



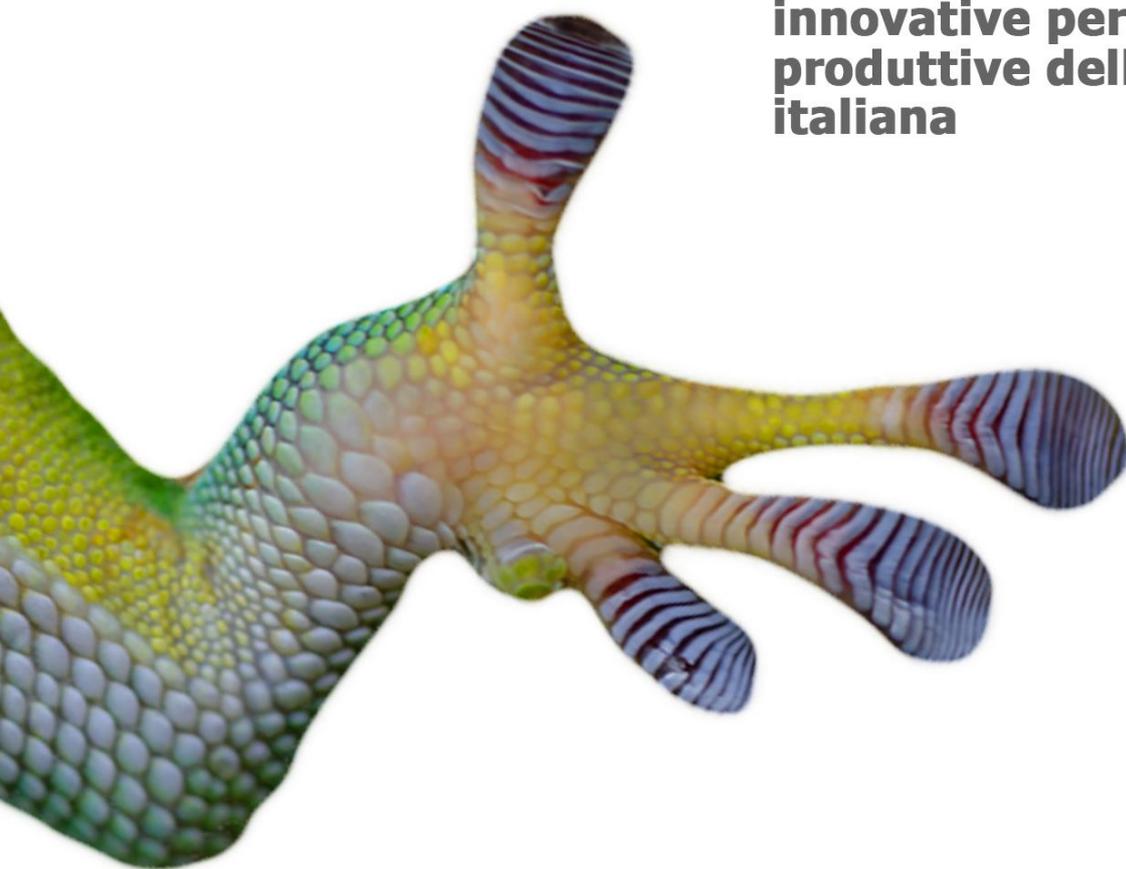
CHIMICA
PASSIONE
PERIODICA

6. MATERIALI

INDUSTRIA 4.0, SMART
MATERIALS, ADDITIVE
MANUFACTURING

GIOVEDÌ 6 DICEMBRE 2018

Materiali e tecnologie
innovative per le sfide
produttive dell'industria
italiana



UN PROGETTO DI



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI TORINO



IN COLLABORAZIONE CON



CHIMICA / PASSIONE PERIODICA

Nell'ambito delle attività di divulgazione della ricerca del Dipartimento di Chimica, siamo orgogliosi di accogliervi alla sesta giornata dell'iniziativa "Chimica: passione periodica".

Il ciclo di conferenze divulgative si articola in sei workshop tematici che avranno luogo ogni primo giovedì del mese, da maggio a dicembre 2018 (3 maggio, 7 giugno, 5 luglio, 4 ottobre, 8 novembre e 6 dicembre).

Con questa importante iniziativa, vogliamo presentare alla società, all'industria e al mondo accademico la nostra ricerca di punta, con l'intento di promuovere percorsi comuni su grandi temi trasversali di interesse collettivo, in un ambiente informale.

Dalla sicurezza alimentare alle tecniche innovative per i beni culturali, dall'energia pulita alla chimica applicata all'investigazione criminale, dalla chimica "green" alla diagnostica medica, il ciclo di conferenze sarà occasione per avviare un dialogo tra i nostri ricercatori e gli attori sociali e produttivi che operano nel settore.

Presenteremo le nostre strategie di sviluppo di materiali intelligenti e nanostrutturati, incluse simulazioni e modelli predittivi, nel contesto di Industria 4.0.

Per favorire la nascita di nuove interazioni, al termine di ogni pomeriggio abbiamo previsto uno spazio di discussione progettuale aperto e un aperitivo scientifico.

Ringraziandovi per aver partecipato a questa prima giornata, vi invitiamo ad iscrivervi alla prossime date di vostro interesse inquadrando il QR code con il vostro cellulare o all'indirizzo <http://www.chimica-ricerca.unito.it>.



La registrazione online è aperta.

Il Direttore del Dipartimento di Chimica


Prof. Marco Vincenti

La viceDirettrice alla Ricerca


Prof.ssa Cristina Prandi

DESCRIZIONE DELLA GIORNATA

Lo sviluppo della società è fortemente influenzato dalla disponibilità di nuovi materiali con proprietà avanzate che ne consentano l'applicazione in differenti settori. Per questo motivo, nel programma di sviluppo della ricerca dell'Unione Europea, i materiali hanno una posizione di ampio rilievo.

Il Dipartimento di Chimica è profondamente coinvolto nel campo della ricerca sui materiali. Diverse classi di materiali ad alto contenuto tecnologico vengono prodotti, caratterizzati e progettati per poter essere applicati in ambiti molto differenti come produzione, automotive, energia, catalisi, biomateriali, beni culturali, sensoristica, salute, ecc.

Numerose sono le tecniche di sintesi dei materiali disponibili presso il Dipartimento di Chimica, così come le tecniche di caratterizzazione (determinazione di composizione, struttura, microstruttura e proprietà, morfologia ecc.).

Le ricerche effettuate nel campo dei materiali nel Dipartimento di Chimica sono spesso strettamente interconnesse con la realtà industriale attraverso numerosi contratti e convenzioni con aziende del territorio e internazionali, consentendo di portare l'innovazione tecnologica dalla ricerca di base fino alla applicazione finale.

PROGRAMMA

Chairperson della giornata: P.Rizzi, G.Ricchiardi

14.00 *Presentazione dell'iniziativa (C. Prandi)*

14.05 *Presentazione del dipartimento (M. Vincenti)*

14.15 *Presentazione della giornata (P. Rizzi, G. Ricchiardi)*

14.20 Il competence center "manufacturing 4.0" - relatore Marcello Baricco

14.30 Materiali metallici, uno zoccolo duro dell'economia: dove va l'innovazione - relatore Livio Battezzati

14.45 Innovazioni nel campo dei sistemi polimerici: nuove funzionalità e sostenibilità ambientale - relatrice Maria Paola Luda

15.00 Materiali catalitici per i processi e per i prodotti - relatrice Gloria Berlier

15.15 *Coffee break*

15.45 Materiali multifunzionali a base carbonio: potenzialità e prospettive - relatrice Domenica Scarano

16.00 L'interazione ricercatori/aziende: casi studio nel Dipartimento di Chimica - relatori Claudia Barolo, Valentina Brunella, Fabrizio Sordello, Marco Pazzi

16.40 NMR allo stato solido: analisi di materiali di interesse industriale - relatore Michele Chierotti

16.50 Le microscopie elettroniche applicate a problematiche industriali - relatrice Maria Carmen Valsania

17.00 *Ospite della giornata: Giorgio Boero (Polo CGreen)*

17.15 *Ospite della giornata: Paolo Dondo (Polo Mesap)*

17.30 *Aperitivo e sessione poster*

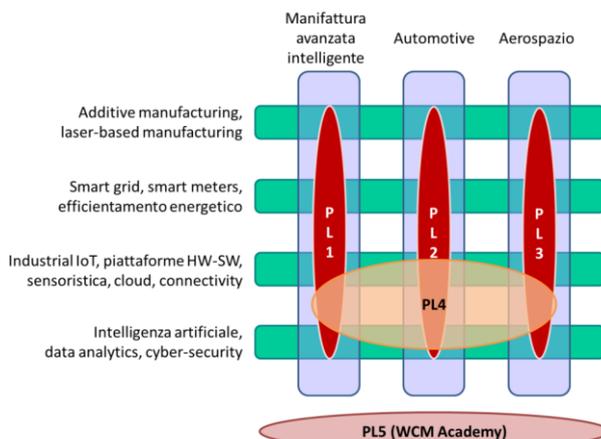
INTERVENTI

NOTE PRIMO INTERVENTO

IL COMPETENCE CENTER "MANUFACTURING 4.0"

M. Baricco

Il Centro di Competenza (Competence Center), costituito dal Politecnico e dall'Università di Torino, con la partnership di 24 imprese, punta all'industria del futuro nel settore manifatturiero, mettendo a punto nuove tecnologie, basate sull'introduzione capillare delle tecnologie digitali lungo tutta la catena dei processi produttivi, abbinate a nuovi modelli economici e a una nuova organizzazione del lavoro. Il Centro di Competenza metterà a disposizione delle aziende "linee pilota" (PL) innovative per diverse tecnologie manifatturiere e costituirà un punto di riferimento in tutti gli ambiti ad esse collegati (p.es. Big Data, Internet of Things, robotica, fotonica, cybersecurity, nuovi materiali, efficientamento energetico dei processi). Speciale attenzione sarà data alla nuova organizzazione del lavoro e della produzione. Il Centro di Competenza fornirà servizi di orientamento e di formazione alle imprese, in particolare PMI, e di attuazione di progetti di innovazione, ricerca industriale e sviluppo sperimentale. Obiettivo primario sono gli ambiti caratteristici di due dei distretti industriali principali del Piemonte, l'automotive e l'aerospazio, senza escludere altri abiti manifatturieri, quali l'industria alimentare.



