



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO.**

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN.

**“ FUNCIONALIZACIÓN EN MEZCLAS DE
POLIPROPILENO- POLIETILENTEREFTALATO
DE DESECHO PARA EL MEJORAMIENTO DE
SUS PROPIEDADES”**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE LICENCIADA EN

QUÍMICA INDUSTRIAL

PRESENTA

EVA VILLEGAS VILLEGAS

ASESORA: M. en C. MARÍA DEL ROSARIO RODRÍGUEZ HIDALGO

CUAUTITLÁN IZCALLÍ, ESTADO DE MEXICO.

2013



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
UNIDAD DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR
DEPARTAMENTO DE EXÁMENES PROFESIONALES**

U. N. A. M.

ASUNTO: **VOTO APROBATORIO**

**DRA. SUEMI RODRÍGUEZ ROMO
DIRECTORA DE LA FES CUAUTITLÁN
PRESENTE**



**ATN: L.A. ARACELI HERRERA HERNÁNDEZ
Jefa del Departamento de Exámenes
Profesionales de la FES Cuautitlán**

Con base en el Art. 28 del Reglamento de Exámenes Profesionales nos permitimos comunicar a usted que revisamos la: **TESIS**

Funcionalización en mezclas de polipropileno-polietilentereftalato de desecho para el mejoramiento de sus propiedades

Que presenta la pasante: **Eva Villegas Villegas**

Con número de cuenta: **40307991-9** para obtener el Título de: **Lic. En Química Industrial**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO**.

ATENTAMENTE

“POR MI RAZA HABLARA EL ESPÍRITU”

Cuautitlán Izcalli, Méx. a 17 de octubre de 2012.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	IQ. Guadalupe Franco Rodríguez	
VOCAL	M. en C. Ma. Del Rosario Rodríguez Hidalgo	
SECRETARIO	M. en C. Bernardo Francisco Torres	
1er SUPLENTE	Q. Ofelia Esperanza Arroyo Fal	
2do SUPLENTE	IQ. Guillermo Martínez Morua	

NOTA: los sinodales suplentes están obligados a presentarse el día y hora del Examen Profesional (art. 120).

HHA/pm

DEDICATORIA

A mis padres: Luis Villegas Vargas y Francisca Villegas Santiago por todo lo que soy, gracias por vuestro esfuerzo.

A mis Hermanos Luis, Evo, Salo, Paco, Poli, Mari, Vena, Erick por estar siempre ahí.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar quiero dar mi más sincero agradecimiento y reconocimiento a mi asesora la M en C María del Rosario Rodríguez Hidalgo por darme la oportunidad de realizar este proyecto, por todo el apoyo académico y principalmente por la amistad que me brinda en la dirección de esta Tesis.

Un agradecimiento especial al Dr. Cesar Soto Figueroa por su participación en la realización del presente trabajo.

A La Q. Maricela Gutiérrez Franco del Laboratorio IR, UV-VIS, USAI, UNAM. Por la facilitación en los estudios de espectroscopia.

Q. Margarita Portilla Bauza y Q. Elvia del Socorro Reynosa Herrera del Laboratorio Análisis Térmico USAI, UNAM. Por la facilitación en los estudios térmicos.

Dr. Luis Alberto Vicente Hineztroza de PAPIIT “Estudio Teórico de Copolímeros bloque procesos de Mineralización en inversión de Vía pH, Temperatura y Fuerza.

Y por último quiero expresar mi agradecimiento y recuerdo a mis amigas y compañeros de generación QI 8va por todo el camino que recorrimos juntos.

INDÍCE

GLOSARIO	7
OBJETIVOS.....	9
INTRODUCCIÓN	10
CAPITULO I INTRODUCCIÓN A LOS POLIMEROS	
1.1 Reacciones de polimerización	12
1.2 Estereoquímica de polímero.....	13
1.3 Copolimerización	14
1.4 Estructura de los polímeros	15
1.5 Cristalinidad de los polímeros	16
1.6 Propiedades térmicas de los polímeros	17
CAPITULO II MEZCLA DE POLÍMEROS	
2.1 Conceptos Termodinámicos.....	19
2.2 Clasificación de mezclas	20
2.3 Agentes de compatibilización	23
2.4 Métodos de Compatibilización.....	24
2.5 Factores que Influyen en la Compatibilización	26
2.6 Métodos de Mezclado	26
CAPITULO III POLIPROPILENO	
3.1 Historia del polipropileno.....	27
3.2 Estructura del Polipropileno.....	27
3.3 Tacticidad	28
3.4 Tipos de Polipropileno	28
3.5 Polimerización del Polipropileno	29
3.6 Propiedades del Polipropileno.....	29
3.7 Aplicaciones.....	32

3.8 Ventajas y Desventajas.....	32
3.9 Polipropileno Modificada con Anhídrido Maleico.....	33
CAPITULO IV POLIETILENTEREFTALATO	
4.1 Síntesis del PET.....	34
4.2 Estructura del PET.....	34
4.3 Propiedades del PET	35
4.4 Ventajas y Desventajas del PET.....	35
4.5 Aplicaciones del PET	36
CAPITULO V MÉTODOS DE ANÁLISIS Y CARACTERIZACIÓN	
5.1 Espectroscopia de Infrarrojo	37
5.2 Calorimetría de Barrido (DSC)	42
CAPITULO VI DESARROLLO EXPERIMENTAL	
6.1 Materiales y Reactivos	45
6.2 Metodología	47
CAPITULO VII RESULTADOS Y ANÁLISIS	
7.1 Mecanismo Probable de la reacción de injerto.....	48
7.2 Determinación del grado de inserción.....	49
7.3 Espectroscopia de infrarrojo para la inserción de anhídrido maleico.....	51
7.4 Análisis de preparación de mezclas.....	55
7.5 Espectroscopia de infrarrojo para las mezclas PP/PET	57
7.6 Mecanismo probable de reacción de la mezcla.....	60
7.7 Calorimetría diferencial de barrido para la mezcla PP/PET.....	62
CONCLUSIONES	68
BIBLIOGRAFÍA	70
ANEXOS	73

GLOSARIO

AM	Anhídrido maleico
ASA	Acrilonitrilo-estireno éster acrílico
Cm^{-1}	Centímetros a la menos uno
CO_2	Bióxido de carbono
DSC	Calorimetría Diferencial de Barrido
FTIR	Espectroscopia de Infrarrojo por Transformada de Fourier
g/m^3	Gramos sobre centímetro cubico
HDPE	Polietileno de alta densidad
Hz	Herz
IC	Índice de carbonilo
IR	Infrarrojo
Izot	Valor indicativo de la fragilidad o la resistencia a los choques
KBr	Bromuro de potasio
LCST	Temperatura de solución critica inferior
LDPE	Polietileno de baja densidad
MF	Melanina Formaldehido
min	Minutos
mm	Milímetros
Mpa	Mega pascales
NaCl	Cloruro de sodio
NR	Caucho Natural
PA	Poliamida
PB	Peróxido de benzoilo
PBR	Poli butadieno
PBT	Poli butadieno Teraftalato
PC	Policarbonato
PE	Polietileno
PET	Polietilentereftalato
PF	Fenol-formaldehído
PMMA	Poli(metacrilato de metilo)
POM	Polioximetileno poliformaldehído (paliacetal)
PP	Polipropileno
PP-AM	Copolímero de injerto polipropileno-anhídrido maleico
PPO	Polióxido de fenilo
PS	Poliestireno
PVC	Policloruro de vinilo
SAN	Estireno acrilonitrilo

t	Tiempo
T	Temperatura
T _c	Temperatura de cristalización
T _d	Temperatura de degradación
T _g	Temperatura de transición vítrea
T _m	Temperatura de fusión
TPU	Poliuretano Termoplástico
UCST	Temperatura de solución crítica superior
V _i	Volumen molar
V	Volumen
ΔG_m	Energía libre de Gibbs
ΔH_m	Entropía de la muestra
$\Delta S_m^{(c)}$	Entropía Combinatorial
μm	Micras
ϕ	Fracción molar
%	Por ciento
(CH ₃) ₂ CO	Acetona
°C	Grados centígrados

OBJETIVO GENERAL

- ✓ Funcionalizar polipropileno de desecho mediante injertos de anhídrido maleico con el propósito de utilizarlo para la compatibilidad en la mezcla con polietilentereftalato de desecho para el reciclado de ambos materiales mejorando sus propiedades.

OBJETIVO PARTICULARES

- ✓ Optimizar la reacción de injerción de polipropileno (PP) con anhídrido maleico.
- ✓ Elegir mediante análisis de espectroscopia infrarojo (FTIR) el mejor % de injerción en polipropileno para utilizarlo en la mezcla.
- ✓ Evaluar la compatibilidad de la mezcla polipropileno-polietilentereftalato (PP-PET) mediante espectroscopia infrarojo (FTIR).
- ✓ Evaluar el comportamiento térmico de la mezcla PP-PET mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC).

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, los plásticos son productos muy utilizados y fabricados en grandes cantidades sin embargo, debido a su difícil degradación ambiental, son uno de los contaminantes más significativos de los suelos y océano. Las investigaciones frente al problema de los plásticos, están dirigiéndose a la búsqueda de diferentes alternativas de reuso.

La obtención de mezclas de polímeros con propiedades adecuadas, es uno de los métodos que pueden utilizarse en el reciclado de los residuos plásticos, para minimizar el problema ambiental generado por los mismos. El reusó en forma de mezclas eliminaría el alto costo de la separación, ayudando a la economía del proceso de reciclaje.

Las mezclas de polímeros permiten la obtención rápida y económica de nuevos materiales con mejores características que los materiales individuales. El mayor problema de las mezclas poliméricas es la inmiscibilidad debida a su poca compatibilidad termodinámica. Se busca entonces mejorar la miscibilidad, intensificado las interacciones entre los polímeros para lograr el reforzamiento de las propiedades.

El polipropileno es un termoplástico de gran demanda; es común mezclarlo con otros polímeros con el fin de mejorar sus propiedades finales. Para lograr un material mezclado que posea buenas características, usualmente se insertan grupos funcionales (agentes compatibilizantes) sobre el PP. Estos agentes mejora la adhesión interfacial y la dispersión de una fase a otra. La modificación del PP con monómeros polares como el anhídrido maleico busca la compatibilización de PP con polímeros polares como poliamidas (PA) o poliésteres como el PET.

En el presente trabajo se plantea una alternativa tecnológicamente viable y de bajo costo para la compatibilización de PP-PET. Con el objetivo de usar polímeros reciclados para las mezclas obteniendo un nuevo material con buenas propiedades finales.

Como primer paso se lleva a cabo la inserción de anhídrido maléico como agente compatibilizante sobre las cadenas de polipropileno. Este tipo de reacciones de injerto en polipropileno se llevan a cabo por el mecanismo de radicales libres, ya que son más fáciles

de realizar a nivel industrial y pueden ocurrir en solución o en fase fundida. En este estudio utilizaremos el peróxido de benzoilo como iniciador de radicales libres la reacción se llevara a cabo en solución por medio de un disolvente apropiado como el xileno, posteriormente se comprobara el grado de inserción por medio de FTIR.

Una vez obtenido el injerto de PP-AM, la segunda etapa es la mezcla de PP-PET, esperando que haya interacciones específicas entre los grupos carboxílicos del anhídrido maleico injertados en el PP y los grupos funcionales que se encuentran en el PET. La reacción de miscibilidad se llevara a cabo en estado fundido consecutivamente se analizara la compatibilidad de la mezcla mediante la aplicación de técnicas analíticas como espectroscopia infrarrojo (IR) y calorimetría diferencial de barrido (DSC)

CAPITULO I INTRODUCCIÓN A LOS POLÍMEROS

Un polímero (del griego *poly*, muchos; *meros*, parte, segmento) es una molécula grande constituida por medio de enlaces repetitivos de muchas unidades más pequeñas o monómeras, que se repiten y se unen entre sí. [1]

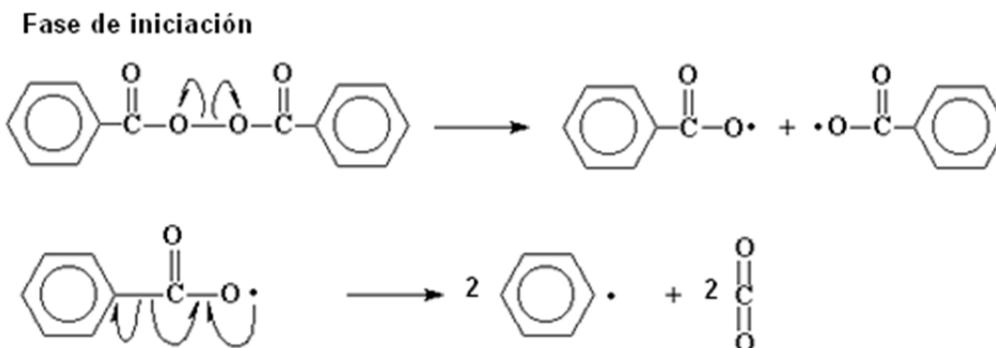
1.1 Reacciones de polimerización [2]

Se clasifican principalmente en:

- a) Reacciones de poliadición: Son el resultado de la adición y rápida de una molécula a la vez a una cadena creciente del polímero, por lo general, a través de un intermediario reactivo (catión, radical o anión) en el extremo creciente de esa cadena.
- b) Reacciones de policondensación: Esta reacción se basa en la existencia de dos centros activos que pueden unirse para dar lugar a un enlace químico, produciéndose, generalmente, la separación de productos secundarios, tales como agua, amoníaco etc.

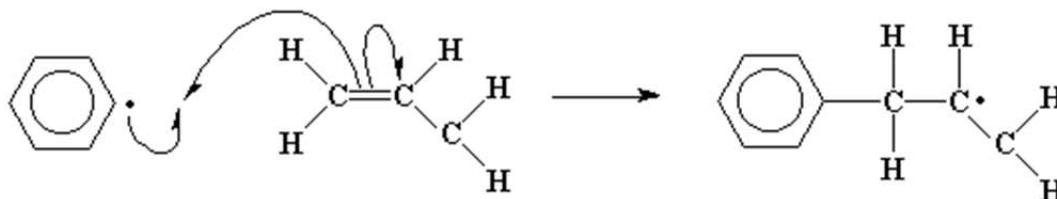
Las reacciones de polimerización por adición se componen de tres fases: Iniciación, propagación y terminación.

Por ejemplo: Muchos alquenos participan en la polimerización por radicales libres al calentarse con iniciadores de radicales como el peróxido de benzoilo. Estos radicales se descarboxilan rápidamente. En este caso se forman radicales fenilo como se observa en la siguiente reacción.

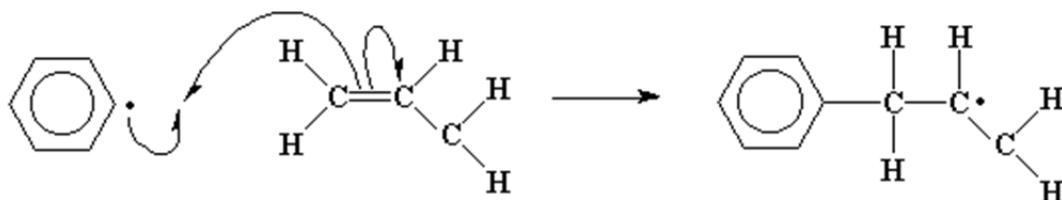


Un radical fenilo se agrega al propileno para dar un radical bencílico estabilizado por resonancia. Esta reacción inicia el crecimiento de cadena del polímero.

Fase de iniciación

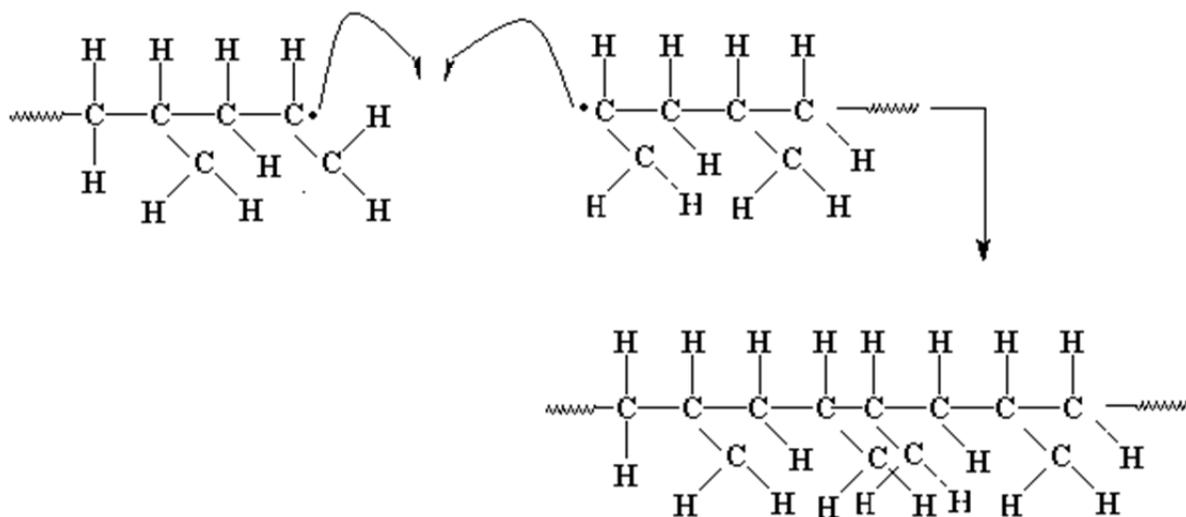


El paso de la propagación es la adición de otra molécula de propileno a la cadena creciente y puede continuar con la adición de varios cientos o miles de unidades de propileno.



Finalmente se detiene la reacción en cadena, ya sea por acoplamiento de dos cadenas, o por reacción con una impureza (por ejemplo oxígeno) o simplemente por agotamiento del monómero.

Fase de terminación



1.2 Estereoquímica de la Polimerización [1]

La polimerización de un monómero puede llevar a un polímero a numerosos centros de quiralidad en su cadena. Por ejemplo al polimerizar el polipropileno. Figura 1.1 El producto que tiene todos los grupos metilo del mismo lado de la espina dorsal en zig zag se llama isotáctico; el que los tiene de manera alternada en los lados opuestos de la espina dorsal, sindiotáctico, y el que los presenta con orientación aleatoria, atáctico.

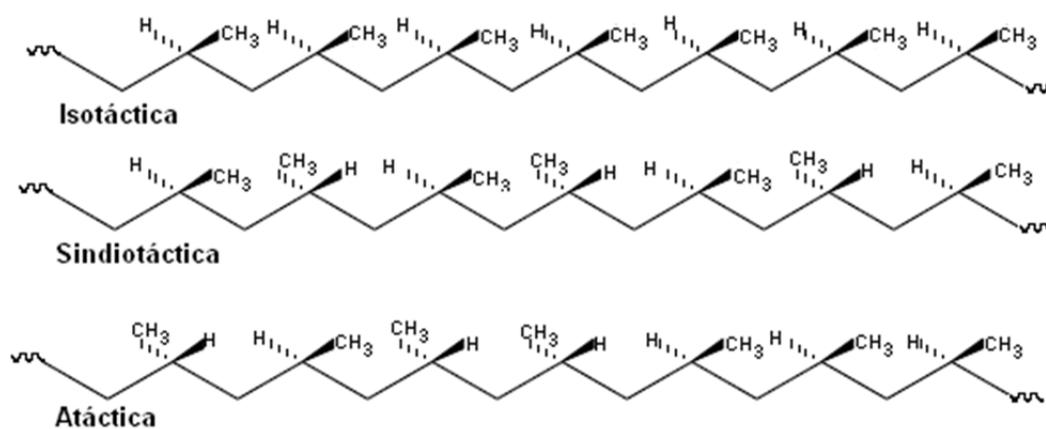


Figura 1.1 Estereoquímica de los Polímeros

1.3 Copolimerización [1]

Son compuestos macromoleculares que contienen varias unidades monoméricas diferentes. Pueden obtenerse por reacciones del tipo: Policondensación y Poliadicción lo que permite preparar innumerables productos técnicos, diferentes por la naturaleza y la proporción de las unidades monoméricas. Se pueden definir varios tipos de copolímeros, según su distribución de las unidades del monómero en cadena. Por ejemplo, si el monómero **A** se copolimeriza con el monómero **B**, el producto puede tener una distribución al azar o alternada de las unidades a través de la cadena (Figura 1.2). La distribución depende de las condiciones iniciales.

