

# Analisi ambientale della sintesi del rosa-ossido: studi LCA & EATOS

*Davide Ravelli*

23 gennaio 2009

Relatori: Prof. Angelo ALBINI  
*Università degli Studi di Pavia - Dipartimento di Chimica Organica*

Ing. Paolo NERI  
*Centro ENEA di Bologna - LCA-lab srl*

## La Chimica verde

Un po' di storia...

Dallo *Sviluppo Sostenibile*...

- **Lo sviluppo che soddisfa i bisogni del presente, senza compromettere la capacità delle generazioni future di soddisfare i loro...**

---

World Commission on Environment and Development; *Our Common Future*; Oxford University Press, Oxford, 1987.

## La Chimica verde

Un po' di storia...

### Dallo *Sviluppo Sostenibile*...

- Lo sviluppo che soddisfa i bisogni del presente, senza compromettere la capacità delle generazioni future di soddisfare i loro...

---

World Commission on Environment and Development; *Our Common Future*; Oxford University Press, Oxford, 1987.

### ...alla *Green Chemistry*

## La Chimica verde

Un po' di storia...

### Dallo *Sviluppo Sostenibile*...

- Lo sviluppo che soddisfa i bisogni del presente, senza compromettere la capacità delle generazioni future di soddisfare i loro...

---

World Commission on Environment and Development; *Our Common Future*; Oxford University Press, Oxford, 1987.

### ...alla *Green Chemistry*

- I dodici principi**

## La Chimica verde

Un po' di storia...

### Dallo *Sviluppo Sostenibile*...

- Lo sviluppo che soddisfa i bisogni del presente, senza compromettere la capacità delle generazioni future di soddisfare i loro...

---

World Commission on Environment and Development; *Our Common Future*; Oxford University Press, Oxford, 1987.

### ... alla *Green Chemistry*

- I dodici principi
- Lo sviluppo dei metodi di valutazione**

*I metodi di valutazione considerati*  
*EATOS & LCA*

Il metodo EATOS - una realtà chimica

*I metodi di valutazione considerati*  
*EATOS & LCA*

Il metodo EATOS - una realtà chimica

- **Metodo semplificato basato esclusivamente sulle sostanze chimiche**

*I metodi di valutazione considerati*  
*EATOS & LCA*

Il metodo EATOS - una realtà chimica

- Metodo *semplificato* basato esclusivamente sulle sostanze chimiche
- **Determinazione di 5 parametri numerici:  $S^{-1}$ , E,  $EI_{IN}$ ,  $EI_{OUT}$ , CI**

## I metodi di valutazione considerati EATOS & LCA

### Il metodo EATOS - una realtà chimica

- Metodo *semplificato* basato esclusivamente sulle sostanze chimiche
- Determinazione di 5 parametri numerici:  $S^{-1}$ , E,  $EI_{IN}$ ,  $EI_{OUT}$ , CI

### Il metodo LCA

## I metodi di valutazione considerati EATOS & LCA

### Il metodo EATOS - una realtà chimica

- Metodo *semplificato* basato esclusivamente sulle sostanze chimiche
- Determinazione di 5 parametri numerici:  $S^{-1}$ , E,  $EI_{IN}$ ,  $EI_{OUT}$ , CI

### Il metodo LCA

- **Metodo completo basato su tutti i contributi connessi con un determinato prodotto/processo**

## I metodi di valutazione considerati EATOS & LCA

### Il metodo EATOS - una realtà chimica

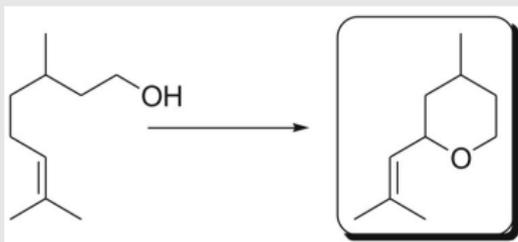
- Metodo *semplificato* basato esclusivamente sulle sostanze chimiche
- Determinazione di 5 parametri numerici:  $S^{-1}$ , E,  $El_{IN}$ ,  $El_{OUT}$ , CI

### Il metodo LCA

- Metodo *completo* basato su tutti i contributi connessi con un determinato prodotto/processo
- **Valutazione attraverso:**
  - **Eco-Indicator99 (Paesi Bassi);**
  - **IMPACT2002+ (Svizzera);**
  - **EPS (Svezia);**
  - **EDIP97 (Danimarca);**

*L'oggetto dello studio*

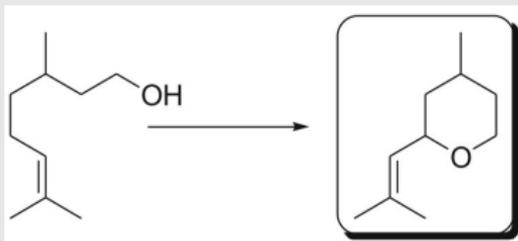
Un po' di chimica...



- **Conversione del  $\beta$ -citronellolo in rosa-ossido: sei alternative differenti;**

## L'oggetto dello studio

Un po' di chimica...



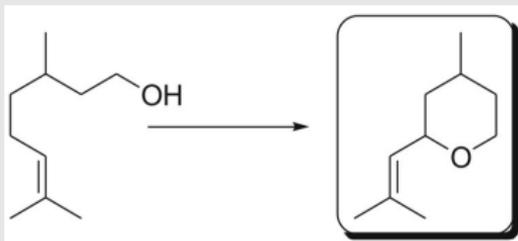
- Conversione del  $\beta$ -citronellolo in rosa-ossido: sei alternative differenti;

Obiettivi dello studio

- **Analisi degli aspetti maggiormente impattanti (solo LCA)**

## L'oggetto dello studio

Un po' di chimica...



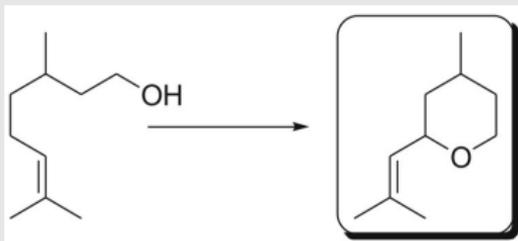
- Conversione del  $\beta$ -citronellolo in rosa-ossido: sei alternative differenti;

Obiettivi dello studio

- Analisi degli aspetti maggiormente impattanti (solo LCA)
- **Valutazione del processo di riciclo solvente (solo LCA)**

## L'oggetto dello studio

Un po' di chimica...