Il Centro di Competenza troverà collocazione, in una prima fase, al Lingotto, un tempo sede di produzione FIAT e simbolo della nascita della grande industria in Italia, oggi spazio riconvertito e restituito alla città, dove potrà nascere l'industria del futuro. Si partirà dal Lingotto per estendersi successivamente in altri spazi della città, inserendo il Centro di Competenza nel grande progetto dell'MTCC (Manufacturing Technology Competence Center) promosso dall'Unione Industriale di Torino, con Politecnico e Università, insieme a numerosi organismi territoriali e fondazioni bancarie.

Una delle novità su cui questa nuova infrastruttura votata all'innovazione di prodotto verrà misurata, è legata alla vocazione a svolgere attività di sviluppo che, partendo dai risultati della ricerca di base svolta nelle Università, siano rivolte alla produzione ed alla certificazione della stessa, portando lo sviluppo di nuovi prodotti ad un livello di maturazione tecnologica prossimo al mercato, rendendo più rapida per le imprese la transizione verso i nuovi paradigmi produttivi.

Fanno parte della squadra di "Manufacturing 4.0": Politecnico di Torino, Università degli Studi di Torino, 4D Engineering, Agilent Technologies, AizoOn Consulting, Altran, Cemas Elettra, Consoft Sistemi, Eni, FCA ITALY, FEV ITALIA, GE Avio, GM Global Propulsion Systems, Illogic, IREN, ItaldesignGiugiaro, Leonardo, Merlo, Michelin Italiana, Prima Industrie, Reply, Siemens, SKF Industrie, ST Microelectronics, Thales Alenia Space Italia, TIM.

Progetto in collaborazione con P.Fino, DISAT, Politecnico di Torino.

(marcello.baricco@unito.it)

NOTE SECONDO INTERVENTO

MATERIALI METALLICI, UNO ZOCCOLO DURO DELL'ECONOMIA: DOVE VA L'INNOVAZIONE

L. Battezzati, M. Baricco, A. Castellero, G. L. Fiore, P. Rizzi, F. Scaglione

I metalli hanno contribuito allo sviluppo tecnologico dell'umanità in varie Ere (bronzo, ferro, nucleare, silicio). Degli 87 metalli del Sistema Periodico 60 sono commercialmente disponibili ed usati in una vasta gamma di prodotti. Si stima che l'insieme della produzione di metalli primari e leghe, lavorazioni, prodotti metallici integrati e riciclaggio delle leghe rappresenti il 46% del valore manifatturiero e l'11% del prodotto interno lordo dell'UE. Le stime sono significative anche per l'industria manifatturiera italiana, la seconda nella UE. Peraltro, la produzione di acciaio il cui uso è un indicatore di sviluppo economico ed industriale di un paese, ha raggiunto in Italia circa 2 Mton negli anni '50 del Novecento, livello a cui le altre potenze industriali mondiali pervennero già ad inizio secolo. Si tratta ora di mantenere il livello produttivo e di progredire nello sviluppo sia di nuovi processi che di nuovi materiali ad alto valore aggiunto anche attraverso il riciclo, entrando a pieno titolo nel concetto di economia circolare.

In questa presentazione, dopo aver fornito dati generali sul ruolo dei metalli nello sviluppo economico, vengono discussi aspetti della ricerca applicata e fondamentale nel settore e vengono descritte due attività in corso nel Dipartimento di Chimica che illustrano contributi su processi avanzati di solidificazione e sulla elaborazione di una nuova categoria di leghe.



La solidificazione rapida delle leghe porta ad ottenere microstrutture a grani fini, vetri metallici ed altre fasi di non-equilibrio. Nel Dipartimento viene effettuata con le tecniche di melt spinning e di melt extraction. Queste conoscenze guidano l'interpretazione dei risultati che si ottengono nella stampa 3D delle leghe, processo in cui piccole porzioni di lega sono fuse da un fascio laser in rapido movimento ed immediatamente tembrate dal metallo sottostante.

I materiali metallici sono tradizionalmente identificati dal componente principale della lega: es. lega ferrosa, superlega a base Ni, lega di Al. Solo nell'ultimo decennio sono stati esplorati sistemi in cui vari elementi sono alligati nelle stesse proporzioni. Ne è nata la nuova tipologia di "leghe ad alta entropia", formate da 4-5 elementi in quantità equimolari. La curiosità scientifica di esplorare nuove zone nello spazio delle fasi ha portato a scoprire nuove leghe inossidabili dalle proprietà meccaniche di particolare interesse dalle ad alte temperature al campo criogenico.



(livio.battezzati@unito.it; marcello.baricco@unito.it; alberto.castellero@unito.it; gianluca.fiore@unito.it; paola.rizzi@unito.it; federico.scaglione@unito.it)

NOTE TERZO INTERVENTO

INNOVAZIONI NEL CAMPO DEI SISTEMI POLIMERICI: NUOVE FUNZIONALITA' E SOSTENIBILITA' AMBIENTALE

M. P. Luda, F. Trotta, M. Zanetti, P. Bracco, V. Brunella, D. Scaralone, F. Caldera

Oltre alle molteplici applicazioni strutturali in cui i materiali polimerici eccellono in virtù di loro caratteristiche peculiari quali bassa densità ed elevate proprietà meccaniche, essi trovano ampio spazio di applicazione come materiali funzionali o smart materials. Le normative nazionali e comunitarie raccolgono istanze in tema di ambiente che impongono lo sviluppo di nuovi materiali ecocompatibili e riciclabili e nuovi processi ecosostenibili.

Ad esempio, polimeri di origine naturale possono essere iper reticolati con processi ecologicamente compatibili ottenendo sistemi dotati di particolari attività complessanti. In opportune condizioni è anche possibile, partendo dagli stessi materiali, ottenere sistemi carboniosi microporosi (Fig.1). Le applicazioni possibili spaziano dal settore ambientale a quello energetico, dal ritardo alla fiamma al rilascio controllato di farmaci.

Una innovazione nel campo degli adesivi a caldo "hot melt" è costituita dalla miscelazione di nanoparticelle di magnetite con sistemi poliolefinici; le particelle si riscaldano per induzione elettromagnetica ed il calore rilasciato è utilizzato per fondere il legante polimerico.

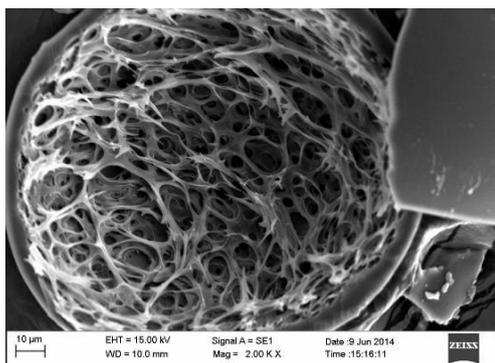


Fig. 1 Carboni microporosi da polimeri iper-reticolati

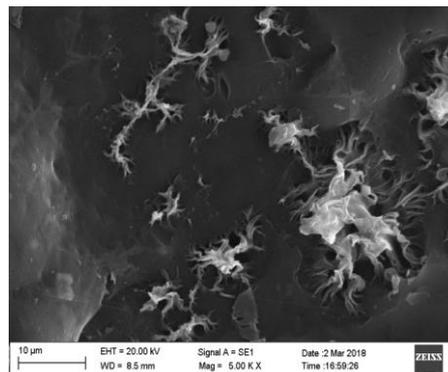


Fig. 2 Attacco fungino su PE in vitro

D'altra parte, uno dei principali problemi derivanti dall'uso estensivo di materiali polimerici di origine fossile è la loro sostanziale non biodegradabilità. Lo studio dell'interazione di microrganismi biologici con materiali polimerici di largo consumo è oggi di grande attualità. È stato recentemente verificato che alcuni ceppi fungini, opportunamente selezionati fra quelli sviluppatasi in una discarica dove erano depositi scarti di polietilene, sarebbero in grado di attaccarlo. Questa osservazione apre nuovi scenari sul fine vita del polietilene e di altri materiali polimerici.

Lo studio dei materiali polimerici richiede l'uso di tecniche particolari quali la Pirolisi/GC/MS (PY-GC-MS) che fornisce informazioni dettagliate sulla composizione di sistemi polimerici complessi, quali leganti in pitture e vernici, e sulla loro reattività e stabilità termica.

(mariapaola.luda@unito.it; francesco.trotta@unito.it; marco.zanetti@unito.it; pierangiola.bracco@unito.it; valentina.brunella@unito.it; dominique.scalarone@unito.it; fabrizio.caldera@unito.it)

NOTE QUARTO INTERVENTO

MATERIALI CATALITICI PER I PROCESSI E PER I PRODOTTI

G. Berlier, F. Bonino, S. Bordiga, P. Calza, G. Cerrato, M. Chiesa, E. Groppo, E. Laurenti, G. Magnacca, G. Martra, V. Maurino, L. Mino, S. Morandi, G. Ricchiardi, G. Spoto, P. Ugliengo

La catalisi è attualmente riconosciuta come 'la tecnologia interdisciplinare più importante e pervasiva nell'industria chimica'. La sua importanza si estende dai processi catalitici e fotocatalitici per l'abbattimento di inquinanti (catalizzatori 'de-NO_x' e 'three-way' per il settore automotive e stazionario, trattamento delle acque, ecc.) a quelli dell'industria petrolchimica e delle polimerizzazioni, passando per i processi per la chimica fine e delle ossidazioni selettive, con una sempre maggiore attenzione alla sostenibilità ed alla transizione dai combustibili fossili alle fonti di molecole ed energetiche alternative, anche ispirandosi a processi naturali.

In questo contesto, molte delle attività di ricerca svolte presso il Dipartimento, spesso in collaborazione con industrie, riguardano i materiali utilizzati come catalizzatori in processi eterogenei (solido/gas o solido/liquido). Le attività sono molteplici, a partire dalla sintesi e ottimizzazione dei materiali, con particolare attenzione alla loro caratterizzazione chimico-fisica (morfologia, proprietà tessiturali quali area superficiale specifica e porosità, struttura e superficie). Tale attività comprende approcci innovativi e all'avanguardia (metodi *in situ* e *operando* per lo studio dei siti attivi e loro interazione con reagenti in condizioni di reazione, tecniche avanzate come la Spettroscopia di Risonanza Paramagnetica Elettronica Pulsata o la simulazione molecolare) con un approccio 'rational design'. Tale approccio implica una comprensione del catalizzatore a partire dalla scala macro- fino alla scala molecolare (Figura 1), per correlare tali proprietà alle performances del catalizzatore (attività, selettività, stabilità alla disattivazione, ecc.), con il fine ultimo di ottimizzare il processo (Figura 2).

