

Roteiro de atividade prática

Curso: Engenharia de Computação

Disciplina: Desconstruindo a Matéria

Período letivo: 2020-1

Professora: Joice Miagava

Professor auxiliar: Hugo Hashimoto

Número e título da aula prática: LB3 – Estudo de caso: Polímeros

Problema proposto (questão / desafio)

A atividade “LB3 – Estudo de caso: Polímeros” será desenvolvida ao longo de 3 aulas. Cada grupo receberá os resultados de análises de dois polímeros distintos. Os resultados são das análises de espectroscopia no infravermelho e ensaio de tração. Com isso, os objetivos da atividade são: identificar, caracterizar e comparar os polímeros recebidos.

Serão entregues os resultados de dois polímeros (identificados por um número cada) e poderão ser: policarbonato (PC), polietileno de alta densidade (PEAD), polietileno de baixa densidade (PEBD), polimetacrilato de metila (PMMA - Acrílico), polipropileno (PP), ou politetrafluoretileno (PTFE - Teflon).

A espectroscopia no infravermelho informa quais os grupos funcionais presentes no polímero e, por isso, deve ser utilizada para identificar o mero que constitui a amostra. De modo complementar, o ensaio de tração indica a configuração da cadeia do polímero a partir de suas propriedades mecânicas.

Feita a identificação e caracterização, o objetivo final é comparar ambos os polímeros investigados. Nessa comparação, é esperada uma discussão sobre a influência dos grupos funcionais e das estruturas das cadeias no ponto de fusão, temperatura de transição vítrea, rigidez e resistência.

Fundamentos e conceitos abordados

Tração em polímeros

Polímeros são macromoléculas formadas por unidades que se repetem (meros) ligadas por ligações covalentes, constituindo cadeias. Essas cadeias não se arranjam de forma 100% organizada e se encontram enroladas. Como consequência, a deformação de polímeros sob tração está relacionada ao desenrolamento dessas cadeias.

Desse modo, o formato da curva obtida pelo ensaio de tração de um polímero pode ser bastante diferente daquela observada para um metal. A figura 1 mostra os resultados de ensaio de tração de 3 polímeros distintos. Essa distinção entre os polímeros ocorre devido à diferença na configuração de suas cadeias, as quais serão mais bem discutidas em sala de aula.

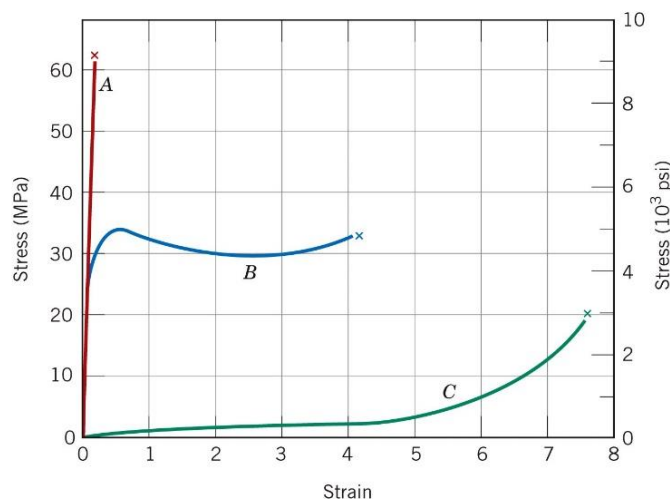


Figura 1. Curvas de tensão versus deformação obtidas dos ensaios de tração de 3 polímeros distintos [1].

Espectroscopia no infravermelho

A espectroscopia no infravermelho é uma técnica bastante utilizada para a identificação dos grupos funcionais presentes em um polímero. Nessa técnica, a luz infravermelha com comprimentos de onda entre 4000 cm^{-1} e 600 cm^{-1} incide na amostra e determinados comprimentos de onda são absorvidos. A absorção ocorre para aqueles comprimentos de onda correspondentes às frequências de vibração das ligações químicas dos grupos funcionais presentes.

