

CONAMA 2022

CONGRESO NACIONAL DEL MEDIO AMBIENTE

El papel de las poliolefinas en el ecodiseño de filme multicapa reciclado mecánicamente



Autor Principal: María Teresa Expósito (Escuela Superior de Ciencias y Tecnología-URJC)

Otros autores: Javier Ramos (Instituto de Estructura de la Materia-CSIC); Juan Francisco Vega (Instituto de Estructura de la Materia-CSIC); Virginia Souza-Egipsy (Instituto de Estructura de la Materia-CSIC), Beatriz Paredes (Escuela Superior de Ciencias y Tecnología-URJC) y Victor Cruz (Instituto de Estructura de la Materia-CSIC).

1. RESUMEN	1
2. INTRODUCCIÓN	1
2.1. Multiescala y reciclado	1
2.2. Ecodiseño de films plásticos multicapa	2
2.3. Problema de la reciclabilidad en sistemas multicapa	3
3. RESULTADOS OBTENIDOS	3
4. BIBLIOGRAFIA	4

1. RESUMEN

Una de las mayores aplicaciones de los plásticos a nivel mundial es el envase multicapa. Este tipo de envase presenta un problema importante en su reciclado, debido fundamentalmente a la falta de compatibilidad entre las diferentes capas. El sistema multicapa con mayor presencia en el mercado es el constituido por poliolefinas (componente estructural), copolímeros de etileno con alcohol vinílico (componente barrera) y una resina plástica que permite la unión de capas incompatibles entre sí (normalmente un copolímero de etileno con monómeros polares). Estos sistemas son difíciles de reciclar, ya que requieren de un proceso de separación (contaminante y caro) o de un reciclado mecánico utilizando agentes compatibilizantes que reaccionan químicamente.

Esta comunicación está integrada en un proyecto centrado en el ecodiseño de films multicapa a través de la combinación de experimentos sencillos y simulaciones computacionales. Una de las propuestas es el estudio de las interacciones entre las diferentes capas para facilitar el posterior reciclado mecánico. Esta presentación se va a centrar en 3 sistemas multicapa formados por polietileno (PE), copolímero etileno/alcohol vinílico (EVOH) y una capa adhesiva funcional (copolímeros de etileno/vinil acetato -EVA- y de etileno/acrilato de etilo -EEA-, y un ionómero sódico de etileno/ácido metilacrílico -EMANA-) que compatibilizará mediante interacción física.

2. INTRODUCCIÓN

2.1. Multiescala y reciclado

El objetivo final de este proyecto es comprender las interacciones que existen entre los componentes poliméricos que forman parte de los films multicapa que se emplean en envasado a través del modelado multiescala en diferentes escalas longitud-tiempo. Para ello, se van a integrar en ascendente diferentes métodos computacionales en distintas escalas (desde parametrización de los potenciales de interacción hasta la definición de las ecuaciones constitutivas), y las interfaces se implementarán utilizando un lenguaje de programación de alto nivel como Python [1][2][3]. En paralelo, los datos obtenidos experimentalmente se verificarán

y validarán con los modelos computacionales. Esta validación es la que permitirá mejorar la confianza en los métodos computacionales a la hora de tomar decisiones como el diseño de componentes que permitan ecodiseñar (como puede ser el aumento de la reciclabilidad) de los films plásticos multicapa [4].

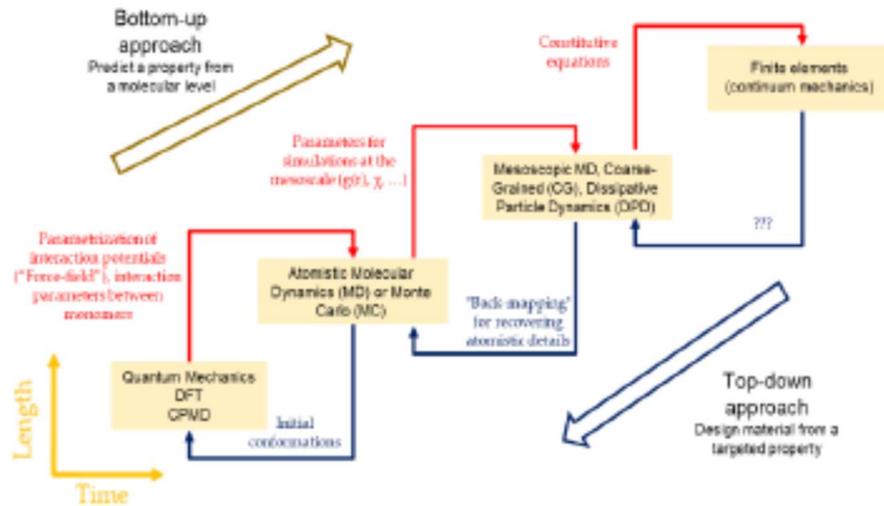


Figura 1. La Información intercambiada entre las escalas longitud-tiempo caracteriza el enfoque mecánico. Las cajas representan los métodos característicos de una determinada escala longitud-tiempo. Las flechas rojas indican la información intercambiada entre escalas siguiendo una estrategia ascendente. Y análogamente, las flechas azules indican el intercambio en una propuesta descendente. Destacar que este modelo debe ser validado con los resultados experimentales en cada nivel.

