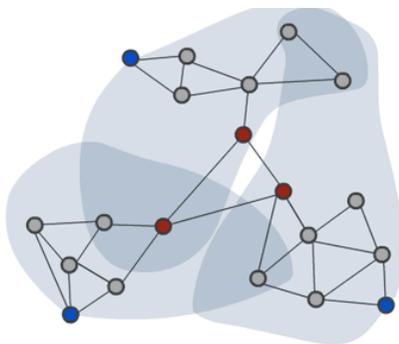


# Scienze chimiche e ingegneria: integrazione culturale e sinergia applicativa in uno sguardo storico e prospettico

Sergio Carrà

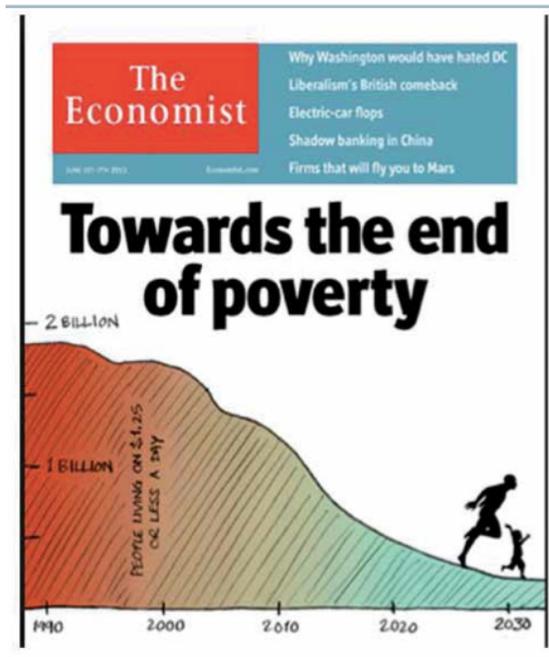


## “Ma che pianeta mi hai fatto?”

Robert Sheckley in un divertente racconto di fantascienza del 1968 ipotizzava che esistesse una società specializzata nella costruzione su commissione di pianeti, alla quale si potesse formulare tale domanda.



Ispirandoci ad esso possiamo chiederci se sia possibile trasformare la terra in un mondo di generale soddisfazione. Tutto ciò tenendo conto che l'attuale sistema produttivo ha portato miliardi di persone fuori dalla povertà offrendo loro un dignitoso benessere.



Grazie alle tecnologie ci si sta avviando verso una abbondanza dei beni di consumo, con il pericolo di raggiungere un punto critico di non ritorno per i danni arrecati all'ambiente.

La scienza e la tecnologia sono la chiave per la prosperità delle nazioni povere (Segreteria Nazioni Unite).

In nessun momento della storia come questo, il progresso scientifico e tecnologico ha offerto la prospettiva di rimuovere la povertà che ancora affligge parte della popolazione umana.

Pertanto qualunque progetto futuro non può prescindere dallo sviluppo delle attività di trasferimento delle tecnologie acquisite, pur essendo necessario che ciò avvenga in modo coerente con un futuro sostenibile.



# Ruolo della Chimica e dell'Ingegneria Chimica

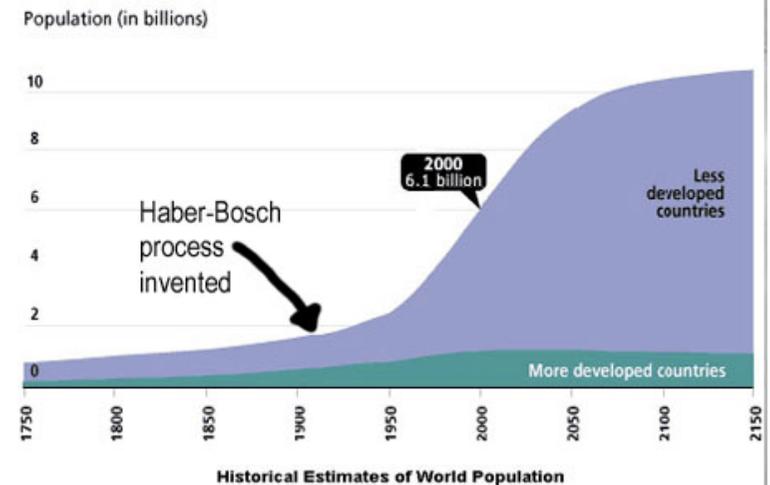


## HABER & BOSCH

Most influential persons of the 20th century  
(according to Nature, July 29 1999)



Nella prima metà del secolo scorso la popolazione umana si è impennata dopo la realizzazione industriale della sintesi dell'ammoniaca, evidenziando che i chimici e gli ingegneri chimici, pur pensando a cose piccole quali gli atomi, stavano realizzando cose grandi.



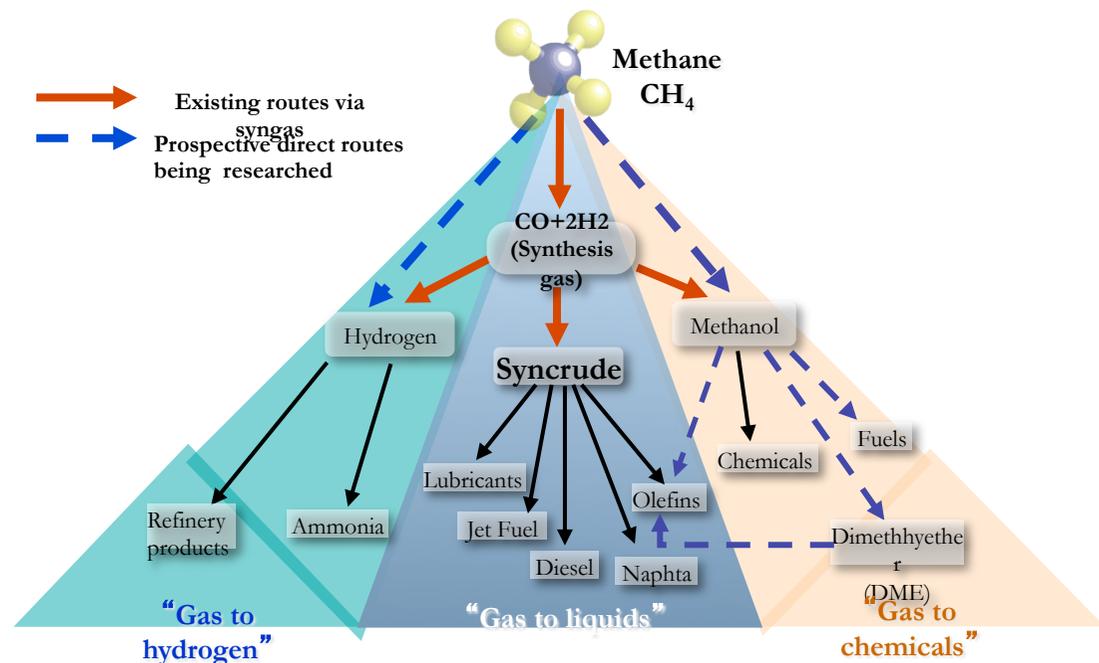
Un contributo determinante è venuto dalla **Chimica Fisica**, che applicando la termodinamica ai sistemi reagenti, era in grado di individuare se un processo potesse avere luogo e quali fossero le condizioni più opportune per realizzarlo.