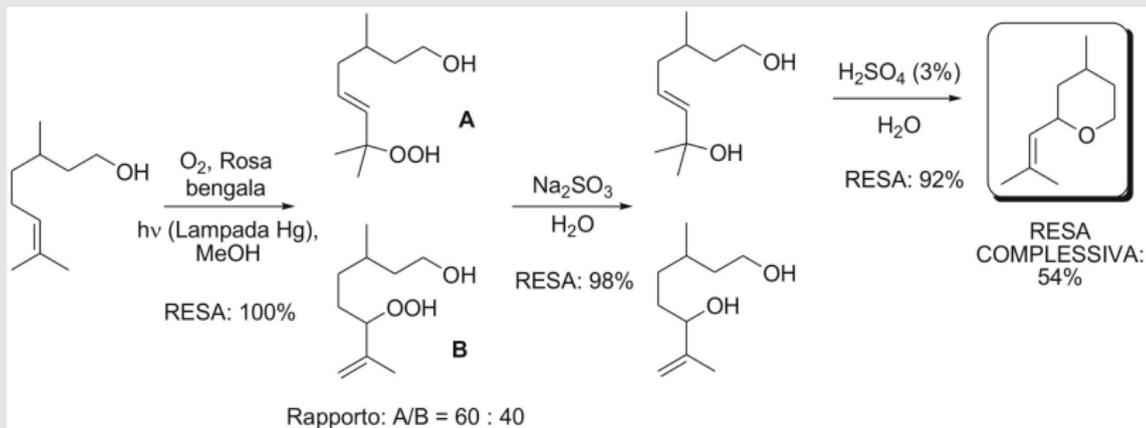
- Conversione del  $\beta$ -citronellolo in rosa-ossido: sei alternative differenti;

Obiettivi dello studio

- Analisi degli aspetti maggiormente impattanti (solo LCA)
- Valutazione del processo di riciclo solvente (solo LCA)
- **Confronto tra le sei alternative: ruolo della fotochimica (LCA & EATOS)**

*I alternativa**Sintesi industriale tramite lampada a vapori di Mercurio*

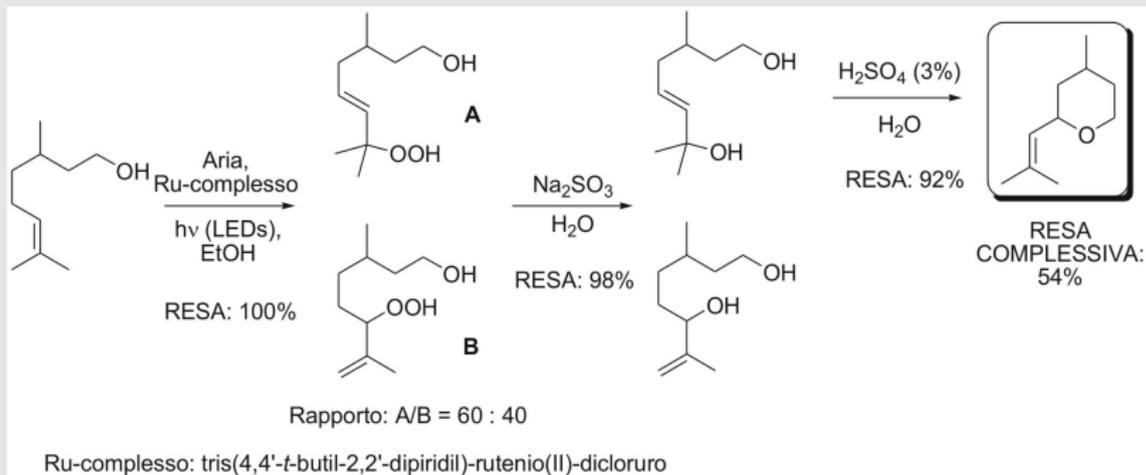
## Sintesi fotochimica su 3 passaggi



## II alternativa

## Sintesi tramite sorgente luminosa a LED

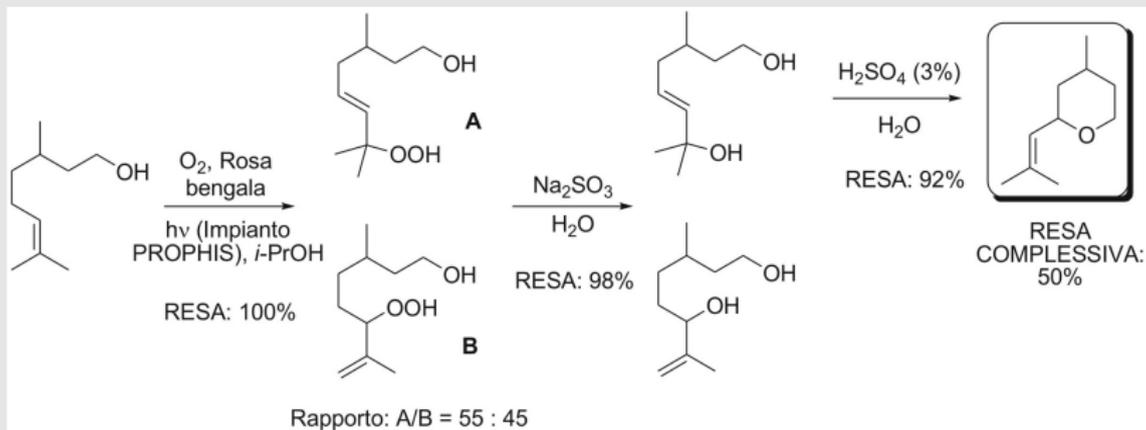
## Sintesi fotochimica su 3 passaggi



## III alternativa

## Sintesi tramite impianto solare PROPHIS

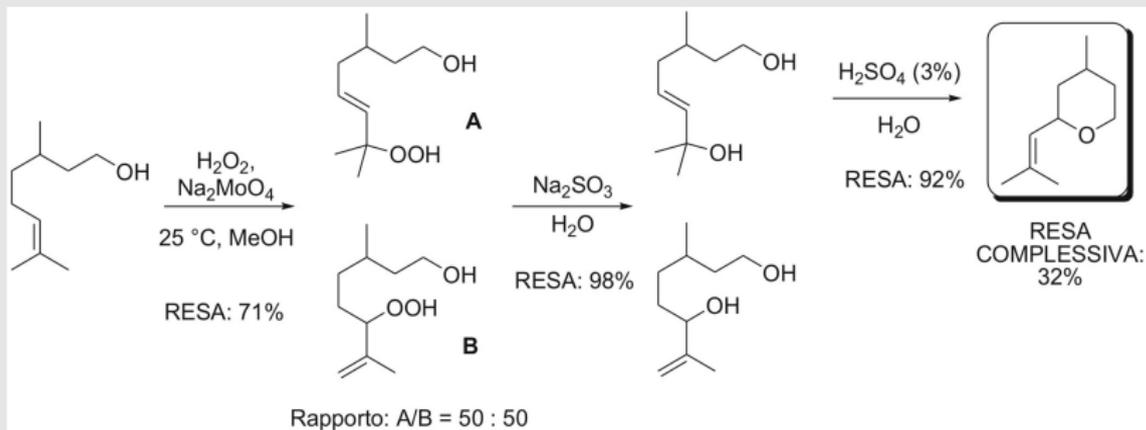
## Sintesi fotochimica su 3 passaggi



## IV alternativa

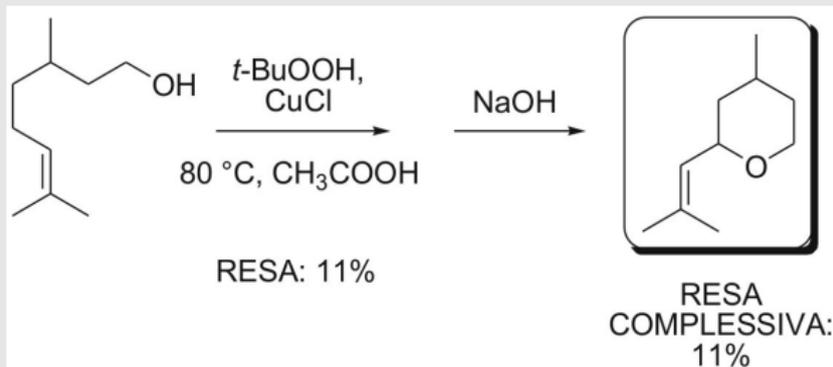
## Sintesi tramite catalizzatore a base di Molibdeno