2.2. Ecodiseño de films plásticos multicapa

El ecodiseño disminuye el impacto medioambiental de los productos a través de su actuación sobre el ciclo de vida, actuando en los aspectos medioambientales en las primeras etapas del diseño del producto. En este contexto, las acciones que se han propuesto en este proyecto de investigación van a ser determinantes en los impactos ambientales atribuibles a los films plásticos multicapa a lo largo de su ciclo de vida.

En este proyecto para mejorar la separación y reciclabilidad de sistemas plásticos multicapa:

- (1) se han seleccionado macromoléculas que actúan como capas interconectantes y que son empleadas en los sistemas multicapa.
- (2) Se busca una interacción física de estas macromoléculas interconectantes con los polímeros de otras capas mediante enlaces iónicos, entrelazamientos y/o fuerzas intermoleculares (i.e. Van der Waals, puente de hidrógeno o dipolo-dipolo inducido).
- (3) Todos los componentes del sistema multicapa son polímeros reciclables/reutilizables.

A nivel computacional se ha propuesto una estrategia de modelado basada en un proceso de trabajo multiescala con objeto de ayudar:

- a) en el diseño de los componentes en el film multicapa, y

b) en el diseño de los compatibilizadores
y conseguir aumentar la capacidad de reciclabilidad de ambas capas.

2.3. Problema de la reciclabilidad en sistemas multicapa

En la actualidad es muy común el uso como compatibilizantes copolímeros de poliolefinas y anhídrido maleico (PE-g-MAH) en sistemas multicapa de polietileno y EVOH. Así los grupos funcionales maleicos reaccionan con los grupos hidroxilo del EVOH mediante uniones covalentes. Al mismo tiempo los segmentos no polares del copolímero PE-g-MAH compatibilizan con el polietileno. Ambas interacciones entre la macromolécula interconectante y las capas polar y no polar son fuertes y evitan la delaminación del film multicapa.

La única posibilidad de reciclado de estos sistemas multicapa en los que no es posible separar los componentes es el mezclado mecánico por encima de la temperatura de fusión. En este proceso, podemos pensar que la sustancia PE-g-MAH actúa autocompatibilizando la mezcla por su carácter polar y no polar; sin embargo, la presencia de fuerzas mecánicas y la alta temperatura del proceso de reciclado favorecen la reacción de estos grupos para generar redes de entrecruzamiento, que impiden la reutilización del material reciclado.

En este proyecto se aborda el problema de la reciclabilidad desde el punto de vista molecular. Se van a estudiar cómo influyen las interacciones específicas que se generan entre los diferentes componentes y los procesos de difusión de las cadenas poliméricas entre capas sobre las diferentes morfologías en las mezclas. Éste estudio nos dará la llave para mejorar la reciclabilidad a través del diseño, manteniendo la aplicación del material durante su ciclo de vida.

3. RESULTADOS OBTENIDOS

La primera parte del proyecto se ha centrado en 3 sistemas multicapa formados por polietileno (PE), copolímero etileno/alcohol vinílico (EVOH) y una capa adhesiva funcional (copolímeros de etileno/vinil acetato -EVA- y de etileno/acrilato de etilo -EEA-, y un ionómero sódico de etileno/ácido metilacrílico -EMANa-) que compatibilizará mediante interacción física.

En este estudio se han empleado diferentes técnicas como microscopías (TEM y AFM), calorimetría, espectroscopía infrarroja y reología lineal para explorar las interacciones entre los diferentes componentes en los sistemas multicapa. La compatibilidad entre los componentes en los 3 sistemas multicapa se ha determinado aplicando la aproximación Nishi-Wang a la depresión de la temperatura de fusión. Esta aproximación requiere que al menos uno de los componentes sea cristalino. Para evitar efectos indeseables, los monocristales (PE) o los agregados microcristalinos (EVOH) se han embebido en los agentes adhesivos (EVA, EEA y EMANa).

Inicialmente, se han estudiado los aspectos morfológicos de los monocristales y los agregados; y posteriormente, se ha determinado la compatibilidad a nivel segmental de los agentes adhesivos tanto con el PE como con el EVOH. Así, es posible definir el sistema más efectivo para estudiar el efecto de la compatibilidad en una etapa ulterior de reciclado. Para finalizar, las

mezclas seleccionadas se estudiaron en estado fundido por reología. Los resultados obtenidos apuntan a que la arquitectura molecular de estos materiales desempeña un papel crucial y limitante, y que será decisivo en el ecodiseño de sistemas multicapa para lograr un sistema multicapa reciclable mecánicamente [5]. Además, los resultados experimentales validan los obtenidos por cálculos computacionales [6].

4. BIBLIOGRAFIA

- [1] D.N. Theodorou. *Chemical Engineering Science* (2007) 62 (21), 5697
- [2] J. Ramos, Juan F. Vega, J. Martínez-Salazar. *Eur. Polym. J.* (2018) 99, 298
- [3] T. E. Gartner, A. Jayaraman. *Macromolecules* (2019) 52, 755
- [4] G. Goldbeck, C. Court “*The Economic Impact of Materials Modelling Indicators, Metrics, and Industry Survey*” (2022). <https://documents.pub/document/the-economic-impact-of-materials-modelling-emmcinfo-the-economic-impact-of.html?page=1>.
- [5] Juan F. Vega, V. Souza-Egipsy, M. T. Expósito and J. Ramos. *Polymers* (2022) 14, 1622.
- [6] Juan F. Vega, J. Ramos, V. Souza-Egipsy, J. Martínez-Salazar. *Polymer* (2022) 256:125256