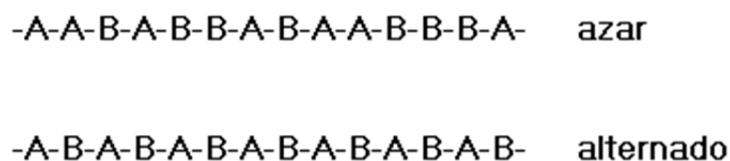


Figura 1.2 Tipos de Copolímero

Se pueden preparar otro tipo de copolímeros, llamados **copolímeros injertado y copolímeros de bloque** (Figura 1.3). En los primeros las ramas del homopolímero de una unidad están “injertadas” en una cadena de otra unidad de monómero; en los segundos, se alternan bloques diferentes de unidades idénticas de monómeros.

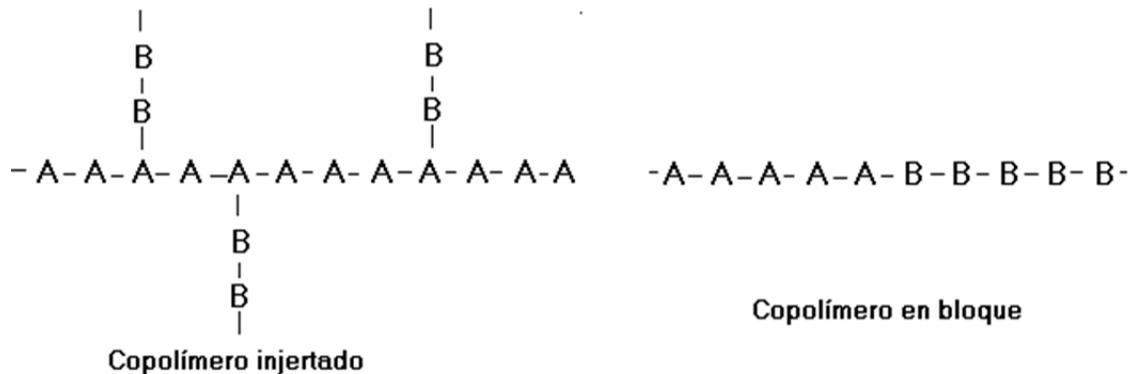


Figura 1.3 Tipos de polímeros

1.4 Estructura y propiedades físicas de los polímeros [3]

Puede establecerse la siguiente clasificación de los polímeros: por el proceso de polimerización, por la forma en que pueden procesarse y por su naturaleza química.

La siguiente es una clasificación de acuerdo a las propiedades presentadas por el producto final

- Termoplástico: Son polímeros lineales, pueden estar ramificados o no, son duros a temperatura ambiente pero se hacen blandos y viscosos cuando se calientan. Ejemplo: Polietileno (PE), polipropileno (PP), Poliestireno (PS) y el cloruro de polivilo (PVC). Figura 1.4 (a)
- Termoestables: se caracterizan por poseer cadenas entrecruzadas formando una resina con una estructura tridimensional que no se funde. Polimerizan irreversiblemente bajo calor o presión formando una masa rígida y dura. Entre estos polímeros se encuentra fenol-formaldehído (PF), Melanina-formaldehído (MF). Figura 1.4(b)

- c) Elastoméricos: se componen de moléculas reticulares menos cerradas, se caracterizan por su gran flexibilidad y elasticidad pertenecen a este grupo el látex, caucho natural (NR), polibutadieno (PBR). Figura 1.4(c).

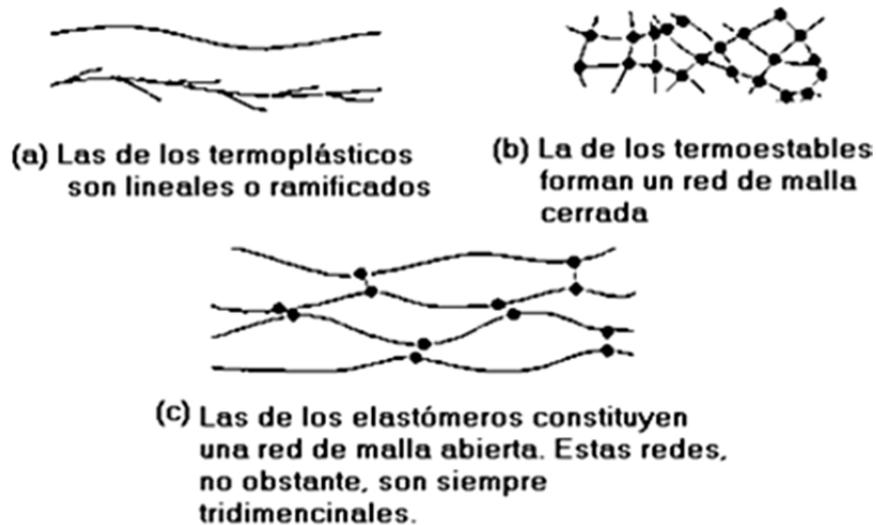


Figura 1.4 Propiedades de los polímeros [32]

1.5 Estado amorfo y estado cristalino [3]

Los términos cristalino y amorfo se utilizan normalmente para indicar las regiones ordenadas y desordenadas de los polímeros, respectivamente. La Figura 1.5 muestra un esquema de un sistema amorfo, uno semicristalino y otro cristalino. En estado sólido algunos polímeros son completamente amorfos, otros son semicristalino y, dependiendo de las condiciones de cristalización.

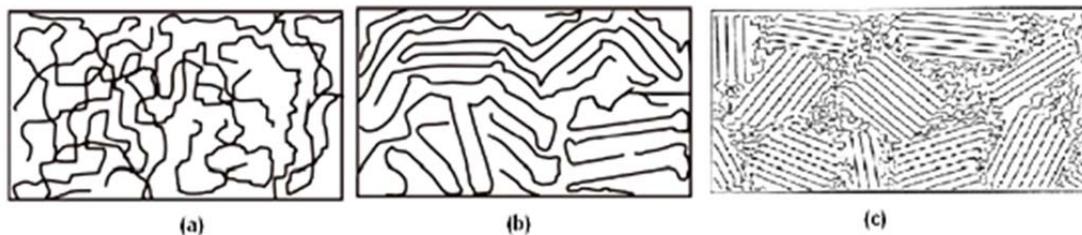


Figura 1.5 Sistema amorfo (a), Semicristalino (b) y cristalino (C)

1.6 Propiedades térmicas de polímeros [4]

Temperatura de fusión (T_m): Es la temperatura a la cual un polímero pasa de un estado sólido a un estado líquido (fundido); sólo se aprecia en polímeros cristalinos. Observar Figura 1.6.

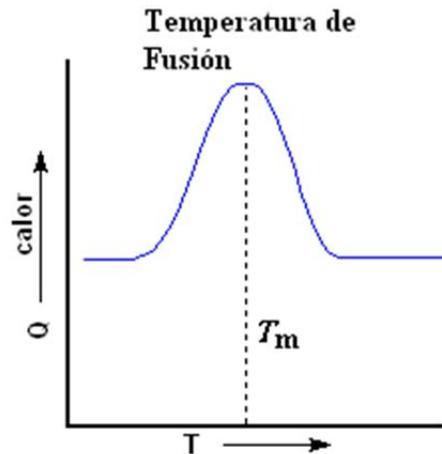


Figura 1.6 Calor en función de la temperatura para un polímero amorfo [28]

Temperatura de Transición vítrea (T_g): Es la temperatura en la cual un polímero cambia de un estado rígido y quebradizo a otro blando y maleable, está presente sólo en polímeros amorfos y es diferente para cada polímero. Observar la Figura 1.7

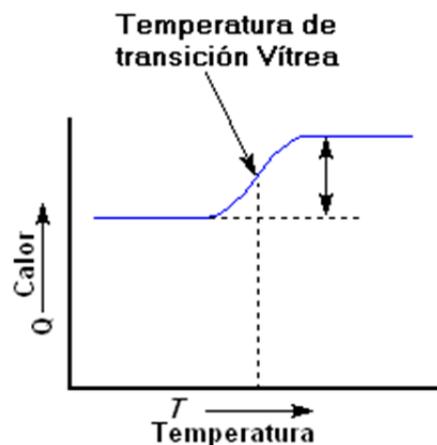


Figura 1.7 Esquema del gráfico de una transición vítrea

Estas dos propiedades físicas pueden ser medidas a través de la técnica de calorimetría diferencial de barrido (DSC), el cual mide el cambio de calor en función de la temperatura.

Realmente la principal responsable de que un polímero sea blando o rígido es la temperatura de transición vítrea T_g . Supongamos que tenemos un polímero cuya T_g está por encima de la temperatura ambiente, entonces este polímero será un material rígido, vítreo. Si por el contrario la T_g de un polímero está por debajo de la temperatura ambiente, este será un material cauchoso, flexible y blando.

Temperatura de degradación: A muy alta temperatura los enlaces covalentes entre los átomos de la macromolécula pueden destruirse (el polímero se quema o carboniza). La temperatura a partir de la cual se manifiesta este deterioro, conocida como temperatura de degradación T_d limita la utilidad del polímero y representa la temperatura superior a la cual el polímero puede ser conformado en forma útil.

Temperatura de cristalización: Por encima de la transición vítrea, los polímeros poseen una gran movilidad. Se contornean, se retuercen y nunca permanecen en una misma posición durante mucho tiempo. Cuando alcanzan la temperatura adecuada, han ganado la suficiente energía como para adaptar una disposición sumamente ordenada, que llamamos cristales. Cuando los polímeros se disponen en esos ordenamientos cristalinos liberan calor, esta caída en el flujo de calor puede verse como una gran depresión en la curva de flujo de calor versus temperatura.

La temperatura en el punto más bajo de la misma, se considera generalmente como la temperatura de cristalización del polímero T_c .

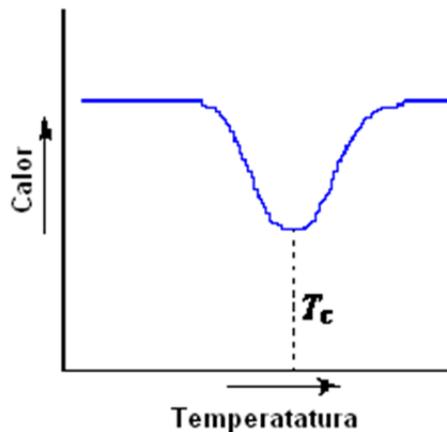


Figura 1.8 Esquema del gráfico de cristalización

CAPITULO II MEZCLA DE POLÍMEROS

En vez de mezclar los monómeros en el proceso de polimerización, se polimerizan dos o más monómeros de forma individual, dando lugar a dos polímeros distintos. Posteriormente y siempre que los polímeros lo permitan, se funden ambos polímeros conjuntamente y se mezclan. Al enfriarlos, se obtiene un material más o menos homogéneo que combina las características de ambos. Este proceso es más económico que la copolimerización pero las características mecánicas que se obtienen no son comparables a las obtenidas por copolimerización.

En los últimos años se ha venido trabajando en mezclas de polímeros por la versatilidad que presentan. En general cuando se incorpora un polímero en pequeñas cantidades, se tiene una buena compatibilidad ya que hay una fase mayoritaria que marca el comportamiento de la mezcla si se mezclan en proporciones mayores, se vuelven incompatibles.[5] Una forma de reforzar la inmiscibilidad es empleando un compatibilizante superando el problema de la inmiscibilidad agregando un tercer componente que cumpla con la función de un puente, ligando a la matriz con la fase dispersa obtenido así una mezcla con características de miscibles. [4] Observar Figura 2.1

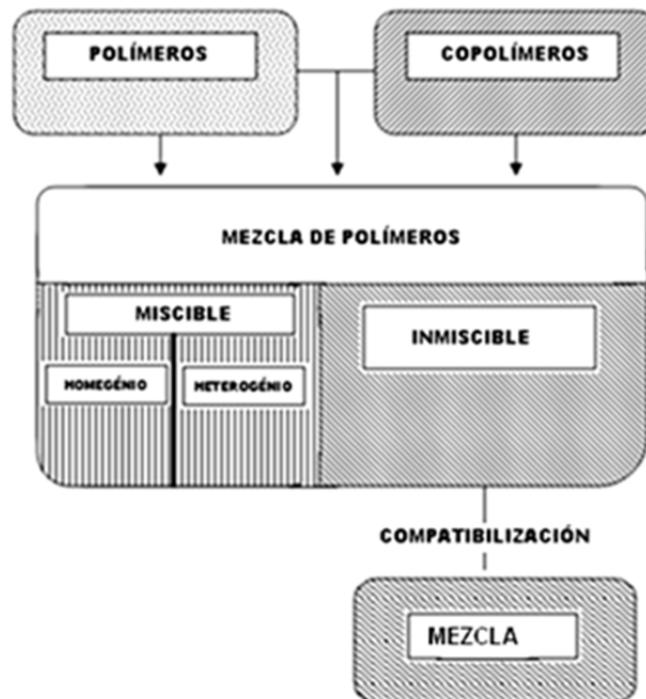


Figura 2.1 Esquema de interacción de los polímeros [5]

2.1 Conceptos termodinámicos [6][7][5]

La cuestión de miscibilidad (a veces llamada compatibilidad) sólo puede entenderse en un contexto termodinámico. En la Figura 2.2 se muestra tres posibles modelos de conducta de la energía libre de Gibbs para una mezcla binaria.

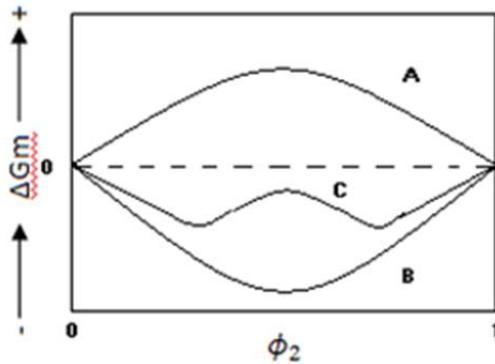


Figura 2.2 Energía libre de una mezcla binaria

La termodinámica elemental enseña que las condiciones necesarias para un sistema binario miscible son:

$$\Delta G_m < 0 \quad (1)$$

$$\left(\frac{d^2 \Delta G_m}{d\phi_2^2} \right)_{T,P} > 0 \quad (2)$$

Donde ΔG_m es la energía libre Gibbs de la mezcla por unidad de volumen y ϕ_2 es la fracción en volumen de uno de los componentes. Siendo una condición para que exista miscibilidad que ΔG_m sea negativo para una temperatura y presión dadas.

En la Figura 2.2 la curva B satisface ambos criterios en cualquier composición, mientras la curva A, teóricamente es posible en el límite de pesos moleculares infinitos, no satisface cualquiera de los criterios señalados. El sistema descrito por la curva C tiene un hueco de miscibilidad en la región media de la composición debido a que la segunda condición no se cumple. Cuando la temperatura no es constante, la naturaleza de la energía libre Gibbs en función de la composición puede cambiar y puede dar como resultado un equilibrio de fases líquido-líquido, como es mostrado en la Figura 2.3.

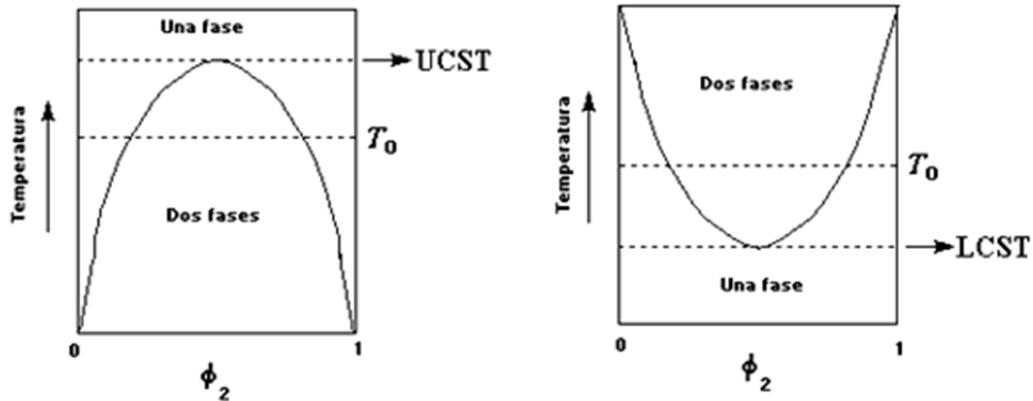


Figura 2.3. Comportamiento de la fase liq-liq. para una mezcla binari, a la izquierda un sistema con temperatura de solución crítica superior (UCST) y al derecha un sisteme con temeperatura de solución crítica inferior (LCST).

Cuando existe la completa miscibilidad a una cierta temperatura, la energía libre Gibbs debe ser similar a la curva B de la Figura 2.2; mientras que para temperaturas dónde dos fases coexisten encima de un cierto intervalo de composición, la energía libre Gibbs para la mezcla homogénea tiene una forma análoga a la curva C. La miscibilidad está determinada por la variación de energía libre de Gibbs (ΔG_m) compuesta de las siguientes contribuciones:

$$\Delta G_m = \Delta H_m - T\Delta S_m^{(c)} - T\Delta S_m^{(e)} \quad (3)$$

Donde ΔH_m es la entalpía de muestra, $\Delta S_m^{(c)}$ es la entropía combinatorial de de mezclado, $\Delta S_m^{(e)}$ es la entropía en exceso de mezclado, y T es la temperatura del sistema. Estas magnitudes y la variación de la composición de estas condiciones dan como resultado los modelos que se presentan en la Figura 2.2.

La misibilidad termodinámica de un par polimérico depende en casos particulares de la temperatura tal como se aprecia en el diagrama de las fases de la figura 2.3 Para algunos pares de polímeros la inmiscibilidad disminuye a medida que la temperatura aumenta. Finalmente, si se calienta demasiado a dicho par, el rango de inmiscibilidad se hará tan pequeño que desaparecerá La temperatura a la cual esto sucede, se denomina

temperatura de solución crítica superior o UCST. Observe el gráfico de la izquierda figura 2.3. La parábola representa el límite entre las temperaturas y composiciones en las cuales existe una sola fase y las que presentan separación de fases. Pero a veces ocurre lo contrario. Para algunos pares de polímeros, el rango de inmiscibilidad disminuye a medida que *decrece* la temperatura. Si se enfría lo suficiente el par, finalmente alcanzaremos una temperatura en la cual el rango es tan pequeño que desaparece. Esta temperatura se denomina temperatura de solución crítica *inferior* o LCST.

Según la teoría Flory-Huggins es posible expresar la entropía combinatorial de una mezcla como ($\Delta S_m^{(e)}$):

$$\Delta S_m^{(c)} = -R \left(\frac{\phi_1}{v_1} \ln \phi_1 + \frac{\phi_2}{v_1} \ln \phi_2 \right) \quad (4)$$

Donde V_i es el volumen molar de la especie i y es proporcional a su peso molecular, ϕ_i es la fracción en volumen del disolvente y soluto polimérico respectivamente, R es la constante universal de los gases. Una importante conclusión puede ya deducirse. Debido a los altos pesos moleculares de los polímeros, la entropía de mezcla combinatorial (la cual siempre favorece la mezcla y a menudo es la principal razón de miscibilidad) es pequeña esto hace que la miscibilidad de los polímeros sea la excepción más que la regla.

Podemos deducir, sin embargo, que para mezclas de polímeros donde $V_i \rightarrow \infty$, esta contribución será muy pequeña y, frecuentemente, despreciable ($S^{M,C} \rightarrow 0$).

En cuanto a las interacciones, si las únicas presentes entre los componentes son del tipo dispersión, entonces $\Delta H^M > 0$, pero en el caso de interacciones específicas, como enlaces de hidrógeno o complejos de transferencia de carga, se espera un valor negativo para ΔH^M , lo que evidentemente favorece la miscibilidad. Pero aún en este caso, la distribución favorable exotérmica puede ser compensada con una entropía de exceso $S^{M,C} < 0$, haciendo difícil el establecimiento de una regla sencilla para la predicción de miscibilidad en polímeros.

2.2 Clasificación de las mezclas con respecto a la teoría termodinámica^[8]

Las mezclas de polímeros pueden ser clasificadas desde el punto de vista termodinámico siguiendo el criterio de energía libre (ΔG):

Mezclas miscibles ($\Delta G < 0$) involucran solubilidad térmica y se caracterizan por la presencia de una fase y una sola temperatura de transición vítrea. En estas mezclas encontramos polímeros que son solubles entre sí, es decir que al mezclarlos en fundido, se puede obtener una sola fase estable que constituye la mezcla, las propiedades son similares a las que se pueden obtener mediante reacción de copolimerización. La miscibilidad depende de la polaridad de la cadena del polímero, por lo que pueden ser polímeros no polares o polímeros polares.

Mezclas inmiscibles ($\Delta G > 0$): son de dos o más fases separadas, exhibiendo las temperaturas de transición vítrea y/o las temperaturas de fusión de cada componente de la mezcla. El desempeño no es predecible con facilidad. Las fases que se forman pueden presentarse como gotas o fibras contenidas en una matriz, y pueden estar agrupadas o distribuidas formando estructuras continuas, estructuras que son generalmente inestables. Para mejorar las propiedades de este tipo de mezclas se consigue mediante la compatibilización que significa la modificación de una mezcla inmiscible por la incorporación de un copolímero para aumentar su miscibilidad.