## Sintesi termica su 3 passaggi



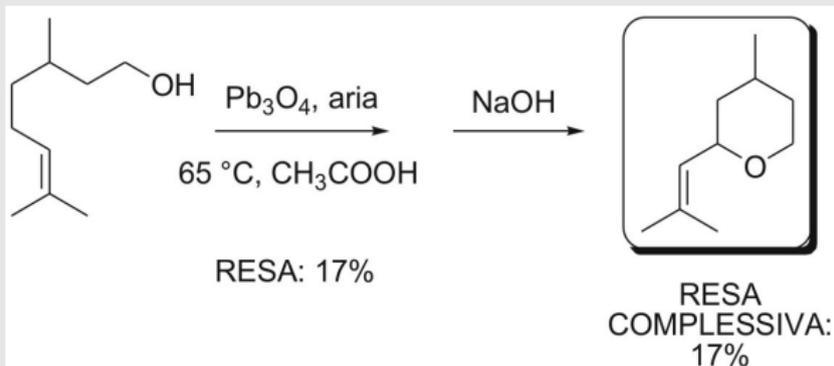
*V alternativa**Sintesi tramite catalizzatore a base di Rame*

Sintesi termica su 1 singolo passaggio



*VI alternativa**Sintesi tramite ossidante a base di Piombo*

Sintesi termica su 1 singolo passaggio



## Lo studio LCA

### Campo di applicazione

## Lo studio LCA

### Campo di applicazione

- **Funzione del sistema:** produzione rosa-ossido

## Lo studio LCA

### Campo di applicazione

- Funzione del sistema: produzione rosa-ossido
- **Unità funzionale: 1 kg di rosa-ossido**

## Lo studio LCA

### Campo di applicazione

- Funzione del sistema: produzione rosa-ossido
- Unità funzionale: 1 kg di rosa-ossido
- **Confini sistema:** dall'estrazione delle materie prime al fine-vita dei materiali e delle attrezzature usate, uso e trasporto compresi

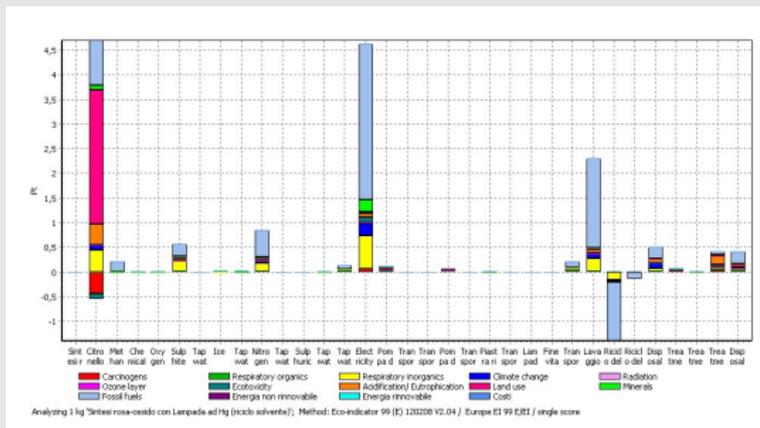
## Lo studio LCA

### Campo di applicazione

- Funzione del sistema: produzione rosa-ossido
- Unità funzionale: 1 kg di rosa-ossido
- Confini sistema: dall'estrazione delle materie prime al fine-vita dei materiali e delle attrezzature usate, uso e trasporto compresi
- **Modalità di calcolo: utilizzo del codice SimaPro 7**

## Valutazione degli aspetti maggiormente impattanti con Eco-Indicator99 Sintesi industriale tramite lampada a vapori di Mercurio

### Diagramma della valutazione per *single score*











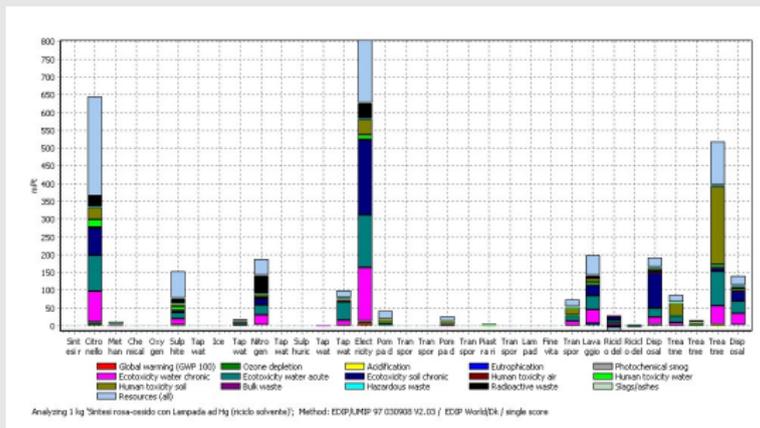




## Valutazione degli aspetti maggiormente impattanti con EDIP97

### Sintesi industriale tramite lampada a vapori di Mercurio

#### Diagramma della valutazione per *single score*

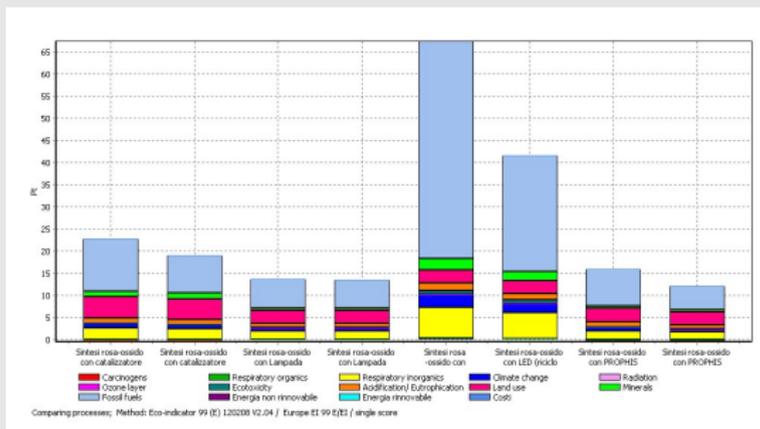


- **Energia elettrica: 28%**
- **Citronello: 20%**
- **Trattamento fognatura: 19%**

## Valutazione del processo di riciclo solvente con Eco-Indicator99

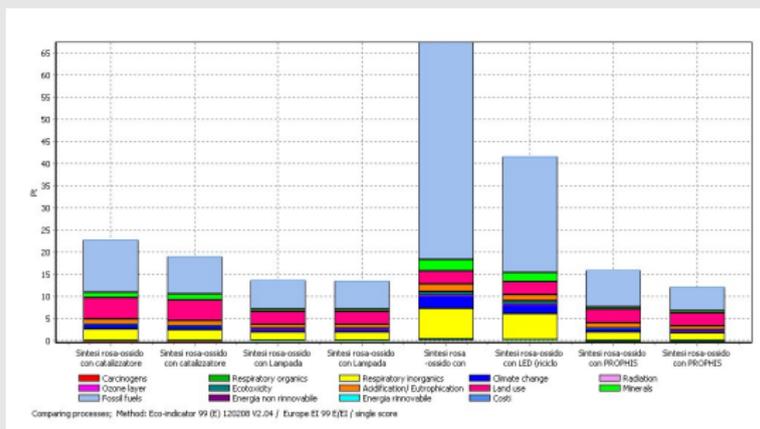
### Confronto delle sintesi con solvente alcolico