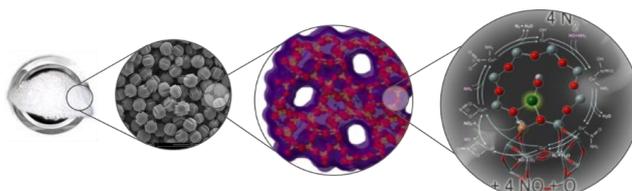


Figura 1. Studio del funzionamento del catalizzatore dalla scala macro- a quella molecolare

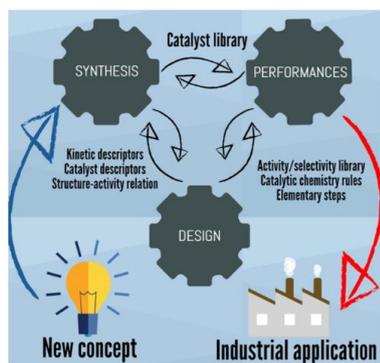


Figura 2. Approccio 'rational design'

I materiali studiati appartengono a varie classi, prevalentemente a base ossidica, ma anche sistemi ibridi per la biocatalisi (enzimi stabilizzati su ossidi o altre matrici). Si tratta quindi di materiali porosi (zeoliti o silici mesoporose) caratterizzati dalla presenza di siti acidi di Brønsted o più spesso ioni di metalli di transizione, nanoparticelle metalliche supportate (anche su carboni porosi, polimeri, o cloruri), ossidi isolanti (ad es. SiO₂, Al₂O₃) e semiconduttori (ad es. TiO₂ a diversa morfologia).

Tra le aziende coinvolte citiamo Biopolis (S), Bruker (D), Chimet (I), Evonik (D), INN (G), Lyodell-Basell (I), SABIC (NL), Umicore (DK)

(gloria.berlier@unito.it, francesca.bonino@unito.it, silvia.bordiga@unito.it, paola.calza@unito.it, mario.chiesa@unito.it, elena.groppo@unito.it, enzo.laurenti@unito.it, giuliana.magnacca@unito.it, gianmario.martra@unito.it, valter.maurino@unito.it, lorenzo.mino@unito.it, sara.morandi@unito.it, gabriele.ricchiardi@unito.it, giuseppe.spoto@unito.it, piero.ugliengo@unito.it)

NOTE QUINTO INTERVENTO

MATERIALI MULTIFUNZIONALI A BASE CARBONIO: POTENZIALITA' E PROSPETTIVE

L.Anfossi, A.Damin, I.Fenoglio, E.Giamello, E.Groppo, S.Livraghi, G.Magnacca, M. Minella, C.Minero, D.Scarano, G.Ricchiardi, G.Spoto, M.Zanetti

Materiali multifunzionali a base carbonio, (allotropi del carbonio, carburi, materiali magnetici, ibridi organici-inorganici, compositi ecc..) realizzati mediante approcci bottom-up, top-down o misti combinano nanostrutture e nanofasi differenti a formare architetture ibride o composite, con potenzialità in parte ancora da esplorare. In particolare, sistemi di differente dimensionalità, come nanotubi di carbonio, fullereni, grafeni, carboni attivi, aerogeli hanno destato interesse per proprietà quali elevata conducibilità elettrica e termica, biocompatibilità, stabilità meccanica e termica, per molteplici applicazioni nei campi della catalisi e fotocatalisi, del fotovoltaico, della sensoristica e biosensoristica, elettrochimica, della biomedicina, come materiali adsorbenti o magnetici.

Fra le diverse tematiche relative ai materiali a base carbonio sono oggetto di studio:

- 1) Carboni di origine naturale e di sintesi, attivati ad alta temperatura in presenza di vapore e/o agenti chimici e con area superficiale superiore a $1000 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$, usati come supporti di catalizzatori a base di nanoparticelle metalliche.
- 2) Carboni magnetici ad elevata area superficiale ottenuti da materiali di scarto e da polimeri per l'adsorbimento di inquinanti da matrici acquose o da terreni.
- 3) Nanoparticelle di nitruro di carbonio (Carbon Nitride Nano Particles, CNNPs) da composti organici azotati a basso costo, funzionalizzate con gruppi amminici primari, per la quantificazione selettiva di biocomposti a concentrazioni nanomolari, come sensori e materiali innovativi fluorescenti.
- 4) Nanoparticelle di carbonio elementare per terapie antitumorali fotodinamiche e fototermiche.

Nuove prospettive nascono quando nanostrutture a base carbonio sono confinate come nanocluster/nanoparticelle in altre fasi (polimeri) a formare compositi, o combinate con altri sistemi (ossidi, solfuri ecc.) a formare eterostrutture ibride o in forma di film sottili ancorati alla superficie.

In questi ambiti nel Dipartimento sono oggetti di studio:

- 1) Compositi CNTs (nanotubi di C), CNFs (nanofibre di C), GNPs (nanopiattine di grafite)/polimeri per applicazioni elettriche, piezoresistive.
- 2) Ibridi C/SnO₂, core-shell e interfacce C/TiO₂, MWCNTs/TiO₂ per applicazioni sensoristiche, magnetiche, fotocatalitiche e conversione della energia.
- 3) Strutture ibride a base grafene/TiO₂/MoS₂ e (GO,rGO)/MoS₂ per applicazioni fotocatalitiche e fotovoltaiche.

E' ormai noto che la progettazione di strutture ad elevata complessità apre nuove prospettive per nuove ed impreviste multifunzionalità, che derivano non solo dalle specifiche proprietà di ciascun componente, ma da effetti sinergici legati alle interazioni interfase.

(laura.anfossi@unito.it, alessandro.damin@unito.it, ivana.fenoglio@unito.it, elio.giamello@unito.it, elena.groppo@unito.it, stefano.livraghi@unito.it, giuliana.magnacca@unito.it, marco.minella@unito.it, claudio.minero@unito.it, domenica.scarano@unito.it, gabriele.ricchiardi@unito.it, giuseppe.spoto@unito.it, marco.zanetti@unito.it)

NOTE SESTO INTERVENTO

L'INTERAZIONE RICERCATORI/AZIENDE: CASI STUDIO NEL DIPARTIMENTO DI CHIMICA

C.Barolo, A.Bianco Prevot, P.Bracco, V.Brunella, R.Buscaino, F.Caldera, M.P.Luda, G.Martra, V.Maurino, M.Pazzi, P.Quagliotto, G.Ricchiardi, D.Scalarone, F.Sordello, F.Trotta, F.Turci, G.Viscardi, M.Zanetti

Molte sono le interazioni che si sono instaurate negli anni fra il Dipartimento di Chimica e aziende non solo del territorio piemontese ma anche su scala nazionale e internazionale. In questo intervento vengono presentati quattro casi studio che esemplificano queste interazioni, mostrando come la ricerca possa essere in alcuni casi fondamentale per l'ottimizzazione, lo sviluppo e il controllo di processi industriali ad alto contenuto tecnologico.

Il gruppo Materiali Polimerici del Dipartimento di Chimica porta avanti da anni diversi filoni di ricerca, molti dei quali legati a industrie, sia di piccola e media dimensione sia grandi industrie. Le collaborazioni industriali sono nate e si sono sviluppate al fine di studiare materiali polimerici innovativi e/o al fine di caratterizzare i materiali polimerici utilizzati a livello industriale e/o al fine di trovare nuovi processi di riciclo a fine vita.

ITT Motion Technologies produce pastiglie per freni e materiali di attrito per il trasporto pubblico e privato. Barge, nella provincia cuneese, ospita il maggiore centro di ricerca e sviluppo. Nel corso degli anni ITT ha collaborato con i dipartimenti di Chimica, Fisica, Scienze della Terra e Management e con il Centro Interdipartimentale "G. Scansetti" dell'Università di Torino. L'entità della collaborazione e la sua prossima estensione ad altri dipartimenti hanno portato alla concezione di un "joint lab" tra UniTO e ITT.

Negli ultimi anni il settore del packaging farmaceutico in vetro ha dovuto fronteggiare una crescente attenzione ai fenomeni di corrosione del vetro da parte di farmaci. La collaborazione con Soffieria Bertolini ha lo scopo di studiare l'interazione tra le formulazioni farmaceutiche e differenti tipologie di vetro per la produzione di contenitori più resistenti e sicuri. Le tecniche principalmente utilizzate sono quelle analitiche e di microscopia. La collaborazione si è gradualmente sviluppata fino ad includere assistenza scientifica in tutti gli aspetti aziendali, dall'analisi delle materie prime alle indagini su problemi sollevati dai clienti.

Il gruppo Materiali Organici Funzionali (MOF) ha riconosciuta esperienza nella sintesi, purificazione e caratterizzazione di materiali organici ed ibridi, in special modo per quanto riguarda il campo dei materiali con proprietà ottiche, di trasporto elettronico e di tipo tensioattivo. Da anni collabora con aziende nella caratterizzazione (spettroscopica e superficiale) o nella messa a punto di prodotti innovativi (sintesi, purificazioni, formulazioni). L'ottimizzazione di processi e prodotti è spesso accompagnata dall'utilizzo del Disegno Sperimentale. In questo contributo saranno evidenziati laboratori, strumenti e competenze che possono essere messe al servizio delle aziende.

(claudia.barolo@unito.it, alessandra.biancoprevot@unito.it, pierangiola.bracco@unito.it, valentina.brunella@unito.it, roberto.buscaino@unito.it, fabrizio.caldera@unito.it, mariapaola.luda@unito.it, gianmario.martra@unito.it, valter.maurino@unito.it, marco.pazzi@unito.it, pierluigi.quagliotto@unito.it, gabriele.ricchiardi@unito.it, dominique.scalarone@unito.it, fabrizio.sordello@unito.it, francesco.trotta@unito.it, francesco.turci@unito.it, guido.viscardi@unito.it, marco.zanetti@unito.it)

NOTE SETTIMO INTERVENTO

NMR ALLO STATO SOLIDO: ANALISI DI MATERIALI DI INTERESSE INDUSTRIALE

M. R. Chierotti, R. Gobetto, C. Nervi, C. Garino

La risonanza magnetica nucleare (NMR) allo stato solido è una potente tecnica di indagine che può essere utilizzata nello studio di diversi materiali di interesse industriale. Grazie al suo approccio multinucleare (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P , ^{29}Si , ^{23}Al ...) e multiparametrico (chemical shift, tempi di rilassamento, interazione dipolare...) permette un'analisi sito specifica che non richiede campioni con ordine a lungo raggio. In questo senso la tecnica è complementare alla diffrazione di raggi X anche perchè può fornire non solo informazioni strutturali ma anche informazioni su eventuali processi dinamici presenti all'interno del sistema. Allo stesso tempo fornisce un'indagine di bulk che la rende complementaria anche a tutte le tecniche di superficie.