Aunque la termodinámica es muy complicada, hay otra categoría, la de las mezclas parcialmente miscibles. Estas aparecen cuando se presenta más de una fase en la mezcla y la energía libre global es positiva, pero al menos en una de las fases hay interacción a nivel microscópico ($\Delta G < 0$ en al menos una fase).

Como en los últimos años se ha estado trabajando en las mezclas por la versatilidad que presentan, ya se pueden conseguir un abanico de propiedades muy amplio La Tabla 2.4 muestra la compatibilidad entre distintos polímeros para la constitución de las mezclas.

Tabla 2.4 Compatibilidad de polímeros[4]

	ABS	ASA	PA	PBT	(PBT+PC)	PC	(PC+ABS)	(PC+PBT)	PE	PET	PMMA	POM	PP	PPO	PPO+PS	PS	PVC	SAN	TPU
ABS	●	●	⊗	●	●	●	●	●	⊗	⊗	●	⊗	○	⊗	⊗	⊗	●	●	●
ASA	●	●	⊗	●	●	●	●	●	⊗	⊗	●	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	●	●	●
PA	⊗	⊗	●	⊗	⊗	○	○	○	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	○	⊗	⊗	○	⊗	●
PBT	●	●	⊗	●	●	●	●	●	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	○	●	⊗
(PBT+PC)	●	●	⊗	●	●	●	●	●	⊗	⊗	⊗	○	⊗	⊗	⊗	⊗	○	●	●
PC	●	●	○	●	●	●	●	●	⊗	●	●	○	⊗	⊗	⊗	⊗	○	●	⊗
(PC+ABS)	●	●	⊗	●	●	●	●	●	⊗	●	●	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	○	●	●
(PC+PBT)	●	●	○	●	●	●	●	●	⊗	●	●	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	○	●	●
PE	○	○	○	○	○	⊗	○	○	●	○	○	○	●	○	⊗	○	⊗	○	⊗
PET	●	●	⊗	●	●	●	●	●	⊗	●	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	○	●	⊗
PMMA	●	●	⊗	⊗	⊗	●	●	●	⊗	⊗	●	○	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	●	⊗
POM	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	○	○	○	⊗	⊗	○	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗
PP	○	○	⊗	○	○	○	○	○	⊗	○	○	○	●	○	⊗	○	⊗	○	⊗
PPO	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	●	●	●	○	⊗	⊗
PPO+PS	⊗	⊗	●	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	●	●	●	○	⊗	⊗
PS	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	●	●	●	⊗	⊗	⊗
PVC	●	●	○	○	○	○	○	○	⊗	○	●	●	⊗	○	⊗	⊗	●	●	●
SAN	●	●	⊗	●	●	●	●	●	⊗	⊗	●	⊗	⊗	⊗	⊗	⊗	●	●	⊗
TPU	●	●	●	⊗	●	●	●	●	⊗	●	●	●	⊗	⊗	⊗	⊗	●	●	●

● Compatible, ⊗ Parcialmente compatible, ○ Incompatible

2.3 Agentes compatibilizantes [8][9][10][11]

Un compatibilizante es cualquier sustancia que ayuda a unir las fases con más fuerza ya que en las mezclas inmiscibles las fases no están fuertemente unidas, una a la otra, por lo mismo difieren en polaridades no hay interacciones en la interface, y presentan morfología no uniforme. El compatibilizante ayuda a la transferencia de energía y esfuerzos

por medio de una fase de unión que se sitúa en la interface y que conecta a las fases. Estos copolímeros incorporados en pequeñas cantidades en la mezcla permiten que cada uno de los polímeros se sitúe en el bloque compatible (Figura 2.5), constituyendo una estructura bastante homogénea estructura, similar a un copolímero de injerto donde la cadena principal es el copolímero compatibilizador y los injertos son las cadenas de los componentes de la mezcla.

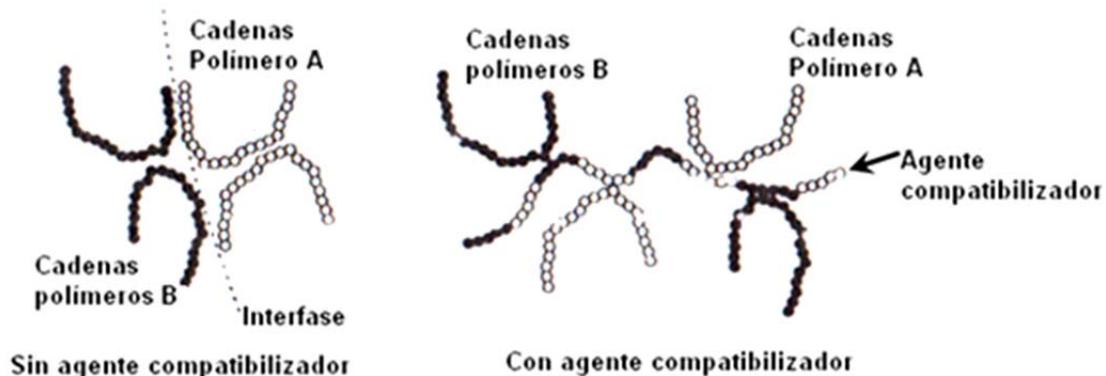


Figura 2.5 Efecto del compatibilizador en las mezclas de polimeros inmiscibles[4]

2.4 Métodos de compatibilización [4][10]

- 1) Adición de un cosolvente: Frecuentemente, dos polímeros inmiscibles formarán una solución verdadera si se encuentra un disolvente común.
- 2) Adición de copolímeros bloque o injertados de ambos componentes: Un copolímero de bloque o injerto adecuado contiene un segmento miscible con uno de los componentes de la mezcla y otro segmento miscible con el otro componente de la mezcla. Incorporación de grupos ácido-base, grupos iónicos etc.
- 3) Reticulación para unir macromoléculas de los dos componentes: Al menos uno de estos polímeros se sintetiza o se entrecruza en la presencia inmediata de otro.
- 4) Mediante interacciones específicas sin enlace químico: interacciones que no involucren enlace químico, tales como puentes de hidrógeno, ión dipolo-dipolo etc.
- 5) Mediante la adición de agentes acoplantes de bajo peso molecular: la adición de compuestos reactivos de bajo peso molecular pueden servir para compatibilizar mezclas a través de la formación de copolímeros.

2.5 Factores que influyen en la compatibilización [8]

- 1) La miscibilidad depende de la polaridad de la cadena del polímero pues otorga afinidad molecular a los materiales, entendiéndose a polímeros polares y polímeros no polares.
- 2) La compatibilización también es influenciada por la distribución del peso molecular y la concentración del compatibilizante en la fase dispersa, factores importantes a afectan a la morfología de la mezcla.
- 3) Otro factor es tensión interfacial de un polímero con respecto al otro y el dominio de adhesión que caracteriza a la interface. Los materiales compuestos con interfaces débiles tiene una resistencia y rigidez relativamente baja, mientras que los materiales con interface fuertes tienen una resistencia y rigidez alta.
- 4) El método de mezclado también influye en la orientación y adhesión de la interface, reflejados en las propiedades morfológicas, físicas y mecánicas de la mezcla.

2.6 Métodos de mezclado [12] [13]

- ✓ En disolución (Se debe hacer una evaporación del disolvente común) [se aplica después de polimerización y antes de extrusión]. EN TANQUE AGITADO.
- ✓ En estado de gel (con plastificante y diluyente) [se aplica previamente al calandrado]. POR MALAXADORA.
- ✓ En estado fundido [habitualmente mediante extrusión]. EXTRUSORA.
- ✓ En máquinas mezcladoras: mezcla no suficientemente homogénea paso previo a los procesos anteriores. MEZCLADOR DE COWLES

CAPITULO III POLIPROPILENO

3.1 Historia del polipropileno

La polimerización catalítica del polipropileno fue descubierta por el italiano Giulio Natta en 1954 y marcó un notable hito tanto por su interés científico, como por sus importantes aplicaciones en el ámbito industrial. Empleando catalizadores selectivos, se obtuvo un polímero cristalino formado por la alineación ordenada de moléculas de propileno monómero. Los altos rendimientos de reacción permitieron su rápida explotación comercial. Aunque el polipropileno fue dado a conocer a través de patentes y publicaciones en 1954, su desarrollo comercial comenzó en 1957 y fue debido a la empresa italiana Montecatini. Pocos años más tarde, otras empresas y Shell fabricaban también dicha poliolefina. [9][14].

Cabe señalar que el polipropileno es uno de los termoplásticos más utilizados en el mundo. El uso que ha tenido está directamente relacionado con su versatilidad, sus buenas propiedades físicas y la competitividad económica de sus procesos de producción. Varios puntos fuertes lo confirman como material idóneo para muchas aplicaciones: baja densidad, alta dureza y resistente a la abrasión, alta rigidez, buena resistencia al calor, excelente resistencia química, excelente versatilidad etc.

3.2 Estructura del Polipropileno [14]

El polipropileno es un material termoplástico obtenido de la polimerización de moléculas de propileno para formar largas cadenas. (Figura 3.1) El polipropileno es un material semicristalino, cuyas propiedades mecánicas en estado sólido depende del tipo y la cantidad de zonas amorfas y cristalinas que tenga el producto final.

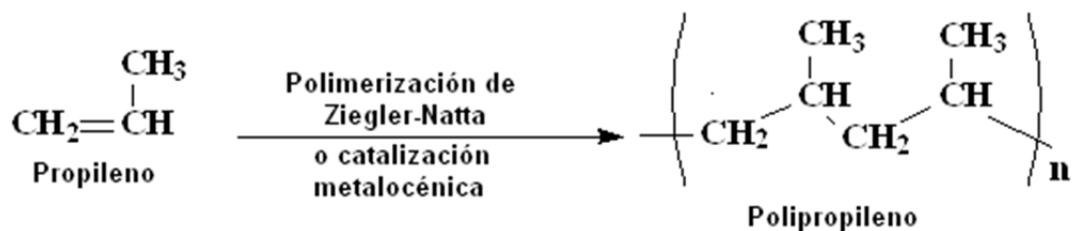


Figura 3.1 polimerización de polipropileno

3.3 Tacticidad[9]

Se pueden obtener tres formas geométricas de las cadenas: isotáctica, sindiotáctica y atáctica. Las formas isotácticas y sindiotácticas, dada su gran regularidad, tienden a adquirir en estado sólido una disposición espacial ordenada, semicristalina, que confiere al material unas propiedades físicas excepcionales. La forma atáctica, en cambio, no tiene ningún tipo de cristalinidad. Los procesos industriales más empleados están dirigidos hacia la fabricación de polipropileno isotáctico que es el que ha despertado mayor interés comercial.

Si bien las formas isotácticas y sindiotácticas cristalizan por enfriamiento a partir de los materiales fundidos, los polipropilenos (PP) comerciales grado inyección y grado extracción, por lo general, son isotácticos en un 94 a 97 %. Las piezas fabricadas son 60 % cristalinas, con una variedad de formas y tamaños de esferulitas poliédricas que dependen de las condiciones particulares de cristalización del material fundido. [14]

3.4 Tipos de polipropileno [15]

El polipropileno se puede clasificar en tres tipos:

- a) Polipropileno homopolímero contiene sólo monómeros de propileno a lo largo de su cadena polimérica, su estructura presenta un alto grado de cristalinidad, lo que se traduce en el aporte de rigidez y dureza a la pieza elaborada, pero exhibe pobre resistencia al impacto a bajas temperaturas y su transparencia no es suficiente para algunas aplicaciones.

- b) Copolímero alternado: Proviene de la reacción con monómeros de etileno y propileno originando materiales con mejores propiedades ante el impacto alta calidad y con bajos puntos de fusión.
- c) Copolímero de alto impacto: Son mezcla físicas del polipropileno homopolímero con el polipropileno copolímero alternado se caracteriza por su alta resistencia al impacto a bajas temperaturas, e incluso a temperaturas de congelación.

3.5 Polimerización del Polipropileno [10] [16]

Uno de los procesos comerciales más antiguos para la producción del PP es la polimerización en solución. Actualmente se le considera obsoleto debido a su alto costo y a una variedad limitada de productos que se pueden obtener.

Si la polimerización se realiza sin catalizador, se obtiene un polímero atáctico, que no cristaliza y presenta una baja resistencia mecánica. En presencia de catalizador Ziegler se obtiene un polímero altamente isotáctico, cristalino, de elevada rigidez, dura y temperatura de reblandecimiento mayor que el polietileno. La polimerización se realiza en reactores con agitación que se alimentan con propileno, al medio de reacción se le añade el catalizador a presión. La temperatura de reacción es de 60 °C y el tiempo de reacción de 8 horas. El grado de conversión es de alrededor de 85 por 100. El polímero cristalino precipita. Tras la reacción se obtiene un mezcla de: Polímero isotáctico, algo de los polímeros atáctico, nafta, monómero no reaccionado y catalizador. Después de la separación se consigue el polímero isotáctico, que es el de interés comercial.

3.6 Propiedades del Polipropileno [15]

El “polipropileno” no es un producto único, hay una gran variedad de polipropilenos con propiedades y características que dependen de los siguientes factores:

- ✓ Clase de polímeros: Homopolímero, copolímero aleatorios o copolímero de bloque
- ✓ Peso molecular y distribución de pesos moleculares
- ✓ Morfología y estructura cristalina
- ✓ Aditivos

-
- ✓ Rellenadores de refuerzo
 - ✓ Técnicas de fabricación

Los homopolímeros resisten la deformación a temperaturas altas. Tienen gran rigidez, resistencia a la tensión, dureza y buena tenacidad a temperatura ambiente. Los copolímeros aleatorios de etileno-polipropileno se caracterizan por su gran resistencia en estado fundido. Tienen transparencia y resistencia al impacto a temperaturas bajas a cambio de menor rigidez, resistencia a la tensión y dureza.

Los copolímeros de bloque, de preferencia con etileno, se clasifican como la resistencia al impacto media, alta y extra-alta a temperaturas bajo cero. Los copolímeros de bloque constan de una matriz cristalina de PP que contiene segmentos de elastómeros etileno-propileno y polietileno cristalino, o sólo uno de estos elastómeros para que los impactos sean absorbidos en la fase elastomérica. La concentración del comonomero de etileno entre la fase elastomérica y la de polietileno, así como el peso molecular de esos segmentos tienen gran influencia sobre las propiedades del copolímero.

Al aumentar el peso molecular, disminuye el índice de fluidez. Las condiciones de los reactores se establecen para producir polímeros del peso molecular o índice de fluidez deseados. En general, pesos moleculares altos conducen a mejores propiedades físicas, pero dificultan el proceso y lo contrario si el peso molecular es bajo.

A continuación en la Tabla 3.6 se presenta un resumen de las principales propiedades del polipropileno.

Tabla 3.6 Propiedades generales de polipropileno [7]

	Propiedad	Unidades Métricas	valor
Mecánicas	Densidad	g/cm ³	0.930
	Resistencia a la atracción	MPa	35.5
	Módulo de tracción	MPa	138
	Módulo de flexión	MPa	1690
	Alargamiento a la ruptura	%	Depende el espécimen moldado y datos térmicos
	Resistencia al impacto Izod con muesca a tem.amb	J/m	37
	Dureza	%	100
Térmicas	Desviación @264 lb/pulg ²	°C	55
	Temp. De ablandamiento	°C	101
	Índice de tem. vicat	°C	154
	Coefficiente lineal de Expansión térmica	mm/mm/°C	9X10 ⁶
Ambientales	Absorción de agua 24 hrs	%	<0.03
	Claridad	% de transmisión	
Resistencia química a	Ácido débil		Excelente
	Ácido fuerte		Varía con el ácido
	Base débil		Excelente
	Base fuerte		Bueno
	Disolventes de bajo peso molecular		Excelente a los polares lo no polares lo hinchan
	alcoholes		Excelente
Eléctricas	Resistencia Dieléctrica	Kv/m	24-28
	Constante dieléctrica		2.25
	Factor de Potencia		0.0002
Otras	Temperatura de fusión	°C	164
	Temperatura de transición vítrea	°C	-20

3.7 Aplicaciones

La modificación con rellenos minerales como el vidrio, talco, mica o carbonato de calcio o combinaciones de ellos amplia los usos del polipropileno sin embargo en la Tabla 3.7 se presentan algunas de las principales aplicaciones

Tabla 3.7 Principales aplicaciones de polipropileno [15][17]

Medios de Moldeo	uso
Molde por soplado	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Contenedores para uso médico ✓ Embalaje
Extrusión	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Revestimientos ✓ Fibras y filamentos ✓ Películas (hasta de 10 milésimas de pulgada) ✓ Tubería ✓ Láminas (más de 10 milésimas de pulg) ✓ Popotes ✓ Alambres y cables
Molde por Inyección	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Electrodomésticos ✓ Muebles ✓ Artículos para el hogar ✓ Equipos y cajas ✓ Artículos médicos ✓ Embalaje (Tapas y contenedores) ✓ Juguetes y novedades ✓ Transporte (Cajas para batería)

3.8 Ventajas y Desventajas de PP [15] [18]

Algunas propiedades que se consideran ventajas inherentes del PP son

- ✓ Bajo peso específico (densidad), Excelente resistencia química
- ✓ Alta temperatura de fusión (comparado con otros plásticos de alto consumo)
- ✓ Buen balance rigidez/tenacidad
- ✓ Adaptable a muchos métodos de transformación, Gran variedad de clases especiales
- ✓ Excelentes propiedades dieléctricas
- ✓ Bajo costo (especialmente por unidad de volumen)

-
- ✓ Excelente resistencia a la humedad
 - ✓ Aislamiento eléctrico

Propiedades que se consideran desventajas de PP

- ✓ Inflamabilidad
- ✓ Fragilidad a bajas temperaturas
- ✓ Rigidez moderada
- ✓ Dificultad para imprimir, pintar y pegar
- ✓ Baja resistencia UV
- ✓ Reducida productividad en extracción (comparada con resinas suaves y amorfas)
- ✓ Nebulosidad (falta de transparencia)
- ✓ Baja resistencia cuando está fundido
- ✓ Susceptibilidad del ataque de disolventes clorados, y aromáticos
- ✓ Descomposición oxidante acelerada por algunos metales

3.9 Polipropileno Modificado con Anhídrido Maleico [3][9]

La introducción o inserción de grupos funcionales polares en las cadenas de PP permiten mejorar la compatibilidad con el refuerzo polar y alcanzar una dispersión homogénea. Esto se lleva a cabo mediante reacciones con especies que contienen grupos funcionales polares en sus estructuras tales como grupos éster, ácidos carboxílicos y anhídridos. Uno de los métodos más usados para funcionalizar PP es mediante reacciones de injerto de un monómero polar en sus cadenas, empleando un peróxido orgánico como iniciador radical.

Las reacciones de funcionalización se realizan generando en primer lugar “sitios” activos en las cadenas del polipropileno, mediante adición de indicadores radicalarios y posteriormente permite que estos “sitios” activos sirvan para reaccionar con el monómero. Mediante las reacciones de funcionalización, el componente injertado queda unido por enlaces covalentes a la poliolefinas como una cadena lateral. El anhídrido maleico es uno de los componentes utilizados para funcionalizar el polipropileno mediante reacciones de injerto, otras especies también han sido utilizadas, tales como éster metálico del ácido itacónico, dietiléster del ácido maleico[19] ácido acrílico.[14][20]

CAPITULO IV
POLI (ETILEN TERAFTALATO)

El poli (etilén tereftalato) PET es un polímero termoplástico perteneciente a la familia de los poliésteres. Fue patentado como un polímero para fibra por J. R. Whinfiel y J. T. Dickinson en 1941. Su uso comercial como fibra poliéster inició en 1955. [8]

4.1 Estructura de PET [8]

El PET es un polímero semicristalino, Cuyas principales propiedades son el reflejo de su capacidad para formar puentes de hidrógeno. El anillo aromático le confiere estabilidad térmica y química (observar Figura 4.1).