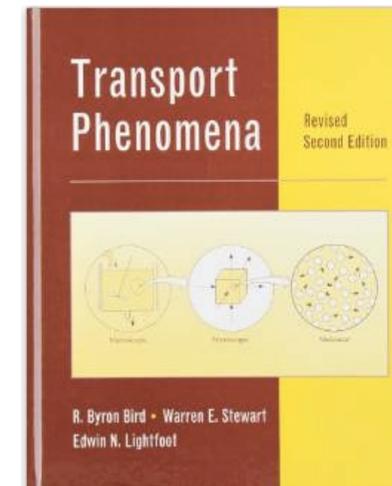
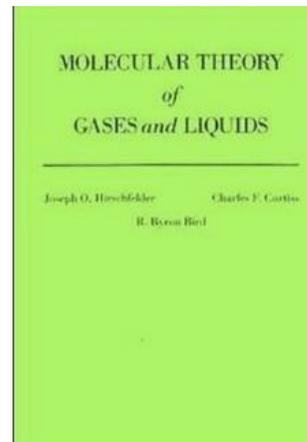
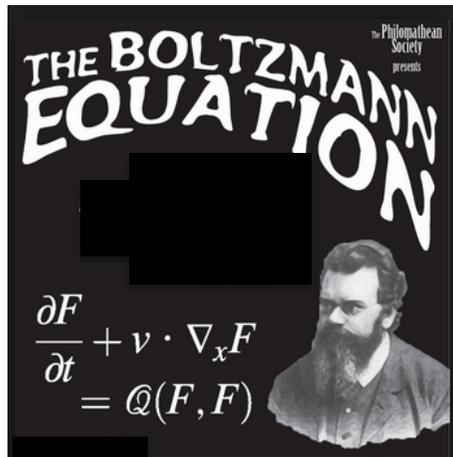
Parallelamente lo sfruttamento del **petrolio**, sia sul piano energetico che chimico ha favorito il gigantismo e la complessità degli impianti, la cui progettazione ha fatto scuola sulle altre attività produttive.

1952 Frederick Rossini, Circolare 500 del National Bureau of Standard : “*Selected Values of chemical thermodynamic properties*”, compendio di valori calcolati mediante la termodinamica statistica delle proprietà degli idrocarburi. La chimica industriale e l’ingegneria chimica ne hanno tratto un **enorme** guadagno.

Tale vertiginoso sviluppo, dovuto in gran parte all’individuazione di nuovi processi catalitici, ha avuto luogo attraverso profonde trasformazioni delle materie prime esistenti in natura.



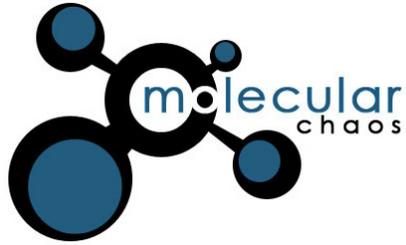
L'Ingegneria Chimica pur traendo le sue origini dalla cultura europea, ha consolidato la sua maturità scientifica al di là dell'Atlantico.



Evidenza l'esistenza di una “**Freccia del tempo**” per cui il passato è **diverso** dal futuro.



Ipotesi del **Caos molecolare**:  
le molecole si muovono in modo incoerente perché non si riconoscono a piccole distanze (ordine  $10^{-8}$ cm).



Malgrado tale ipotesi, l'equazione di Boltzmann fornisce ottimi risultati nella descrizione dell'evoluzione delle miscele gassose verso lo stato di equilibrio.

Creando la **situazione insolita** (con risvolti drammatici) di una teoria messa in dubbio pur essendo in accordo con l'esperienza.

Comunque utile per la **tecnologia** che ne ha saputo trarre notevoli vantaggi.

In realtà con tale approccio veniva sancita l'importanza dei processi di trasporto di materia ed energia nella gestione e progettazione dei processi chimici, con estensione a quelli presenti negli ambienti naturali, inclusa l'atmosfera.

## Problematiche fondamentali che si presentavano ai chimico fisici coinvolti negli sviluppi dell'ingegneria chimica:

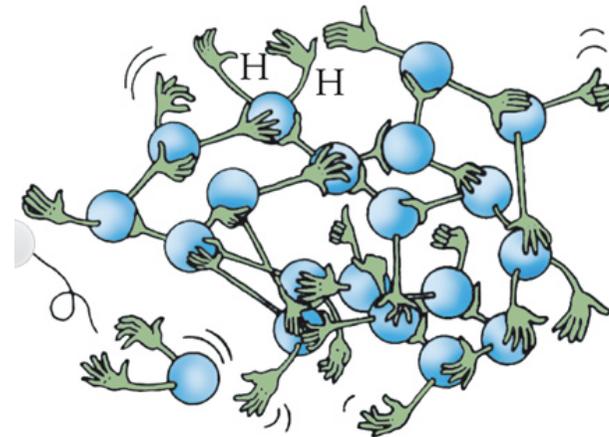
- Qual è la natura dello stato liquido, perché esiste una temperatura critica, qual è il ruolo delle forze intermolecolari sugli equilibri fra le fasi?
- Qual è la probabilità che due molecole che si incontrano, o meglio collidono, diano origine ad una trasformazione chimica?
- E' possibile utilizzare la meccanica quantistica, formulata nel 1925 e che aveva già ridisegnato il volto della chimica, per valutare in termini **accurati** la struttura e l'energia delle molecole?
- Qual è la natura della turbolenza e come può essere simulata?

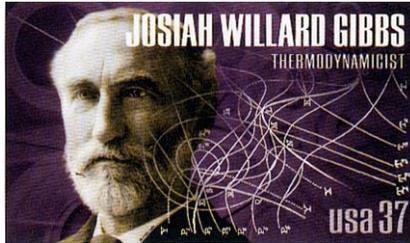
Alla metà del secolo scorso si riteneva che per ottenere la soluzione di tali problemi fossero necessari più di cinquanta anni, per cui dovessero essere trasferiti ai nipoti.

La constatazione che la geometria dell'impacchettamento delle molecole in un **liquido** fosse poco sensibile alle forze attrattive che determinano viceversa il valore dell'energia, aprì concrete possibilità per la formulazione di accurate equazioni di stato e di modelli esprimenti le proprietà termodinamiche delle miscele liquide.

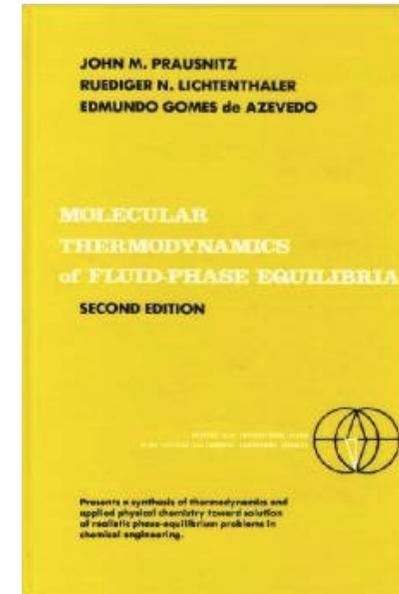
**Questo approccio falliva per l'acqua pur essendo la sua molecola relativamente semplice.**

Gli atomi di ossigeno si comportano come se avessero due braccia e due centri di attrazione dovuti ai **legami idrogeno**, per cui viene privilegiata la coordinazione tetraedrica. In virtù di questa connettività il liquido è formato da un reticolo dinamico soggetto a deformazioni e difetti.

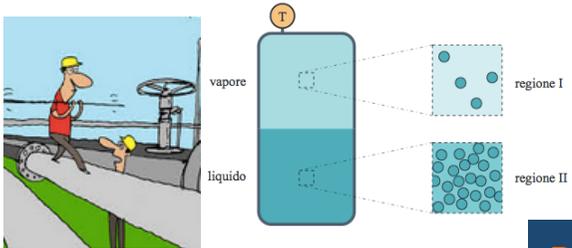




I risultati di tali ricerche hanno trovato una collocazione nella **Termodinamica Molecolare** che sulla scia del lavoro di W.Gibbs, stava diventando uno strumento indispensabile per valutare la composizione delle miscele in equilibrio, con ampie applicazioni nell'Ingegneria Chimica, riguardanti:



- i processi di separazione per distillazione, estrazione con solventi, adsorbimento su superfici solide,
- la preparazione di materiali polifasici,
- l'evoluzione delle gocce liquide e delle particelle solide presenti nei gas atmosferici,
- la distribuzione degli idrocarburi nei giacimenti petroliferi,
- ....