#### Diagramma delle 4 coppie di sintesi



## Valutazione del processo di riciclo solvente con Eco-Indicator99 Confronto delle sintesi con solvente alcolico

### Diagramma delle 4 coppie di sintesi

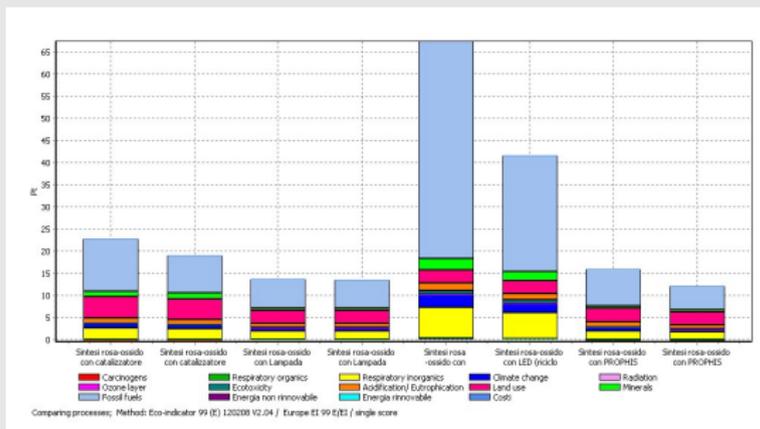


### ● Dimostrazione della convenienza del riciclo solvente

## Valutazione del processo di riciclo solvente con Eco-Indicator99

### Confronto delle sintesi con solvente alcolico

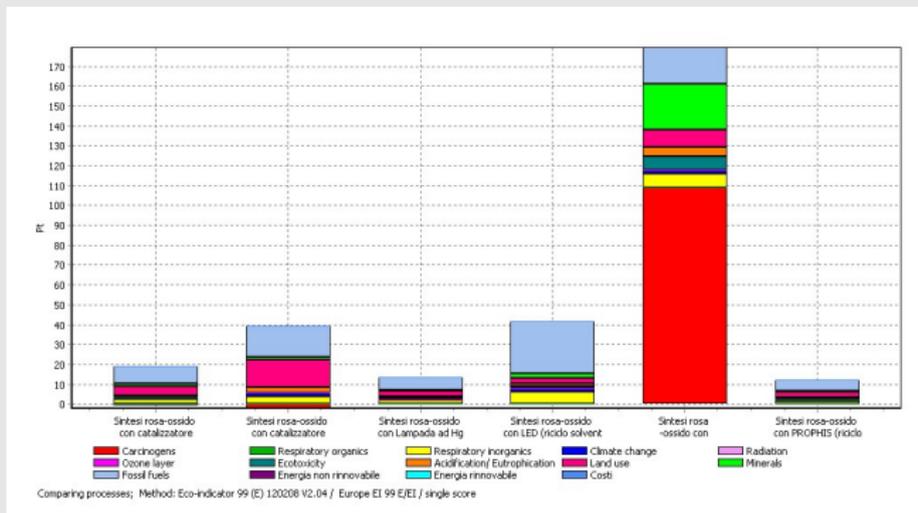
#### Diagramma delle 4 coppie di sintesi



- Dimostrazione della convenienza del riciclo solvente
- **Vantaggio proporzionale al volume di solvente!**

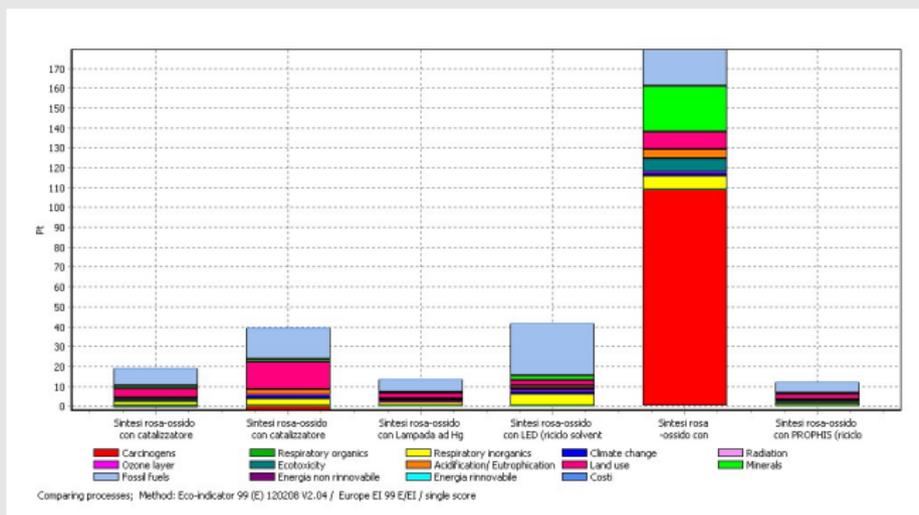
## Confronto delle 6 alternative sintetiche con Eco-Indicator99

### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con Eco-Indicator99

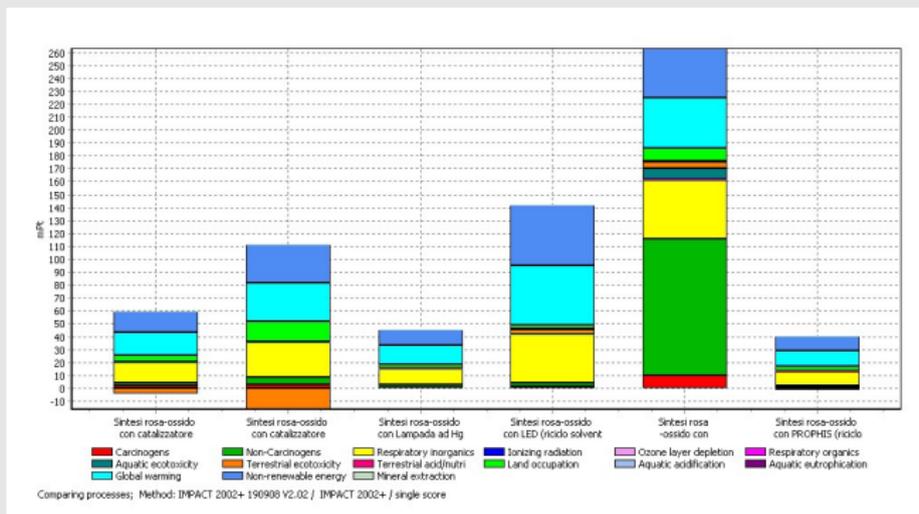
### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



- **Alternativa migliore: PROPHEIS**
- **Alternativa peggiore: Piombo**

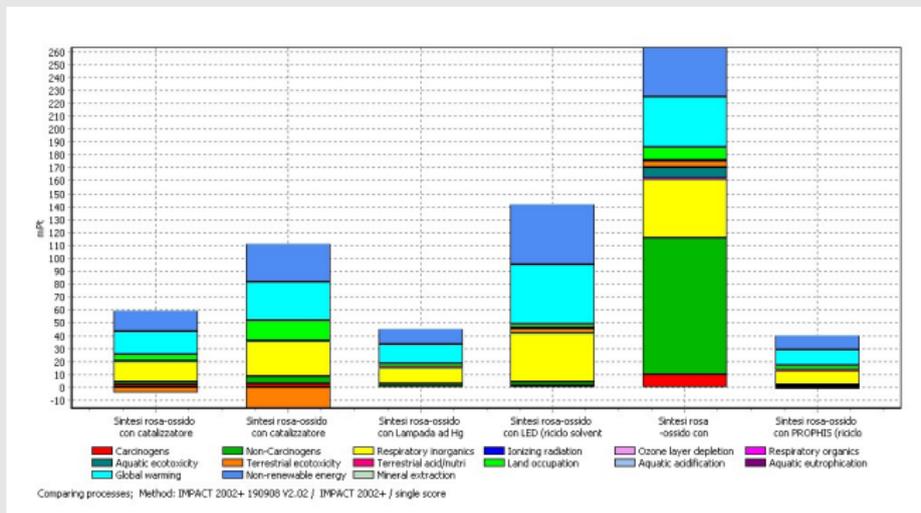
## Confronto delle 6 alternative sintetiche con Impact2002+

### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con Impact2002+

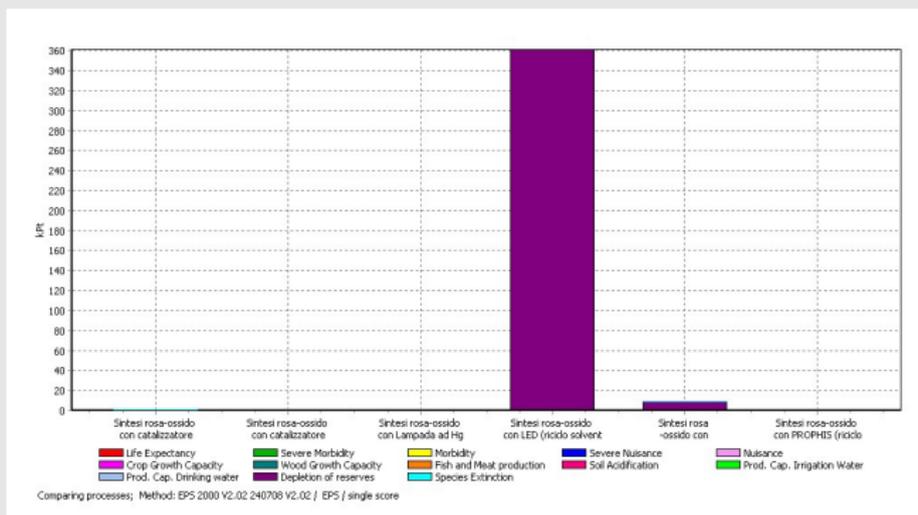
### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



- **Alternativa migliore: PROPHIS**
- **Alternativa peggiore: Piombo**

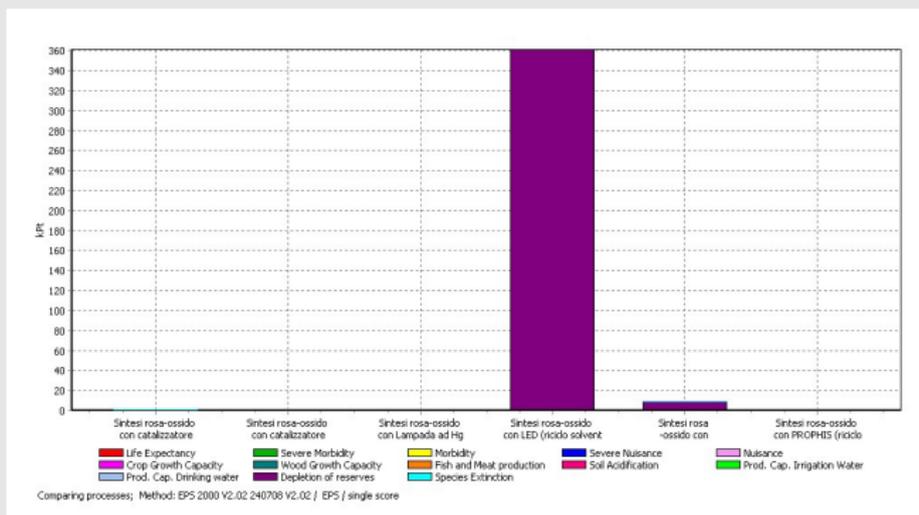
## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EPS

### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EPS

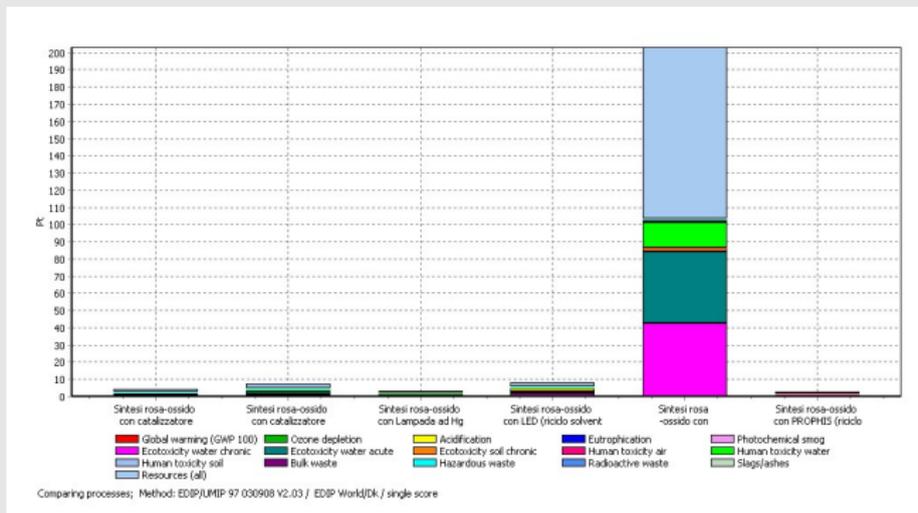
### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



- **Alternativa migliore: PROPHIS**
- **Alternativa peggiore: LED**

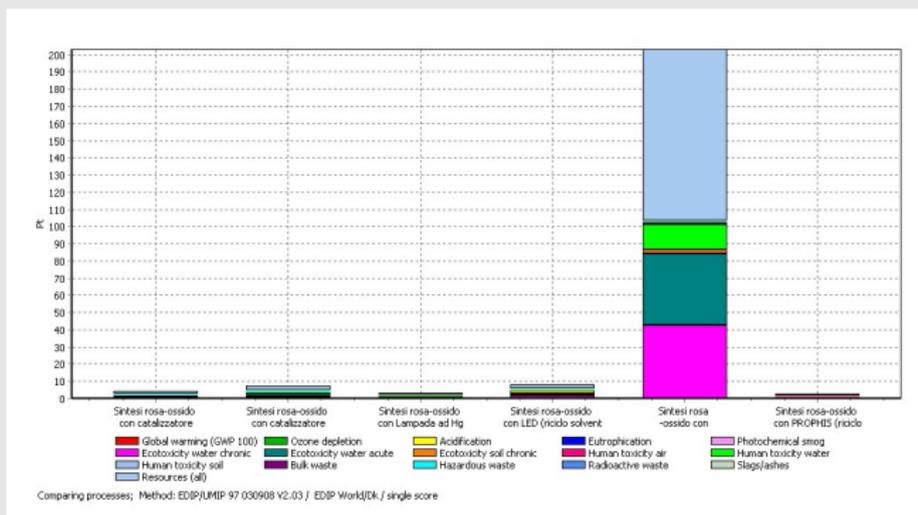
## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EDIP97

### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EDIP97

### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi

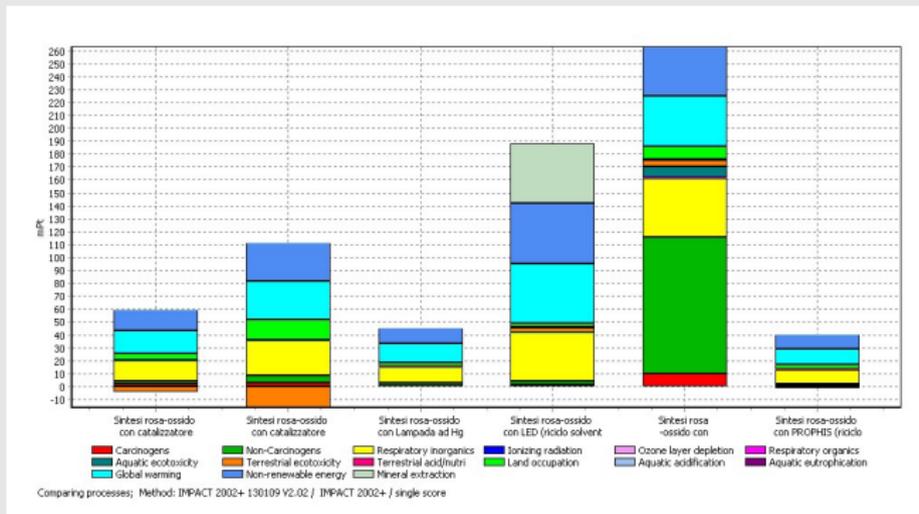


- **Alternativa migliore: PROPHIS**
- **Alternativa peggiore: Piombo**

## Confronto delle 6 alternative sintetiche con Impact2002+ modificato

Aggiunta del contributo dei metalli Ga, In e Ru

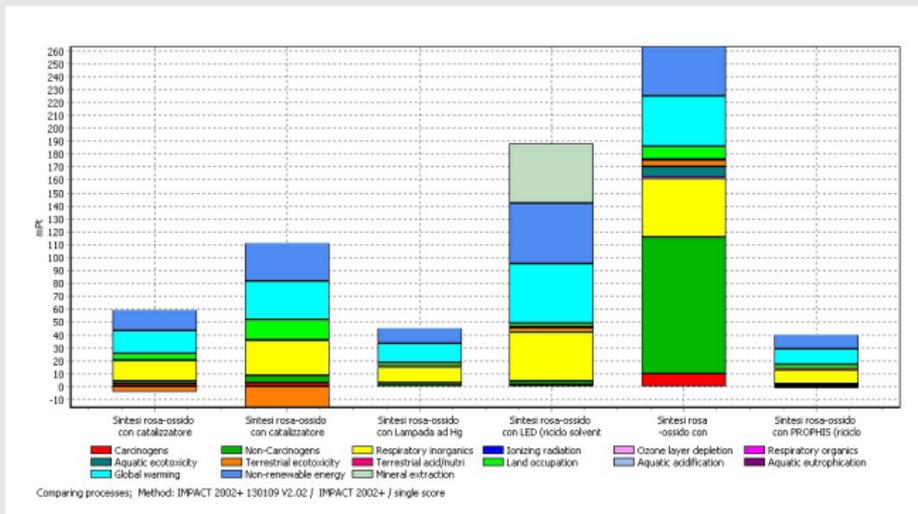
### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con Impact2002+ modificato

Aggiunta del contributo dei metalli Ga, In e Ru

### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



- **Alternativa migliore: PROPHIS**
- **Alternativa peggiore: Piombo**

*Valutazione dei costi esterni con Eco-Indicator99 e EPS*  
*Sintesi con lampada a vapori di Mercurio*

Confronto tra costi interni ed esterni

## Valutazione dei costi esterni con Eco-Indicator99 e EPS

### Sintesi con lampada a vapori di Mercurio

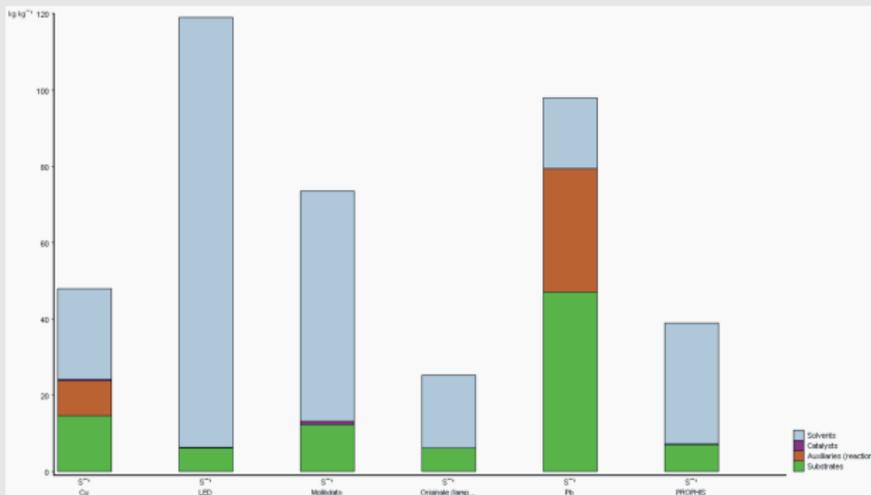
#### Confronto tra costi interni ed esterni

Costo Rosa-ossido al pubblico:	150 euro/kg
Costi interni:	975 euro/kg
Costi esterni (EI99):	223 euro/kg
Costi esterni (EPS):	101 euro/kg

## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

Determinazione dell'Indice di Massa -  $S^{-1}$

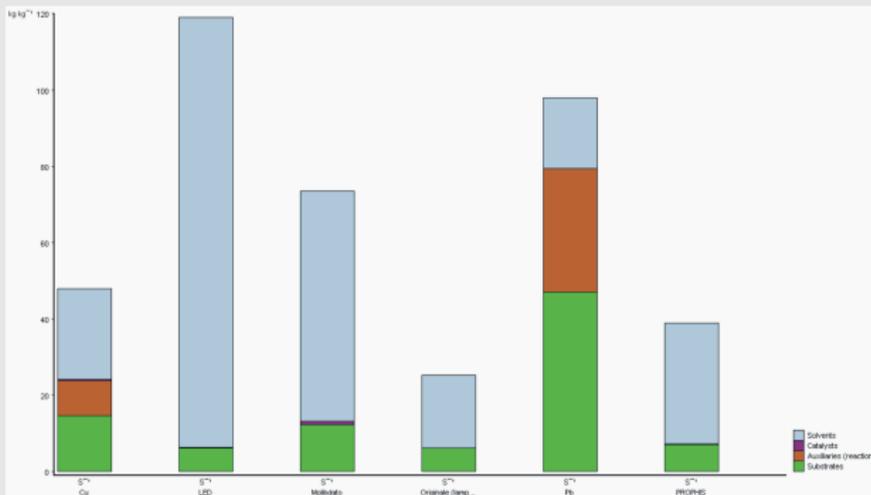
### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione dell'Indice di Massa - $S^{-1}$

