



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI
DELL'INSUBRIA

“Scienza dei materiali per catalisi, adsorbimento e separazione”

Coordinatore: Prof.ssa Jenny G. Vitillo

Contatti: jenny.vitillo@uninsubria.it

Keywords: materiali porosi, catalisi eterogenea, metal-organic frameworks (MOFs), zeoliti, nanoparticelle metalliche, adsorbimento di gas, separazione dei gas, CO₂ capture, caratterizzazione spettroscopica, modellistica computazionale.



Finalità: La facility è dedicata alla progettazione, sintesi, caratterizzazione e modellizzazione di materiali funzionali per applicazioni in catalisi eterogenea, adsorbimento e separazione dei gas e light harvesting. L'obiettivo è sviluppare materiali avanzati e comprendere, a livello molecolare, le interazioni tra superfici solide e molecole ospiti, integrando approcci sperimentali e computazionali.

Esempi di applicazioni

- Catalizzatori a base di materiali metallo-organici e nanoparticelle metalliche per l'attivazione di legami C-H e reazioni di idrogenazione.
- Materiali porosi per la cattura, stoccaggio e separazione di CO₂, H₂ e gas industriali.
- Studio di coloranti incapsulati in materiali microporosi per applicazioni di light harvesting, light upconversion e fotonica.
- Supporto allo sviluppo di materiali per processi energetici e ambientali sostenibili.

Localizzazione: c/o Dipartimento di Scienza ed alta tecnologia, Via Valleggio 9, 22100 Como.

Organizzazione:

La facility integra competenze sperimentali e teoriche nel campo della scienza dei materiali, combinando sintesi chimica, caratterizzazione strutturale e spettroscopica e modellistica computazionale avanzata. Essa rappresenta

un punto di riferimento per lo sviluppo e lo studio di materiali funzionali destinati ad applicazioni catalitiche, energetiche e ambientali.

La facility è organizzata in 3 sottostrutture:

- Sottostruttura 1 – Sintesi e progettazione di materiali funzionali
- Sottostruttura 2 – Catalisi, adsorbimento e separazione
- Sottostruttura 3 – Caratterizzazione avanzata e modellistica computazionale

Collegamento con le Piattaforme Tecnologiche del CRIETT e le Piattaforme Scientifiche di Ateneo:

La facility opera in collaborazione con:

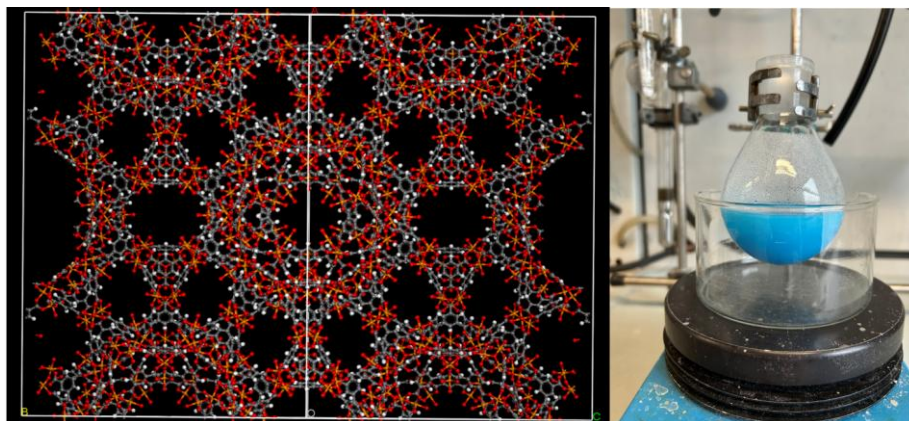
- Piattaforma Sostenibilità, in relazione agli obiettivi di (i) sostenibilità dei processi industriali, (ii) riduzione dell'impatto ambientale, (III) cattura e valorizzazione degli scarti, (iv) tutela delle risorse naturali.
- Piattaforma Tecnologie per energia, salute e ambiente, nell'ambito dello sviluppo di materiali, metodi e approcci per applicazioni energetiche e ambientali avanzate.

Sottostruttura “Sintesi e progettazione di materiali porosi e nanostrutturati”

Responsabile: Prof.ssa Jenny G. Vitillo

Contatti: jenny.vitillo@uninsubria.it

Keywords: sintesi di materiali, metal–organic frameworks (MOFs), zeoliti, nanoparticelle metalliche, materiali microporosi, tecniche idrotermali, glove box.



Breve descrizione

Facility dedicata alla sintesi e progettazione razionale di materiali funzionali, con particolare attenzione a materiali microporosi e nanostrutturati per applicazioni in catalisi, adsorbimento e separazione. Le attività comprendono la sintesi di metal–organic frameworks (MOFs), zeoliti e materiali ibridi, nonché la preparazione di nanoparticelle metalliche supportate e non supportate.

