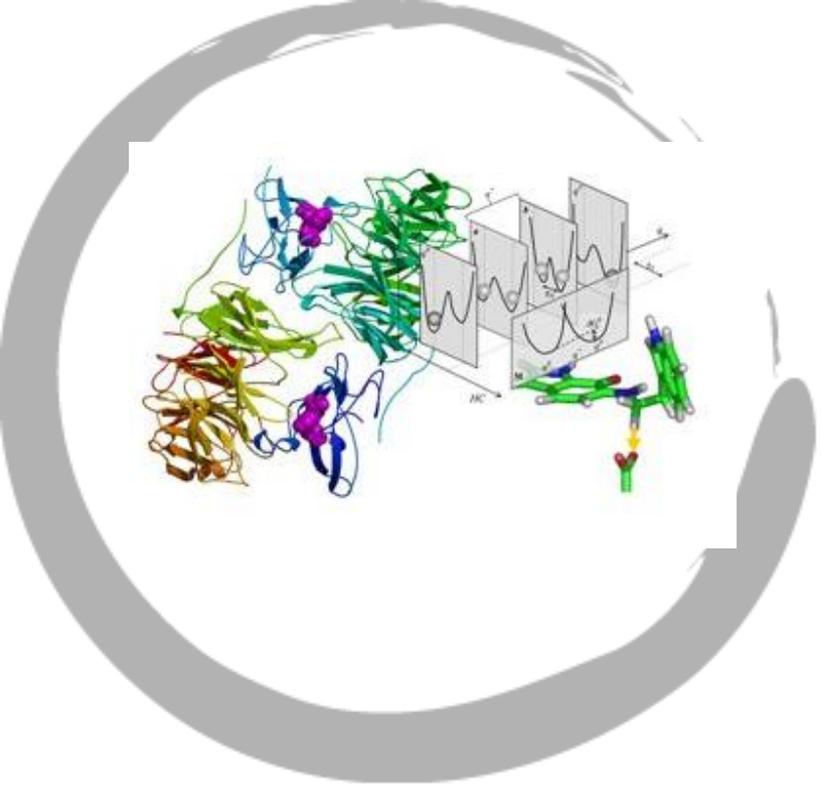




Alcune sintesi chimiche sono realizzate in presenza di substrati biologicamente attivi. La loro conduzione richiede un accurato controllo sia dell'ambiente in cui hanno luogo le reazioni sia delle condizioni operative.

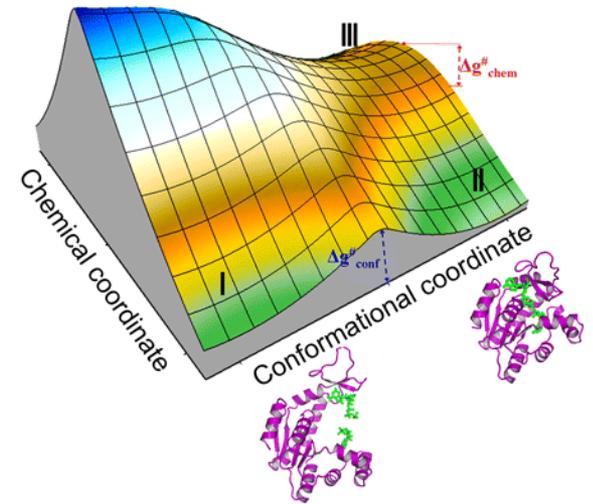
Una adeguata progettazione dei corrispondenti reattori richiede la capacità di descrivere cinematicamente le complesse reti di reazioni enzimatiche presenti nei processi biochimici la cui difficoltà riflette il fatto che l'enorme potere catalitico degli enzimi resta ancora un arcano segreto della biochimica.