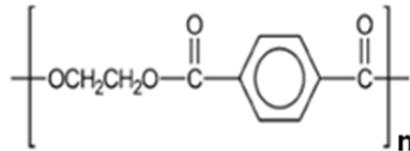


Figura 4.1 Unidad repetitiva del PET

4.2 Síntesis del PET

Se puede producir por polimerización en condensación a partir de ácido tereftálico o tereftalato de dimetilo y etilenglicol como se observa en la siguiente reacción. [13]

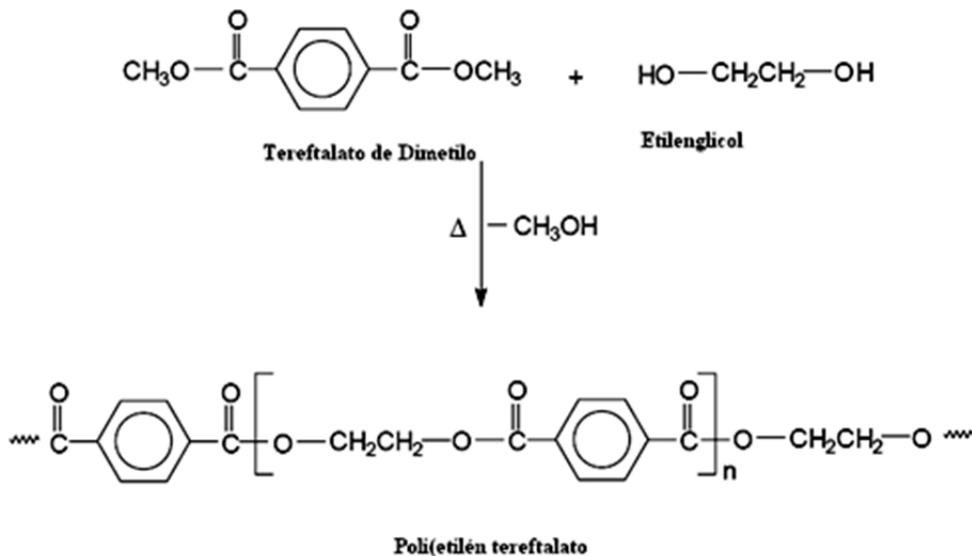


Figura 4.2 Reacción de síntesis del PET

Para reducir la cristalinidad se puede copolimerizar el PET, los copoliésteres de PET modificado con glicol se denominan PETG. Los envases de shampoo transparente y los botes de detergente líquido son algunas de sus aplicaciones. El copoliéster de PCTA se produce a partir de ciclohexanodimetanol, ácido tereftálico (TPA) y otros ácidos dibásicos[18]

4.3 Propiedades del PET [8]

Tiene buenas propiedades como barrera al gas y la humedad, dureza y resistencia al calor etc. En la Tabla 4.3 se presentan sus propiedades generales.

Tabla 4.3 Propiedades de PET

Propiedad	Parámetro
Calidad de moldeo	Buena
Densidad relativa	1.34-1.39
Resistencia a la atracción Mpa	59-72
Resistencia a la compresión Mpa	76-128
Resistencia al impacto, Izod J/mm	0.01-0.04
Dureza	Rockwell M94-M101
Dilatación Térmica, 10-4/°C	15.2-24
Resistencia al calor °C	80-120
Resistencia Dieléctrica V/mm	13.780-15.750
Constante Dieléctrica (60 Hz)	3.65
Factor de Disipación (60 Hz)	0.0005-5
Resistencia Arco, s	40-120
Absorción de agua (24 hrs), %	0.02
Velocidad de combustión mm/min	Consumo lento
Efecto Luz solar	Se decolora ligeramente
Efecto de ácidos	Atacado por ácidos oxidantes
Efecto de álcalis	=
Efecto Disolvente	Atacado por hidrocarburos de halógeno
Calidad mecanizada	Excelente
Calidad óptica	Transparente a opaco

4.4 Ventajas y desventajas del PET [8]

Algunas propiedades que se consideran ventajas inherentes del PET son

- ✓ Tenacidad y rigidez
- ✓ Procesable a través de métodos para termoplásticos

-
- ✓ La presencia de grupos polares (hidroxilo y carboxilo) en los finales de cadena molecular. Abre una vía para la utilización de este polímero como agente compatibilizante entre diferentes polímeros, o para mejorar el grado de adhesión en materiales termoplásticos reforzados con fibras o cargas minerales.

Propiedades que se consideran desventajas de PET

- ✓ Sujeto al ataque de ácidos y bases
- ✓ Baja resistencia térmica
- ✓ Escasa resistencia a disolventes

4.5 Aplicaciones del PET [17]

Este plástico se ha utilizado en envases para alimentos, fibras para prendas de vestir, alfombras e hilos de neumáticos durante más de 20 años. La mayoría de las aplicaciones exigen que el PET esté orientado y sea cristalino para conseguir las óptimas propiedades. Los procesos de orientación se realizan a 100 -120°C, o ligeramente por encima de la temperatura vítrea (T_g)

Otras aplicaciones del PET son en películas fotográficas, cintas de video, recipientes para hornos de microondas, cintas magnéticas. El PET cuya calidad es reforzada se utiliza para en engranajes, rejillas de ventiladores, interruptores eléctricos y artículos deportivos.

CAPITULO V

MÉTODOS DE ANÁLISIS Y CARACTERIZACIÓN

5.1 Espectroscopia de infrarrojo [13][21]

La región infrarroja del espectro electromagnético se extiende desde el extremo rojo al final del espectro visible hasta las microondas entre 0.7 y $500 \mu\text{m}$, en números de onda, entre 14000 cm^{-1} y 20 cm^{-1} . El intervalo espectral de mayor uso es la región del infrarrojo medio, que cubre la frecuencia de 200 cm^{-1} a 4000 cm^{-1} (50 a $2.5 \mu\text{m}$). En la Figura 5.1 se muestran las regiones del espectro. La espectroscopia infrarroja implica movimientos de torsión, flexión, rotación y vibración de los átomos de una molécula. Al interactuar con la radiación infrarroja, algunas porciones de la radiación incidente se absorben a determinadas longitudes de onda.

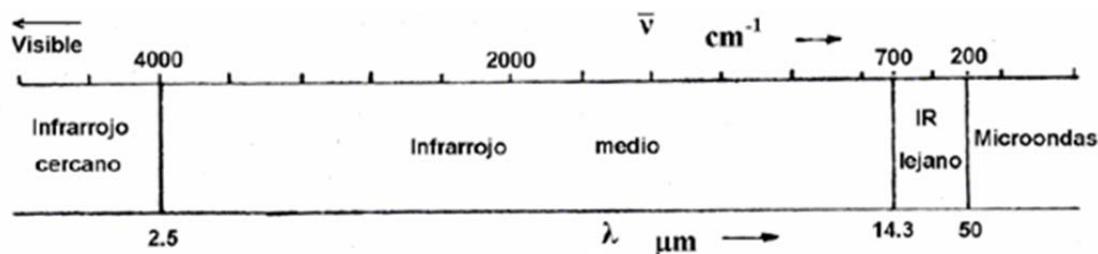


Figura 5.1 Región infrarrojo del espectro electromagnético

Vibraciones Moleculares: Los átomos o grupos atómicos de las moléculas están en continuo movimiento unos con respecto a otros. Las posibles formas vibratorias de una molécula poliatómica pueden visualizarse mediante un modelo mecánico del sistema, tal como lo demuestra la Figura 5.2 las masas atómicas se representan con bolas cuyo peso es proporcional al correspondiente peso atómico, y que se distribuye de acuerdo con la geometría especial de la molécula.

Para que se verifique la absorción infrarrojo deben cumplirse dos condiciones. Primero, la energía de la radiación debe coincidir con la diferencia de energía entre los estados excitados y el normal de la molécula. La molécula absorberá entonces la energía radiante aumentando su vibración natural. En segundo lugar, la vibración debe ir acompañada de un cambio en el momento dipolar eléctrico, que es lo que distingue a la espectroscopia infrarrojo de la Raman.

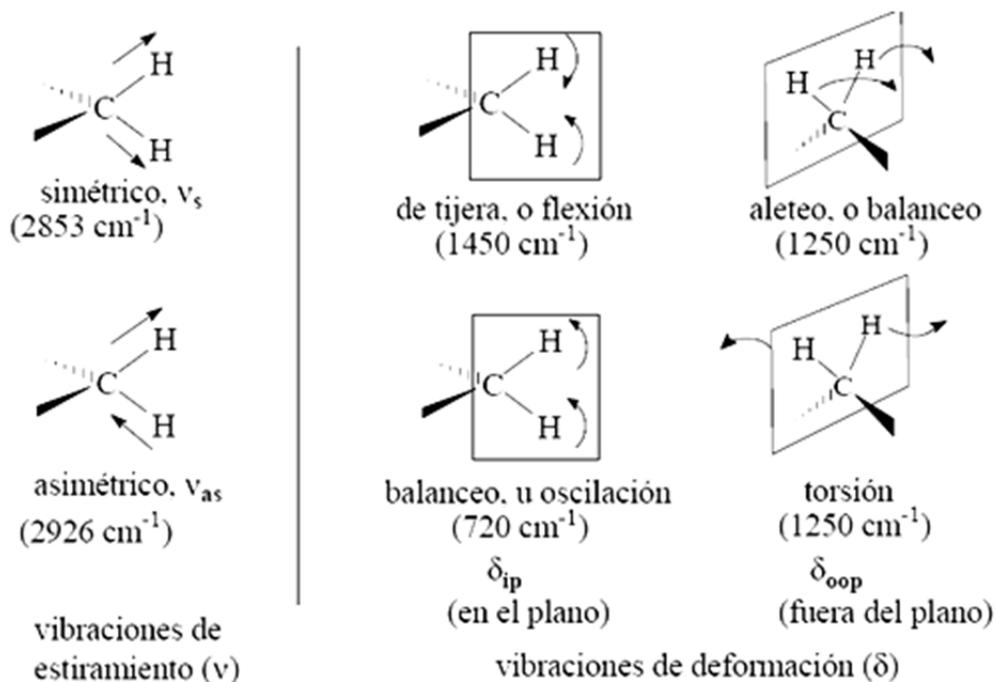


Figura 5.2 Vibraciones y frecuencias características de metilo

Las vibraciones de estiramiento involucran cambios en la frecuencia de los átomos unidos a lo largo de un eje de enlace. En figura 5.3 se ilustran las formas de vibración. En los grupos simétricos existen frecuencias de vibración idénticas.

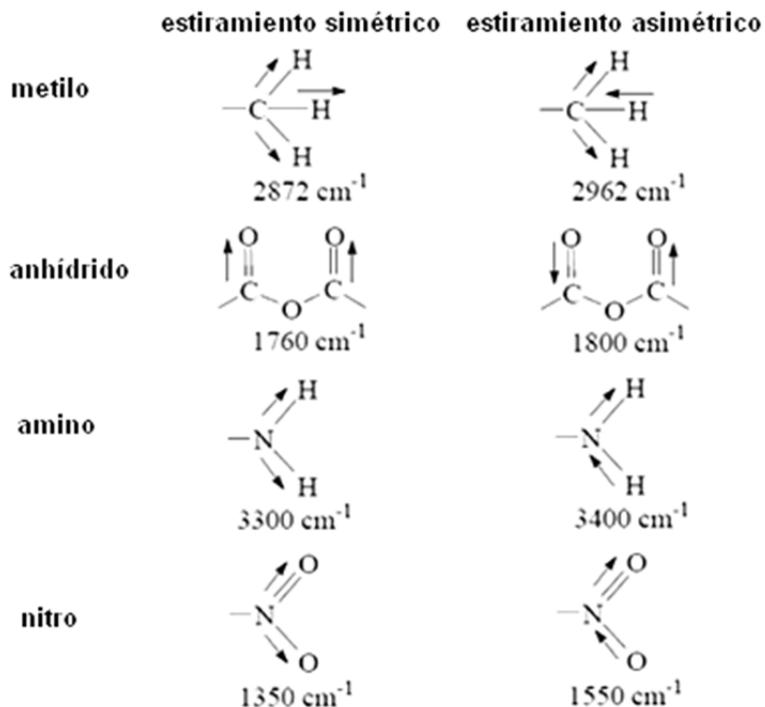


Figura 5.3 Estiramiento de los grupos comunes

Como los átomos que constituyen una molécula están en constante vibración cuando el número de átomos en una molécula excede de 10 o más, el número de modos posibles de vibración se vuelve muy grande. Afortunadamente, muchas frecuencias son características para enlaces localizados. Así la absorción de luz por el estiramiento del enlace C-H casi siempre ocurre con frecuencias entre 2800 cm^{-1} y 2900 cm^{-1} . La mayoría de los espectrofotómetros usan una fuente de luz incandescente para proporcionar luz con longitudes de onda de 2.5 a unos $15\text{ }\mu\text{m}$. Un sistema alternativo de nomenclatura se refiere a la recíproca de la longitud de onda como número de onda o frecuencia. Una longitud de onda de $2.5\text{ }\mu\text{m}$ corresponde a un número de frecuencias de 4000 cm^{-1} son equivalentes a 1000 m^{-1} y así sucesivamente. Un prisma giratorio o una rejilla de difracción descomponen la luz de la fuente en un espectro del que se aíslan progresivamente las diferentes longitudes de onda con ayuda de filtros. Una ranura programada compensa por la intensidad variable de la fuente a diferentes longitudes de onda.

FTIR: Los instrumentos de transformada de Fourier no contienen elementos de dispersión y detectan y miden todas las longitudes de onda simultáneamente. En lugar de un monocromador, utiliza un interferómetro para producir los patrones de interferencia que contienen la información del espectro infrarrojo. Entre las principales ventajas de los instrumentos de FTIR sobre los espectrómetros dispersos están la mayor velocidad y sensibilidad, mejor poder de concentración de luz, mayor exactitud en la calibración de longitud de onda, diseño mecánico más sencillo y eliminación de la contribución de la luz dispersa y de emisiones de IR.

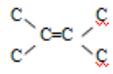
Muestra para el análisis: La muestra puede ser una película delgada sin soporte (generalmente alrededor de 0.001 mm de espesor), una película por evaporación sobre un sustrato no absorbente como NaCl, una solución en una celda de material no absorbente, una oblea prensada clara del material mezclado en polvo de KBr o una suspensión del material en aceite de parafina pesado que se sostiene entre placas de NaCl. También se usan como sustratos otros haluros alcalinos o alcalinotérreos. Generalmente el agua y los alcoholes no se usan como solvente porque absorben fuertemente en la región infrarrojo y pueden corroer los sustratos. En un instrumento de doble haz se cancela la adsorción por el vapor de agua y el CO_2 .

En la Tabla 5.4 se resumen las posiciones de algunas bandas características de absorción. Aunque éstas son valiosas al analizar los espectros IR, a menudo se pueden saber mucho considerando al espectro completo como si fuera una huella digital. De esta manera se puede identificar con rapidez los homopolímeros más comunes por simple comparación estándar. Los copolímeros, terpolímeros y las mezclas traen complicaciones, aunque los espectros pueden ser simplemente aditivos. Algunas bandas se corren por cambios del ambiente. Las bandas del OH y del NH se mueven por los enlaces de hidrógeno. De hecho el corrimiento de la banda OH en metanol deuterado se usa como medida de pureza.

Para propósitos de identificación, el análisis por infrarrojo se puede aplicar a las superficies y a los fragmentos de la pirolisis de los materiales poliméricos. Además de usarse en la identificación de polímeros desconocidos y de la estimación de las cantidades de comonomeros, impurezas o grupos en los extremos de la cadena de los polímeros, con algunas modificaciones el análisis infrarrojo se usa para medir la cristalinidad y la orientación de grupos específicos en los polímeros cristalinos. Las reacciones químicas de los polímeros pueden seguirse por la aparición de grupos funcionales tales como grupos oxigenados en la oxidación o de grupos oxhidrilo libres que se originen por hidrólisis.

Tabla 5.4 Posiciones de las bandas infrarrojas características [21]

Grupo	Rango de frecuencia, cm^{-1}
Vibraciones por es el estiramiento OH	
Libre OH	3610-3645(aguda)
Enlace de hidrógeno intramoleculares	3450-3600(aguda)
Enlace de hidrógeno intermoleculares	3200-3550 (amplio)
Compuestos quelato	2500-3200(muy amplio)
Vibraciones por estiramiento NH	
Libre	3300-3500
NH enlazado con hidrógeno	3070-3350
Vibraciones por estiramiento CH	
$\equiv\text{C-H}$	3280-3340
$=\text{C-H}$	3000-3100
C-CH_3	$2872 \pm 10, 2962 \pm 10$
O-CH_3	2815-2832
N-CH_3 (aromático)	2810-2820

Grupo	Rango de frecuencia, cm^{-1}
N-CH ₃ (alifático)	2780-2805
CH ₂	2853 ± 10, 2926± 10
CH	2880 - 2900
Vibraciones por estiramiento SH	
Libre SH	2550-2600
Vibraciones por estiramiento C≡N	
No conjugado	2240-2260
Conjugado	2215-2240
Vibraciones por estiramiento C≡C	
C≡CH (terminal)	2100-2140
C-C≡C-C	2190-2260
C-C≡C -C≡CH	2040; 2200
Vibraciones por estiramiento C=O	
No conjugado	1700-1900
Conjugado	1590-1750
Amidas	~1650
Vibraciones por estiramiento C=C	
No conjugado	1620-1680
Conjugado	1585-1625
Vibraciones flexiones CH	
CH ₂	1405-1465
CH ₃	1355-1395, 1430-1470
Vibraciones en ésteres C-O-C	
Formatos	~ 1175
Acetatos	~ 1240, 1010-1040
Benzoatos	~1275
Vibraciones por estiramiento C-OH	
Alcoholes cíclicos secundarios	990-1060
Vibraciones flexionantes fuera de plano en sistemas etilénicos substituidos por CH	
-C=CH ₂	905-915, 985-995
-CH=CH-(cis)	650-750
-CH=CH-(trans)	960-970
C=C ₂	885-895
	790-840

5.2 Calorimetría Diferencial de barrido (DSC)[22[23]

La calorimetría diferencial de barrido (DSC, Differential Scanning Calorimetry) permite el estudio de aquellos procesos en los que se produce una variación entálpica, por ejemplo determinación de calores específicos, puntos de ebullición y fusión, pureza de compuestos cristalinos, entalpías de reacción y determinación de otras transiciones de primer y segundo orden.

En general, el DSC puede trabajar en un intervalo de temperatura que va desde la temperatura del hidrógeno líquido hasta unos 600 °C. Por esta razón esta técnica de análisis se emplea para caracterizar aquellos materiales que sufren transiciones térmicas en dicho intervalo de temperaturas. La familia de materiales que precisamente presentan todas sus transiciones térmicas en ese intervalo son los polímeros.

En el campo de los polímeros pueden determinarse transiciones térmicas como la temperatura de transición vítrea T_g , temperatura de fusión T_m , se pueden hacer estudios de compatibilización de polímeros, reacciones despolimerización y proceso de curado.

Existen dos tipos de métodos para obtener los datos: DSC de potencia compensada donde la muestra y el material de referencia se calientan mediante calentadores separados aunque sus temperaturas se mantienen iguales mientras las temperaturas se aumentan (o disminuyen) linealmente. DSC de flujo de calor donde se mide la diferencia de cantidad de calor de la muestra y de la referencia cuando la temperatura de la muestra aumento (o disminuye) linealmente. Los dos métodos proporcionan la misma información.

El DSC mide el flujo de calor en la muestra a estudiar y en un material inerte de referencia de forma independiente. Se mantienen a la misma temperatura la muestra y la referencia, $\Delta T = T_r - T_s$, mediante un controlador de temperatura. En la Figura 5.5 se muestra un esquema de DSC donde S señala el comportamiento para la muestra y R el de referencia.

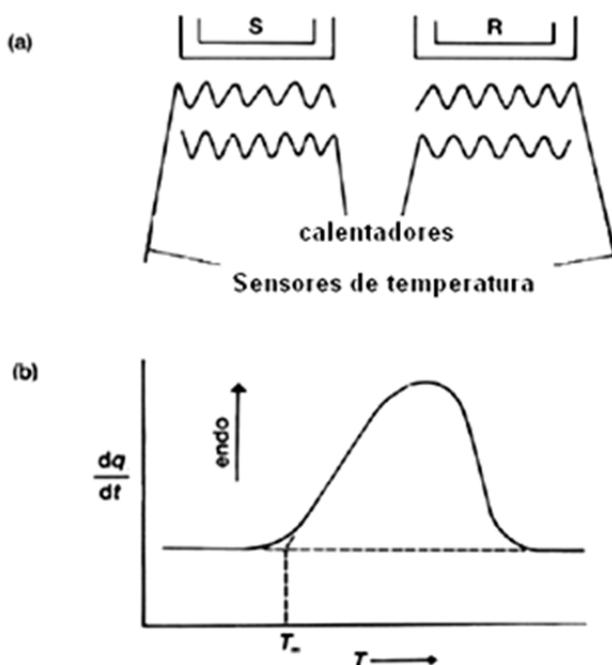


Figura 5.5 Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC). (a) Aparato (S=Muestra, R=Referencia); (b) Curva típica DSC

Aplicaciones

- ✓ Se puede obtener información relacionada con la temperatura y cambios de entalpia a los que ocurren los fenómenos térmicos.
- ✓ La formación de picos endotérmicos de fusión se puede utilizar para estimar la pureza de la muestra.
- ✓ Se pueden obtener las transiciones sólido-sólido y la medida de ΔH de las mismas
- ✓ Observación de la evolución del comportamiento de cristales líquidos
- ✓ Aplicación al estudio de polímeros. En la Figura 5.6 se muestran algunas propiedades que pueden ser análisis mediante DSC.