La sottostruttura dispone di competenze consolidate nella manipolazione di composti aria- e umidità-sensibili, grazie all'utilizzo di glove box a atmosfera inerte, e nell'impiego di tecniche idrotermali per la sintesi controllata di materiali porosi. L'approccio integrato consente di modulare composizione, struttura e proprietà superficiali dei materiali, ottimizzandone le prestazioni in funzione dell'applicazione finale.

Pubblicazioni:

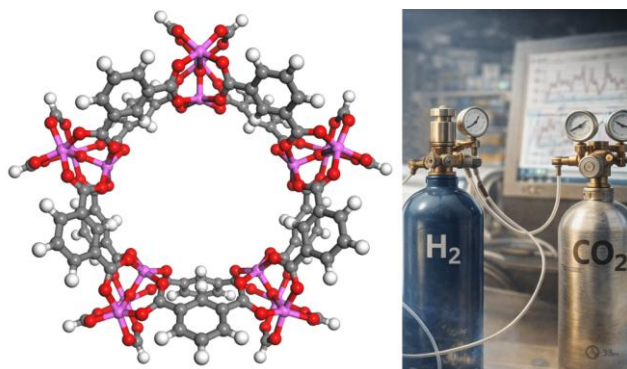
1. “Influence of First and Second Coordination Environment on Structural Fe(II) Sites in MIL-101 for C–H Bond Activation in Methane”, J.G. Vitillo, C.C. Lu, C.J. Cramer, A. Bhan, L. Gagliardi, *ACS Catal.*, **11**, 579–589 (2021).
2. “Modeling Metal Influence on the Gate Opening in ZIF-8 Materials”, J. G. Vitillo, L. Gagliardi, *Chem. Mater.* **33**, 4465–4473 (2021). [featured on the Front Cover]
3. “Experimental and computational characterization of phase transitions in CsB₃H₈”, O. Zavorotynska, M. H. Sørby, J. G. Vitillo, S. Deledda, C. Frommen and B. C. Hauback, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **23**, 17836–17847 (2021).
4. “Water-Driven Structural Transformation in Cobalt Trimesate Metal-Organic Frameworks”, J. Ethiraj, V. Surya, P. Selvam and J. G. Vitillo, *Energies*, **14**, 4751 (2021).
5. “Catalytic, Spectroscopic, and Theoretical Studies of Fe₄S₄-Based Coordination Polymers as Heterogenous Coupled Proton–Electron Transfer Mediators for Electrocatalysis”, N. Jiang, A. Darù, Š. Kunstelj, J. G. Vitillo, M. E. Czaikowski, A. Filatov, A. Wuttig, L. Gagliardi, J. S. Anderson,* *J. Am. Chem. Soc.*, **146**, 12243–12252 (2024). DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.4c03726>
6. "Introducing Metal-Sulfur Active Sites in Metal-Organic Frameworks via Post-Synthetic Modification for Hydrogenation Catalysis", *Nature Chem.* (2025). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41557-025-01876-y>.

Sottostruttura “Catalisi eterogenea e adsorbimento/separazione”

Responsabile: Prof.ssa Jenny G. Vitillo

Contatti: jenny.vitillo@uninsubria.it

Keywords: catalisi eterogenea, idrogenazione, attivazione C–H, adsorbimento di gas, CO₂ capture, H₂ storage, volumetria di adsorbimento.



Breve descrizione

Facility dedicata allo studio delle proprietà catalitiche e di adsorbimento dei materiali sviluppati nella facility, con particolare riferimento a processi di catalisi eterogenea, cattura e separazione della CO₂ e stoccaggio di gas. Le attività includono l'impiego di catalizzatori a base di MOFs (in particolare ferro-based) per l'attivazione di legami C–H e di nanoparticelle metalliche per reazioni di idrogenazione.

La sottostruttura si avvarrà di tecniche di volumetria di adsorbimento (strumento in acquisizione) per la determinazione della superficie specifica, della distribuzione dei pori e della capacità di adsorbimento di N₂, CO₂, e H₂. Queste misure consentono una valutazione quantitativa delle prestazioni dei materiali in ambito energetico e ambientale, supportando lo sviluppo di soluzioni sostenibili e ad elevata efficienza.