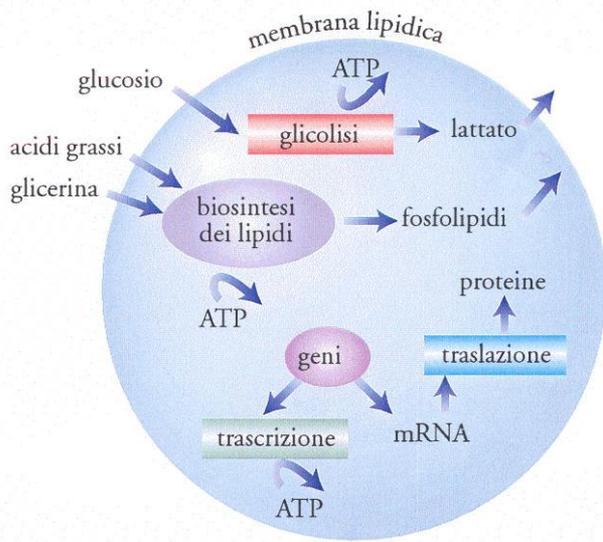




La dinamica delle transizioni fra le diverse conformazioni delle molecole proteiche puo' influire sulla velocita' dei processi catalitici.

Le indagini mediante simulazioni al calcolatore si integrano con i risultati sperimentali relativi a processi molto veloci, e pertanto forniscono indirizzi su come orientare le ricerche sperimentali.





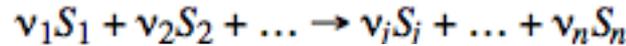
L'obbiettivo piu' ambizioso, con profonde potenzialita' nei settori biotecnologico e farmaceutico, e' la simulazione del comportamento di una cellula agli stimoli esterni.

Modello in silicio di una cellula

Componenti chimici

reattore

Struttura cellulare
 -genoma
 -membrana
 -citoplasma
 -ambiente esterno
 -.....



$$v = k \cdot \prod_i^{j-1} [S_i]^{\nu_i}$$

$$v = \frac{V_{\max} \cdot [S]}{[S] + K_m}$$

$$v = \frac{\frac{[S_1][S_2]}{\alpha K_1 K_2} V_f - \frac{[S_3][S_4]}{\beta K_3 K_4} V_r}{1 + \frac{[S_1]}{K_1} + \frac{[S_2]}{K_2} + \frac{[S_3]}{K_3} + \frac{[S_4]}{K_4} + \frac{[S_1][S_2]}{\alpha K_1 K_2} + \frac{[S_3][S_4]}{\beta K_3 K_4} + \frac{[S_2][S_4]}{\gamma K_2 K_4} + \frac{[S_1][S_3]}{\delta K_1 K_3}}$$

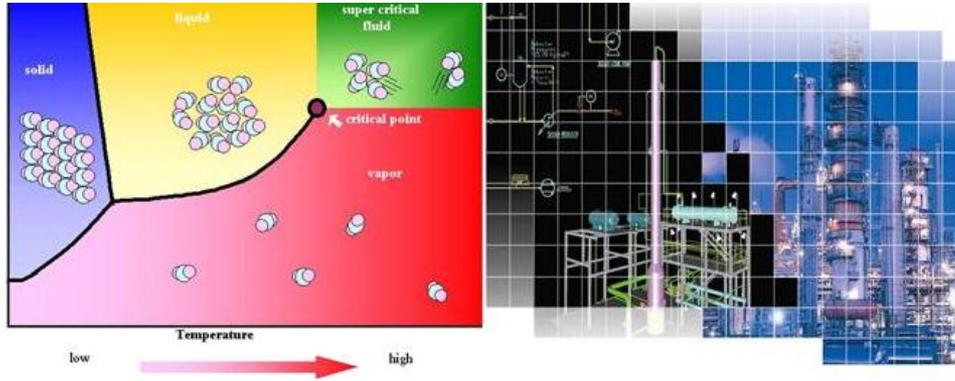


Nella gran parte dei processi della chimica industriale si devono trattare miscele di diversi componenti presenti in fasi gassose, liquide e solide a contatto reciproco.

I componenti si distribuiscono fra le diverse fasi la cui composizione sta alla base della scelta e progettazione delle unita' in cui si attua la loro separazione.

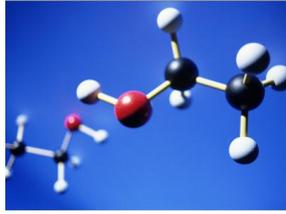
Queste conoscenze riguardano anche:

- la preparazione di materiali solidi polifasici,
- la soluzione di problemi ambientali coinvolgenti l'evoluzione delle gocce liquide e delle particelle solide presenti nei gas atmosferici
- la valutazione della distribuzione degli idrocarburi nei giacimenti petroliferi.