Para exemplificar o fenômeno, a figura 2 representa o estiramento das ligações C-H em um grupo CH_2 . Como esse estiramento ocorre com frequência equivalente ao comprimento de 32853 cm^{-1} , se uma onda com essa frequência incidir na molécula, ocorrerá a absorção dessa onda.

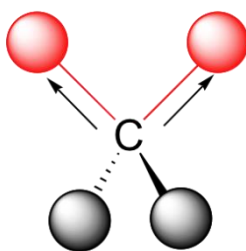


Figura 2. Esquema de estiramento simétrico em grupo CH_2 . Fonte: chem.libretexts.org [2].

Na figura 3, são apresentados os espectros coletados para 3 materiais: poliamida 6 (PA6 - Nylon), policarbonato com ABS (PC-ABS) e polietileno (PE). Os “picos” observados nos espectros indicam os comprimentos de onda que foram absorvidos pelo material. Por exemplo: o “pico” em 3300 cm^{-1} no espectro no PA6 é característico das ligações N-H presentes nesse polímero.

Um vídeo explicando melhor esses fundamentos e mostrando como a análise foi realizada está disponível no YouTube (link no Blackboard junto a esse roteiro).

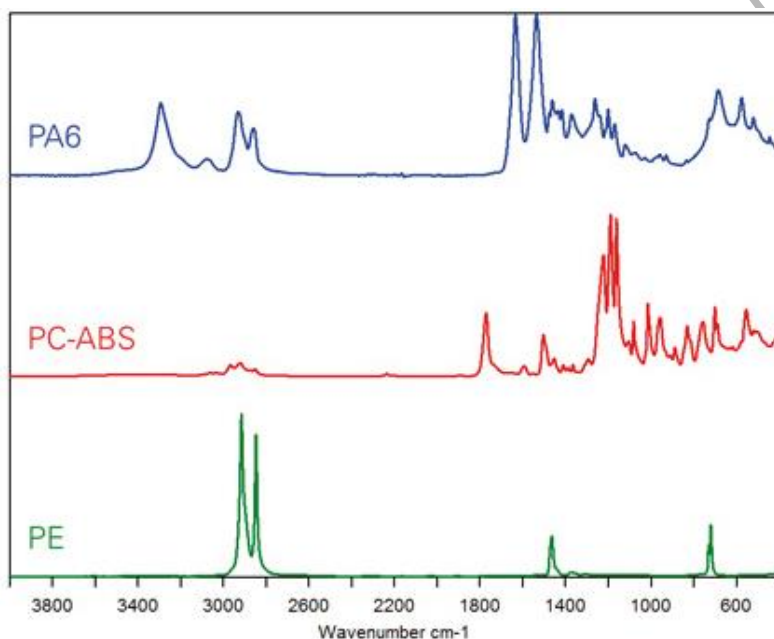


Figura 3. Espectros no infravermelho de 3 polímeros: PA6, PC-ABS e PE.

Fonte: plastics-polymer-analysis.com [3].

Propriedades térmicas e configuração de cadeia

É importante notar que existem outros conceitos sobre polímeros que são abordados nas videoaulas de teoria que são importantes para a discussão de resultados dessa atividade. Entre esses conceitos, estão: propriedades térmicas do polímero, como a configuração da cadeia influencia nas propriedades mecânicas e térmicas.

Etapas da atividade (programa)

Dado o contexto, são definidas três etapas principais dessa atividade: identificação do mero por espectroscopia no infravermelho; caracterização e validação dos polímeros de acordo com os resultados do ensaio de tração; e comparação dos polímeros aplicando as teorias vistas em sala de aula.

Espectroscopia no infravermelho

Os espectros coletados como resultados da espectroscopia no infravermelho dos polímeros a serem investigados estão disponíveis para seu grupo no formato .csv no canal de seu grupo do Teams em “Arquivos”, estes devem ser plotados e os “picos” devem ser identificados.

Indique as ligações químicas correspondentes aos principais “picos” observados no espectro e, então, identifique seu polímero. As tabelas do Anexo I podem ser utilizadas como referência nessa etapa.