**G: Miscela ideali:** molecole puntiformi, non interagenti, mescolate casualmente



GOD

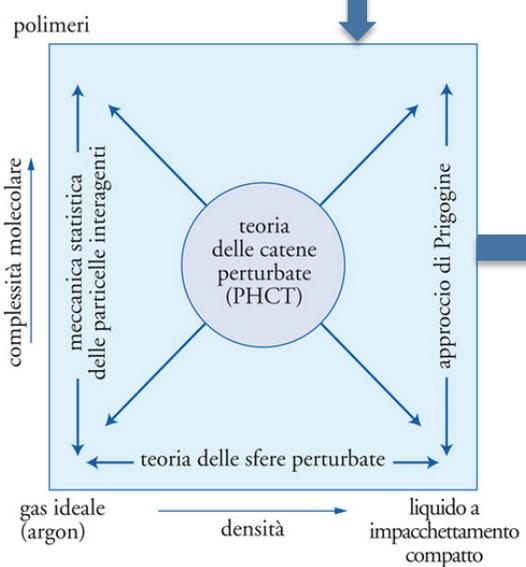
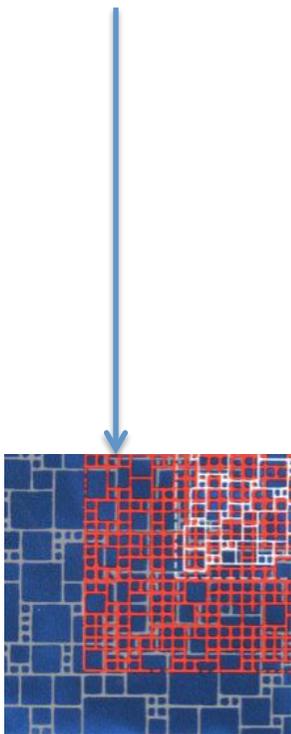
**D:** Il sistema non si smiscela; perché ciò avvenga le molecole devono interagire.  
**G:** venga Hildebrand con le sue **miscele regolari.**



**D:** Le molecole hanno volumi diversi che influenzano la loro distribuzione .  
**G:** vengano Prausnitz, Flory, Prigogine, ..... con la **Perturbed Hard Chain Theory.**  
**D, indignato:** ma è un Patchwork!



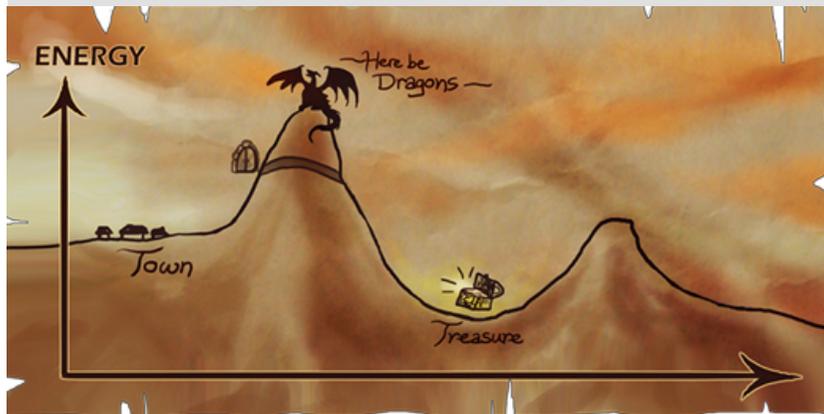
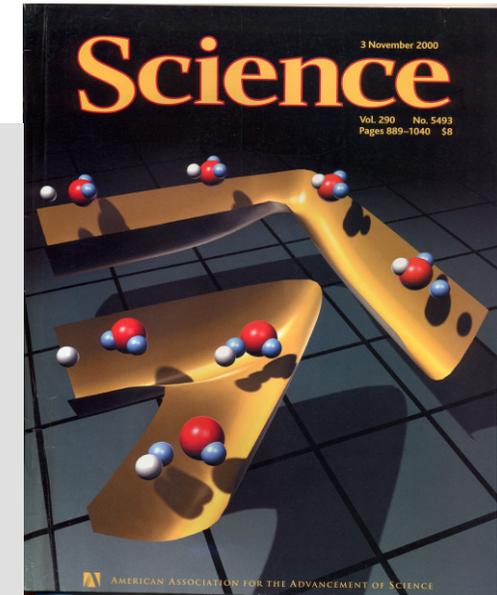
DEVIL



# Velocità delle reazioni

La collisione fra due molecole genera una trasformazione chimica se il moto di un complesso molecolare che comprende entrambi i reagenti su una superficie di energia potenziale, simile ad un paesaggio montano, supera una barriera di energia.

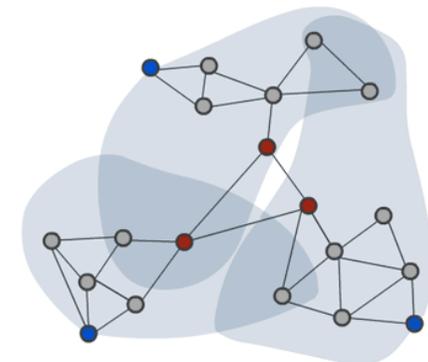
Alla sommità si trova lo “**stato di transizione**” la cui velocità di decomposizione, facilmente calcolabile, si identifica con quella della reazione.



$$velocità \propto \frac{k_B T}{h} [X^\ddagger] \propto T [X^\ddagger]$$

J.Hirschfelder:  
“Epoca making concept”

Stava nascendo una super scienza in grado di descrivere l'evoluzione nel tempo dei sistemi reagenti, inclusi quelli biologici, offrendo un importante strumento per la simulazione e la progettazione.



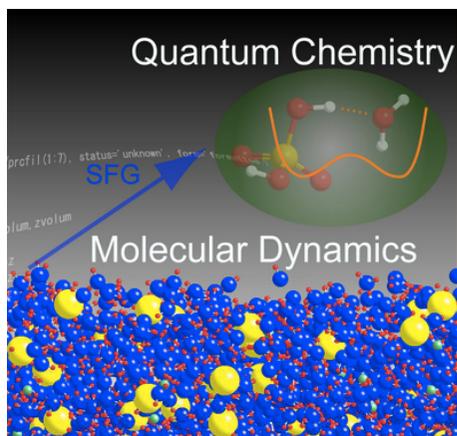
Nella seconda metà del '900 il progresso del calcolo elettronico ha permesso di **simulare** con ragionevole accuratezza gli eventi molecolari mediante la meccanica quantistica.

“La convinzione che fosse possibile realizzare tale programma costituiva un **grido di trionfo e di disperazione**” per le difficoltà matematiche che presentava.  
*John Pople, premio Nobel.*

I chimici teorici dopo essersi accontentati di riprodurre dati sperimentali già noti, grazie alla