La valutazione della separazione fra i diversi componenti e' basata su bilanci materiali ed energetici, in unita' a piu' stadi, assumendo che in prima approssimazione su ciascuno di essi si instaurino le condizioni di equilibrio termodinamico.

Attualmente la termodinamica delle miscele a piu' componenti, fa ampio uso delle conoscenze disponibili sulla struttura delle molecole e sulle forze di interazione specifica per la formulazione di equazioni di stato che a temperatura e pressione assegnate permettono di valutare quali siano le fasi in equilibrio e quale sia la loro composizione.

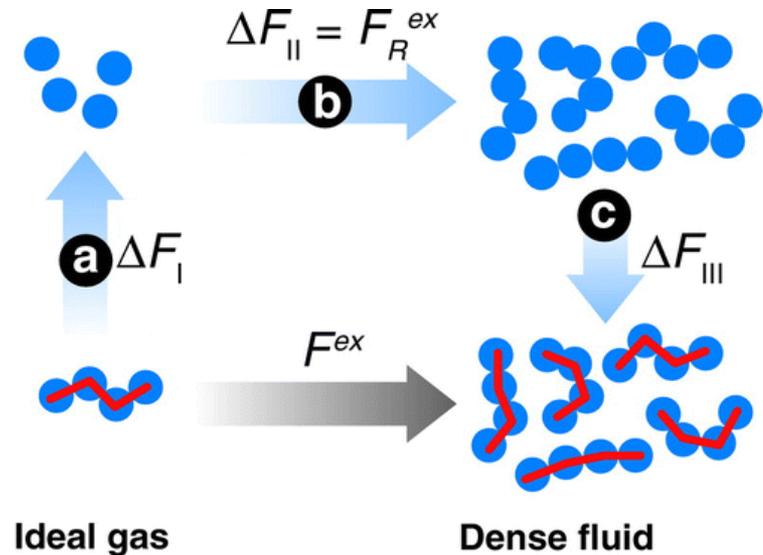


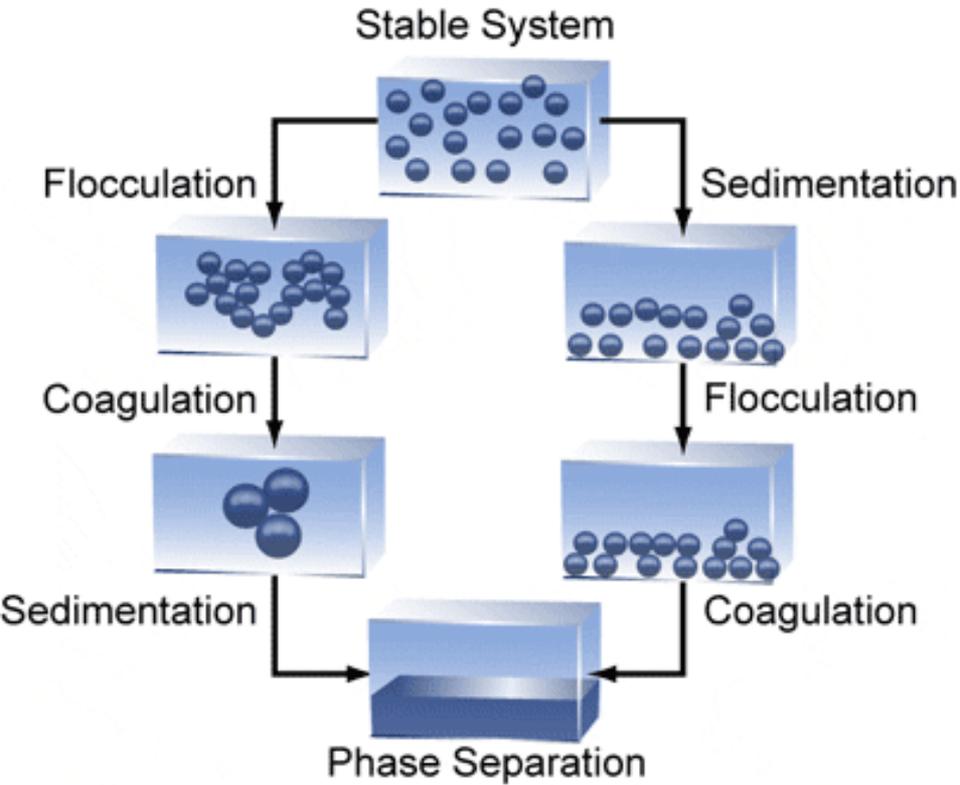
$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij}(r)$$

$$P = kT \frac{\partial}{\partial V} \left[\ln \int \dots \int e^{-\Phi/kT} dx_1, dx_2, \dots, dx_N \right]$$

Esse hanno raggiunto un livello di maturita' tale da includere i gas e i liquidi densi, ed uno spettro di molecole che va dalle semplici alle piu' complesse quali i polimeri.