In questo contributo verranno presentate alcune applicazioni della tecnica sviluppate nel Dipartimento di Chimica su diversi tipi di materiale di interesse industriale: da polimeri organici porosi e materiali per l'energia ai materiali molecolari cristallini di interesse farmaceutico.

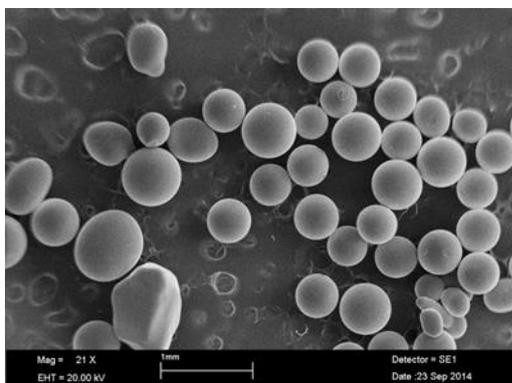
In particolare verranno messe in risalto le potenzialità nella caratterizzazione strutturale e nello studio di fenomeni dinamici, i vantaggi dell'approccio multinucleare e gli aspetti quantitativi.

(michele.chierotti@unito.it; roberto.gobetto@unito.it; carlo.nervi@unito.it; claudio.garino@unito.it)

NOTE OTTAVO INTERVENTO

LE MICROSCOPIE ELETTRONICHE APPLICATE A PROBLEMATICHE INDUSTRIALI

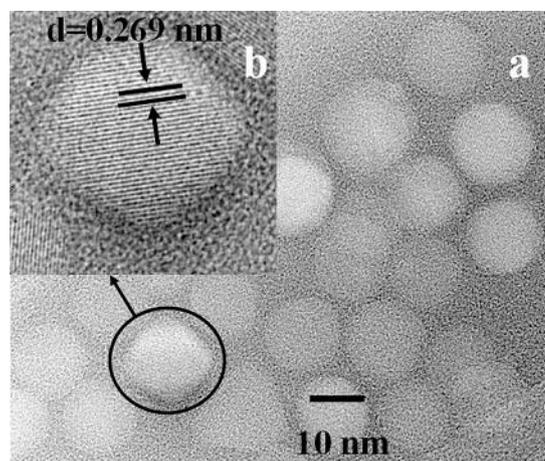
M.C.Valsania



Il laboratorio di microscopia del Dipartimento di Chimica comprende strumentazioni differenti nel campo della microscopia da quella ottica a quella elettronica a scansione (SEM) ed in trasmissione (TEM), queste ultime abbinate all'analisi della composizione chimica dei particolari osservati (EDS). Queste strumentazioni possono essere utilizzate per l'analisi di svariati materiali che vanno dai metalli ai polimeri ai ceramici agli ossidi.

Le analisi possono fornire informazioni morfologiche, composizionali, microstrutturali e strutturali dalla scala dei millimetri a quella dei nanometri, costituendo quindi un valido supporto sia per la ricerca nel campo dei materiali sia per analisi più strettamente di routine come quelle necessarie per il controllo di qualità di materiali commerciali anche ad elevato contenuto tecnologico. In questo contesto quindi, il Centro di microscopia può rappresentare un valido supporto al servizio delle industrie sia per le produzioni di materiali e componenti già consolidate sia per quelle più innovative.

Il laboratorio di microscopia si doterà nel 2019 di un nuovo FESEM (Field Emission Scanning Electron Microscope) dotato di fascio ionico a ioni Ga, EDS, EBSD (Electron Backscattered Diffraction) e SIMS (Secondary-Ion Mass Spectrometry). Con il nuovo strumento sarà possibile effettuare analisi in ultra-alta risoluzione, anche in sezione di campioni grazie al fascio FIB. Inoltre, tramite EBSD si potrà analizzare l'orientamento cristallografico di materiali cristallini, evidenziando orientazioni preferenziali dovute a tecniche produttive.



SESSIONE POSTER

ORO NANOPOROSO MODIFICATO PER LA REAZIONE DI EVOLUZIONE DI IDROGENO

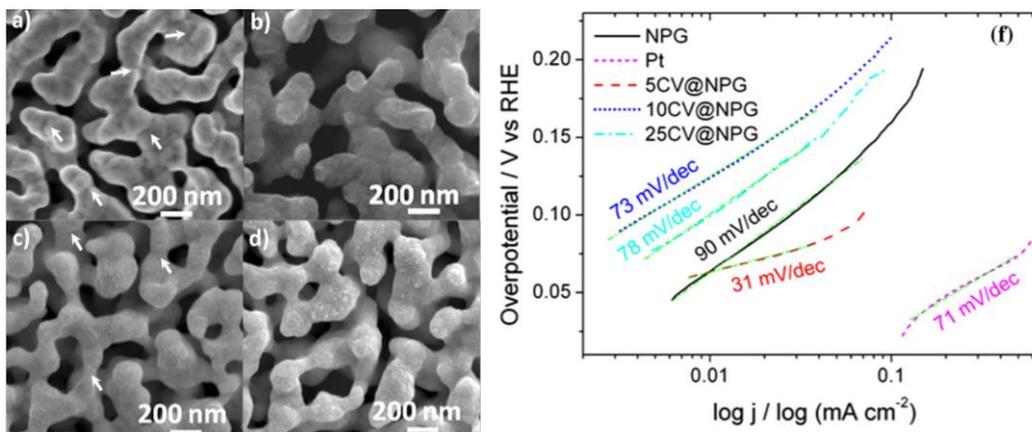
F. Scaglione, P. Rizzi, L. Battezzati

Un nuovo catalizzatore per lo splitting dell'acqua è stato preparato mediante deposizione di MoS₂ amorfo con voltammetria ciclica (CV) su oro nanoporoso (NPG) ottenuto tramite de-alligazione elettrochimica di un precursore amorfo, Au₄₀Cu₂₈Ag₇Pd₅Si₂₀ (at.%).

In funzione del numero di cicli, i legamenti di oro sono progressivamente incapsulati da uno sottile strato di MoS₂ amorfo, catalizzatore per la reazione di evoluzione di idrogeno. NPG si dimostra un ottimo substrato per l'elettrodeposizione di questo composto attivo, avendo buona resistenza meccanica, ottime proprietà catalitiche in aggiunta ad elevate proprietà di conducibilità ed area superficiale.

Dallo studio delle curve LSV (linear sweep voltammetry) per elevati numeri di cicli, si è potuto studiare le proprietà catalitiche di questo elettrodo composito, ottenendo bassi valori di pendenza Tafel e buone correnti di scambio.

L'effetto sinergico tra NPG ed MoS₂ amorfo conferisce a questo materiale a multi-componenti alta efficienza per la catalisi dell'idrogeno. I dati elettrochimici raccolti dimostrano come i campioni ottenuti, possano trovare impiego per la sostituzione dei convenzionali catalizzatori di platino per la reazione di evoluzione di idrogeno (HER) in ambiente acido.



Immagini SEM dei campioni prima e dopo 1000 cicli di HER. a), b) NPG; c), d) 5CV@NPG;

f) Pendenza Tafel per i campioni dopo 1000 cicli HER.

(federico.scaglione@unito.it; paola.rizzi@unito.it; livio.battezzati@unito.it)

MATERIALI IBRIDI PER LA RIMOZIONE DI INQUINANTI DALLE ACQUE URBANE ED INDUSTRIALI

E. Laurenti, P. Calza, G. Magnacca, M.C. Paganini

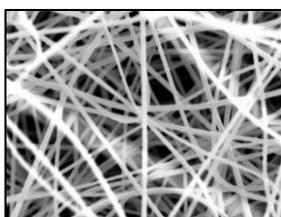
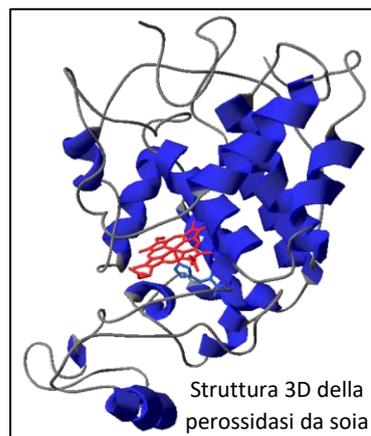
Per la depurazione delle acque urbane ed industriali si utilizzano attualmente varie tecnologie combinate allo scopo di ottenere la degradazione delle sostanze inquinanti. I metodi più usati sono processi di tipo fermentativo, operati mediante microorganismi opportunamente selezionati, e trattamenti chimico-fisici scelti in base alla tipologia di inquinanti da trattare. Nuove sostanze vengono però continuamente prodotte e immesse sul mercato con proprietà di stabilità e di resistenza che le rendono più difficili da degradare con i metodi tradizionali. Ad esempio, nuovi farmaci e nuovi prodotti per la cura della persona vengono realizzati con queste caratteristiche ed una parte dei loro principi attivi finisce nelle acque di scarico, ma non viene poi degradata negli impianti di depurazione delle acque urbane.

Per risolvere efficacemente questi problemi sono allo studio nuovi metodi e nuovi materiali. Una delle linee di ricerca sviluppate nel Dipartimento di Chimica va in questa direzione, sfruttando le diverse competenze nel campo della sintesi dei materiali, della fotocatalisi e della catalisi enzimatica per realizzare nuovi materiali ibridi in cui le varie proprietà confluiscono e rendono l'insieme più efficiente delle parti che lo compongono.

I più interessanti tra i vari materiali sino a qui prodotti sono basati sullo sfruttamento della capacità dell'enzima perossidasi, estratto dalla buccia dei semi di soia, di catalizzare la degradazione ossidativa

di molte sostanze ad opera del perossido di idrogeno. Per il possibile sfruttamento di queste proprietà l'enzima è stato dapprima immobilizzato su vari supporti solidi (granuli o monoliti di silice, film e fibre polimeriche) e poi utilizzato in presenza di ossidi fotocatalitici in grado di produrre specie reattive che, da un lato, generano il perossido necessario per l'azione enzimatica e dall'altro attaccano le sostanze inquinanti e contribuiscono alla loro degradazione.