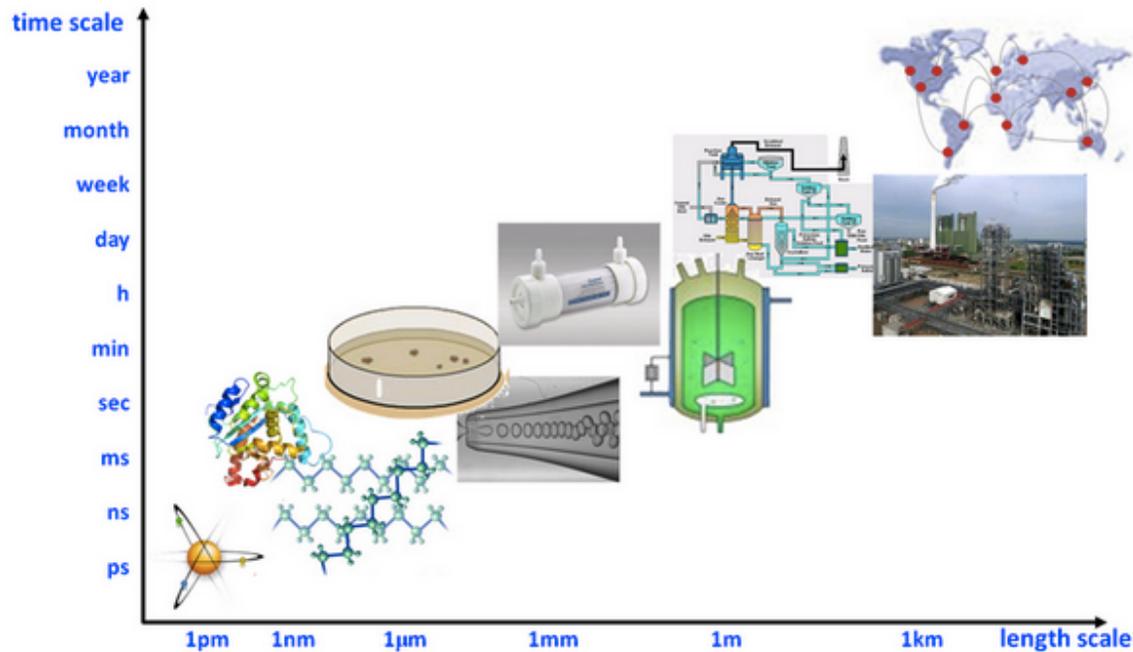
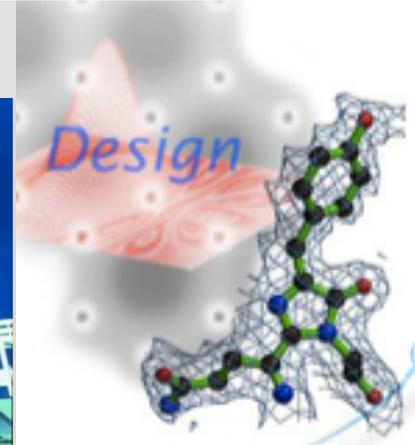
## Chimica Computazionale

potevano avventurarsi nella esplorazione di eventi virtuali in grado di orientare le indagini in diversi settori.



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

# Affermazione della Ingegneria Chimica



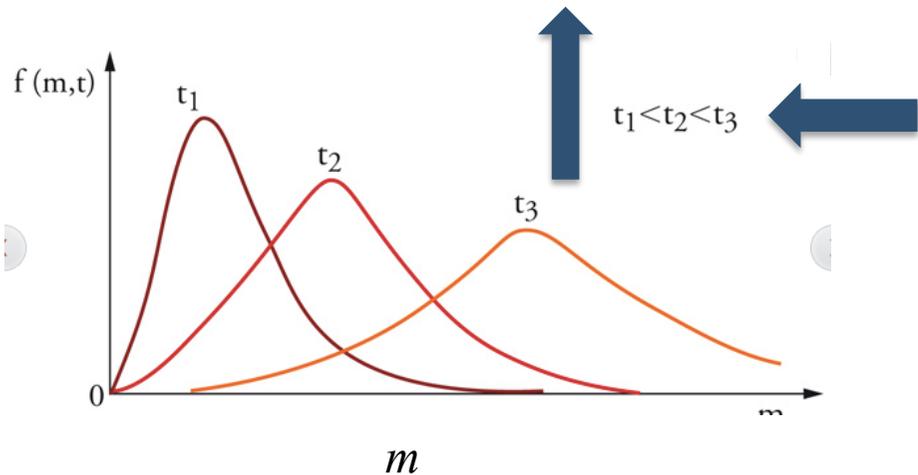
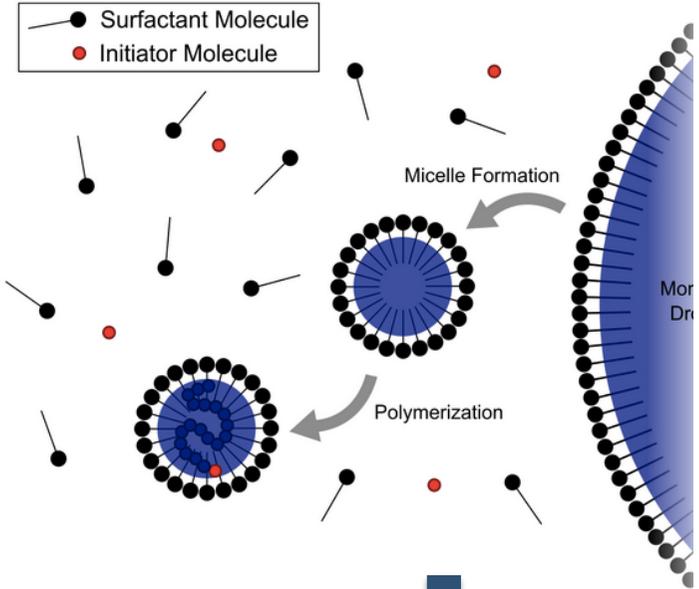
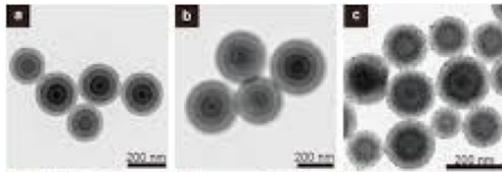
Approccio a più scale

**Caratteristiche peculiari**

- 1- **Energetiche**, tengono conto degli effetti termici minimizzando il consumo di energia
- 2- **Strutturali** concernenti le connessioni fra le diverse unità
- 3- **Controllo**, per garantire una gestione affidabile ed efficiente

# Materiali Polimerici

Sistemi eterogenei in emulsione

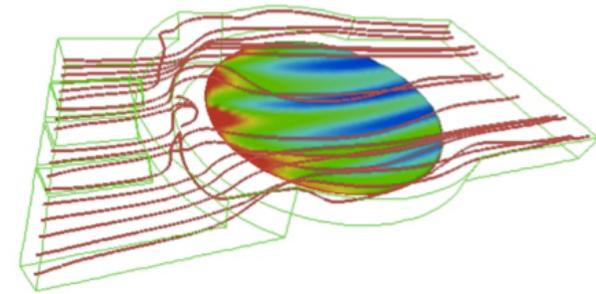
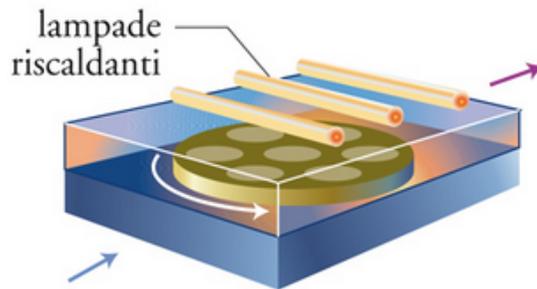
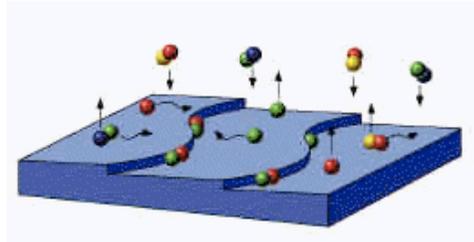


$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial [g(x,t)f(x,t)]}{\partial x} = b(x,t) - d(x,t)$$

nascita  $b(x,t)$   
 morte  $d(x,t)$   
 massa  $x=m$  delle particelle

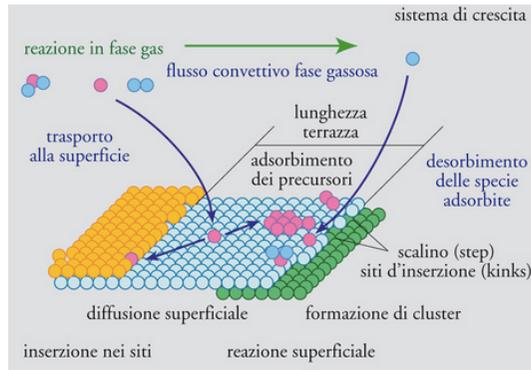
# Ingegneria delle superfici

Preparazione dei materiali monocristallini impiegati nella costruzione di dispositivi di varia natura attraverso la **deposizione chimica da fase vapore**.