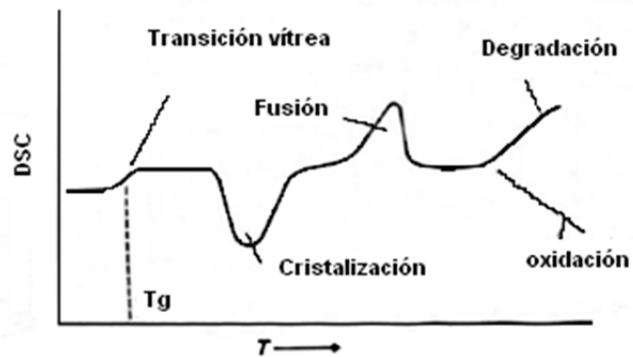


Figura 5.6 Curva DSC de un polímero orgánico Típico

- ✓ Análisis de la composición de plásticos reusados como se muestra en la Figura 5.7

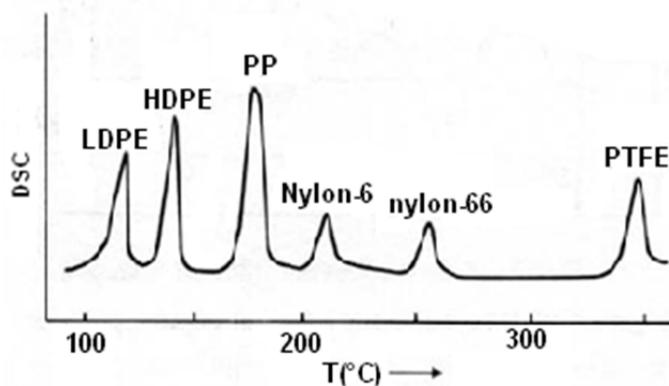


Figura 5.7 DSC de un plástico reutilizado

CAPITULO VI
DESARROLLO EXPERIMENTAL

6.1 Material y reactivos:

Material	Especificaciones
Vasos de precipitado, matraces aforados	50, 100, 500 mL
Pipetas graduadas, pipetas volumétricas	10, 20, 1, 25, mL
Piseta, Vidrio de reloj	Con agua destilada
Mufla Estufa	Sybron/Thermolyne J.M Ortiz
Parilla de calentamiento	0-300 °C
Espectrofotómetro FTIR	PERKIN ELMER FT-IR , Spectrometer, Spectrum RX I
Termostato para TGA/DSC	Horno grande 1100 C. POG260TT Tem. 22° +/- 0.1 °C
Termómetro, Cronometro	-10 – 300°C
Recipiente de aluminio	
Vidrio de reloj	

Reactivos	Especificaciones
Polipropileno PP	Desechos de recipientes para comida y vasos desechables. Lavado y triturado.
Polietilentereftalato PET	Desechos de botellas de agua, lavado y triturado
Xileno	C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂ . Marca (Fermont), PM:106.17 Pureza:99.7 (Mezcla de xilenos)
Acetona	Marca (Fermont) (CH ₃) ₂ CO, PM:58.8 Pureza:99.6 %
Peróxido de benzoilo PB	(C ₆ H ₂ CO) ₂ O ₂ , PM:242.23 Pureza= 99 %
Anhídrido maleico AM	CH ₄ H ₂ O, PM:98.6 Pureza=99%,

6.2 Metodología

6.2.1 Injerto del polipropileno

- 1) Las reacciones de injerto fueron realizadas en un vaso de precipitado de 250 mL
- 2) En el interior del vaso se coloca una cantidad necesaria de PP con aproximadamente 50 mL de disolvente (Xileno).
- 3) Una vez que se alcanza la temperatura de ebullición, y que el polipropileno se ha disuelto completamente (180 – 220 °C) se agrega la cantidad de monómero (Anhídrido maleico) a injertar mezclando durante 10 minutos.
- 4) Cuando haya pasado el tiempo de mezclado se agrega el peróxido de benzoilo. En este momento se mide el tiempo de reacción. (10 minutos).
- 5) Las variables para optimizar la reacción de injerto son las concentraciones de peróxido de benzoilo y anhídrido maleico. Por lo que se realizan reacciones con diferentes concentraciones.
- 6) Una vez transcurrido el tiempo estimado para la reacción del PP, se procede a precipitar el producto obtenido con acetona.
- 7) El producto obtenido se filtra, lavándolo constantemente con acetona y agua para eliminar las cantidades de iniciador y de anhídrido maleico que no reaccionaron.
Nota: Los residuos obtenidos en el filtrado contienen xileno que es tóxico para el ambiente, por lo cual han sido almacenados en recipientes adecuados para su posterior tratamiento.
- 8) El producto deja secar en estufa a una temperatura de 30-50 °C por aproximadamente 1 hora.
- 9) Se pesan muestras de aproximadamente 2.0 g de PP funcionalizado con el fin de elaborar películas planas mediante moldeo por compresión,
- 10) Los 2 g de polímero se coloca entre dos placas de metal, que se van a introducir en la mufla a una temperatura de 180-250 °C aproximadamente, Cuando el material haya fundido, se sacan las placas y se ejerce presión para formar la película.
- 11) Las películas del material funcionalizado se introducen en un espectrofotómetro FTIR, para analizar el grado de inserción en el PP

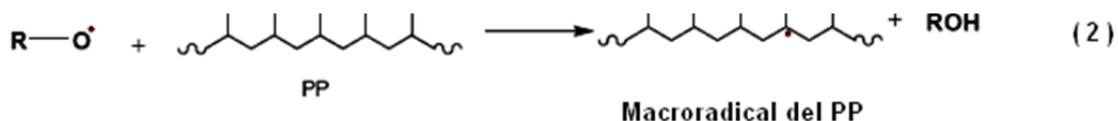
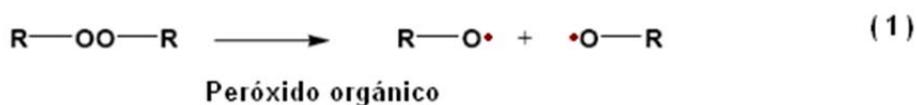
6.2.2 Elaboración de las mezclas de PP-PET

- 1) Las reacciones de la mezcla fueron realizadas en estado fundido.
- 2) Se coloca cierta cantidad a mezclar de PET en un recipiente de acero inoxidable o aluminio con agitación hasta alcanzar la temperatura de fundición (200 -250 °C).
- 3) Posteriormente se coloca la cantidad de PP-AM que se va a mezclar bajando un poco la temperatura para evitar que el material se queme.
- 4) Se mantiene en agitación hasta que los materiales hayan formado una pasta homogénea. El material se deja enfriar.
- 5) Se pesan muestras de aproximadamente 2.0 g la mezcla con el fin de elaborar películas planas mediante moldeo por comprensión,
- 6) Los 2 g de polímero se coloca entre dos placas de metal, que se van a introducir en la mufla a una temperatura de 200-300 °C aproximadamente, Cuando el material haya fundido, se sacan las placas y se ejerce presión para formar la película.
- 7) Las películas del material funcionalizado se introducen en un espectrofotómetro FTIR.
- 8) Se prepararon mezclas PP/PET con porcentajes de 50/50, 10/90, 20/80 etc.
- 9) Para la caracterización de la muestra por DSC la mezcla se trituro finamente, cabe mencionar que solo se llevó a cabo este estudio de acuerdo a los resultados obtenidos por FTIR de las mezclas.

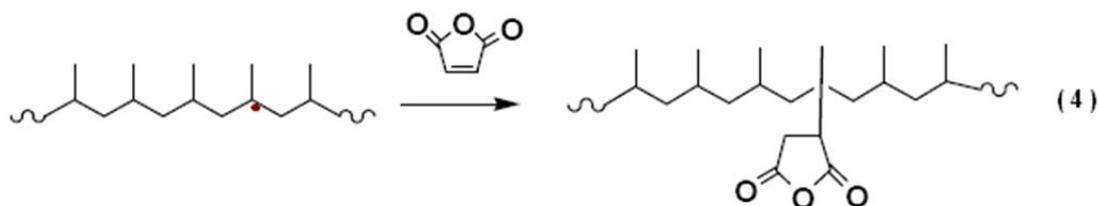
CAPITULO VII RESULTADOS Y ANÁLISIS

7.1 Mecanismo probable de la reacción del injerto [3][24]

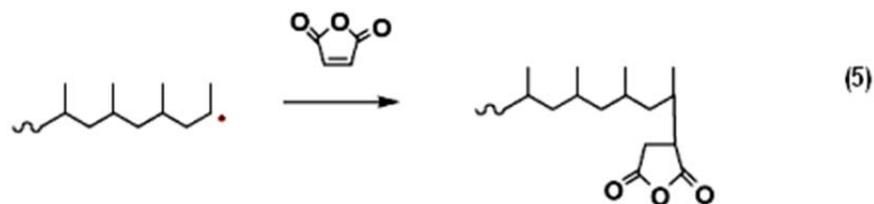
Los peróxidos orgánicos son compuestos que pueden descomponerse térmicamente para producir radicales libres. Estos radicales abstraen átomos de hidrógenos terciarios de las cadenas de PP, generando “sitios” activos y posteriormente permitiendo que estos sirvan para reaccionar con el monómero. Esto se ilustra en las reacciones 1 y 2 respectivamente.



Luego de haberse formado el macroradical del PP, la reacción de injerto puede ocurrir por dos caminos diferentes. El primero consiste en una ruptura β la que tiene lugar antes de que ocurra el injerto del monómero en la cadena polimérica (Reacción 3). El segundo camino es la ocurrencia de injerto del monómero en el macroradical del PP ya generado antes de que éste experimente una ruptura β (Reacción 4)



Como resultado de la ruptura β (Reacción 3), se generan dos cadenas de PP de menor peso molecular lo que significa una degradación del polímero. En consecuencia, una de estas cadenas contiene un doble enlace terminal, mientras que la segunda cadena de PP termina con un sitio radical donde podrá ocurrir el injerto del monómero (reacción 5). Una vez que se injerta la primera molécula del monómero en el macroradical de PP, éste puede actuar como un nuevo centro activo adicionando, a través de una reacción en cadena, nuevas moléculas de monómero y así se propagará el injerto.



7.2 Determinación del grado de inserción de AM en el PP

La inserción de AM en la cadena de PP debido a la funcionalización fue analizada mediante (FTIR) en donde se determinó el grado de inserción de AM por medio del índice de carbonilo. Este índice relaciona las alturas de las bandas asignadas a los grupos carboxílicos provenientes de la reacción de injerto: $h: 1.784$ y $h: 1.710$ con la altura de la banda asignada a la absorción de los grupos CH_2 que se presenta en 1.460 cm^{-1} y la cual es invariable para el PP. Se usó la siguiente ecuación. [11] [12] [25] [26]

$$IC = \frac{\text{altura de la banda } 1784 \text{ cm}^{-1} + \text{altura de la banda } 1710 \text{ cm}^{-1}}{\text{altura de la banda } 1460 \text{ cm}^{-1}}$$

Los resultados se resumen en la Tabla 7.1 donde se observan las condiciones de reacción que mostraron mayor % en peso de inserción de AM sobre las cadenas de PP.

Tabla 7.1 Condiciones de reacción entre PP y el AM para la obtención % de injerto

Muestra	Peróxido %(en peso)	AM %(en peso)	% Grado de Inserción
1A	1	2	0.169
2A	4	5	1.266
3A	1	6	2.397
4A	5	8	2.400
5B	1	3	2.329
6B	3	4	1.174
7B	2	7	1.175
8B	4	5	1.177
9B	polipropileno sin funcionalizar		
1D	3	8	1.195
2D	1	5	1.127
3D	10	10	1.195
4D	5	2	1.182
5D	8	10	1.180

Tabla 7.2 Comparación de grados de inserción del anhídrido maleico con PP reportados en otros estudios él % en peso.

Estudio 1 [25]				Estudio 2[27]			
Peróxido %	AM %	Tiempo de reacción segundos	Grado inserción %	Peróxido %	AM %	Tiempo de reacción	Grado inserción %
0.09	4.10	900	0.816	0.40	6.50	1200	0.578
0.09	8.10	900	1.260	0.50	6.50	360	1.160
1.50	8.10	900	0.516	.050	6.50	600	1.300
0.90	4.10	1.500	0.637	.050	10.0	780	2.880
1.50	4.10	1.500	0.506	.050	10.0	360	1.120
0.90	8.10	1.500	0.292	.050	10.0	600	2.567
1.50	8.10	1.500	0.708	.050	4.50	780	1.540
0.40	6.10	1.200	0.578	.090	4.50	1500	0.636
2.00	6.10	1.200	0.811	.090	8.50	900	0.817
1.20	2.20	1.200	0.262	.090	8.50	900	1.263
1.20	10.0	1.200	0.472	.090	2.50	1500	0.290
1.20	6.10	1.080	1.109	1.30	6.50	1200	0.271
0.50	10.0	2.567	1.072	1.30	6.50	1200	1.137
0.50	6.10	2.872	2.147	1.30	6.50	1300	1.083
0.50	10.0	1.539	0.735	1.30	6.50	1200	2.151

En comparación de la Tabla 7.1 y Tabla 7.2 los grados de inserción PP-AM conseguidos en este estudio en forma general son mayores en algunos casos a los descritos en estudios reportados en la Tabla 7.2, debido probablemente a las condiciones de reacción que se utilizaron tales como: concentración de los reactivos pues en este caso se utilizaron concentraciones más elevada, de igual manera pudo haber influenciado el origen de los polímeros de desecho utilizados etc.

7.3 Espectroscopia de infrarrojo (FTIR) para la inserción de AM

El espectro de FTIR obtenido de polipropileno de desecho utilizado experimentalmente, y que no ha sido funcionalizado con AM se muestra en la Figura 7.1. En este espectro se señalan las bandas características de los grupos funcionales constituyentes.

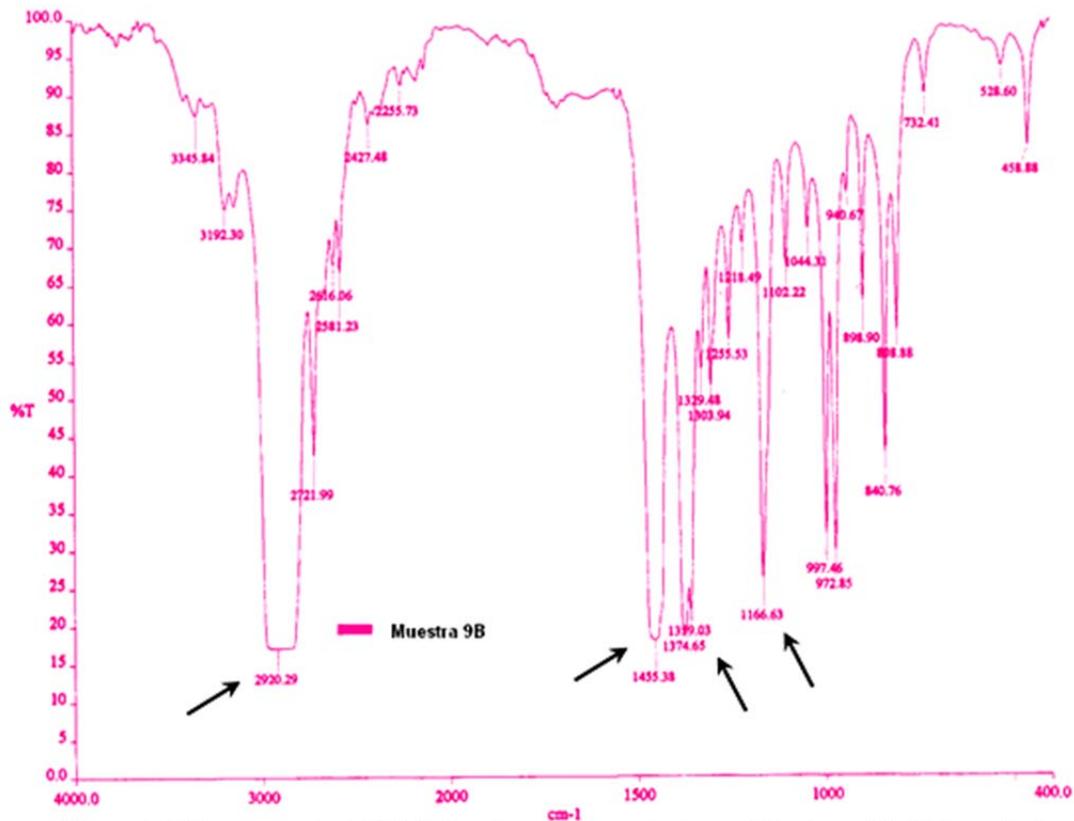


Figura 7.1 Espectro de FTIR del polipropileno sin inserción de anhídrido maleico

En la Figura 7.1 se observan solo las bandas de absorción características del Polipropileno, las cuales corresponden a enlaces carbono-carbono, y enlaces carbono-hidrogeno: Se observar la presencia de una banda fuerte en 2930.29 cm^{-1} correspondiente a la vibración de estiramiento asimétrica y simétrica del enlace C-H alquilo. La banda $1,455.38\text{ cm}^{-1}$ y 1359 cm^{-1} pertenecen a las vibraciones de deformación flexión de los grupos CH_2 invariable para el PP y se presentan vibraciones de flexión de los grupos CH_3 en $1,166.63\text{ cm}^{-1}$. [21][25][27] [28]

La existencia del injerto de AM en PP se comprobó en los resultados de la Figura 7.2 que muestra el espectro FTIR de una muestra de PP funcionalizado y la del polipropileno sin modificar.