Questi materiali sono stati sinora testati con successo nella degradazione di coloranti organici (remazol blue, orange e methylorange), fenoli variamente sostituiti (policlorofenoli, bisfenolo A) e principi attivi di farmaci (carbamazepina, naproxene, diclofenac). In tutti questi casi l'azione dei materiali ibridi è risultata più rapida ed efficiente rispetto all'azione dell'enzima e dei fotocatalizzatori presi separatamente.



Esempi di materiali ibridi

VISIBILITA' DELLE IMPRONTE DIGITALI SU SUPERFICI PLASTICHE

M. P Luda

La deposizione di impronte digitali su visori e schermi oltre ad inficiarne le proprietà estetiche crea spesso difficoltà di lettura ed interpretazione del dato ivi rappresentato.



Per ottenere superfici con proprietà anti-impronta digitale l'approccio generalmente impiegato è quello di realizzare superfici "easy-to-clean", con energia superficiale tale per cui il materiale lasciato con l'impronta scorra via facilmente dalla superficie. Questo approccio non sempre si è rivelato di successo in campo industriale anche per la varietà e complessità delle impronte digitali. Un approccio alternativo è quello di realizzare superfici in cui l'impronta depositata non sia visibile per effetto di fenomeni ottici di diffusione e riflessione. In questo lavoro si sono determinate le principali proprietà ottiche (Haze, luminanza, riflettanza) chimiche e di superficie (rugosità, angolo di contatto) di superfici realizzate con diverse tecnologie industriali (In Mould Decoration, In Mould Labeling, Painted) definendo quelle che principalmente giocano un ruolo nei fenomeni di "inganno ottico". Tali proprietà sono state misurate sulla superficie pulita e dopo aver depositato su di esse una impronta digitale artificiale realizzata in condizioni standard e riproducibili.

In questo modo è possibile ottenere una classificazione oggettiva delle proprietà anti-impronta digitale delle varie superfici e definire per ogni proprietà dei valori di cut-off da rispettare per ottenere l'effetto voluto. Questo approccio suggerisce anche delle linee guida per la realizzazione di superfici con queste proprietà.

Progetto in collaborazione con A. Li Pira, D. Trevisan, V. Pau, GML, C.R.F. S.C.p.A

(mariapaola.luda@unito.it)

COMPORAMENTO ALLA COMBUSTIONE DI NANOCOMPOSITI A BASE DI PA12 CONTENENTI NANOTUBI DI CARBONIO E POSS

M. Zanetti

Nell'industria dei polimeri vi è una crescente domanda di ritardanti di fiamma (FR) più efficienti ed ecologicamente compatibili di quelli attualmente disponibili su scala commerciale. Durante la combustione, molti dei ritardanti di fiamma di comune utilizzo, generalmente contenenti alogeni, possono creare problemi d'impatto ambientale. I sistemi finora sviluppati per sostituire i prodotti alogenati (idrossidi inorganici, sistemi ad intumescente) si sono dimostrati efficienti ma a scapito delle proprietà meccaniche del materiale polimerico.

In questo studio sono state analizzate l'infiammabilità e le proprietà termiche di un nanocomposito a matrice poliammidica (PA12) in cui sono stati dispersi nanotubi di carbonio a parete multipla (MWCNT) e un silsesquiosano oligomero poliedrico (POSS). Gli esperimenti di combustione, eseguiti al Cono Calorimetro, mostrano un effetto sinergico tra MWCNT e POSS atto a ridurre la combustibilità della PA12. L'effetto di ritardo alla fiamma è stato altresì valutato con prove di combustione UL-94 e di Indice di Ossigeno.

Progetto in collaborazione con A. Veca, Centro Ricerche Fiat S.C.p.A.

[\(marco.zanetti@unito.it\)](mailto:marco.zanetti@unito.it)

SVILUPPO DI NUOVE LEGHE DI AL STUDIAE APPOSITAMENTE PER LA MANIFATTURA ADDITIVA

L. Battezzati

La possibilità di produrre oggetti metallici di forme complesse attraverso la manifattura additiva (Additive Manufacturing, AM) sta ricevendo attenzioni crescenti da numerosi campi industriali ed in particolare di quelli automotive e aerospaziale. Tuttavia, ad oggi i materiali a disposizione per la produzione additiva sono limitati.

Qui viene presentata una procedura sperimentale alternativa per testare nuove leghe che potrebbero essere sfruttate nel campo dell'AM.

L'idea principale per la validazione di nuove leghe è quella di testare come le composizioni selezionate reagiscono quando sono sottoposte alla rapida solidificazione, per fare ciò campioni cristallini e amorfi sono stati prodotti tramite melt spinning (MS) (Figura 1) e caratterizzati. Le composizioni che dopo MS hanno fornito risultati interessanti sono state successivamente processate con la macchina da AM al fine di ottimizzare i parametri di processo in grado di portare ad una pozza fusa continua e stabile.

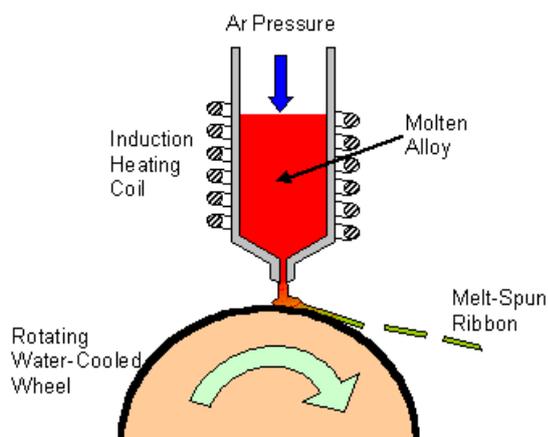


Figura 1 Esempio schematico di come funziona il melt spinning

Le leghe amorfe sono state considerate con l'idea di produrre solidi nanocristallini ad elevata resistenza sfruttando i differenti profili termici che insorgono durante il processo di fusione laser.

Al fine di stabilire se le leghe sono compatibili con il processo additivo e presentano caratteristiche migliori delle leghe attualmente in uso sono state eseguite caratterizzazioni microstrutturali, strutturali e termiche di tutti i nastri prodotti. Inoltre, la resistenza alla rapida solidificazione e la tendenza delle composizioni selezionate a criccare sono state valutate attraverso misure di nanoindentazione. Le leghe cristalline hanno mostrato risultati soddisfacenti in termini di durezza e

non hanno mostrato formazione di cricche dopo la rapida solidificazione, al contrario le leghe amorfe delle composizioni selezionate sono risultate troppo fragili per essere utilizzate nel campo della manifattura additiva.

Lavoro di dottorato svolto da Silvia Marola in collaborazione con D. Manfredi dell'Istituto Italiano di Tecnologia (Torino), P. Konda Gokuldoss della Norwegian University of Science and Technology, (Gjøvik, Norway) e J. Eckert dell'Erich Schmid Institute of Materials Science (Leoben, Austria).

(livio.battezzati@unito.it)

STUDIO DI CATALIZZATORI PER L'ABBATTIMENTO DEGLI NO_x DA FONTI MOBILI

G. Berlier, S. Bordiga, S. Morandi

NO_x è un termine generico per indicare gli ossidi di azoto NO e NO₂. Tali sostanze sono prodotte durante la combustione in aria ad alta temperatura, sia da fonti fisse (processi industriali ed impianti di riscaldamento) sia da fonti mobili (mezzi di trasporto), e rappresentano un grave rischio per la salute. Per quanto riguarda il settore automotive, a differenza di quel che succede nei sistemi di trattamento dei gas esausti per i motori a benzina, l'abbattimento di NO_x da motori diesel rappresenta un problema tecnologico. Ciò è dovuto alla natura ossidante della miscela utilizzata (miscela 'magra' e.g. alto rapporto aria/combustibile) che non permette la riduzione diretta degli NO_x a N₂ e H₂O. Risultati significativi sono stati recentemente ottenuti mediante due differenti metodologie, basate su nanomateriali: la riduzione selettiva catalitica con ammoniaca (NH₃-SCR) e l'accumulo e riduzione degli NO_x (NSR).

Per quel che riguarda il processo NH₃-SCR sono studiate zeoliti scambiate con ioni rame, con particolare attenzione alla struttura a pori piccoli chabazite (Cu-CHA, Figura 1) che mostra eccellente attività e stabilità alla disattivazione. L'attività di ricerca si basa prevalentemente sullo studio della natura (stato di ossidazione, struttura locale, distribuzione all'interno del reticolo) e reattività degli ioni rame utilizzando tecniche spettroscopiche in condizioni operando (UV-Vis, infrarosso, assorbimento di raggi X con luce di sincrotrone), con il supporto del calcolo teorico (DFT) e di dati sull'attività catalitica, al fine di definire relazioni struttura-proprietà ed evidenziare i parametri necessari all'ottimizzazione del catalizzatore.

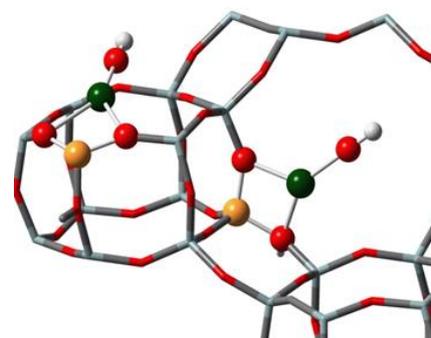


Figura 1. Cavità di zeolite CHA con ioni Cu(OH)⁺ come controioni.

I catalizzatori NSR sono generalmente costituiti da platino e da un metallo alcalino o alcalino-terroso (presente come ossido) supportati su una γ -allumina ad elevata area superficiale. L'attività del catalizzatore si esplica in due stadi (Figura 2): (i) durante il normale funzionamento del motore (fase magra), il catalizzatore accumula gli NO_x come nitrati sulla superficie dell'ossido del metallo alcalino o alcalino terroso; (ii) per ripristinare la capacità di accumulo, si passa ad una breve fase ricca per mezzo dell'immissione di un pulso di carburante che riduce gli NO_x accumulati ad N₂ grazie all'intervento catalitico del platino. Per mettere in luce i cammini di reazione e le proprietà del sistema, sono stati condotti studi combinati per caratterizzare sia la fase gas con misure in microreattore, sia la natura delle specie adsorbite mediante spettroscopia IR in situ ed in condizioni *operando*.

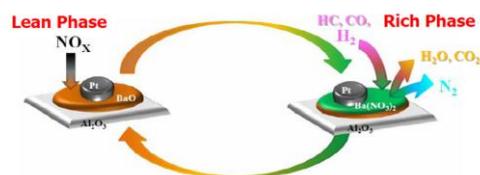


Figure 2. Ciclo di funzionamento di un catalizzatore NSR.