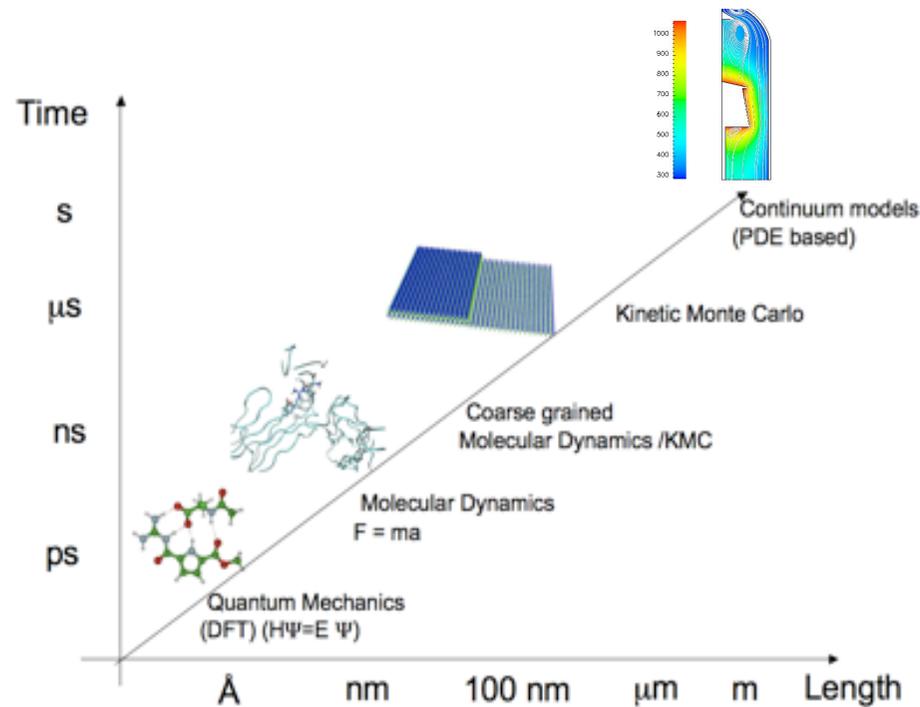
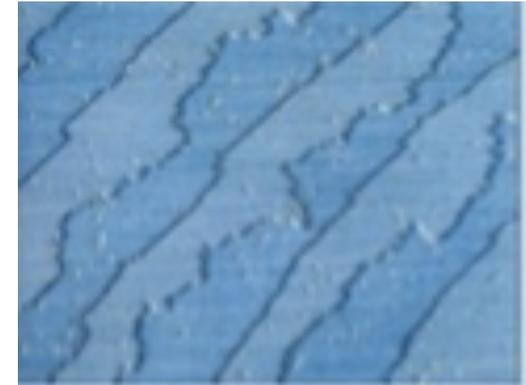


Controllando il percorso e le caratteristiche del flusso dei reagenti gassosi che lambiscono la superficie di deposizione, e' possibile conferire al materiale le caratteristiche strutturali desiderate, soprattutto per quanto concerne l'ottenimento di superfici **monocristalline** carenti di difetti.

# Modello terrace-step di crescita di superfici monocristalline

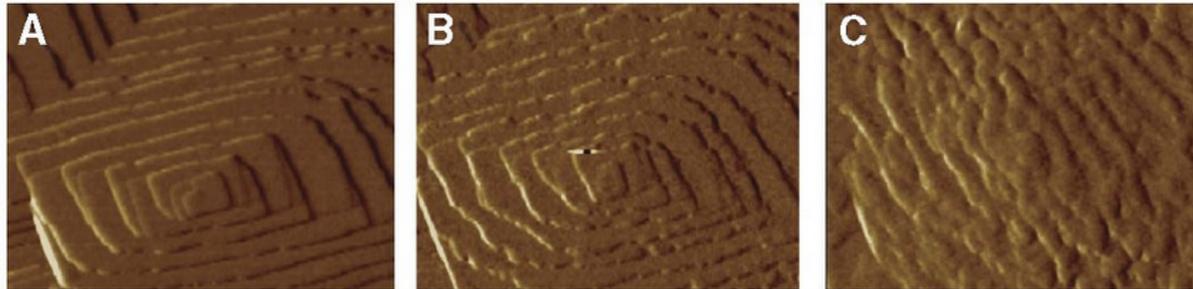


La superficie diviene un microreattore chimico.



La progettazione dei reattori fruisce della simulazione molecolare a più scale.

## Scaling down dei concetti dell'ingegneria chimica.



La monocristallinità della superficie è contenuta fra due condizioni limiti, entrambe dipendenti dalla velocità di crescita:

- **Policristalli** per instabilità del gradino
- **Amorfi** per formazione di ampi cluster

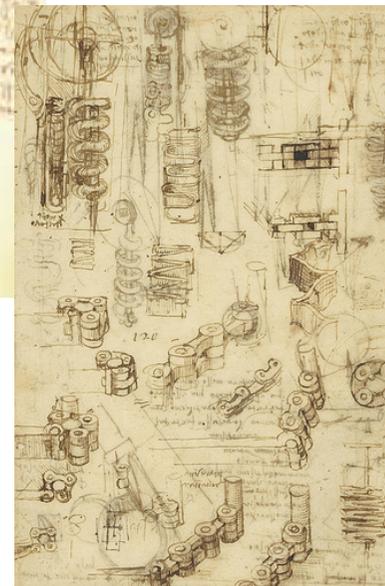
Il controllo della velocità di crescita, in modo di limitare tali catastrofi, è simile a chi deve navigare fra Scilla Cariddi.

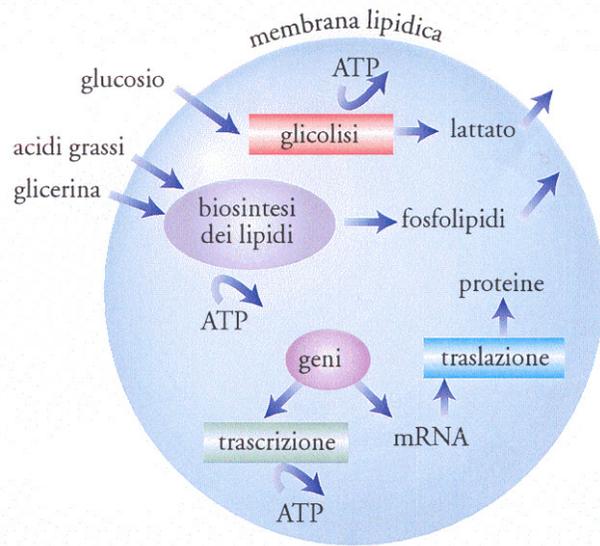


La capacità di trasformare il silicio "metaforicamente" in oro ha fatto attribuire ai tecnici operanti in tale settore l'appellativo di "nuovi alchimisti".