Pubblicazioni:

1. “Thermal Treatment Effect on CO and NO Adsorption on Fe(II) and Fe(III) Species in Fe₃O-Based MIL-Type Metal–Organic Frameworks: A Density Functional Theory Study”, Vitillo, J. G.; Gagliardi, L. *Inorg. Chem.* **60**, 11813–11824 (2021).
2. “Beyond Radical Rebound: Methane Oxidation to Methanol Catalyzed by Iron Species in Metal–Organic Framework Nodes”, M. C. Simons, S. D. Prinslow, M. Babucci, A. S. Hoffman, J. Hong, J. G. Vitillo, S. R. Bare, B. C. Gates, C. C. Lu, L. Gagliardi and A. Bhan, *J. Am. Chem. Soc.*, **143**, 12165-12174 (2021).
3. “The role of carbon capture, utilization and storage for economic pathways that limit global warming to below 1.5 °C”, J. G. Vitillo, M. D. Eisaman, E. S. P. Aradóttir, F. Passarini, T. Wang, S. W. Sheehan, *iScience*, **25**, 104237 (2022).
4. “Comparing the reaction profiles of single-iron catalytic sites in enzymes and in reticular frameworks for methane-to-methanol oxidation”, J. G. Vitillo,* C. C. Lu, A. Bhan, L. Gagliardi, *Cell Rep. Phys. Sci.* **4**, 101422 (2023).
5. “Mechanism of Benzene Hydroxylation on Tri-Iron Oxo-Centered Cluster-Based Metal–Organic Frameworks”, J. G. Vitillo*, M. Choudhary, M. C. Simons, L. Gagliardi and A. Bhan,* *J. Phys. Chem. C*, **127**, 23246–23257 (2023). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c06423

6. “Unraveling Transfer Hydrogenation Mechanisms by Ammonia Borane to Alkenes Over Self-Healing Copper Nanoparticles: the Complementary Role of N-H Bond, Surface, and Solvent”, A. Maspero, F. Bardelli, K. F. Konidaris, M. Uboldi, C. Lucarelli, N. Schiaroli and J. G. Vitillo*, *ACS Catal.*, **14**, 9594–9606 (2024). DOI: <https://doi.org/10.1021/acscatal.4c02556>
7. “Introduction to hybrid pores for CO₂ technologies”, P. Ágota Szilágyi, J. G. Vitillo, G. A. Craig, *Mater. Adv.*, **5**, 5336-5338 (2024). DOI: <https://doi.org/10.1039/D4MA90055C>

Sottostruttura “Caratterizzazione spettroscopica e modellistica computazionale dei materiali”

Responsabile: Prof. Jenny G. Vitillo

Contatti: jenny.vitillo@uninsubria.it

Keywords: FTIR, UV-Vis, Raman, TGA, DSC, XRPD, DFT, TD-DFT, metodi multireference, modellistica molecolare, machine learning, intelligenza artificiale.



Breve descrizione

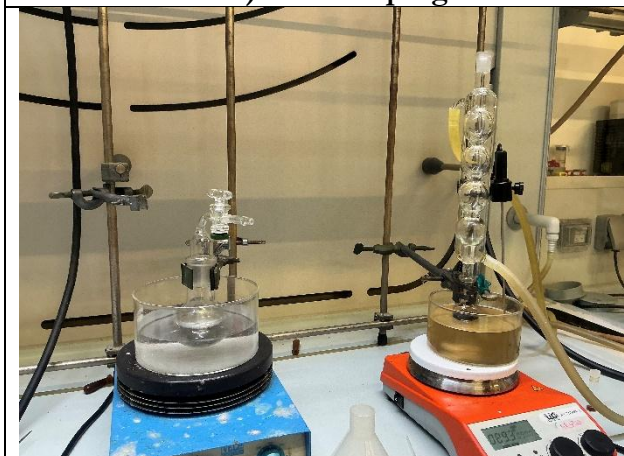
Facility dedicata alla caratterizzazione strutturale, termica e spettroscopica dei materiali e allo studio delle loro interazioni con molecole ospiti, integrando approcci sperimentali e computazionali. Le attività sperimentali includono FTIR (in trasmissione e ATR) e UV-Vis in fase omogenea ed eterogenea, analisi termiche (TGA e DSC), XRPD per il controllo di qualità e la valutazione della stabilità strutturale, nonché SEM per l'analisi morfologica.

La sottostruttura presenta una forte componente di modellistica quantomeccanica, basata su metodi DFT, TD-DFT e multideterminanti, per la simulazione di profili di reazione e l'assegnazione di spettri IR e Raman di molecole sonda (CO, H₂, CO₂, NO,...) interagenti con superfici solide e di spettri UV-Vis di molecole otticamente attive per il light harvesting e la light upconversion. L'integrazione tra dati sperimentali e simulazioni consente una comprensione approfondita dei meccanismi alla base dei processi catalitici e di adsorbimento. Uso di metodi di intelligenza artificiale per il design dei materiali.