Progetto in collaborazione con: Umicore Denmark ApS

Il lavoro è stato svolto nell'ambito della tesi di dottorato di C. Negri.

(gloria.berlier@unito.it; sara.morandi@unito.it; silvia.bordiga@unito.it)

“SMART MATERIALS” PER LA CONVERSIONE TERMoeLETTRICA DI CALORE DISPERSO: MODELLIZZAZIONE AB-INITIO, SINTESI E APPLICAZIONI

A. Castellero, L. Maschio, N. Barbero, C. Barolo, M. Baricco

Nel Dipartimento di Chimica le attività di ricerca sulla tecnologia termoelettrica sono sviluppate con un approccio multidisciplinare che va dalla modellizzazione delle proprietà di trasporto dei materiali, allo sviluppo di processi metallurgici scalabili a livello industriale, all'integrazione dei materiali in dispositivi termoelettrici.

Mediante metodi ab-initio è possibile calcolare in modo accurato le proprietà di trasporto dei materiali termoelettrici. Questo approccio permette, da un lato, di modellizzare e ottimizzare le proprietà di materiali già esistenti mediante drogaggio o sostituzione isoelettronica di atomi, e dall'altro, di prevedere le proprietà di nuovi materiali che non sono mai stati sintetizzati.

Le proprietà dei materiali dipendono in maniera significativa dai processi impiegati per la loro produzione. Processi metallurgici tradizionali (fusione ad arco seguita da ricottura) conducono alla sintesi di materiali vicino all'equilibrio termodinamico, le cui proprietà sono confrontabili a quelle calcolate ab-initio. Tuttavia, l'utilizzo di tecniche di non equilibrio (quali la macinazione di polveri o la rapida solidificazione) può condurre alla formazione di fasi metastabili (amorfe, soluzioni solide sovrasature) con proprietà termoelettriche migliorate grazie al disaccoppiamento della conducibilità elettronica da quella fononica.

L'utilizzo dei materiali termoelettrici passa attraverso l'integrazione in dispositivi in grado di convertire un gradiente di temperatura in corrente elettrica. Un'applicazione oggetto di studio è l'integrazione di celle fotovoltaiche con dispositivi termoelettrici flessibili che massimizzino il rapporto potenza/peso. La realizzazione di sistemi incapsulanti polimerici garantisce flessibilità al sistema e permette l'inserimento di adeguati sistemi filtranti delle radiazioni dannose per i dispositivi.

(alberto.castellero@unito.it; lorenzo.maschio@unito.it; nadia.barbero@unito.it;
claudia.barolo@unito.it; marcello.baricco@unito.it)

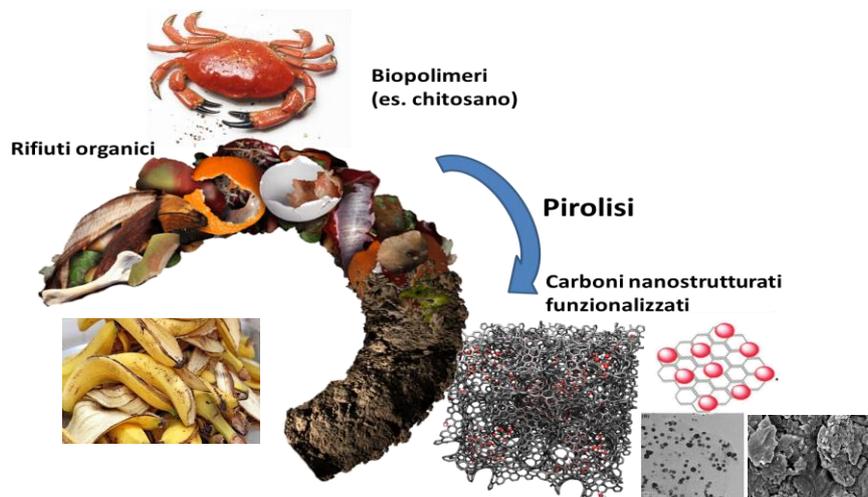
MATERIALI DI SCARTO COME FONTE DI MATERIE PRIME

G. Magnacca, P. Benzi, D. Scarano

Il termine Biochar individua materiali ricchi di carbonio ottenuti da biomasse trattate a temperature non superiori ai 700°C in assenza o scarsità di aria. A questa famiglia di materiali appartengono i materiali carboniosi ottenuti da fonti rinnovabili quali: scarti di attività agricole (ottenuti per esempio dalle potature delle piante) e dell'industria alimentare (gusci di crostacei ricchi di chitina, bucce di banane, di patate e simili ricchi di polisaccaridi e cellulosa), e la frazione umida dei rifiuti solidi urbani (raccolta separatamente dal resto dei rifiuti grazie all'introduzione della raccolta differenziata) dopo compostaggio e separazione della materia umica. Tutte queste sostanze possono essere sfruttate come materie prime a costo estremamente limitato per ottenere materiali carboniosi le cui caratteristiche di idrofilicità/idrofobicità possono essere modulate grazie alla scelta della temperatura di pirolisi e, conseguentemente, alla quantità di gruppi funzionali lasciati sulla superficie dei materiali in seguito al trattamento termico. I char così ottenuti possono essere sfruttati per la cattura degli inquinanti organici ed inorganici presenti in matrici acquose e/o terreni.

Le stesse materie prime possono essere sfruttate per funzionalizzare particelle magnetiche a base di magnetite che per pirolisi possono produrre ferro-zero-valente altamente magnetico ed in grado di rendere magnetici i biochar prodotti: in tal modo la semplice applicazione di un campo magnetico rende molto rapido il recupero dei materiali dopo il loro utilizzo.

Gli autori ringraziano il dott. Federico Cesano per il suo valido contributo allo svolgimento di questo lavoro.



Progetto in collaborazione con R. Nisticò (DISAT, Politecnico di Torino), L.Carlos e M.E. Parolo (Comahue University, Neuquen, Argentina), E. Ben Khalifa (Treatment and Water Desalination Research Unit and Health and Occupational Environment Research Unit –Tunisian Occupational Safety and Health Institute, Tunisia)

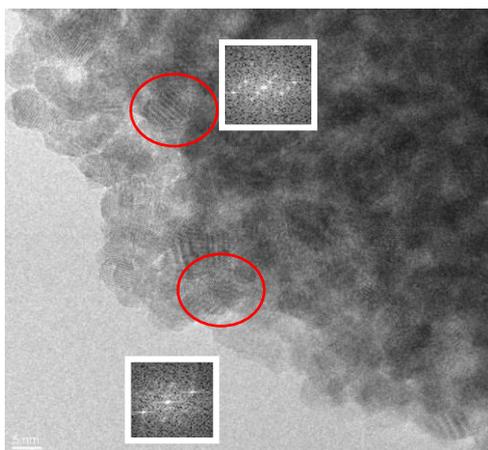
(giuliana.magnacca@unito.it; paola.benzi@unito.it; domenica.scarano@unito.it)

CATALIZZATORI SOLIDI ACIDI PER LA VALORIZZAZIONE DELLE BIOMASSE LOGNO-CELLULOSICHE

G. Cerrato, E. Bonometti, E. Diana, L. Operti

Il diossido di zirconio, o zirconia (ZrO_2), è stato ampiamente utilizzato per molte applicazioni tecnologiche, a causa delle sue interessanti proprietà fisiche e chimiche [Joo, J., Am. Chem. Soc. 2003, 125, 6553]. La sua sintesi assistita da microonde può aiutare a superare gli svantaggi delle comuni tecniche di sintesi riducendo i tempi di reazione, migliorando la resa e guidando la preparazione di una fase metastabile a basse temperature, quale la fase tetragonale, riducendo pertanto i costi e l'impatto ambientale.

Ecco pertanto la procedura, rapida e "green" per ottenere la zirconia con questa metodologia: sintesi sol-gel assistita da microonde, seguita da calcinazione, anch'essa assistita da microonde. Il prodotto ottenuto è ZrO_2 in fase tetragonale [Kitchen, H., Chem. Rev. 2014, 114, 1170], come confermato da diverse tecniche sperimentali di caratterizzazione. La morfologia è stata studiata mediante HR-TEM, che ha evidenziato piccole particelle sferiche con una distribuzione omogenea della forma e della dimensione (vedi figura).



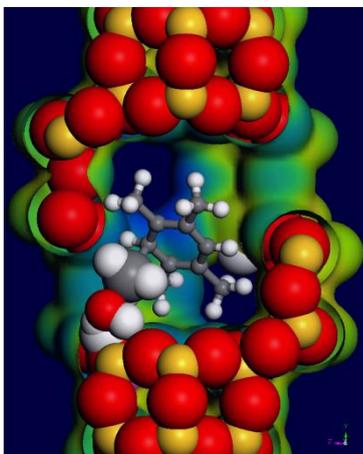
La zirconia ha guadagnato interesse sia come catalizzatore tal quale sia qualora sia promosso con solfati e/o ioni metallici (Au, Ni, etc.), grazie alla sua stabilità termica, alla contemporanea presenza di siti acidi e basici di diversa forza ed alla sua stabilità in atmosfere ossidanti e riducenti. La zirconia può agire come catalizzatore di idrogenazione, mentre la zirconia promossa con solfati mostra un'elevata attività catalitica nelle reazioni di isomerizzazione e esterificazione degli alcani. Inoltre, la ZrO_2 è un interessante catalizzatore per reazioni legate alle biomasse, in particolare nella trasformazione, in vari passaggi, della stessa in prodotti di chimica fine e nella produzione di biodiesel.

Il presente lavoro rappresenta il tema principale della tesi di dottorato della dott.ssa Alessia Giordana.

(giuseppina.cerrato@unito.it; elisabetta.bonometti@unito.it; eliano.diana@unito.it; lorenza.operti@unito.it)

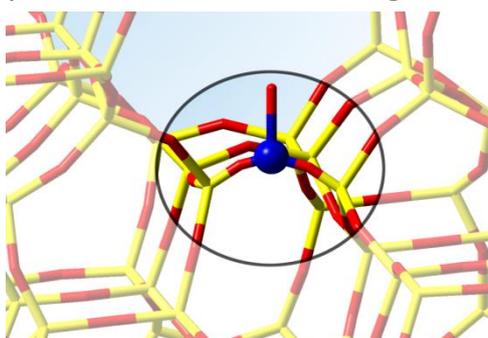
NANOREATTORI PER UNA CATALISI SELETTIVA

S. Bordiga, F. Bonino, G. Berlier



Le zeoliti sono materiali cristallini di origine sia naturale che di sintesi, caratterizzati da un'organizzazione di cavità e canali delle dimensioni delle molecole. Questa è una delle ragioni per cui, negli ultimi 60 anni, si sono affermate come materiali per la catalisi selettiva. Si tratta di allumino silicati, materiali molto diffusi in natura e quindi la struttura di base è in genere poco costosa e può essere prodotta su larga scala. Il segreto di questi materiali è che, soprattutto in fase di sintesi, se ne possono guidare le caratteristiche strutturali (l'organizzazione e le dimensioni di cavità e canali) e la composizione (la presenza di siti acidi o redox) rendendoli dei catalizzatori estremamente selettivi ed attivi.