Nell'insieme stava maturando l'euforica ambizione di sintetizzare nuove molecole e materiali opportunamente progettati con proprietà e caratteristiche funzionali sempre più rispondenti ai bisogni dell'uomo, quasi a confermare l'affermazione di Leonardo:

**“Dove la natura finisce di produrre le sue proprie specie, comincia l'uomo, in armonia con le leggi della natura a creare una infinità di specie”.**

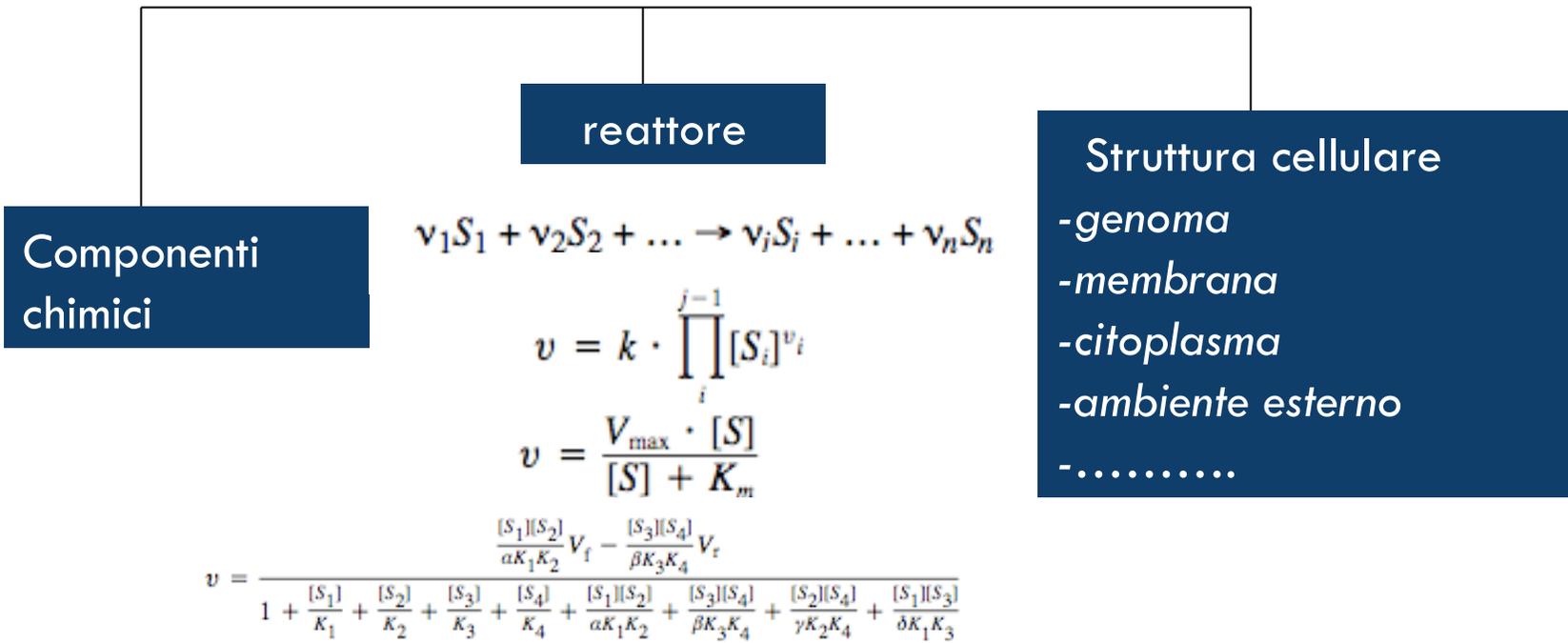


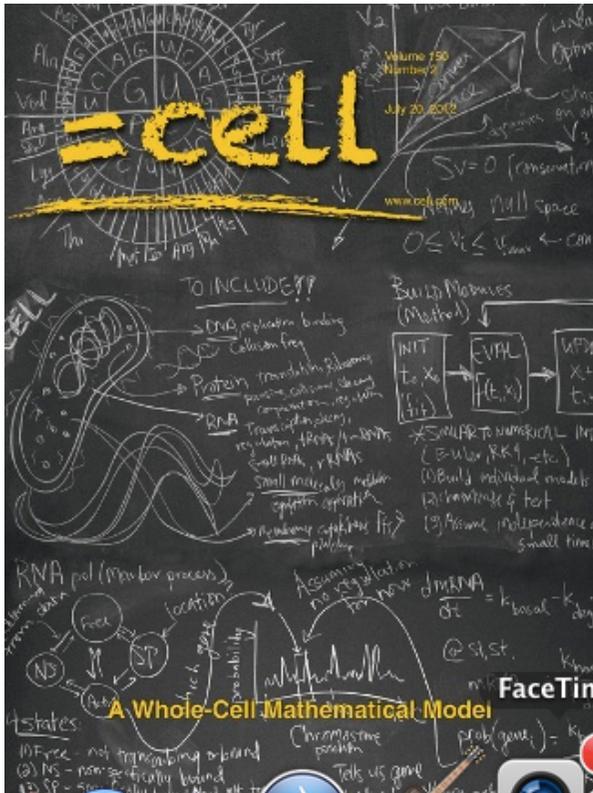


La vita non è che una vastissima gamma di reazioni chimiche coordinate (*Jim Watson*).

Simulazione di una cellula:  
una sfida per l'ingegneria chimica

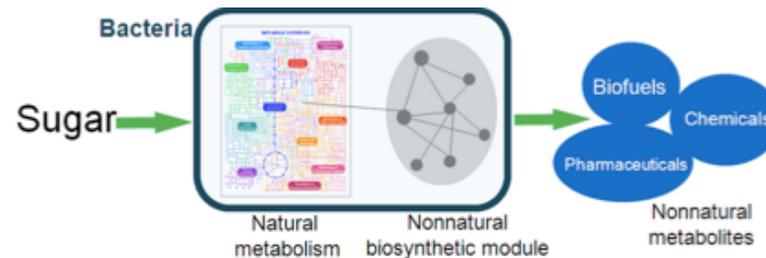
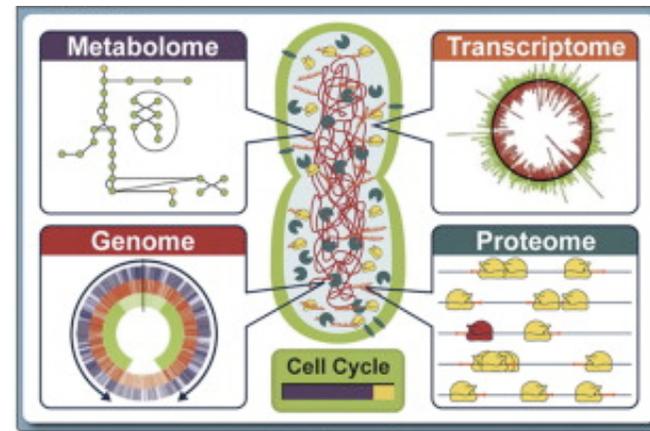
### Modello in silicio di una cellula





# Perché simulare una cellula?

La comprensione di come opera a partire dalle singole molecole e dalle loro interazioni costituisce una sfida che può essere affrontata fruendo delle conoscenze maturate nell'ingegneria chimica.



Un buon modello di una cellula può accelerare scoperte in biologia e in bioingegneria e costituisce uno strumento per lo sviluppo della biologia sintetica.



Le conoscenze maturate nella seconda metà del novecento hanno avuto conseguenze importanti poiché dai processi produttivi di larga scala si è ripiegato su quelli di minori dimensioni, connessi con le attività sociali, con particolare riferimento:

- alla salute
- al servizio
- all' intrattenimento.

Situazione che ha favorito nel nostro paese un modello di sviluppo basato su un tessuto di piccole e medie imprese molto vivace, anche se per certi aspetti vulnerabile, perché per competere sui mercati globali è necessario disporre di strutture di ricerca che risultino all'avanguardia nelle tecnologie che determinano le più efficaci spinte innovative.

Situazione che fortunatamente si è conservata sino ad oggi resistendo ai venti di crisi che hanno intaccato molte altre attività.

## COSA RISERVA IL FUTURO?

Sono affiorate grandi sfide conseguenti da emergenze planetarie, che richiedono lo sviluppo di nuovi metodi di indagine.



La tecnologia dovrà impegnarsi, oltre che sulla salute, sui problemi riguardanti:

- il depauperamento delle risorse,
- l'approvvigionamento di energia,
- la tutela dell'ambiente,
- lo sviluppo economico,

-.....



Se i combustibili fossili fossero prossimi all'esaurimento l'attuale società dovrebbe fronteggiare una **crisi drammatica**.

Fortunatamente la scoperta di nuovi giacimenti non accenna a diminuire per cui ci si deve chiedere perché il pianeta sia così ricco di idrocarburi che annoverano un nuovo protagonista: **lo shale gas**.