Pubblicazioni:

1. “Multireference methods are realistic and useful tools for modeling catalysis”, J. G. Vitillo, C. J. Cramer, L. Gagliardi, *Isr. J. Chem.*, **62**, e202100136 (2022).
2. “X-ray and synchrotron FTIR studies of partially decomposed magnesium borohydride”, R. Dahal, J. G. Vitillo, A. C. Åsland, C. Frommen, S. Deledda and O. Zavorotynska, *Energies*, **15**, 7998 (2022).
3. “Synthesis, Characterization, Fluorescence Properties, and DFT Modeling of Difluoroboron Biindole-diketones”, A. Maspero, F. Vavassori, L. Nardo, G. Vesco, J. G. Vitillo,* and A. Penoni,* *Molecules*, **28**, 4688 (2023).
4. “Best practices for transition metal catalysts with density functional methods”, J. G. Vitillo,* *Chem Catal.*, **5**, 101427 (2025). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cheecat.2025.101427>
5. “Breaking the 1250 nm Barrier: A Computational Approach to Light Upconversion via Triplet-Triplet Annihilation in the Silica Telecom Band”, J. G. Vitillo, *ACS Applied Energy Mater.*, accepted (2026).

1) Sintesi e progettazione di materiali porosi e nanostrutturati



Vetreteria e strumentazione di base per reazioni chimiche

Vetreteria e strumentazione di laboratorio dedicate alla preparazione di soluzioni e alla conduzione di reazioni chimiche in condizioni controllate, a supporto della sintesi di materiali porosi e nanostrutturati.



Stufa LLG uniOVEN-110

Stufa da laboratorio per la sintesi e il trattamento termico dei materiali, dotata di un controllo accurato della temperatura ($\pm 0,5$ °C), essenziale per garantire riproducibilità e controllo delle fasi di cristallizzazione.



Bombe per la sintesi solvotermale e idrotermale

Reattori ad alta pressione in teflon e acciaio per la sintesi solvotermale e idrotermale di materiali microporosi, che consentono il controllo di temperatura, pressione e tempo di reazione.



Glove box MBRAUN Labstar a 3 guanti

Sistema a atmosfera controllata (argon) per la manipolazione e sintesi di composti aria- e umidità-sensibili, garantendo condizioni operative riproducibili e un'elevata purezza dei materiali ottenuti.

2) Catalisi eterogenea e adsorbimento/separazione



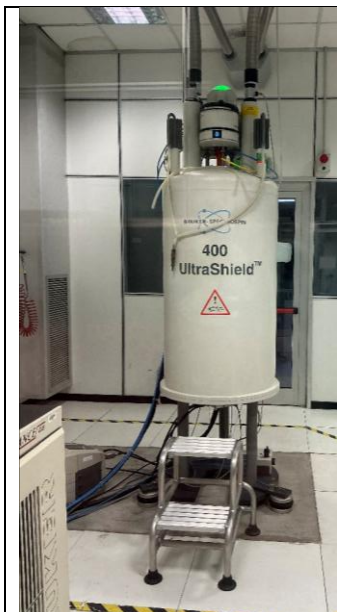
Schlenk line

Linea Schlenk per la manipolazione e la reazione di composti sensibili all'aria e all'umidità sotto atmosfera inerte, utilizzata nella preparazione e nello studio di catalizzatori eterogenei.



Glove box Labstar MBRAUN a 3 guanti

Sistema a atmosfera controllata (argon) per la manipolazione e sintesi di composti aria- e umidità-sensibili, garantendo condizioni operative riproducibili e un'elevata purezza dei materiali ottenuti.



NMR, TGA-DSC, SEM, XRD (in acquisizione), volumetrico (in acquisizione), GC-MS. Dettagli alla pagina del CRIETT. <https://www.uninsubria.it/ricerca/strutture-la-ricerca/centri-speciali/centro-di-ricerca-e-trasferimento-tecnologico-criett-1>

3) Caratterizzazione spettroscopica e modellistica computazionale dei materiali



FTIR in trasmissione e ATR (Nicolet iS10, rivelatore DTGS)

Spettrometro FTIR operante nell'intervallo $4000-650\text{ cm}^{-1}$, impiegato per lo studio delle vibrazioni molecolari e delle interazioni tra molecole sonda e superfici solide.



Spettrofotometro UV-Vis (Shimadzu UV-2600i)

Spettrofotometro UV-Vis per misure in trasmissione e riflettanza diffusa nel range $185-900\text{ nm}$ con risoluzione di $0,5\text{ nm}$, utilizzato per l'analisi delle proprietà ottiche ed elettroniche dei materiali.

NMR, TGA-DSC, SEM, XRD (in acquisizione), vedi sopra