Le attività nel Dipartimento di Chimica su questo argomento hanno inizio alla fine degli anni 80 e da allora non si sono mai più arrestate, ampliando progressivamente gli ambiti di interesse e le potenzialità di attività, anche grazie al susseguirsi delle collaborazioni industriali. Eni, Topsøe, Evonik



La cavità di una zeolite e un centro attivo per la catalisi

e Umicore, sono le grandi aziende che, per alcuni aspetti delle attività svolte ed attualmente in atto, ci hanno accompagnato in questo percorso. Un ulteriore importante passaggio nel presente sviluppo delle ricerche, è stata la collaborazione con il gruppo di catalisi dell'Università di Oslo, attiva da oltre 15 anni.

Inizialmente, sono stati condotti studi spettroscopici di natura fondamentale (sfruttando le conoscenze chimico fisiche del gruppo) ma progressivamente, ampliando le competenze e le disponibilità strumentali del dipartimento (sia da un punto di vista sperimentale che teorico) e di grandi centri strumentali, come il sincrotrone di Grenoble e di Trieste, si sono affrontati studi sempre più complessi che ci permettono attualmente di studiare questi materiali anche in condizioni di reazione.



Set up sperimentale al Sincrotrone di Grenoble

Il più recente elemento di innovazione nelle attività di gruppo è rappresentato dall'avvio di attività di sintesi di nuovi materiali, intrapreso grazie all'iniziativa dei più giovani, che si stanno cimentando nella realizzazione di nuovi catalizzatori a struttura porosa gerarchica, cioè contenenti livelli multipli di porosità, per offrire materiali catalitici sempre più performanti.

Progetto in collaborazione con: EVONIK e Umicore Denmark ApS

Attività di sintesi sviluppata dalla Dott.ssa Valentina Crocellà (post-doc). Set up operando sviluppati dal Dott. Matteo Signorile (post doc) e Alessandro Damin (tecnico EP).

(gloria.berlier@unito.it; francesca.bonino@unito.it; silvia.bordiga@unito.it)

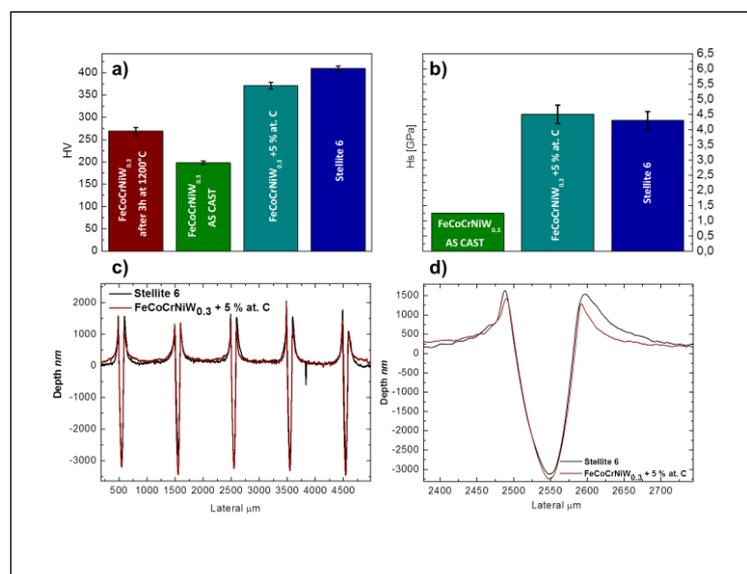
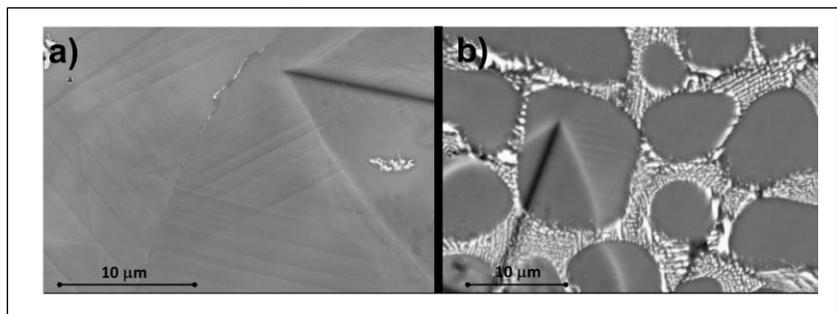
SVILUPPO DI NUOVE LEGHE AD ALTA ENTROPIA PER APPLICAZIONI DI RESISTENZA ALL'USURA: $\text{FeCoCrNiW}_0.3$ E $\text{FeCoCrNiW}_0.3 + 5 \text{ AT.}\% \text{ C}$

L. Battezzati, G. Fiore

Soluzioni solide multicomponenti contenenti elementi in quantità quasi equiatomica sono chiamate leghe ad alta entropia. Negli ultimi dieci anni questo tipo di leghe ha attirato una crescente attenzione sia per quanto riguarda gli studi fondamentali sui diagrammi di fase multicomponenti, sia per le ottime proprietà meccaniche dovute alla complessità delle leghe.

In questo lavoro, una nuova lega ad alta entropia è stata testata per le sue proprietà di resistenza all'usura. Usando un criterio sviluppato precedentemente per predire la composizione di leghe stabili ad alta entropia, il massimo contenuto di W che può essere aggiunto a un sistema quaternario FeCoNiCr è stato definito essere 7 at. %. La nuova lega $\text{FeCoCrNiW}_0.3$ all'equilibrio è quasi interamente costituita da una fase fcc. La presenza di una frazione minore del composto intermetallico Fe_7W_6 è dovuta a un eccesso di un 1% W non solubile nella matrice.

La soluzione solida che costituisce la lega possiede basse energie di stacking fault come suggerito dalla formazione di bordi di scorrimento intorno alle impronte di durezza Vickers. D'altra parte, la durezza è bassa per un materiale che dovrebbe essere usato per la resistenza all'usura. Per migliorare questa proprietà, è stato aggiunto in lega un 5 at. % C per ottenere carburi a base Cr e W- ad alta durezza omogeneamente distribuiti



all'interno della soluzione solida fcc.

Le proprietà della lega $\text{FeCoCrNiW}_0.3 + 5 \text{ at.}\% \text{ C}$ sono comparabili con le superleghe a base Co- in termini di durezza, scratch test (in figura) e resistenza all'ossidazione.

Questi risultati sono molto incoraggianti e porteranno a ulteriori ottimizzazioni della lega in vista di una possibile applicazione industriale, essendo la lega proposta competitiva dal punto di vista dei costi rispetto alla lega commerciale Stellite® 6 a causa della riduzione a 1/3 dei materiali costosi Co e W.

Progetto in collaborazione con Flavia Gili e D. Mangherini, CRF, Torino

(livio.battezzati@unito.it; gianluca.fiore@unito.it)

IL DISEGNO SPERIMENTALE: UN UTILE STRUMENTO A BASSO COSTO PER LO STUDIO E L'OTTIMIZZAZIONE DEI MATERIALI

C. Barolo, S. Berto, M. Malandrino, D. Vione

Il "Disegno Sperimentale" (traduzione letterale del termine inglese Experimental Design o Design of Experiments, DoE) è una tecnica statistica che permette di studiare e modellizzare un qualsiasi sistema o problema grazie ad un'opportuna pianificazione degli esperimenti. Grazie al DoE è possibile studiare ed ottimizzare materiali anche complessi considerando più variabili (fattori) contemporaneamente ed utilizzando il minimo numero di esperimenti significativi. In questo modo è possibile estrarre la massima informazione con la minima spesa di tempo, personale e materie prime. Infatti, si identificano in primo luogo i fattori che presentano una reale influenza sulle risposte misurate, e, in secondo luogo, si creano dei modelli empirici utili per l'interpretazione dei dati sperimentali.

L'adeguata pianificazione degli esperimenti all'interno dello spazio sperimentale individuato permette di variare tutti i fattori rilevanti simultaneamente e di correlare i risultati mediante un modello matematico, che può essere successivamente utilizzato per l'interpretazione, l'ottimizzazione e la predizione.

Nel Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino, questo approccio è impiegato sia in alcuni laboratori didattici (corso di Chemiometria e corso di Chimica Industriale relativi alle lauree magistrali in Chimica ed in Chimica Industriale rispettivamente), sia in ambito di ricerche sviluppate anche in collaborazione con aziende. Si spazia dall'ottimizzazione delle formulazioni e dei metodi di analisi, alle preparazioni di materiali organici, inorganici ed ibridi. [F. Bella, et al., PCCP, 15 (2013) 3706-3711; V. Gianotti, et al., ChemSusChem, 7 (2014) 3039-3052; N. Barbero, et al., Org. Lett., 17 (2015) 3306-3309; E. Conterposito, et al. ChemSusChem 9 (2016) 1279-1289; S. Galliano, et al. Solar Energy, 163 (2018) 251-255; S. Berto, et al., Electrochimica Acta, 284 (2018) 279] Nel poster saranno evidenziati i punti di forza e le problematiche relative a questo approccio, grazie all'utilizzo di semplici esempi pratici.

Queste ricerche sono derivate in parte dalla tesi di dottorato di S. Galliano ed in parte dal dott. Luca Carena e dalla dott.ssa Eleonora Conca nell'ambito di un progetto finanziato dalla Fondazione CRT.