L'abbondanza ed il basso costo degli idrocarburi costituisce una enorme risorsa energetica che si deve utilizzare nel modo più opportuno con limitati effetti sull'ambiente.

## Pertanto

La sfida viene trasferita sulla sostenibilità, intesa a:

- Controllare il riscaldamento globale
- Diminuire, o minimizzare, la volatilità dell'approvvigionamento dell'energia stabilizzando il clima politico
- Allentare la transizione dall'impiego dei combustibili fossili alle energie alternative

Gli approcci sino ad ora seguiti per fronteggiare i problemi posti dalla sostenibilità sono stati e sono tuttora oggetto di dibattiti, prese di posizione politiche e di ricerche, con l'obiettivo di cogliere una possibile transizione verso

**l'era post petrolifera.**

Tutto ciò tentando però di mantenere il presente modo di vita.

**E quindi con risultati sino ad ora obiettivamente modesti.**



Sta maturando però la consapevolezza che l'impiego dell'energia non possa prescindere dalla sua qualità.

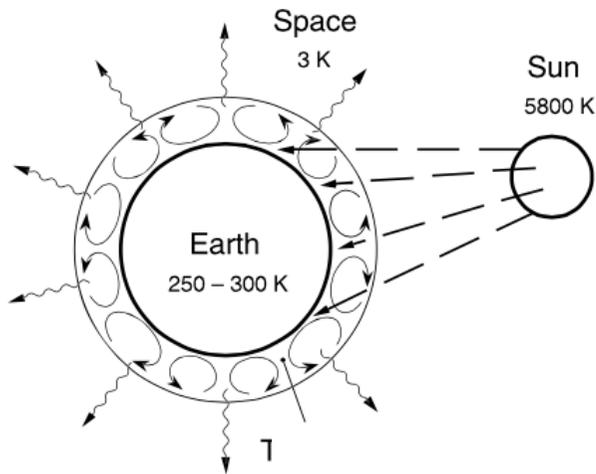
**Exergia: concetto unificante.**

Misura la qualità dell'energia espressa dalla massima quantità di lavoro che può essere ottenuto quando un sistema raggiunge il suo equilibrio con l'ambiente.

A differenza dell'energia non si conserva.

## Risorsa energetica:

materia che non si trova in equilibrio con l'ambiente e quindi in virtù della sua composizione dotata di un elevato contenuto di **exergia**.



**Flusso di exergia che raggiunge la terra: 140.000 TW.** In gran parte impiegato nei processi naturali associati ai moti marini ed atmosferici, alle trasformazioni fisiche o chimiche di natura geologica e allo sviluppo dei processi biologici.

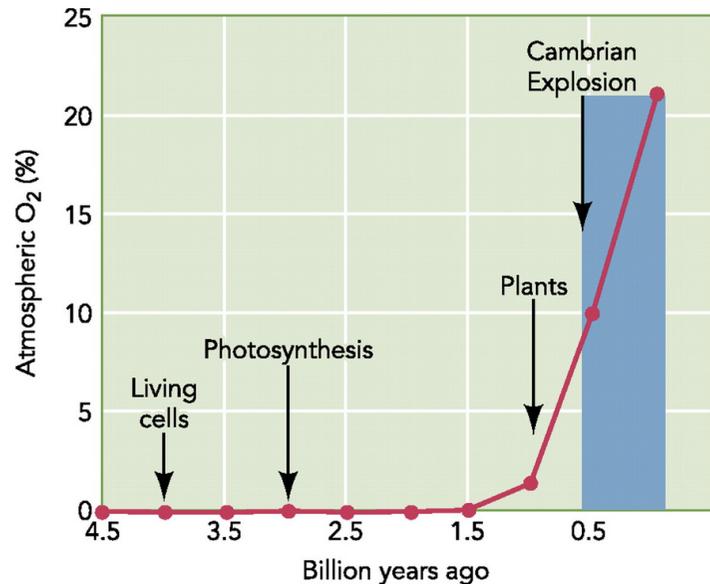
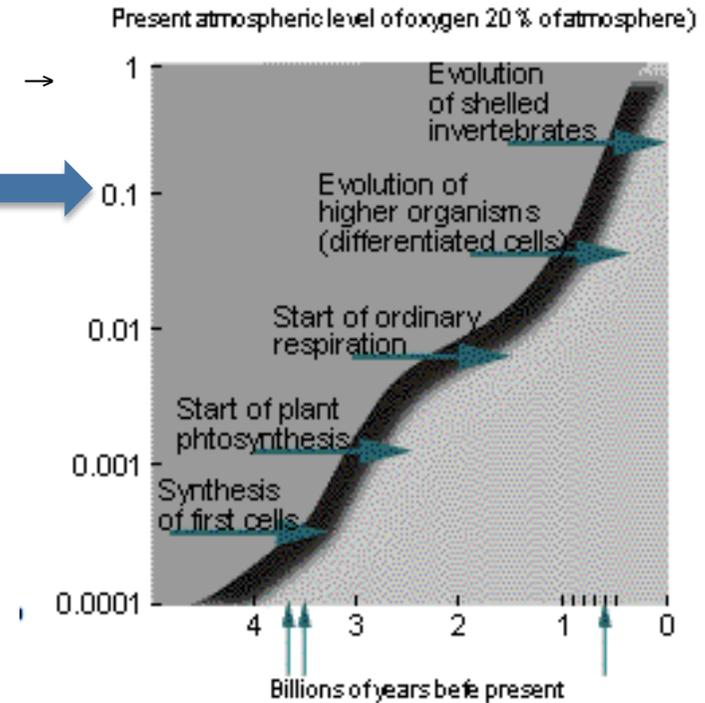
**Nella fotosintesi, madre di tutti i processi biologici: circa 90 TW.**

**Nelle attività antropiche: circa 16 TW.**



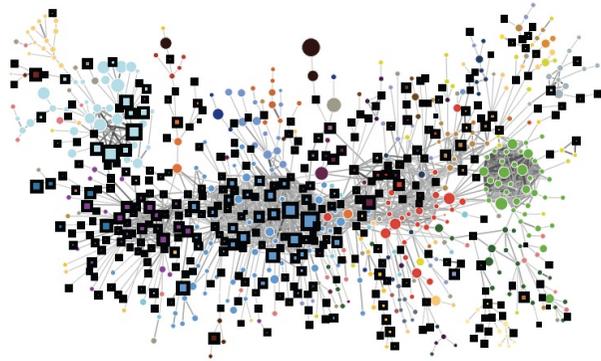
La fotosintesi in poco più di 3 miliardi di anni, grazie al flusso di exergia solare, ha trasformato la terra attraverso:

Lo sviluppo degli organismi viventi.



Le modifiche fisiche associate alla comparsa e accumulo dell'ossigeno nell'atmosfera.

La storia della fotosintesi offre una esemplificazione di come i sistemi aperti percorsi da un flusso di exergia si adattano al mondo esterno attivando meccanismi che favoriscono l'emergenza di strutture sempre più complesse.

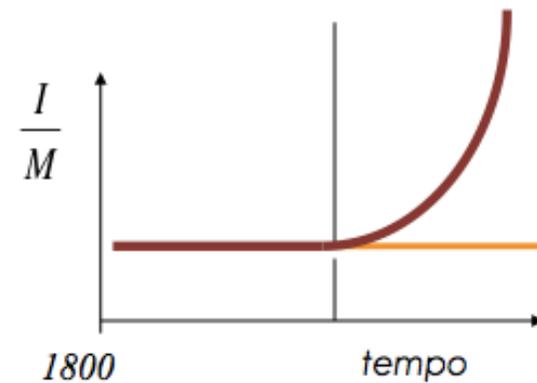


Le attività umane si sviluppano attraverso network in cui hanno luogo scambi di materia, energia ed informazione che favoriscono l'auto organizzazione verso più elevati livelli di complessità.