Ensaio de tração e validação no CES Edupack

No canal de seu grupo está disponível também o resultado do ensaio de tração de um corpo de prova de cada polímero a ser investigado. A partir do ensaio de tração, o módulo de elasticidade deve ser determinado com precisão, ou seja, é necessário um gráfico com os dados obtidos pelo extensômetro. Como o extensômetro coleta dados apenas no início do ensaio (deformação de 0,8%), é necessário traçar também o gráfico contendo os resultados do ensaio completo. Esse último gráfico permitirá que as demais propriedades, como limite de escoamento, possam ser observadas.

Note que a interpretação dos gráficos de tração em polímeros deve ser diferente da realizada em metais. Por exemplo: o limite de escoamento para materiais do tipo B da figura 1 é determinado pelo valor do primeiro “pico” na curva tensão versus deformação.

Com os valores das propriedades em mão, valide seus resultados com o gráfico da figura 4. Em alguns casos, esse gráfico pode servir também para identificar um polímero não identificado por espectroscopia no infravermelho.

Vídeos para você comparar visualmente os comportamentos durante o ensaio de tração, além de checar a aparência dos polímeros investigados, estão disponíveis no YouTube (links no Blackboard). Esses vídeos podem, de certa forma, te auxiliar na discussão. Contudo, lembre-se que os gráficos mostrados pelo software pelo vídeo não são exatamente os mesmos que você tem que traçar.

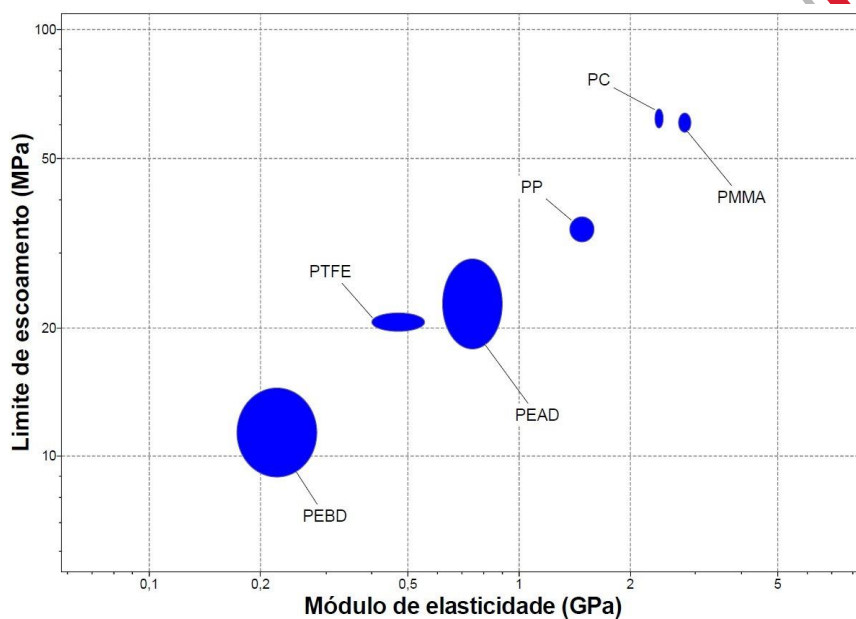


Figura 4. Gráfico obtido no software CES Edupack com o módulo de elasticidade e limite de escoamento dos polímeros em questão.

Comparação de propriedades e cadeias poliméricas

Comparar os polímeros recebidos, correlacionando os dados e as estruturas das cadeias com as propriedades mecânicas mensuradas, os pontos de fusão e as temperaturas de transição vítrea apresentadas na tabela I.

Tabela I. Temperatura de transição vítrea (T_g) e temperatura de fusão (T_m) de cada polímero.