#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi

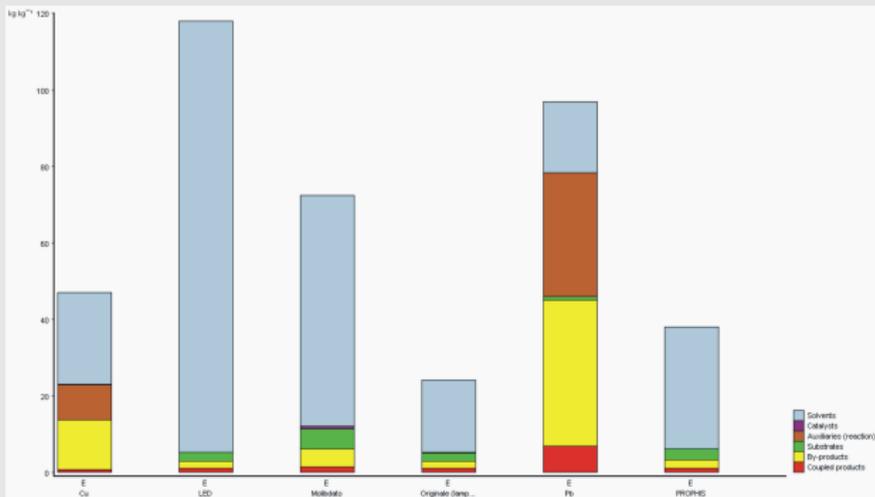


- **Alternativa migliore: Lampada Mercurio**
- **Alternativa peggiore: LED**

## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione del Fattore Ambientale - E

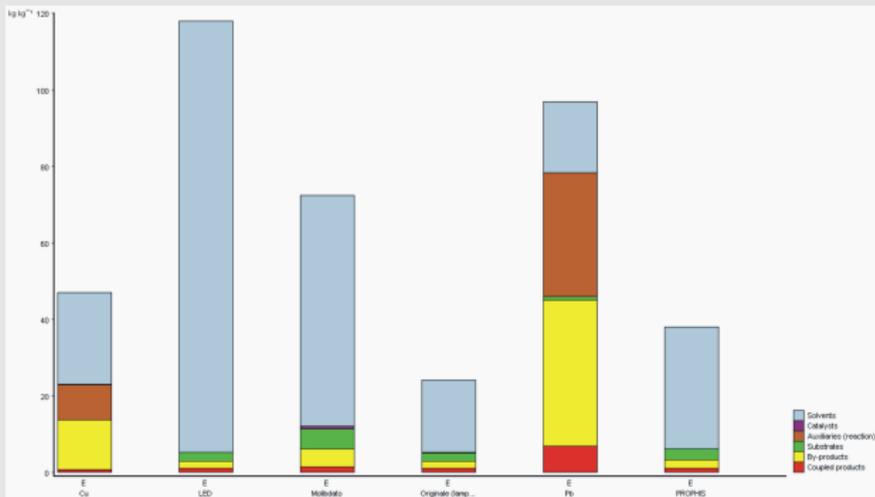
#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione del Fattore Ambientale - E

#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi

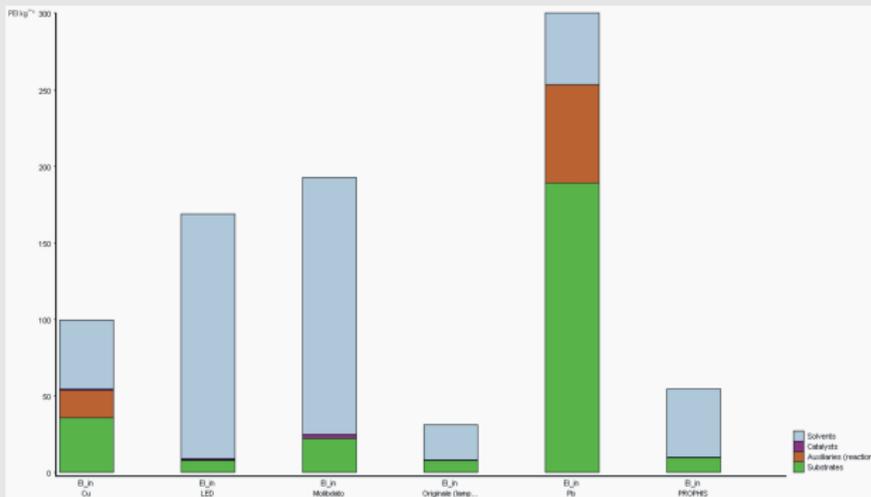


- **Alternativa migliore: Lampada Mercurio**
- **Alternativa peggiore: LED**

## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione dell'Indice Ambientale - $EI_N$

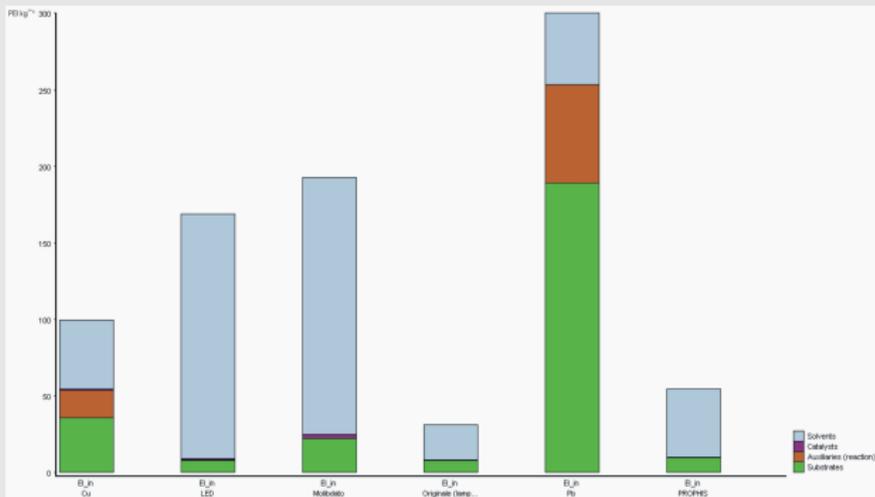
#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione dell'Indice Ambientale - $EI_{IN}$

#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi

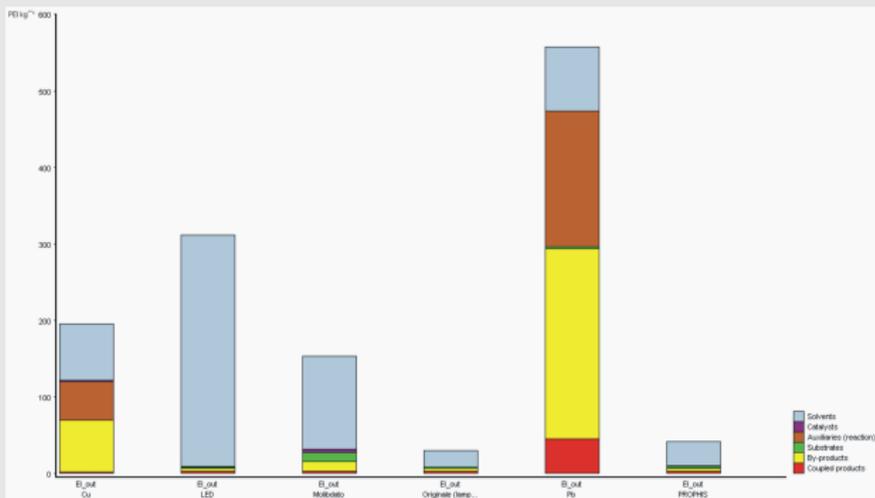


- **Alternativa migliore: Lampada Mercurio**
- **Alternativa peggiore: Piombo**

## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione dell'Indice Ambientale - $EI_{OUT}$