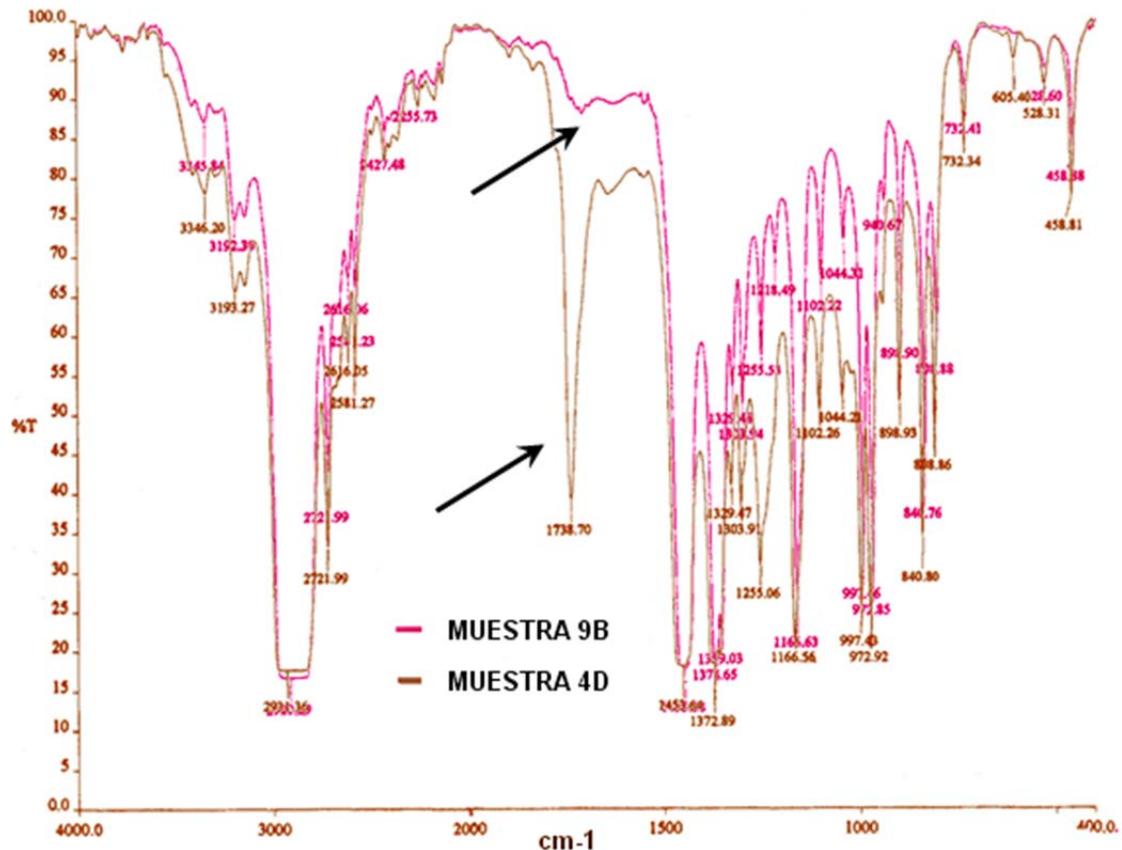


Figura 7.2 Comparación de espectros FTIR, PP injertado y PP sin injertar

Los espectros de la Figura 7.2 presentan las mismas bandas características del PP sin funcionalizar, pero también se observa la presencia de una banda intensa en 1734 cm^{-1} que corresponden a vibraciones de estiramiento de grupos carboxilo (C=O) provenientes

Sin embargo los espectros FTIR descritos en las figuras anteriores no obtuvieron el mayor grado de inserción AM. El mayor grado de inserción AM se obtuvo en los espectros FTIR de la Figura 7.4 con 2.400 % y 2.397 % de injerto. En estos espectros se observan las bandas de los grupos ácido carboxílico en 1712-1713 cm^{-1} por las vibraciones C=O ya descritas, se observa también otra banda en 1774-1774 cm^{-1} que corresponde a grupos carbonilo que se injertaron como anillo de 5 eslabones en PP. Observar estructura (b). [25] [27]

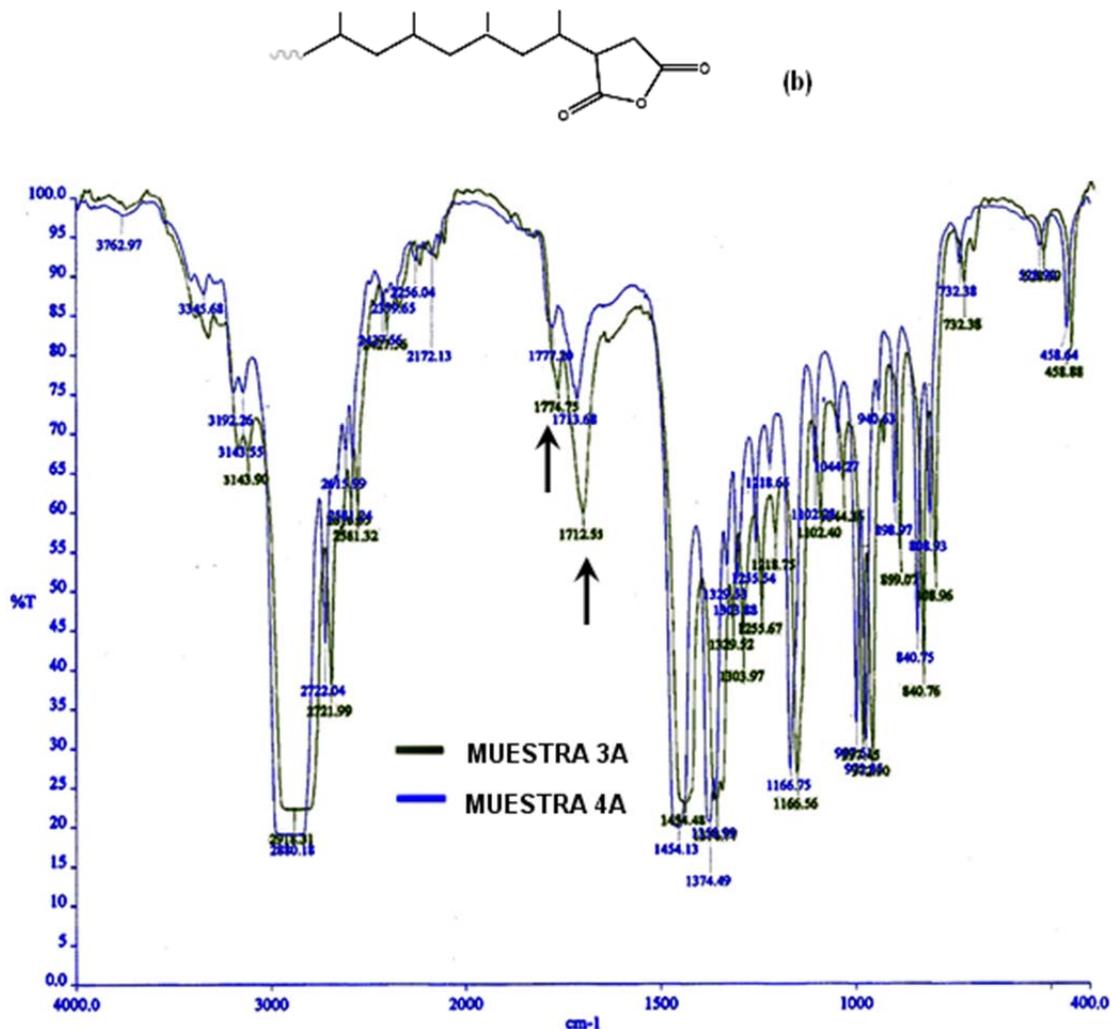


Figura 7.4 Espectros FTIR con mayor % de inserción AM

Recordemos que la intensidad de estas dos bandas se utilizó para la determinación del porcentaje de injerto de AM por medio del índice de carbonilo (IC) descrito con anterioridad y por lo tanto los porcentajes de injerto de la Figura 7.4 son mayores que en los demás espectros obtenidos.

La muestra **4A** con 5% de peróxido y el 8 % de anhídrido maleico (Tabla 7.1) por haber obtenido el mayor % de inserción 2.400 de anidrido maleico marco las condiciones reacción para obtener el PP injertado utilizado en la mezcla con PET.

7.4 Análisis de preparación de las mezclas

Se prepararon muestras de PP/PET con PP sin funcionalizar y PP funcionalizado con distintos porcentajes en peso de cada polímero; los resultados más relevantes se muestran en la Tabla 7.3 en donde por ejemplo la **Muestra 1** PET/PP, 50/50 se realizó con una cantidad que contenía el 50 % de PET y el 50 % de PP. Las imágenes que se describen en la tabla 7.3 morfológicamente son fotografías tomadas con una cámara de resolución común ya que una microscopía electrónica de barrido (SEM) no se llevó a cabo por fines económicos. Sin embargo las fotografías muestran claramente una diferenciación notable con la cual se puede deducir resultados considerables.

Tabla 7.3 Resultados de mezclas PP/PET

Mezclas	Resultados	Observaciones
<p>Muestra 1 PP/PET 50/50 El PP no se funcionalizo</p>		<p>Físicamente la mezcla no se llevó a cabo, pues en el momento de la reacción de mezclado se observan dos fases que no se unen una con la otra, Esto sucedió en todas las muestras realizadas con PP sin funcionalizar.</p>
<p>Muestra 2 PP/PET 20/80 El PP no se funcionalizo</p>		<p>La mezcla aparentemente se lleva a cabo en estado fundido, sin embargo en el momento de elaborar las placas para su estudio estas se pulverizan con facilidad evitando su análisis.</p>
<p>Muestra 3 PP/PET 70/30 Con PP funcionalizado</p>		<p>Se observa en la placa realizada que no hay una homogenización de los materiales al 100%. Se pueden observar a simple vista dos fases distintas de materiales que no se unieron entre sí.</p>
<p>Muestra 4 PP/PET 80/20 Con PP funcionalizado</p>		<p>Ya existe una mejor homogenización de los materiales, sin embargo la placa no se ve del todo uniforme todavía, se alcanzan a ver puntos donde permanecen dos fases.</p>
<p>Muestra 5 PP/PET 50/50 Con PP funcionalizado</p>		<p>Ya existe una homogenización de los materiales a simple vista, la película se puede realizar con facilidad y es transparente con apariencia de una sola fase.</p>

Hasta aquí y por los resultados obtenidos en la tabla 7.3 ya se puede deducir que el PP funcionalizado ayuda a la adhesión con el PET, puesto que las muestras sin funcionalizar simplemente no de consiguieron resultados favorables.

7.5 Espectroscopia de infrarrojo (FTIR) para las mezclas PP/PET

El espectro de FTIR obtenido de PET de desecho utilizado en el estudio, se muestra en la Figura 7.5. En esta espectro se señalan bandas de absorción infrarroja asociadas a los grupos químicos característicos del PET, se encuentran bandas intensas asociadas el grupo funcional éster en 1712 cm^{-1} esta banda es intensa. El anillo aromático presenta bandas en 3054 cm^{-1} por estiramientos del enlace C-H por lo generalmente múltiples bandas, El esqueleto del anillo C=C presenta bandas que encuentran en $1500\text{-}1600\text{ cm}^{-1}$, La banda en 732 cm^{-1} son vibración mixtas de los grupos teraftálicos (o bien sustituciones de anillo para), la banda 1092 cm^{-1} al estiramiento O-C-C, la asignación de las bandas de “etileno” CH_2 del grupo $-\text{O}-(\text{CH}_2\text{CH}_2)-\text{O}-$ son observadas en 1240 cm^{-1} . La banda en 3400 cm^{-1} corresponde a grupos OH de las cadenas terminales del PET. [21][28].

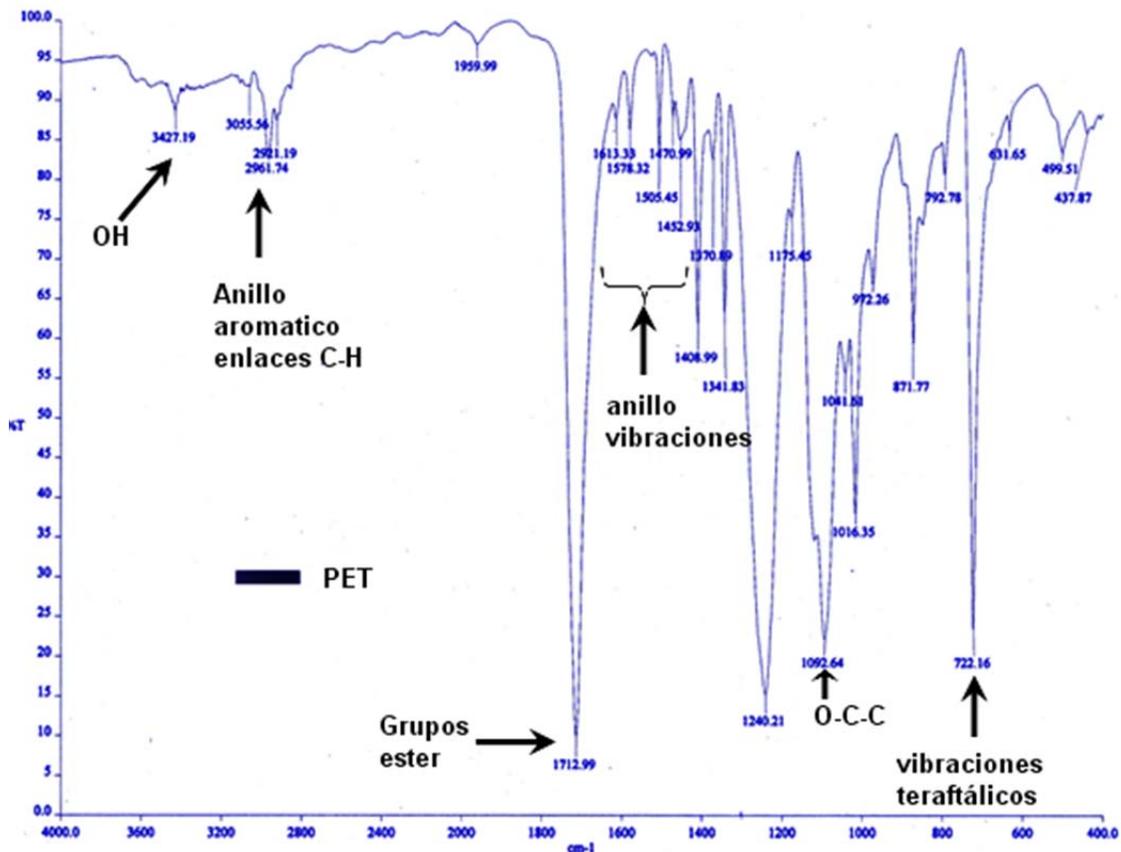


Figura 7.5 Espectro FTIR obtenido del PET de desecho

Como ya se mencionó en el la Tabla 7.3 se realizaron mezclas de PP/PET cabe mencionar que se realizaron estudios de infrarrojo a las películas de las mezclas obtenidas con buenas características. En la Figura 7.6 se presentan dos espectros uno corresponde a la mezcla PP-MA/PET donde de coloco 80% de PP funcionalizado y 20% de PET el otro es de una mezcla donde se colocó 70 PP funcionalizado y 30% de PET. Se puede observar que los espectros de la mezclas no difirieron mucho en las características del espectro del PET de desecho utilizado (Figura 7.5), solo como diferencia más relevante está el estiramiento que sufren las bandas entre 2900 cm^{-1} y 3000 cm^{-1} su reseña posible es que son vibraciones de estiramiento del enlace C-H alquilo proveniente del PP. También hay un estiramiento en la banda 1454 cm^{-1} ; podrían ser deformaciones simétricas de CH_2 del PP, por cual ya se deduce que si hay una posible interacción entre los polímeros. [21][29].

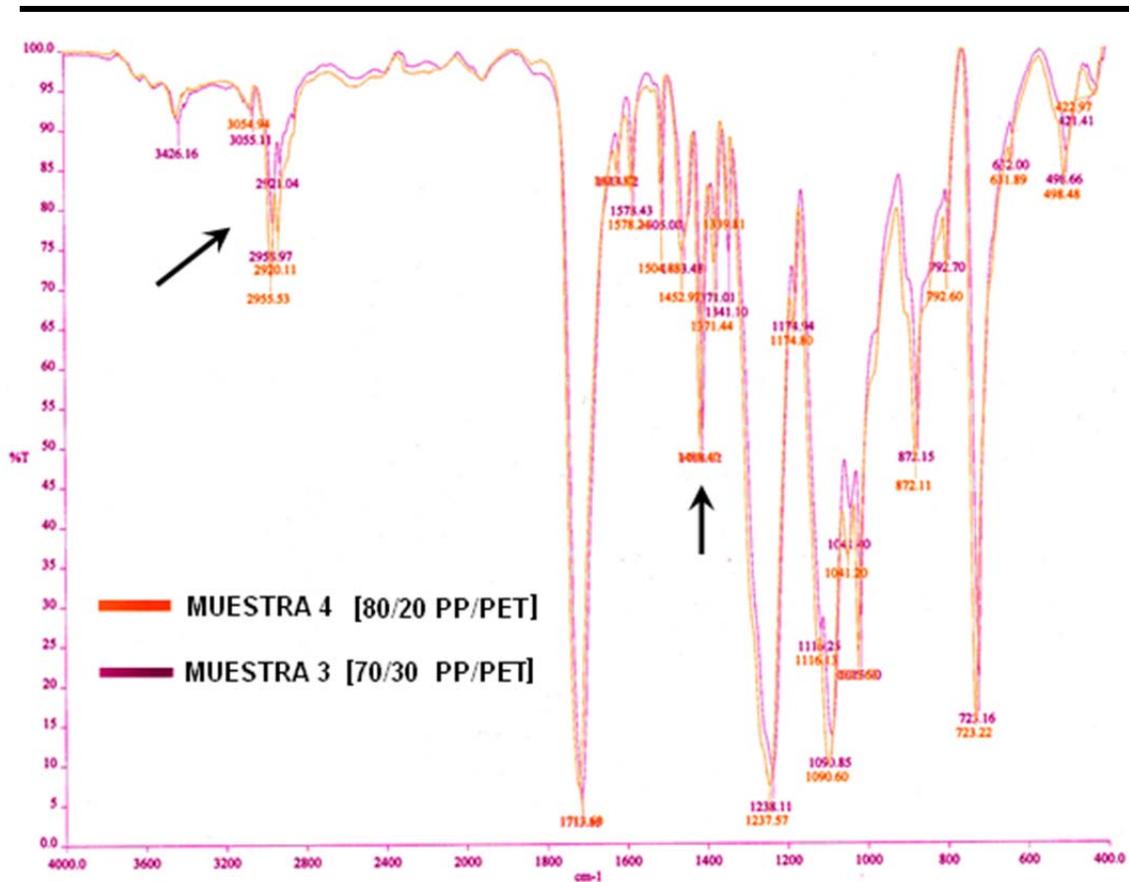


Figura 7.6 Comparación de espectros FTIR de mezclas PP/PET

En la Figura 7.7 Se muestra el espectro FTIR de la muestra 5 de la Tabla 7.3 (PP/PET 50/50) donde primeramente se observa el ensanchamiento de las bandas del carbonilo del PET indican un incremento en el desorden de estos grupos funcionales, es decir las interacciones entre polímeros ya se están manifestando. Este ensanchamiento de bandas se debe a las interacciones específicas como puentes de hidrógeno. Nuevamente como en la Figura 7.6 la intensidad de las bandas ente 3919-2951 cm⁻¹ es muy notable sufriendo un alargamiento; demostrando así que hay interacción polímero-polímero pues estas bandas correspondientes a la vibración estiramiento del enlace C-H del PP. La banda 3424 cm⁻¹ corresponde nuevamente a grupos OH. La banda en 732 cm⁻¹ son vibraciones mixtas de los grupos teraftálicos.

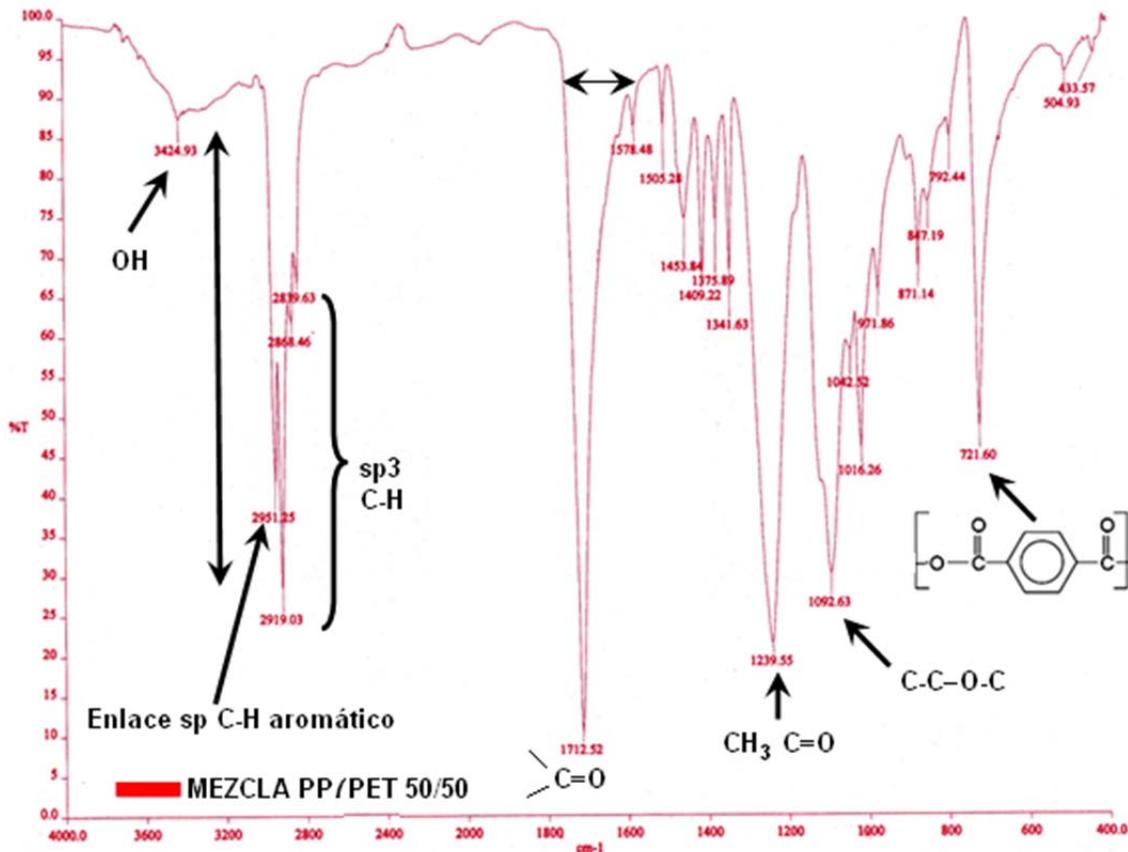
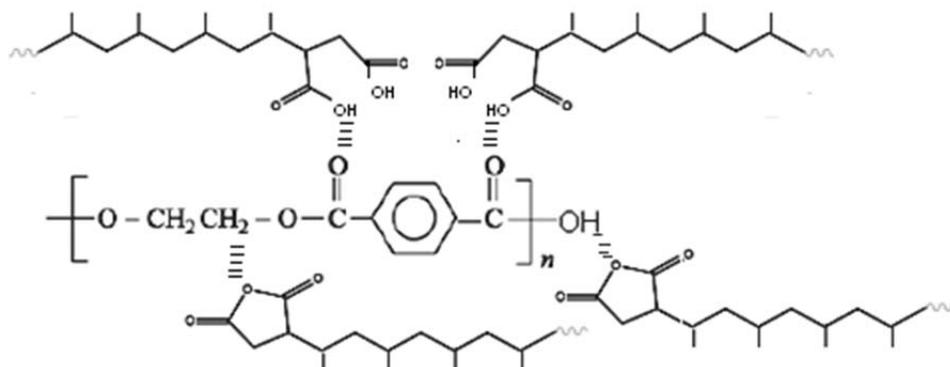