Polímero	T_g (°C)	T_m (°C)
PC	142 a 158	--
PEAD	-125 a -90	125 a 132
PEBD	-125 a -90	98 a 115
PMMA	96 a 104	--
PP	-14 a -6	161 a 170
PTFE	117 a 130	315 a 339

Evidências do aprendizado

Ao final da investigação, deve ser entregue um relatório que inclua uma discussão de resultados com embasamento nas teorias de microestruturas e propriedades de polímeros. Portanto, o relatório estará completo se apresentar os seguintes tópicos:

- Introdução que contextualize e apresente os objetivos do trabalho;
- Conteúdo teórico relevante para a compreensão e análise do caso;
- Descrição dos procedimentos e do tratamento de dados do ensaio de tração;
- Explicação dos fundamentos da espectroscopia no infravermelho;
- Resultados obtidos e tratados;
- Discussão de resultados, correlacionando a configuração da cadeia do polímero, as propriedades caracterizadas e as propriedades térmicas;
- Conclusões do trabalho.

Esse relatório deve ser escrito para um leitor que tem conhecimentos básicos em engenharia de materiais e pode se interessar em reproduzir o trabalho descrito. Portanto, desenvolva um documento organizado e claro para que o trabalho seja reprodutível. Um modelo de entrega e dicas de redação estão disponíveis no Blackboard junto a esse roteiro.

As turmas apresentam datas de entregas distintas de acordo com a grade horária e calendário. Na tabela II são apresentadas as datas para cada turma.

Tabela II. Datas de entrega de acordo com a turma.

Turma	Entrega prévia	Entrega final
Comp 1	20/05	31/05
Comp 2	22/05	31/05

Referências bibliográficas

[1] CALLISTER, W. D.; RETHWISCH, D. G. Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach, 4th edition, Wiley, 2012.

[2] https://chem.libretexts.org/LibreTexts/University_of_California_Davis/UCD_Chem_002CH/UNIT_IV%3A_MOLECULAR_SPECTROSCOPY/20.2%3A_Vibrations_and_Rotations_of_Molecules%3A_Infrared_and_Microwave_Spectroscopy Data de acesso: 27 de abril de 2018.

[3] <http://www.plastics-polymer-analysis.com/> Data de acesso: 27 de abril de 2018.

ANEXO I

Tabela A. Comprimento de onda equivalente à vibração de ligações químicas do PC.

Tipo de ligação	Número de onda (cm ⁻¹)
C-H alifáticos	2960 - 2850
C-H alceno	3000 - 2840
C=O de éster	1850 - 1630
C=C de anel aromático	1600 - 1400
C-O de ésteres	1300 - 1050
C-H fora do plano	1050 - 350

Tabela B. Comprimento de onda equivalente à vibração de ligações químicas do PEAD.

Tipo de ligação	Número de onda (cm ⁻¹)
C-H alifáticos	2960 - 2850
CH ₂	1470 - 1430
C-H metil	1465 - 1450
C-H fora do plano	1050 - 350

Tabela C. Comprimento de onda equivalente à vibração de ligações químicas do PEBD.

Tipo de ligação	Número de onda (cm ⁻¹)
C-H alifáticos	2960 - 2850
CH ₂	1470 - 1430
C-H metil	1465 - 1450
C-H fora do plano	1050 - 350

Tabela D. Comprimento de onda equivalente à vibração de ligações químicas do PMMA.

Tipo de ligação	Número de onda (cm ⁻¹)
C-H alifáticos	2960 - 2850
C=O de ácidos carboxílicos	1760 - 1710
CH ₂	1470 - 1430
C-O de ácidos carboxílicos	1420 e 1300 - 1200
C-O de ésteres	1300 - 1050
C-H fora do plano	1050 - 350

Tabela E. Comprimento de onda equivalente à vibração de ligações químicas do PP.

Tipo de ligação	Número de onda (cm ⁻¹)
C-H alifáticos	2960 - 2850
CH ₂	1470 - 1430
CH ₃	1450 - 1350
C-H fora do plano	1050 - 350

Tabela F. Comprimento de onda equivalente à vibração de ligações químicas do PTFE.

Tipo de ligação	Número de onda (cm ⁻¹)
C-F	1400 - 1000
C-H fora do plano	1050 - 350