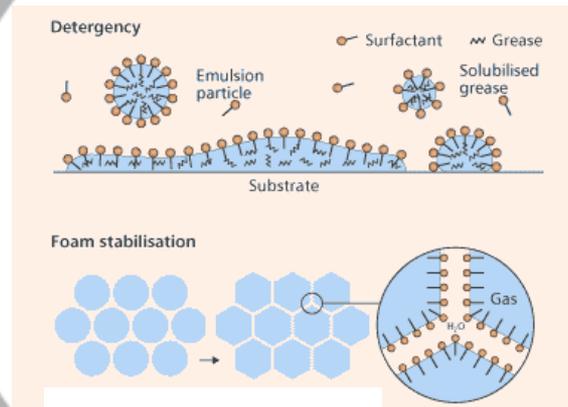
Sono state proposte molte equazioni di stato la cui impostazione scientifica si riconduce alla applicazione della termodinamica statistica alle teorie dei fluidi.





I sistemi dispersi sono costituiti da una moltitudine di particelle condensate presenti in un fluido e tali per cui il rapporto fra la superficie e il volume e' dell'ordine di 10^6 - 10^7 cm^{-1} .

Si manifestano in diverse forme e vengono classificati come aerosol, emulsioni e colloidi. In tali particelle gli atomi prossimi alla superficie sono soggetti ad una energia potenziale diversa da quella presente all'interno del solido poiche' le forze di interazione reciproca non risultano del tutto bilanciate.



I sistemi dispersi sono coinvolti in diverse applicazioni riguardanti la chimica praticata da industrie che operano nei settori dei tensioattivi, dei prodotti alimentari, degli additivi per vernici. La conoscenza delle loro caratteristiche interviene nella chimica delle formulazioni, presente nei settori industriali dell'edilizia, degli adesivi e del tessile.

L'uso dei tensioattivi interviene anche in:

- nel trattamento delle acque ,
- nel ricupero assistito del petrolio,
- nella tutela dell'ambiente.



Cruciale allo sviluppo della chimica industriale e' la disponibilita' delle materie prime, con particolare riferimento al petrolio che ha dominato il panorama delle attivita' produttive chimiche. Tanto da chiederci che cosa avrebbero fatto i chimici in sua assenza .

La chimica industriale non puo' prescindere dall'utilizzo delle risorse naturali, le quali grazie alla cultura e all'ingegnosita' umana vengono opportunamente trasformate.

Il petrolio deve essere condiviso con la produzione di energia che ne fa ampio uso, e su di esso , trattandosi di una risorsa non rinnovabile, pende la spada di Damocle del picco di Hubbert che, pur con incertezza, sancisce il limite della sua disponibilita' .



Ma allora che cosa riserva il futuro?
Sta emergendo una frontiera scientifica
tecnologica volta all'avvicendamento delle
risorse fossili con quelle derivanti da prodotti
naturalii. ||
suo successo potrebbe trasformare molti
aspetti della nostra società'.

L'esplorazione delle complicate reti dei cammini metabolici degli organismi monocellulari procariotici può permettere di isolarne i passaggi rilevanti connettendoli fra di loro in modo da favorire la produzione di prodotti chimici, farmaci e carburanti. Le potenzialità di impiego delle tecniche precedenti sono molto promettenti nella preparazione di biocarburanti da biomasse, trasformando la stessa cellulosa che è recalcitrante all'azione dei batteri.



In conclusione

Malgrado l'incubo di incombenti catastrofi dovute al depauperamento delle risorse e all'inquinamento ambientale, il genere umano continuerà a migliorare il suo benessere.

E ciò attraverso uno sviluppo favorito dal progresso scientifico nel cui ambito la comunità dei chimici e dei chimici industriali continuerà a dare un contributo determinante.





GRAZIE PER L'ATTENZIONE