Progetto in collaborazione con: Gruppo GAMELAB Politecnico di Torino, Università del Piemonte Orientale, BIOOPS srl, Chiorino Spa, ITT S.R.L., ARPA Piemonte

(claudia.barolo@unito.it; silvia.berto@unito.it; mery.malandrino@unito.it; davide.vione@unito.it)

ZrO₂ DROGATO CON CERIO: UN INTERESSANTE ED INUSUALE SISTEMA FOTOCATALITICO*M.C.Paganini, E.Giamello*

Il biossido di zirconio è stato a lungo studiato negli ultimi decenni grazie alla sua ampia gamma di applicazioni nei campi dei composti ceramici, dispositivi ottici, sensori di gas, catalisi (sia come catalizzatore che come supporto del catalizzatore). D'altra parte, anche l'ossido di cerio ha attirato l'attenzione a causa delle sue proprietà redox in particolare legate alla capacità di stoccaggio dell'ossigeno (OSC-oxygen storage capacity). Negli ultimi anni i materiali a base del sistema misto CeO₂ -ZrO₂ sono stati ampiamente utilizzati come catalizzatori per la conversione delle emissioni per gli impianti automobilistici e industriali in composti non tossici. L'applicazione di tale sistema si basa sul facile trasferimento elettronico CeIII→CeIV e viceversa, che influenza la capacità di stoccaggio dell'ossigeno e sul miglioramento della stabilità termica e delle proprietà redox di questi materiali misti rispetto all'ossido di cerio puro. Ossidi misti a base di ossido di zirconio recentemente sono stati utilizzati per processi di fotocatalisi utilizzando la luce UV a causa dell'elevato band gap di ZrO₂ (più di 5 eV).

Nel nostro studio abbiamo sintetizzato, tramite il processo sol-gel, gli ossidi misti di ZrO₂-CeO₂ con differente concentrazione di CeO₂ (0,5-10-90% in peso). Da una caratterizzazione sistematica strutturale e spettroscopica, abbiamo trovato importanti informazioni sulla presenza di difetti nel reticolo del materiale e abbiamo verificato anche la fotoattività degli ossidi misti con luce visibile. Sono stati condotti esperimenti fotochimici preliminari per testare le proprietà riduttive e ossidative di questi ossidi misti. Risultati incoraggianti sono stati ottenuti soprattutto con il campione con la minore quantità di cerio (0,5%). La formazione di anioni superossido (attività di riduzione) e l'interazione con le hole presenti (attività di ossidazione) sono state ottenute irradiando con luce visibile (lampada con filtro a 420 nm) e monitorando i materiali con la spettroscopia di risonanza paramagnetica elettronica.

(mariacristina.paganini@unito.it, elio.giamello@unito.it)

FILAMENTI PER STAMPA 3D: CARATTERIZZAZIONE DI UNA NUOVA CLASSE DI MATERIALI COMPOSITI

P.Bracco, M.Zanetti

La stampa 3D trova un sempre maggior impiego sia a livello industriale che artigianale, riuscendo a fornire soluzioni vantaggiose nella realizzazione o nell'implementazione della produzione di oggettistica. La tecnologia della modellazione con deposito di filamento fuso (dall'inglese fused deposition modeling) è stata introdotta anche in recenti interventi di restauro, sfruttando la possibilità di creare degli unicum, a partire da modelli 3D e non più da calchi, che potrebbero compromettere ulteriormente l'opera. Poiché l'oggetto stampato viene poi posto a diretto contatto con l'oggetto artistico, è opportuno caratterizzare i filamenti, per evitare che questi, sul lungo termine, possano a loro volta indurre la degradazione dei materiali già in opera.

I filamenti sono, principalmente, composti da polimeri termoplastici, miscelati con additivi, come per esempio riempitivi, stabilizzanti UV, antiossidanti, ritardanti di fiamma, che hanno lo scopo di migliorarne le proprietà meccaniche o modificarne l'aspetto estetico così da avere effetti materici simili al marmo, legno, bronzo, rame, per citarne qualcuno.

Lo studio qui presentato, introduce la caratterizzazione, attraverso un approccio multi-analitico, di diversi filamenti già utilizzati o pronti per essere utilizzati in interventi di restauro. Oltre alla composizione chimica, si sono anche valutati la stabilità chimica durante il processo di stampa e l'eventuale rilascio di componenti organiche volatili, indesiderate sia per la sicurezza dell'operatore, che per quella dell'opera d'arte.

Progetto in collaborazione con: Giulia Rollo, Koinè, Conservazione Beni Culturali Scrl.

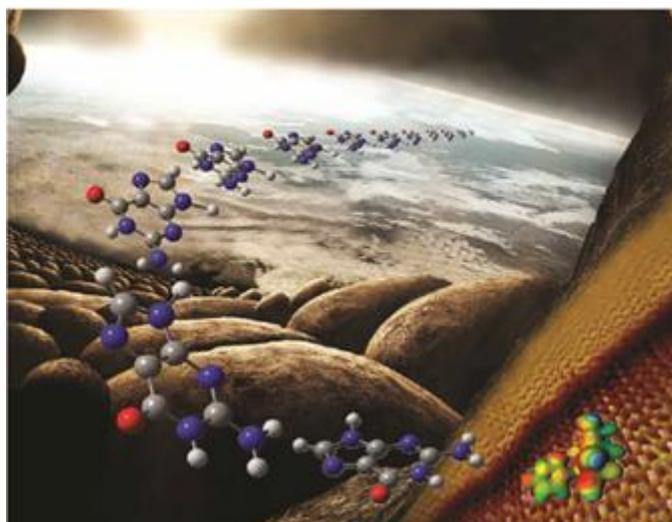
(pierangiola.bracco@unito.it, marco.zanetti@unito.it)

PROCESSI CATALITICI ALLA SUPERFICIE DI OSSIDI: DALLA CHIMICA PREBIOTICA ALLA PRODUZIONE DI FINE CHEMICALS IN REGIME DI ATOM ECONOMY

G. Martra, P. Ugliengo

La Natura è stata capace di produrre molecole complesse in condizioni che rispondono agli attuali, ineludibili criteri di sostenibilità, in cui rientra anche il regime di atom economy, cioè la ricerca di strategie sintetiche che permetta di pervenire al prodotto desiderato utilizzando il minor numero di atomi possibile. E' tipicamente il caso di alcuni processi prebiotici che circa 4 G-anni fa hanno portato alla formazione di polipeptidi e di acidi nucleici, anche con l'intervento catalitico di superfici di minerali (Figura) [Bernal J. D. *The Physical Basis of Life*, Routledge and Kegan Paul, London (1951)]. Tra le reazioni di rilevante interesse industriale attualmente molto dispendiose in termini di atom economy si colloca la formazione di legami ammidici e peptidici, tanto che la ricerca di metodologie innovative a questo riguardo è stata riconosciuta come una delle priorità scientifiche [Pattabiraman V. R. & Bode J. W. *Nature* 480, 471–479 (2011)] ed applicative [Constable D. J. C. et al. *Green Chem.* 9, 411–420 (2007)] della chimica sintetica: per circostanziare l'impatto di questo tipo di reazione, è forse sufficiente citare che almeno il 70% dei principi farmacologicamente attivi contiene almeno un legame ammidico.

Partendo dalla evidenza sperimentale della possibilità di formare lunghi oligopeptidi in assenza di solvente ed in condizioni di blando riscaldamento alla superficie di nanoparticelle di SiO_2 e TiO_2 [Martra G. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 53, 4671-4674 (2014)] è stato intrapreso un percorso di ricerca che ha portato alla proposta di possibili meccanismi di formazione di legami ammidici alla superficie di SiO_2 [Pantaleone R. et al. *Chem. Eur. J.*, 24, 16292-16296 (2018)] e di legami peptidici alla superficie di TiO_2 [Rimola et al. *ACS Catal.*, 8, 4558–4568. (2018)], ed alla



messa a punto di condizioni di reazione che consentono rese e selettività di interesse industriale [Calcio-Gaudino E. et al. *Catal. Sci. Technol.*, 4, 1395-1399 (2014); Arena F. et al. *Catal. Sci. Technol.*, 5, 1911-1918 (2015)]. L'attuale proseguimento di questi studi è mirato alla definizione di relazioni struttura-proprietà che consentano di individuare (tra materiali già commercialmente disponibili) o preparare catalizzatori a base di questi due ossidi ottimali per la produzione di ammidi e di peptidi, anche in alternativa a "critical raw materials" individuati dall'Unione Europea sulla base della scarsità e difficoltà di reperimento a livello internazionale [<https://eur-lex.europa.eu/legal-content/IT/TXT/PDF/?uri=CELEX:52017DC0490&from=EN>].

Queste attività fanno anche parte del programma di ricerca del Dr. Marco Fabbiani e del Dr. Stefano Pantaleone.

(gianmario.martra@unito.it, piero.ugliengo@unito.it)

APPUNTI



CHIMICA.EVENTI@UNITO.IT | 011 670 7592/8352
DIPARTIMENTO DI CHIMICA | VIA P. GIURIA, 7 – TORINO



CHIMICA
**PASSIONE
PERIODICA**

MAGGIO > DICEMBRE 2018

**AULA AVOGADRO
VIA P. GIURIA, 7
DIPARTIMENTO DI CHIMICA
UNIVERSITA' DI TORINO**

**GLI EVENTI SONO GRATUITI
PER PARTECIPARE ISCRIVITI SU
WWW.CHIMICA-RICERCA.UNITO.IT
O SCANSIONA IL QR-CODE**

6 GIOVEDI' TEMATICI SULLA (NOSTRA) CHIMICA

3 MAG: SOCIETA'

**DIDATTICA, BENI CULTURALI, CHIMICA FORENSE
DAI LIBRI ALL'INDAGINE SUL CAMPO, IL CONTRIBUTO
DELLA CHIMICA ALLE SFIDE DELLA SOCIETA'**

7 GIU: BENESSERE

**SICUREZZA ALIMENTARE E SALUTE
TECNOLOGIE E STRUMENTI INNOVATIVI PER LA SALUTE
E LA SICUREZZA ALIMENTARE**

5 LUG: AMBIENTE

**CHIMICA VERDE, ECONOMIA CIRCOLARE
UN USO EFFICIENTE DELLE RISORSE PER MIGLIORARE
IL NOSTRO IMPATTO SUL PIANETA**

4 OTT: ENERGIA

**RINNOVABILE, PULITA, EFFICIENTE
NUOVI APPROCCI PER LA PRODUZIONE,
LA TRASFORMAZIONE E LO STOCCAGGIO DI ENERGIA**

8 NOV: BIG DATA

**MODELLI PREDITTIVI, SIMULAZIONE, ANALISI
L'USO DEI BIG DATA PER L'ANALISI CHIMICA
E LA SIMULAZIONE NUMERICA DI MOLECOLE E MATERIALI**

6 DIC: MATERIALI

**INDUSTRIA 4.0, SMART MATERIAL,
ADDITIVE MANUFACTURING
MATERIALI E TECNOLOGIE INNOVATIVE PER LE SFIDE
PRODUTTIVE DELL'INDUSTRIA ITALIANA**