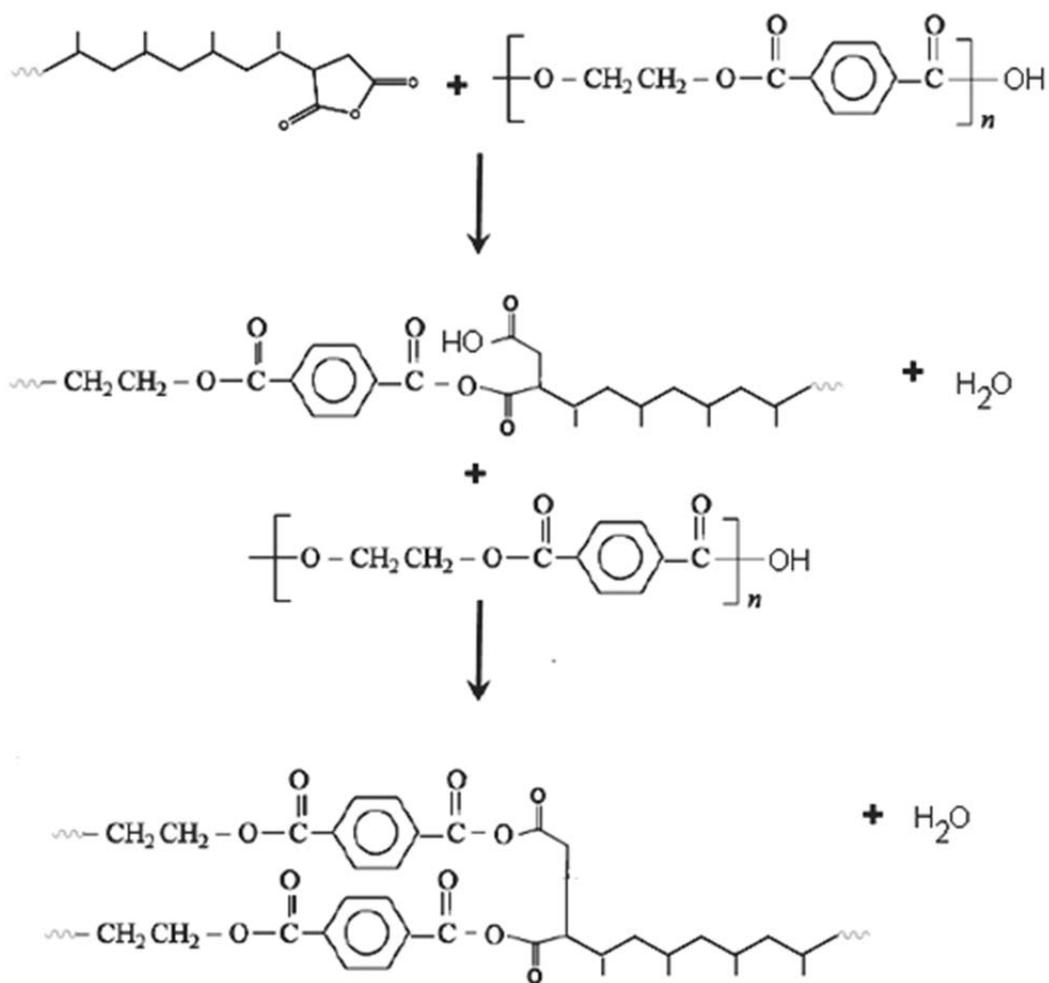
Figura 7.7 Espectro FTIR de PP/PET Muestra 5 de la Tabla 7.3

7.6 Mecanismo probable de la reacción de la mezcla PP/PET [10] [20] [30]

En seguida se presenta las reacciones que puede formar el compatibilizador con el PET haciendo notar que si hay una posibilidad de miscibilidad polímero-polímero. Se tiene la posibilidad de formar puentes de hidrógeno con los grupos OH y COOH del PET. Observar la siguiente reacción.



También por el tratamiento aplicado a la mezcla de PP/PET otro mecanismo posible es la de una reacción de esterificación con un grupo C=O del anhídrido maleico y un OH terminal del PET, como se describe en la siguiente reacción:



7.7 Calorimetría diferencial de Barrido (DSC) para las mezcla PP-AM/PET

El resultado que se espera obtener en análisis de Calorimetría diferencial de barrido de las mezclas PP/PET, se pueden señalar en tres casos límites.^{[31][32]}:

- a) Total miscibilidad: Se dice que un sistema de polímeros es totalmente miscible cuando las dos transiciones vítreas o cualquier otra transición térmica, de los componentes se convierten en una intermedia por efecto del mezclado y cuya posición en la escala de temperaturas dependerá de la composición inicial de mezcla.
- b) Miscibilidad parcial. Se dice que un sistema binario de polímeros es parcialmente miscible cuando las transiciones vítreas o cualquier otra transición térmica, de los componentes se desplazan una hacia la otra por efecto del mezclado; el desplazamiento que alcanzan será función de la composición inicial de la mezcla de partida.
- c) Miscibilidad nula: Un sistema binario es inmiscible totalmente cuando las transiciones vítreas o cualquier otra transición térmica, de los componentes permanecen invariables por efecto del mezclado.

Para poder hacer un comparativo entre lo experimental y lo teórico en la Tabla 7.4 se presentan las características térmicas de polipropileno y polietilentereftalato reportadas bibliográficamente. [4][21]

Tabla 7.4 Características térmicas

Polímero	Símbolo	Tg[°C]	Tm [°C]	ΔH_m°
Polipropileno	PP	(-30)	165	137 J/g
polietilentereftalato	PET	69	256	120 J/g

Se muestran también en las Figuras 7.11 y 7.12 termogramas DSC de PET y PP respectivamente reportadas en la bibliografía en los cuales se puede observar sus propiedades térmicas.

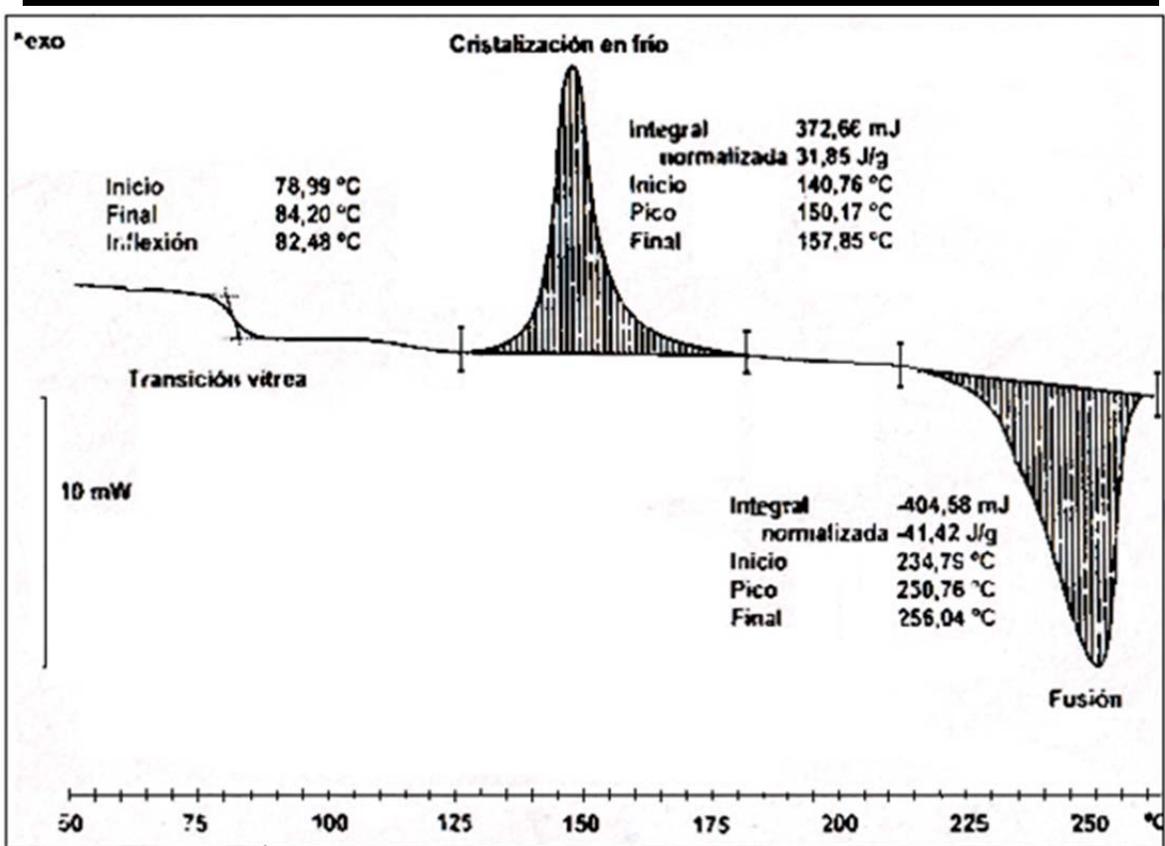


Figura 7.11 DSC del PET reportado en la bibliografía [4]

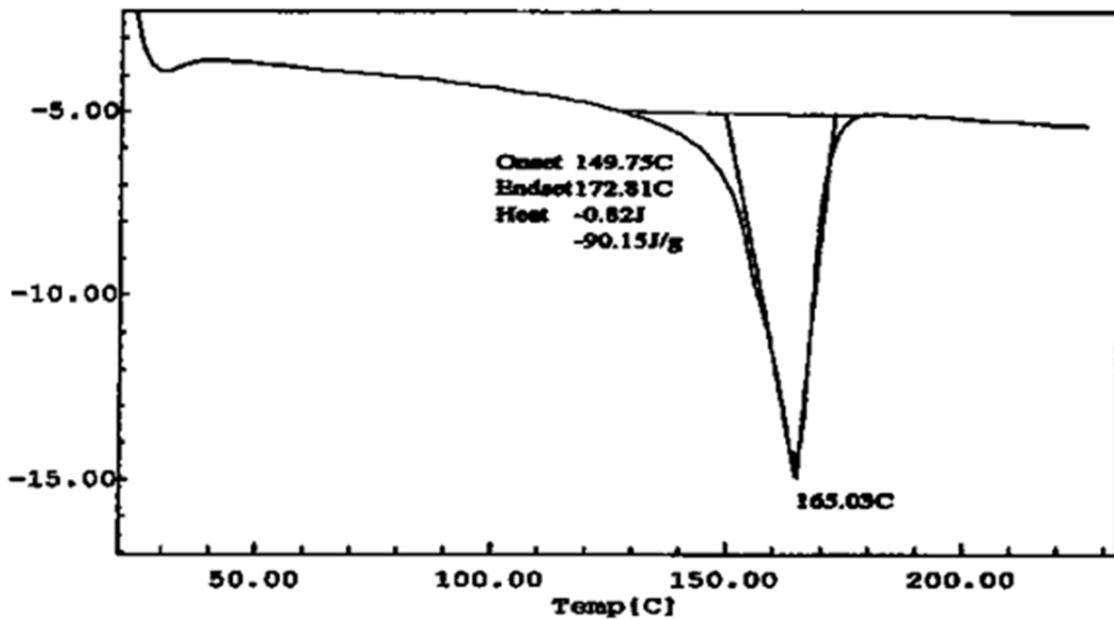


Figura 7.12 DSC del polipropileno reportado en la bibliografía [8]

En la figura 7.13 se muestra el DSC de la mezcla PP/PET, se usó para este análisis una mezcla de 50% PP y 50% PET ya que de acuerdo a los resultados anteriores esta demostró tener una mayor compatibilidad.

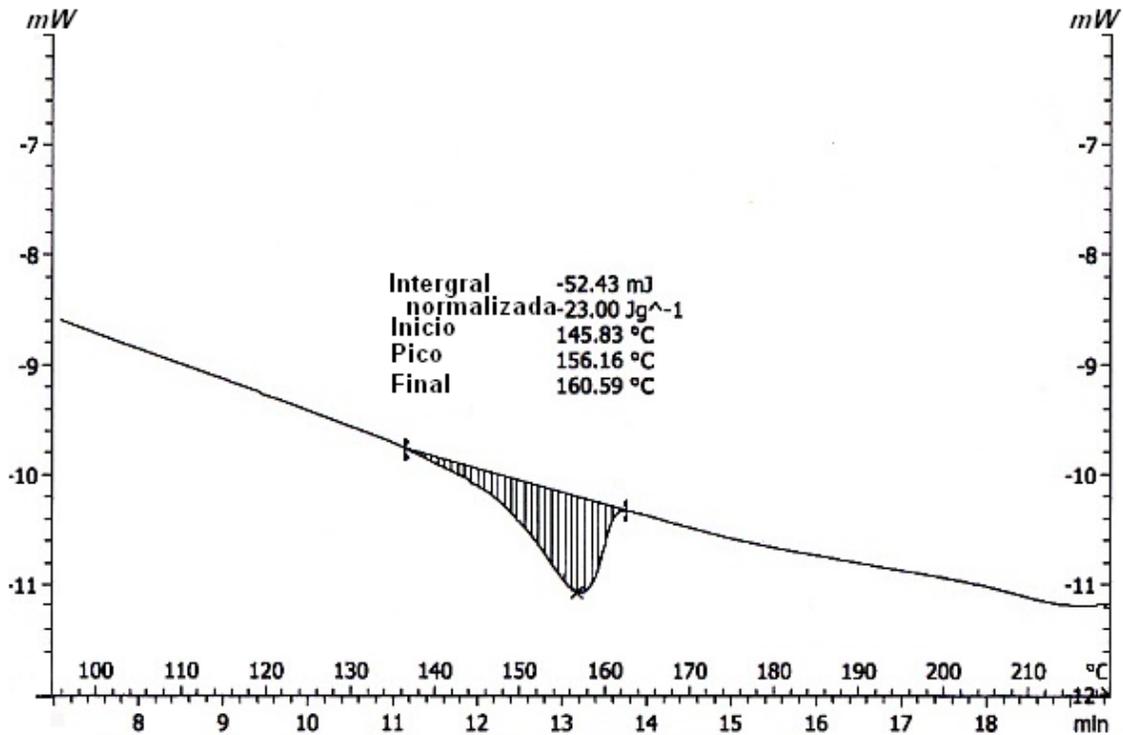


Figura 7.13 DSC de PP/PET Experimental

Analizando el termograma de la figura 7.13 se puede concluir los siguientes criterios.

- 1) El pico desarrollado se encuentra 156.16 °C es cercano al temperatura de fusión del PP reportado en la bibliografía que se observa en la Figura 7.12 y en la Tabla 7.4 donde en punto de fusión del PP es de 165 °C sin embargo por la diferencia que existe entre la bibliografía y la experimental, puede señalarse que este pico térmico no pertenece al PP, ni a ninguna otra temperatura térmica de los polímeros individuales en cuestión; sino de una nuevo fase térmica formada por el copolímero PP-AM-PET, y su disminución y desplazamiento en el termograma varía en función de la composición e interacción de la mezcla. La disminución en el punto de fusión

nos indica que el copolímero es más sensible al calor que los materiales individuales.

- 2) Tomado en cuenta los tres criterios de miscibilidad descritos con anterioridad que consiste en el comportamiento de la temperatura térmicas con relación a los materiales individuales se puede concluir que si existe miscibilidad entre polímeros. Como ya se había descrito anteriormente se esperaba que si la mezcla no tuviera grado miscibilidad la aparición de varios picos individuales hicieran su derivación en el termograma, sin embargo solo hay un solo pico por lo cual se concluye que existe miscibilidad entre los polímeros y la posición de la temperatura en la escala del termograma es debido a la cantidad que se usó de cada polímero.
- 3) Temperatura de transición vítrea T_g : Se aplica principalmente a polímeros amorfos, aunque los polímeros cristalinos también tienen temperaturas de transición vítrea, ya que todos los polímeros tienen regiones amorfas entre las regiones semicristalinas, sin embargo esto dependerá de la cantidad partes cristalinas o amorfas en un polímero. [35] en este caso no aparece un T_g en el termograma experimental por lo cual se deduce que el copolímero formado tiene un alto grado cristalinidad.
- 4) Temperatura de cristalización T_c : Sólo aparecerá en los polímeros capaces de formar cristales. La posibilidad de que un polímero se presente en estado cristalino está favorecida por la existencia de un alto grado de regularidad química estructural. En este caso se puede observar que el exoterma de cristalización no aparece indicando que la nueva fase formada por el copolímero PP-AM/PET no presenta tendencia a cristalizar durante el calentamiento.
- 5) Temperatura de fusión T_m : Los polímeros completamente amorfos, no exhibirán ni cristalización ni fusión. En el termograma aparece el pico de fusión por lo tanto podemos concluir nuevamente que el copolímero formado por PP/PET es cristalino. Cuando todas las circunstancias son favorables se produce el empaquetamiento de

las cadenas en un sistema cristalino, las razones por las cuales el copolímero presente este orden son de diverso orden pudiéndose destacar las siguientes.

- a) La existencia de cadenas muy regulares por esto es por la naturaleza de los polímeros.
 - b) La existencia de interacciones intermoleculares fuertes como puentes de hidrogeno que es lo que concluimos que sucede en probable mecanismo de reacción que ya se ha descrito.
 - c) La existencia de una estructura química favorable en la cadena, esto debió ser a la inserción de anhídrido maleico.
- 6) Como el copolímero obtenido es cristalino puede llegar a formar poliformismo: esto significa que un polímero puede cristalizar en dos o más sistemas, uno de los cuales es significativamente menos ordenado o menos estrechamente empaquetado razón por la cual uno de ellos es dominante; el que se produzca uno u otro depende de la regla general de las condiciones de cristalización a que se somete el copolímero. En los termogramas el poliformismo es representado por la aparición de picos en este caso no existe tal cosa no podríamos decir a ciencia cierta si el copolímero formado por PP/PET tiene esta tendencia ya que sería necesario un estudio más detallado.
- 7) A partir de los valores de entalpía de Fusión (ΔH_m) se puede estimarse el contenido de fase cristalino o cristalinidad (X_c) que se define como la porción de copolímero que se haya en estado cristalino, Se calcula a partir de la siguiente expresión:

$$X_c = \frac{\Delta H_m}{\Delta H^\circ} * 100$$

Donde ΔH° es el valor teórico de entalpía de fusión de un polímero supuesto 100 % cristalino y es exclusivo de cada polímero; ΔH° se obtiene a partir de las medidas colorimétricas DSC. Como se está utilizando una mezcla por lo tanto la expresión queda:

$$X_c = \frac{\Delta H_m}{\Delta H^\circ_{PP} + \Delta H^\circ_{PET}} * 100$$

Sustituyendo los valores:

$$X_c = \frac{-23 \text{ J/g}}{209 \text{ J/g} + 120 \text{ J/g}} * 100 = 0.069 \text{ J/g} * 100 = 6.9 \%$$

La consecuencia que podemos observar en este porcentaje de cristalinidad 6.9 % es que incluso para los polímeros de estructura muy regular la cristalinidad alcanzada nunca llega a ser total; así pues, en los polímeros capaces de cristalizar siempre hay una importante fase amorfa. Además el tamaño de las entidades cristalina es mucho menor que la longitud total de la cadena, por lo que sólo una pequeña parte de la misma puede participar en la estructura cristalina considerando un material obtenido con estado semicristalino.

Así, los polímeros semicristalinos presentan, por una parte, una transición asociada a la fase amorfa de los mismos y, por otra parte, una transición en la cual desaparecen por fusión las entidades ordenadas o cristalinas.

Podemos apreciar una disminución en la temperatura de fusión debido al efecto de un componente amorfo y que permite suponer la existencia de interacciones termodinámicas tales como la morfología de los cristales.

La ausencia de Tg y de exoterma de cristalización en el termograma del copolímero es debido a la orientación de cristalinidad inducida por el proceso de mezclado.

