

Refinamento da estrutura cristalina de amostras de polipropileno isotático pelo método de Rietveld

L. G. Martinez^{1*}, M. T. D. Orlando², H. P. S. Corrêa³, W. L. Oliani¹, H. Otaguro¹, L. F. C. P. Lima¹, D. F. Parra¹, A. B. Lugão¹

1- Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN/CNEN-SP

2- Universidade Federal do Espírito Santo – UFES

3- Universidade Federal do Mato Grosso do Sul - UFMS

A estrutura cristalina de amostras de polipropileno isotático (iPP) foi estudada por meio do refinamento de dados de difração de raios X com fonte síncrotron, pelo método de Rietveld. As amostras, denominadas A (H210) e B (H803), foram cedidas pela empresa Braskem na forma de grãos com índice de fluidez 24 e 0,5 dg.min⁻¹ e massa molar z-média 580.000 e 1.040.000 g.mol⁻¹, respectivamente. O índice de fluidez foi obtido usando um plastômetro Modular Melt Flow da CEAST, a 230° C com carga de 2,16 kg e a massa molar por análise de Cromatografia de Permeação em Gel (GPC) de alta temperatura. Os corpos de prova foram obtidos na forma de disco ($e = 2$ mm e $\Phi = 25$ mm) por prensagem dos grãos a 190° C por 15 min (10 min sem pressão e 5 min com pressão de 8 MPa) seguida de resfriamento em água à temperatura ambiente. As medidas de difração de raios X foram obtidas com radiação síncrotron (D12A-XRD1 LNLS). O refinamento partiu do modelo estrutural proposto por Natta [1]: estrutura monoclinica e grupo espacial (C12/c). Os valores obtidos para o parâmetro de cela unitária da amostra A (H210) foram $a = 6,872(1)$ Å, $b = 21,291(2)$ Å, $c = 6,777(2)$ Å, $\beta = 103,49(3)^\circ$ e, para a amostra B (H803), $a = 6,729(1)$ Å, $b = 20,830(1)$ Å, $c = 6,614(2)$ Å e $\beta = 103,52(3)^\circ$.

Referencia:

[1] G. Natta, P. Corradini; Il Nuovo Cimento, V. 15, Suppl. 1, 1960.

Os autores agradecem ao CNPq (proj. CNPq # 480337/2007-1) e ao LNLS.

* lgallego@ipen.br