

Applicazione dell’LCA a diverse alternative di sintesi di un fotoiniziatore utilizzato per la produzione del poli(acetato di vinile-acido crotonico)

Rivas Márquez M.N.¹, Arfelli F.², Rosas J.M.¹, Rodríguez Mirasol J.¹, Cordero T.¹, Ciacci L.^{2,3}, Passarini F.^{2,3}

¹Dipart., di Ingegneria Chimica, Facoltà di Scienze, Università di Malaga, Spain.

²Dipart., di Chimica Industriale “Toso Montanari”, Università di Bologna, via Piero Gobetti 85, 40136 Bologna, Italia.

³CIRI FRAME, Università di Bologna, via Angherà 22, 47922 Rímini, Italia.

Keyword: Life Cycle Assessment, fotoiniziatore, 1-idrossicicloesilfenilchetone, poli(acetato di vinile-acido crotonico)

Tipo di submission: Poster

Abstract:

Il poli(acetato di vinile-acido crotonico) è un copolimero versatile, impiegato principalmente come adesivo e/o precursore nella produzione di additivi nel settore automobilistico. La sua sintesi, comunemente attivata mediante iniziatori termici (azobisisobutirronitrile o vari perossidi), consiste nella copolimerizzazione dell'acido crotonico (CA) con l'acetato di vinile (VAc)¹ (Figura 1). Tuttavia, gli iniziatori termici richiedono temperature elevate che, da un lato, comportano elevati consumi energetici e, dall'altro, possono alterare la struttura chimica dei precursori, rendendo anche complicato il controllo dei parametri del processo². Tali implicazioni stimolano lo sviluppo di alternative più sostenibili. In questo contesto, l'uso dell'1-idrossicicloesilfenilchetone (Irgacure 184) rappresenta un'opzione promettente, in quanto consente di avviare la polimerizzazione sfruttando radiazioni UV, a temperatura ambiente e con una minore generazione di sottoprodotti. Tuttavia, nonostante l'uso di Irgacure 184 sia coerente con i principi della chimica verde, è necessario applicare una valutazione completa dell'impatto mediante l'analisi del ciclo di vita (LCA) per confermare gli effettivi vantaggi ambientali rispetto all'attivazione termica alternativa.

Seguendo una prospettiva di ciclo di vita, oltre alla sintesi del copolimero, è quindi necessario valutare anche gli impatti associati alla produzione dell'iniziatore. Di conseguenza, il caso studio propone l'applicazione dell'LCA per stimare gli impatti ambientali di sei diversi percorsi di sintesi di Irgacure 184, in riferimento a tre scenari: (i) scala di laboratorio, (ii) scala pilota con stima del consumo energetico utilizzando un approccio di tipo “Advanced Process Calculation” (APC)³ e (iii) su scala pilota utilizzando “Process simulation tools”³ come Aspen Plus. Inoltre, lo studio mira ad evidenziare le lacune dei comuni database LCA riguardo alla disponibilità di informazioni relative a molecole complesse, come quelle coinvolte nelle sintesi presentate. Coerentemente, la piattaforma Reaxys è stata utilizzata come riferimento di retrosintesi per la produzione di alcuni precursori di Irgacure 184, assenti dalle tradizionali banche dati. L'LCA è applicata seguendo un approccio from-cradle-to-gate e i risultati sono normalizzati ad 1 kg di iniziatore finale, scelto come unità funzionale, per agevolare il confronto tra i tre scenari. La valutazione dell'impatto è stata eseguita con il metodo Environmental Footprint 3.1 e il modello è stato generato sul software Simapro.

I risultati preliminari suggeriscono che i tre approcci presentano impatti significativamente diversi a causa della varianza associata alla stima del consumo energetico. In particolare, la scarsa ottimizzazione dei processi di laboratorio e le apparecchiature basate principalmente sull'elettricità comportano consumi particolarmente elevati. L'approccio APC adottato è sensibile ai lunghi tempi di reazione e alle alte temperature, poiché non consente di modellare il potenziale recupero di energia all'interno del sistema. Infine, Aspen Plus rappresenta l'opzione più rappresentativa. Tuttavia, l'uso di ASPEN è limitato dalla conoscenza delle cinetiche di reazione, che spesso non sono disponibili in letteratura, soprattutto per reazioni poco comuni e, come in questo caso, non ancora diffuse sul mercato.