CONCLUSIONES

- ✓ Con los resultados FTIR se ha logrado optimizar las variables de reacción entre el Polipropileno y anhídrido maleico consiguiéndose injertar un máximo de 2.400 % en peso de anhídrido sobre las cadenas de polipropileno; las condiciones con las que se logra este porcentaje fueron con el 5 % de peróxido de benzoilo y el 8 % de anhídrido maleico.
- ✓ La inserción de anhídrido maleico sobre el polipropileno se comprobó por espectroscopia de infrarrojo donde se observó una amplia evidencia en las bandas de absorción de los grupos carbonilos que provenían del anhídrido maleico y que estaban ausentes en los espectros infrarrojos del polipropileno sin injertar.
- ✓ En cuanto a las mezclas de polipropileno-polietilentereftalato se observa que en estado físico el mezclado si se lleva acabo y que este tiende a ser más evidente en polipropileno funcionalizado ya que en polipropileno sin funcionalizar las mezclas no se pudieron realizar dando resultados finales de materiales con malas propiedades físicas y morfológicas.
- ✓ Los estudios de espectroscopia FTIR realizadas las mezclas PET/PP demuestran que si existe interacción entre los polímeros pues la variación que existió en las bandas de absorción fue notable.
- ✓ En calorimetría diferencial de barrido para la mezcla PP/PET, tomado en cuenta los tres criterios de miscibilidad descritos con anterioridad que consiste en el comportamiento de la temperatura térmicas con relación a los materiales individuales se puede concluir que si existe miscibilidad entre polímeros.
- ✓ Los resultados de la Calorimetría Diferencial de Barrido muestran que se trata de un copolímero siemicristalino.

- ✓ La calorimetría diferencial de barrido para la mezcla PP/PET indican la disminución de temperatura de fusión que se ve afectada por el copolímero formado, señalado así que existe interacción entre las fases o bien se puede decir que hay compatibilización de la mezcla PET/PP.
- ✓ Se puede concluir que este tipo de mezclas funcionalizadas puede realizarse de manera satisfactoria con materiales de desecho dado su elevadísimo tonelaje de estos productos como residuos domésticos e industriales. De este modo se abre una vía adicional a la reutilización de restos materiales de gran consumo, lográndose beneficios económicos y al medio ambiente.
- ✓ Por otro lado, la investigación aún no concluye ya que se puede seguir estudiando más a detalle las propiedades de este nuevo material, como por ejemplo sus propiedades mecánicas (dureza, resistencia al impacto, flexión, elongación, etc.) las cuales nos ayudarían a darle una aplicación más específica del material.

BIBLIOGRAFIA

- 1) GARCÍA Juan Diego, Lozano B. Luis. “Química Industrial”. Ed. Horacio Escarabajal. Universidad Politécnica de Cartagena. España 2005
- 2) WADE L. G. Química Orgánica 2^{da} Ed. Ed. Prence-Hall Hispanoamericana, México 1983.
- 3) VALLEGOS M. Evangelina, “Aprovechamiento de *Cannabis sativa* como material de refuerzo/carga del polipropileno” Tesis Doctoral, Universidad de Girona 2006
- 4) BARLART Gimeno Rafael. et.al.”Introducción de la Ciencia e Ingeniería de Polímeros. “Universidad de Politécnica de Valencia. España 2004.
- 5) LESZEK A. Utracki. Polymer Alloys and Blends Thermodynamics and Rheology Ed. Hanser Publishers. Germany Republic of. 1989.
- 6) HERNÁNDEZ Padeon Genoveva “Modificación de Hule Polibutadieno Usando un Polímero de configuración Semi-Rígida. Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa. México D.F. Mayo 1994
- 7) KAREL Solc. Polymer Compatibility and incompatibility Principles y Practices. Vol 2. Harwood Academic Publishers 10th. Newyork 1986.
- 8) PAREDES Escobar Rubén D; Salinas Sandoval Ruth C. “Compatibilización de Polipropileno con Politeraftalato de Etilo.” Tesis de Ingeniería. Escuela politécnica Nacional. Quito, DM, 2007.
- 9) ARENCÓN Osuna David. “Efectos de la Incorporación de Polietilentereftalato Sobre la Estructura y Propiedades Mecánicas de Materiales Compuestos Polipropileno-Vidrio”. Tesis Doctoral Universidad Politécnica de Catalunya. Departamento de Ciencias de los materiales Terrasa Diciembre del 2002
- 10) RAMÍREZ Lozano Tomas. “Compatibilización de Materiales Plásticos Mezclas PET _HDPE”. Tesis de Maestría. Universidad Autónoma de Nuevo León. México. Julio 1998.
- 11) WITTCOFF, Phd, Harol A. “Productos Químicos Orgánicos Industriales” Vol. 1 Ed. Limusa, México D.F 1999.
- 12) N. GONZÁLES, Blanca Rojas de Gáscue, Williams Figueea, Rosberi Lorenzo y Nicolino bracho. Revista Iberoamericana de Polímeros. Vol. 9(3), Mayo 2008.

- 13) SKOOG. A. Douglas, 5^{at} ed. "Principios de Análisis Instrumental". Ed. McGraw Hill. España 2001.
- 14) GARBULINSKI, L., Sales, D., Manzano, R., Garay, L., Fourcade, J., Del Rio, A. 2006. Industrias y servicios: Polipropileno. Universidad Nacional de Cuyo. Facultad de Ingeniería. Mendoza, República Argentina.
- 15) IRVIN. I Rubin. "Materiales Plásticos y sus Propiedades y Aplicaciones". Ed. Limusa 2004. Mexico D.F
- 16) VINCENT C. Maria, Alvares B. Silvia., Zaragoza G. Luis, "Principales polímeros Comerciales", Ed. Universidad Politécnica de Valencia, 2006
- 17) CASTELLES Elías Xavier. "Reciclaje de Residuos Industriales". 2 da ed. Ed. Díaz Santo. España 2009.
- 18) RICHARDSON & Lokensgard. "Industria de plástico". Ed. Paraninfo. Madrid España 2000.
- 19) MABE Sola G. Mandolesi Ester M. "Propiedades Mecánicas de Mezclas de Polipropileno y Poliestireno". Universidad Tecnológica Nacional, Abril 2006.
- 20) KAHOVEC J. "Recycling of polymers. 38 th. Microsymposium (IUPAC). Macromolecular symposia. No. 135. Ed. Wiley-VCH. 2008.
- 21) FERDINAND Rodríguez. "Principales sistemas de polímeros". 2 da ed. Ed. Mansa Moderna S.A de C.V. México D.F 1984.
- 22) www.ugr.es/~proyecto08173/qbiofisica/.../FundamentosDSC.pdf(25/07/2012)
- 23) www.upo.es/depa/webdex/quimfis/docencia/biotec.../DSC0607.pdf(25/07/2012)
- 24) www.mater.upm.es/polimeros/.../Cap6_0Intro_1Mezclado.pdf(25/07/2012)
- 25) K. GALLEGOS, B.L. López, C. Gartner. Revista de Ingeniería de Antioquía, No. 37. Julio 2006, pp 59-70
- 26) MEHRDAD Yazdani-Pedram, Katia Calderon y Raul Quijada. Bol. Soc. Chil. Quim. V.45 No.2 Concepción Junio 2000
- 27) VELEA; F.J Juanes; J. C Míguez; M.L. González. Anales de Mecánica de la Fractura, No.25, Vol 2 (2008).
- 28) HUBERT Lobo. Bonilla V Jose. "Handbook of Plastics Analysis". Ed Marcel Bekke Inc. New York 2003.

- 29) AREAL Guerra Rogeli. "Química Orgánica Aplicada I". Ediciones UPC. Terrasa Barcelona. 1991.
- 30) OLIVARES Robles L. Vázquez Rodríguez S. Sánchez Valdez S. Ingenierías, Julio-septiembre 2008 Vol XI. No. 40. Saltillo Coahuila.
- 31) Mehrdad Yazdani-Pedram, Katia Calderon y Raul Quijada. Bol. Soc. Chil. Quim. V.45 No.2 Concepción Junio 2000.
- 32) www.transmerquim.com/images/.../a/anhidrido%20maleico.pdf(26/07/12)
- 33) ARES, C. Marcos. M. Gómez, G. Ellis, M. J. Abad, L. Barral. Revista Iberoamericana de Polímeros. Vol. 10(5) Septiembre 2009.
- 34) BOIN Claudio, Ciano Fernando, López S. Luciano, C3.19. Materiales Universidad Nacional de Rosario, 2002'
- 35) LUENGO Rico Gustavo. "Mezcla de polímeros estudio de su compatibilidad" Tesis doctoral Facultad de Ciencias Químicas, España Madrid 1993.
- 36) M. YAZDANI-PEDRAM, Katia calderón, Raúl Quijada. Boletín de Sociedad Chilena Química. Vol. 45 No. 2, Jun. 2000
- 37) MUÑOZ Pinto Fidel. "Procesamiento y propiedades de algunas Poliofinas. Departamento de Química. Facultad de Ciencias .Universidad de los Andes. Mérida. Venezuela.
- 38) N. LÓPEZ Nestor, J. Andrés Torres, D. Peralta, J.Cruz Gómez. A Cohen-Barki, N. Ramírez. "Tecnología ciencia" Ed. (IMIQ) . Vol 11(1-2):28-34.1996.
- 39) PALACIOS Alquisira, Joaquín. "Caracterización de polímeros". Ed. Sociedad Química de México S.A. Abril de 1982 México D.F.
- 40) SÁNCHEZ Mora Johan J. "Comportamiento Térmico Mecánico del Poli(Etilentereftalato) (PET) modificado con Resinas Poliméricas Basadas en Bisfenol-A". Tesis Doctoral. Universidad Politécnica de Catalunya Barcelona. Junio 2003.
- 41) www.saber.ula.ve/bitstream/123456789/16700/1/polimeros.pdf(25/07/2012)
- 42) www.quimica.unam.mx/IMG/pdf/4acetona.pdf (26/07/12)
- 43) www.transmerquim.com/images/.../a/anhidrido%20maleico.pdf(26/07/12)
- 44) www.ciaquimica.com.ar/pdf/msds/1038-xileno_msds.pdf(26/07/12)
- 45) www.estis.net/sites/cien-bo/default.asp?site=cien-bo&page(26/07/12)

ANEXOS

HOJA DE SEGURIDAD [40]

ACETONA

FORMULA: C₃H₆O,

PESO MOLECULAR: 58.08 g/ mol.

COMPOSICION: C: 62.04 %; H: 10.41 % y O: 27.55 %.

GENERALIDADES:

- ✓ La acetona es un líquido incoloro, de olor característico agradable, volátil, altamente inflamable y sus vapores son más pesados que el aire.
- ✓ Es utilizada como disolvente de grasas, aceites, ceras, hules, plásticos, lacas y barnices. Se usa en la manufactura de algunos explosivos, rayón, películas fotográficas, elaboración de removedores de pinturas y barnices, purificación de parafinas, en la deshidratación y endurecimiento de tejidos, en la extracción de algunos productos vegetales y animales y como materia prima en una gran variedad de síntesis en química orgánica. Por otra parte, junto con hielo y dióxido de carbono sólido, se puede utilizar para enfriar a temperaturas muy bajas.

PROPIEDADES QUIMICAS

- ✓ Punto de ebullición: 56.5 °C
- ✓ Punto de fusión: -94 °C.
- ✓ Densidad: 0.788 g/ ml (a 25 °C); 0.7972 g/ml (a 15 °C)
- ✓ Índice de refracción: 1.3591 (a 20 °C) y 1.3560 (a 25 °C).
- ✓ Punto de inflamación en copa cerrada (flash point): -18 °C.
- ✓ Temperatura de autoignición: 538 °C.
- ✓ Presión de vapor a (20 °C): 185 mm de Hg
- ✓ Densidad de vapor (aire = 1): 2
- ✓ Límites de explosividad: 2.6-12.8 %
- ✓ Conductividad eléctrica (S/cm): 5.5 X 10⁸ (a 298.15 K)
- ✓ Temperatura crítica: 235.05 °C
- ✓ Presión crítica: 35257.5 mm de Hg.

-
- ✓ Volumen crítico: 0.209 l/mol.
 - ✓ Momento dipolar: 2.88 debyes
 - ✓ Volumen molar (l/mol): 0.739 (a 298.15 K)
 - ✓ Densidad molar (mol/l): 16.677 (sólido a -99 °C), 13.506 (líquido a 298.15 K)
 - ✓ Temperatura de punto triple: -94.7 °C.
 - ✓ Presión de punto triple: 19.46 mm de Hg.
 - ✓ Solubilidad: Miscible con agua, alcoholes, cloroformo, dimetilformamida, aceites y éteres.

NIVELES DE TOXICIDAD:

- ✓ LD50 (en ratas en forma oral): 5800 mg/Kg
- ✓ LD50 (en piel de conejos): 20 mg/Kg
- ✓ RQ: 5000
- ✓ Niveles de irritación a ojos en humanos: 500 ppm
- ✓ Niveles de irritación a piel en conejos: 395 mg, leve. 500 mg / 24 h, leve.
- ✓ Niveles de irritación a ojos en conejos: 3.950 mg, severo. 100 mg/24h, moderado.
- ✓ México: CPT: 2400 mg/m³ (1000 ppm)

MANEJO:

- ✓ Equipo de protección personal:
- ✓ Utilice bata, lentes de seguridad y, si es necesario, guantes de hule natural o neopreno (no utilizar PVC), en una zona bien ventilada, de preferencia en una campana. Evite un contacto prolongado de la piel con este producto químico. No debe utilizarse ropa de rayón ni lentes de contacto cuando se maneje este producto.
- ✓ Al trasvasar pequeñas cantidades con pipeta, siempre utilizar propipetas.
- ✓ Ingestión: Lavar la boca con agua. Si se ingirió, diluir tomando agua. No inducir el vómito.

HOJA DE SEGURIDAD**PEROXIDO DE BENZOILO[43]**

SUSTANCIA: Peroxido de Benzoilo

NOMBRE COMERCIAL : PEROXIDO DE DIBENZOILO

CARACTERÍSTICAS Y PROPIEDADES QUÍMICAS Y FÍSICAS

- ✓ Cristales o polvo blanco, inodoro.
- ✓ Punto de fusión (se descompone): 103°C
- ✓ Densidad relativa (agua = 1): 1.3
- ✓ Solubilidad en agua: Escasa
- ✓ Presión de vapor, kPa a 20°C: <0.1
- ✓ Densidad relativa de vapor (aire = 1): 8.4
- Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.007

ESTABILIDAD E IDENTIFICACIÓN DE RIESGOS (TOXICOLOGÍA)

- ✓ Puede descomponerse con explosión por choque, fricción o sacudida. Puede explotar por calentamiento intenso Por combustión, formación de humos tóxicos e irritantes y gases de ácido benzoico y monóxido de carbono. La sustancia se descompone al calentarla intensamente a 103°C. La sustancia es un oxidante fuerte y reacciona violentamente con materiales combustibles y reductores. Reacciona violentamente con compuestos orgánicos, ácidos inorgánicos, alcoholes y aminas, originando peligro de fuego y explosión. Ataca a algunas formas de plástico, de caucho o de recubrimientos; pudiendo originar peligro de fuego y explosión. Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire. La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. El contacto prolongado o repetido puede producir sensibilización de la piel.

MEDIDAS DE SEGURIDAD INDUSTRIAL

- ✓ Para evitar incendios: Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. NO poner en contacto con sustancias inflamables. NO poner en contacto con superficies calientes. Evitar la contaminación.
- ✓ Para evitar explosiones: No exponer a fricción o choque.
- ✓ En caso de incendio utilizar: Agua en grandes cantidades.
- ✓ En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.

- ✓ Para evitar la inhalación: Ventilación (no si es polvo), extracción localizada o protección respiratoria.
- ✓ Para evitar el contacto de la piel: Guantes protectores y traje de protección.
- ✓ Para evitar el contacto con los ojos: Gafas ajustadas de seguridad.
- ✓ Para evitar la ingestión: No comer, ni beber ni fumar durante el trabajo.

- ✓ En caso de derrames y fugas: Mojar el producto con agua. Utilizar herramientas que no generen chispas para recoger la sustancia derramada (no usar materiales que contengan celulosa, tales como la madera o el papel). Eliminar el residuo con agua abundante. NO absorber en aserrín u otros absorbentes combustibles.

HOJA DE SEGURIDAD

XILENO [42]

Nombre químico:	Xileno
Fórmula química:	C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂
Sinónimos:	Xilol; Dimetil -benceno; Metil-tolueno
Familia química:	Hidrocarburos aromáticos

PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

- ✓ Aspecto: Líquido incoloro, claro.
- ✓ Olor: Olor característico.
- ✓ Solubilidad: Insoluble en agua.
- ✓ Peso Específico: 0.86 @ 20C/4C
- ✓ pH: No aplicable.
- ✓ % de Volátiles por Volumen @ 21C (70F): 100
- ✓ Punto de Ebullición: 137 - 140C (279 - 284F)
- ✓ Punto de Fusión: -25C (-13F)
- ✓ Densidad del Vapor (Air=1): 3.7
- ✓ Presión de Vapor (mm Hg): 8 @ 20C (68F)
- ✓ Tasa de Evaporación (BuAc=1):0.7

IDENTIFICACIÓN DE GIESGOS

- ✓ Inhalación: La inhalación de los vapores puede irritar la nariz y garganta. La inhalación de altas concentraciones puede causar náuseas, vómitos, dolor de cabeza, zumbido de los oídos y severas dificultades respiratorias que pueden retrasarse en su presentación. Se ha reportado también dolor subesternal, tos y ronquera. Altas concentraciones del vapor son anestésicas y depresoras del sistema nervioso central.
- ✓ Ingestión: La ingestión causa sensación quemante en la boca y estómago, náuseas, vómitos y salivación.
- ✓ Cantidades insignificantes aspiradas a los pulmones pueden producir neumonía hemorrágica severa con severo daño pulmonar o muerte.
- ✓ Contacto con la Piel: El contacto con la piel resulta en pérdida de los aceites naturales y produce, con frecuencia, una dermatitis característica. Se puede absorber a través de la piel.
- ✓ Contacto con los Ojos: Los vapores causan irritación ocular. Las salpicaduras causan severa irritación, posibles quemaduras corneales y daño ocular.
- ✓ Exposición Crónica: La inhalación crónica puede causar dolor de cabeza, pérdida del apetito, nerviosismo y palidez cutánea. El contacto repetido o prolongado con la piel puede causar sarpullido. La exposición repetida de los ojos al vapor altamente concentrado puede causar daño ocular reversible. La exposición repetida puede dañar la médula ósea, produciendo conteos bajos de células sanguíneas. Puede dañar también el hígado y los riñones.
- ✓ Empeoramiento de las Condiciones Existentes: Las personas con desórdenes cutáneos ya existentes o problemas oculares o función hepática, renal, sanguínea o respiratoria deteriorada, pueden ser más susceptibles a los efectos de esta sustancia.

HOJA DE SEGURIDAD
ANHIDRÍDO MALEICO [41]

Nombre Químico: ANHIDRIDO MALEICO – C₄H₂O₃

Sinónimos: Cis-anhídrido butenodioico; 2,5-furandione

CARACTERÍSTICAS Y PROPIEDADES QUÍMICAS Y FÍSICAS

- ✓ Estado físico y aspecto: Sólido. (Cristales sólidos).
- ✓ Olor: No disponible
- ✓ Sabor: No disponible.
- ✓ Peso molecular: 98,06 g / mol
- ✓ Color: Blanco.
- ✓ pH (sol. 1% / agua): 7 [Neutro.]
- ✓ Punto de ebullición: 202 ° C (395,6 ° F)
- ✓ Punto de fusión: 52,8 ° C (127 ° F)
- ✓ Temperatura crítica: No disponible.
- ✓ Peso específico: 1.48 (Agua = 1)
- ✓ Presión de vapor: No aplicable.
- ✓ Densidad de vapor: 3,4 (aire = 1)
- ✓ Volatilidad: No disponible.
- ✓ Propiedades de dispersión: Ver la solubilidad en agua.
- ✓ Solubilidad: Soluble en agua. Ligeramente soluble en metanol.

ESTABILIDAD E IDENTIFICACIÓN DE RIESGOS (TOXICOLOGÍA)

- ✓ Rutas de entrada: Contacto cutáneo, con los ojos, inhalación e ingestión.
- ✓ Toxicidad en los animales: Toxicidad aguda
- ✓ DL50 (oral, rata): 481 mg kg.
- ✓ DL50 (piel, conejo): 2620 mg/kg.
- ✓ Efectos crónicos en los seres humanos: La sustancia es tóxica para los pulmones y para las membranas mucosas.
- ✓ Otros efectos tóxicos en seres humanos: Muy peligroso en caso de ingestión. Peligroso en caso de contacto cutáneo (irritante, Permeable) y de inhalación.

-
- ✓ Observaciones especiales sobre los efectos crónicos en los seres humanos: La exposición puede causar asma, dermatitis y edema pulmonar. Los efectos pueden ser retardados. Tumorigeno.
 - ✓ Observaciones especiales sobre otros efectos tóxicos en el hombre: Estornutatorio