Il progresso si manifesta attraverso :

- la miniaturizzazione degli impianti
- la funzionalità dei processi

$$\frac{\text{sviluppo}}{\text{crescita}} \approx \frac{\text{Informazione}(I)}{\text{materia}(M)}$$



**Crescita:** espansione per accrescimento, che si manifesta in termini: spaziali, materiali ed energetici.

**Sviluppo:** include oltre al PIL, il livello organizzativo e gli indicatori qualitativi di benessere e culturali.

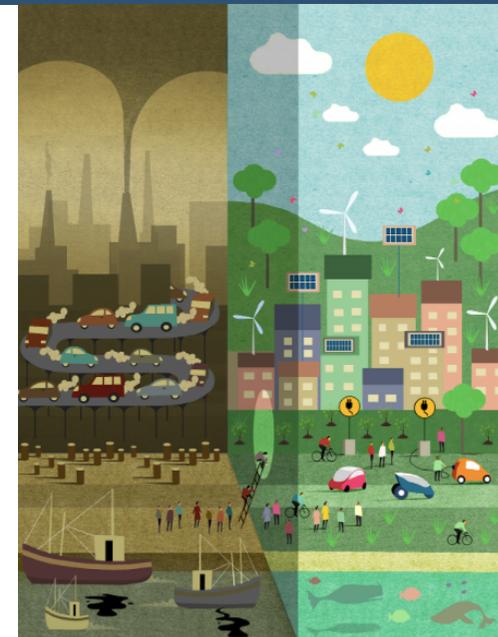
In questo quadro appare legittimo ritenere che non esistano limiti allo sviluppo.

Tuttavia per proseguire al ritmo attuale sono necessari:

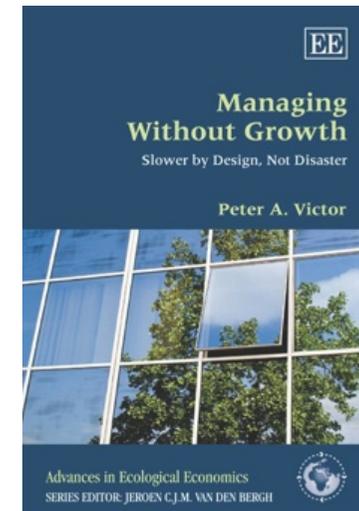
-un accumulo di risorse, tale da garantire, o avvicinare, l'approvvigionamento energetico.

-la capacità di impedire che un troppo intenso impiego dell'energia, in particolare attraverso la combustione, provochi indesiderate evoluzioni dell'ambiente.

Ma si può costruire un mondo soddisfacente?



**Peter Victor** (*York University di Toronto*) ci ha provato rimodellando l'economia canadese. Grazie allo sviluppo tecnologico è legittimo ritenere che fruendo di tale situazione si possa costruire un futuro sostenibile.



Attraverso l'impiego delle carbon tax, di programmi antipovertà e riduzione delle ore di lavoro, di risparmio energetico è riuscito a simulare una transizione verso una situazione di stabilità economica **stazionaria** che non compromette lo stato del pianeta.

Le emissioni di gas serra ed il GDP per persona si **stabilizzano** su valori accettabili per la tutela del pianeta e per il benessere.

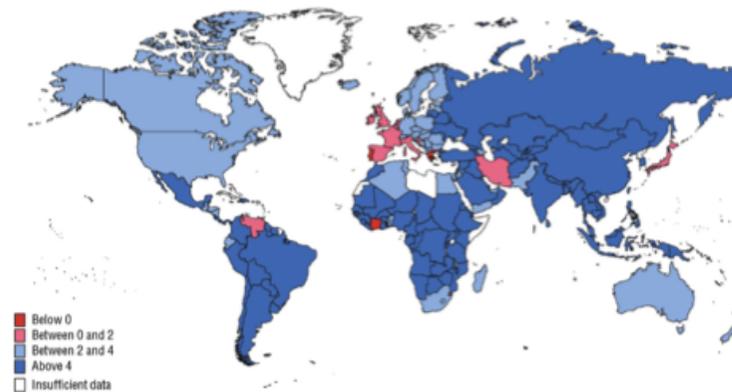
**Peculiarità:** la parte tecnologica del programma risulta la più facile da realizzare poiché si basa sulle tecnologie esistenti.

Pertanto la sua applicazione riguarda più la politica che non la scienza.

## Quale politica?

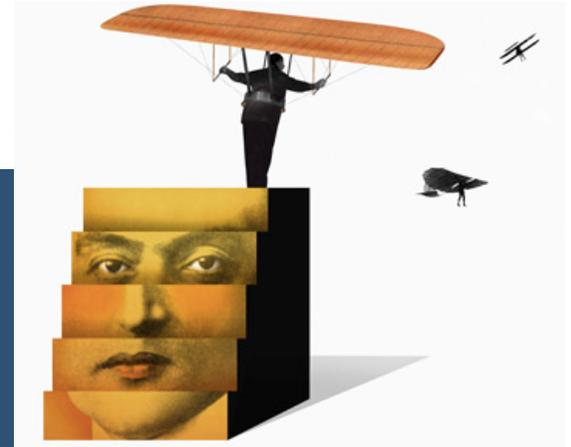
- Accordi internazionali
- Leggi e regolamentazioni severe
- Tasse e sussidi
- Profondo cambiamento delle infrastrutture energetiche
- Cambiamenti strutturali del sistema bancario e finanziario.

In sostanza è necessario: convincere i politici e la popolazione di tutto il mondo di cambiare il modo di vita, includendo gli abitanti dei paesi in via di sviluppo che tendono a convergere verso lo stato di benessere dei paesi ricchi.



Si tratta di un cambiamento **epocale** che potrebbe includere anche la pianificazione familiare (per decreto).

- Che cosa è rimasto del **tecno-ottimismo** protagonista della rivoluzione tecnologica?
- È ancora in grado di alimentare un ritmo di sviluppo che contrasti la crisi economica?



-Da parte di alcuni si sostiene sia improbabile che si verifichi entro breve tempo una svolta tecnologica simile alle precedenti, anche se la comunità scientifica è numerosa e fruisce globalmente di generosi finanziamenti.

-Da parte di altri si paventa lo sviluppo della tecnologia perché considerata responsabile dell'eccessivo consumo delle risorse naturali e del degrado ambientale sino a preconizzare l'avvento di autentiche catastrofi. Tanto da invocare una improbabile decrescita.

J.Kendrew, premio Nobel: “Gli scienziati non sono in grado di prevedere il futuro meglio di ogni altro, anche nel proprio campo di ricerca”.



Le anticipazioni si sono sempre rivelate vistosamente sbagliate, come nel 1937 quando la National Academy of Science ha chiesto ai maggiori scienziati del tempo quali fossero i campi della tecnologia che avrebbero fatto i progressi piu' significativi. Nessuno ha saputo prevedere l'energia nucleare, gli aerei con motori a reazione, il transistor e gli antibiotici.

La tecnologia percorre un cammino simile all'evoluzione biologica con esiti non prevedibili.

“Technology is a gift of God. After the gift of life it is perhaps the greatest of God's gifts. It is the mother of civilizations, of arts and of sciences.”

—Freeman Dyson

## CONCLUSIONI

**Paul Krugman**, premio Nobel per l'economia :

“Salvare il pianeta non costa niente” (New York Times).

Sostiene che gli scienziati non capiscono cosa significa crescita economica. Probabilmente ha ragione, anche perché a giudicare da come va il mondo sembra che non lo capiscano nemmeno gli economisti.

Comunque non si può che essere d'accordo con la sua filosofia del “**mai dire mai**”, purché si tenga opportunamente conto delle **condizioni al contorno**.

In realtà è necessario essere consapevoli che i problemi sollevati dalla sostenibilità non possono prescindere dallo sviluppo di ricerche che portino a tecnologie innovative, tali da assicurare uno stato di benessere generalizzato, **senza dover imporre modifiche sociali e politiche, difficilmente praticabili, o addirittura utopiche.**

GRAZIE PER L'ATTENZIONE