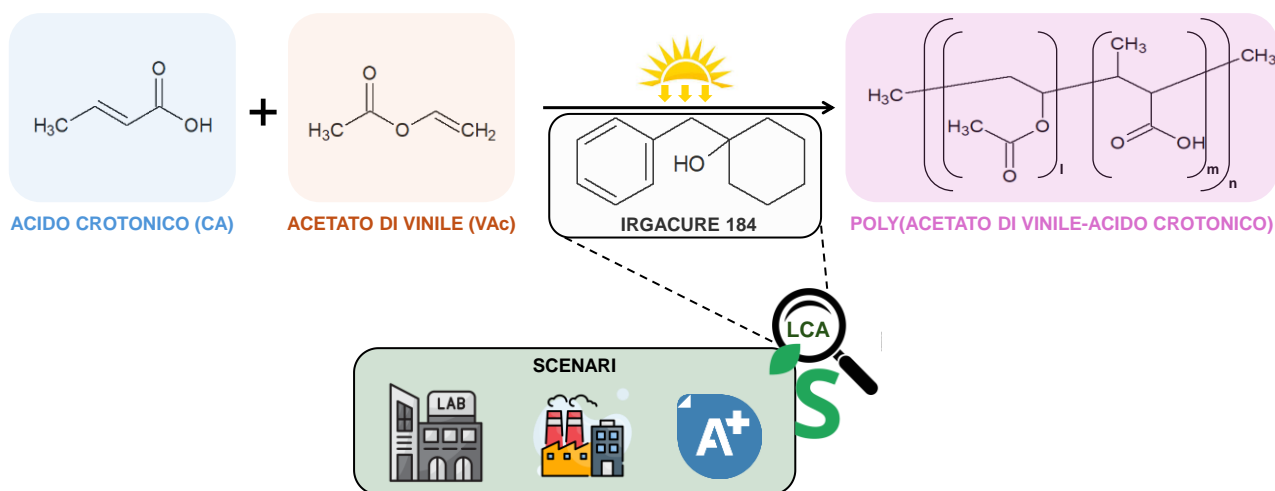


Figura 1. Reazione di sintesi innovativa del copolimero e scenari di calcolo.

Riferimenti bibliografici:

1. Jorea A., Parodi A., Benelli T., Ciacci L., Fagnoni M., Galletti P., Mazzocchetti L., Ravelli D., Torri C., Vassura I., Samorì C. Poly(vinyl acetate-co-crotonic acid) from bio-based crotonic acid: synthesis, characterization and carbon footprint evaluation. *Royal Society of Chemistry* 2023.
2. Mansfeld U., Pietsch C., Hoogenboom R., Becer C.R., Schubert U.S. Clickable initiators, monomers and polymers in controlled radical polymerizations – A prospective combination in polymer science. *Royal Society of Chemistry* 2010.
3. Parvatker A.G., Echelman M.J. Comparative evaluation of chemical life cycle inventory generation methods and implications for life cycle assessment results. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering* 2019.

Riconoscimenti: Questo Lavoro è stato sostenuto dal MCIN [TED2021-131324B-C21; PID2022-140844OB-I00] è dall'Unione Europea "NextGenerationEU"/PRTR (MCIN/AEI/10.13039/501100011033). M.N.R.M riconosce il sostegno finanziario ricevuto attraverso il Programma Erasmus+ e la Fondazione Unicaja, nonché l'Università di Malaga, per il completamento del suo soggiorno di pre-dottorato. Gli autori ringraziano per il sostegno finanziario ricevuto dal programma LIFE dell'Unione Europea nell'ambito dell'accordo di finanziamento n. 101074164 (CROSS-LIFE – Acido CROtonico da fanghi di depurazione). Tuttavia, le opinioni espresse sono quelle degli autori e non riflettono necessariamente quelle dell'Unione Europea.