

Tecniche computazionali nel riciclo di rifiuti plastici

Toray e l'Università di Chicago stanno sviluppando metodi predittivi per calcolare la viscoelasticità di polimeri contenenti riciclato.

24 febbraio 2023 08:48

Il gruppo giapponese Toray e l'Università di Chicago stanno lavorando a nuove tecniche di simulazione multiscala per prevedere la viscoelasticità di strutture polimeriche, con potenziali applicazioni nel riciclo di rifiuti plastici.

I lavori sono stati pubblicati sulle riviste scientifiche *Macromolecules* e *Journal of Polymer Science*.



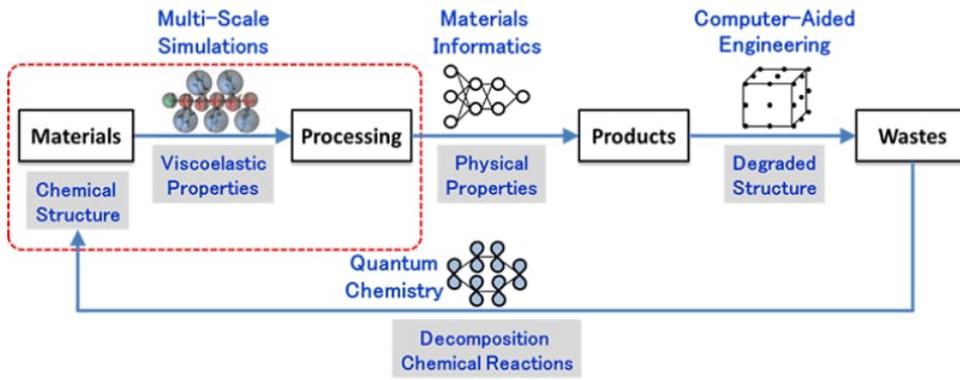
L'obiettivo è simulare il comportamento viscoelastico, nella trasformazione dei polimeri, in base al contenuto di materiale riciclato introdotto nel fuso. Potendo calcolare questo parametro in fase di formulazione dei compound, si può accelerare lo sviluppo dei materiali e dei prodotti, rendendoli più idonei al successivo riciclo.

Dato che la viscoelasticità è cruciale nel determinare la qualità dei pezzi stampati o estrusi, ridurre il tempo di avvio produzione, basato su tentativi e successivi aggiustamenti dei parametri, apporta benefici in termini di maggiore produttività e riduzione degli scarti.

La tecnica di simulazione multiscala messa a punto da Toray e Università di Chicago consente di prevedere con precisione la viscoelasticità dalla struttura chimica dei polimeri, combinando la tecnologia di progettazione molecolare computazionale studiata da Toray con la metodologia "coarse-graining" (letteralmente a "grana grossa") sviluppata dall'Università di Chicago, che semplifica i calcoli raggruppando gli atomi costituenti le molecole.

Questa tecnica - affermano i due partner - è stata verificata con polistirene e poliammide 6, ottenendo nelle prove di lavorazione risultati congruenti con quelli della simulazione.

Toray integrerà i risultati della ricerca nei calcoli di chimica quantistica, informatica dei materiali e progettazione CAE (Computer-aided engineering). L'obiettivo è creare un framework integrato e coerente capace di collegare tutti i dati, dalle materie prime ai prodotti, fino ai rifiuti e di nuovo ai feedstock rigenerati.



© Polimerica - Riproduzione riservata