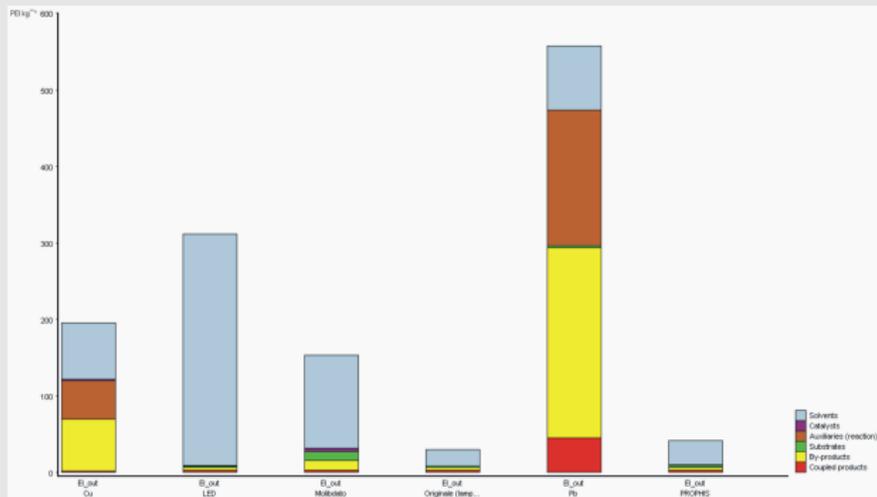
#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione dell'Indice Ambientale - $EI_{OUT}$

#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi

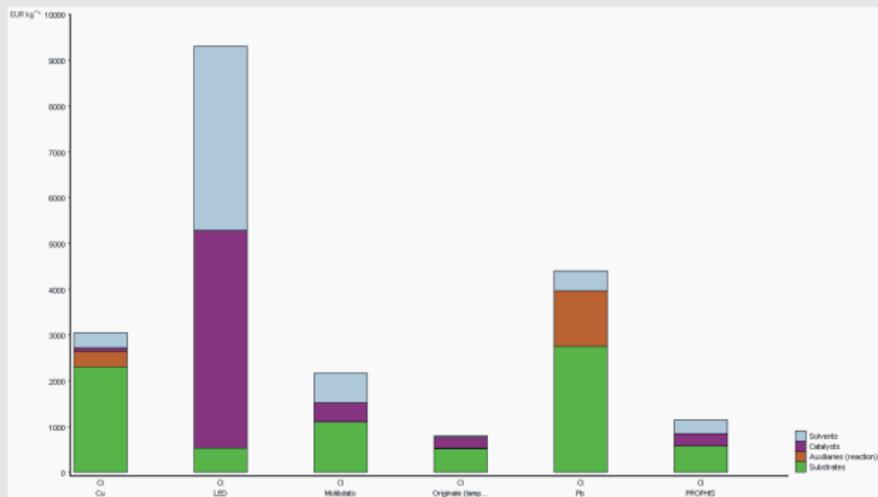


- **Alternativa migliore: Lampada Mercurio**
- **Alternativa peggiore: Piombo**

## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione dell'Indice di Costo - CI

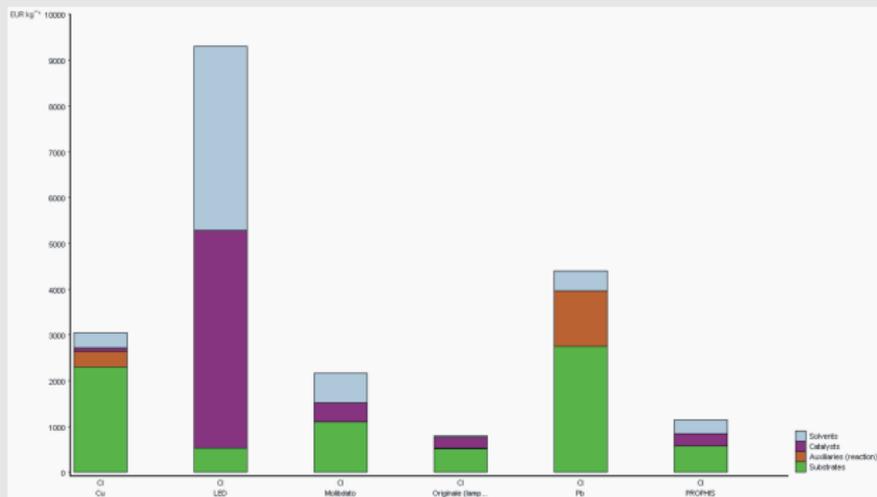
#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione dell'Indice di Costo - CI

#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi

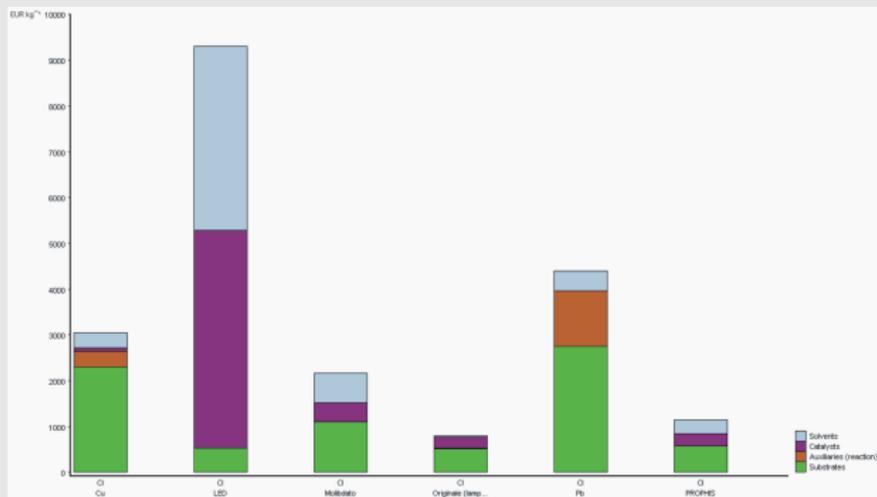


- **Alternativa migliore: Lampada Mercurio**
- **Alternativa peggiore: LED**

## Confronto delle 6 alternative sintetiche con EATOS

### Determinazione dell'Indice di Costo - CI

#### Diagramma della valutazione delle 6 sintesi



- Alternativa migliore: Lampada Mercurio
- Alternativa peggiore: LED
- **Confronto con dati LCA: valori leggermente inferiori**

## Conclusioni

### Il ruolo della fotochimica?

Confronto tra le sintesi

## Conclusioni

### Il ruolo della fotochimica?

#### Confronto tra le sintesi

- **Vantaggi delle sintesi via Lampada Hg o PROPHIS**

**Importanza di:**

- messa a punto del processo;**
- solvente;**
- tossicità delle sostanze;**
- consumo delle risorse;**

## Conclusioni

### Il ruolo della fotochimica?

#### Confronto tra le sintesi

- Vantaggi delle sintesi via Lampada Hg o PROPHIS

Importanza di:        messa a punto del processo;  
                                  solvente;  
                                  tossicità delle sostanze;  
                                  consumo delle risorse;

#### Confronto tra i metodi

- **Sostanziale accordo tra i metodi;**

## Conclusioni

### Il ruolo della fotochimica?

#### Confronto tra le sintesi

- Vantaggi delle sintesi via Lampada Hg o PROPHIS

Importanza di:            messa a punto del processo;  
                                  solvente;  
                                  tossicità delle sostanze;  
                                  consumo delle risorse;

#### Confronto tra i metodi

- Sostanziale accordo tra i metodi;
- **Maggiori informazioni tramite LCA;**  
**Maggiore semplicità di EATOS;**