

QUÍMICA

Mestrados Integrados em Eng^a Biomédica e Eng^a Física Tecnológica

2^o Teste

27/04/2019

Duração: 120 min

É aconselhada a consulta da Tabela Periódica. Justifique as suas respostas.

I (13.0 val)

O 1,2-etanodiol ($\text{OHCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$) é um diálcool incolor e inodoro, com um gosto adocicado, mas venenoso e o ácido tereftálico ($\text{HOOC}_6\text{H}_4\text{COOH}$) é um diácido derivado do benzeno, com os grupos ácido nas posições 1 e 4, sólido à temperatura ambiente.

- Descreva as estruturas moleculares das duas moléculas pela teoria do enlace de valência, indicando as hibridações dos átomos e respectivas configurações electrónicas no estado hibridado, os tipos de ligação, ângulos aproximados de ligação, pares de electrões não partilhados e eventual existência de orbitais π deslocalizadas. (5.0 val)
 - Uma destas moléculas tem momento dipolar 2.27 D e a outra é apolar. Identifique-as, justificando a sua resposta. (1.5 val)
 - Analise detalhadamente as interações entre duas moléculas de ácido tereftálico. (2.0 val)
- As moléculas descritas na pergunta 1 podem polimerizar entre si, formando um poliéster, o poli(tereftalato de etileno) ou PET, conhecido comercialmente como *Dacron*, que é utilizado em embalagens e também em fibras para cordoaria e vestuário.
 - Diga qual o tipo de polimerização, esquematize a reacção de polimerização e identifique o mero. (1.5 val)
 - Uma amostra de PET tem uma temperatura de transição vítrea de 75 °C e a sua temperatura de fusão é de ~250 °C. Classifique-a quanto à cristalinidade e esboce a curva de variação do volume específico com a temperatura, fazendo a legenda da figura. (2.0 val)
 - Indique uma temperatura à qual esta amostra de PET seja frágil e outra à qual se espera que apresente boa trabalhabilidade, justificando. (1.0 val)

II (7.0 val)

- O latão é uma liga de cobre (^{29}Cu) e zinco (^{30}Zn) que pode conter entre 3 e 45% de zinco (% atómica).
 - Estime o raio metálico do cobre puro, sabendo que cristaliza numa estrutura cúbica de faces centradas e tem massa volúmica de 8.96 g.cm^{-3} . (1.0 val)
 - Calcule a massa volúmica teórica de um latão com % atómica de zinco de 15%, admitindo que o parâmetro de rede não se altera pela presença do zinco. Diga que tipo de liga é o latão e justifique o facto de as percentagens atómicas de níquel não excederem 45%. (2.0 val)
- O molibdénio (^{42}Mo) e o índio (^{49}In) são metais do 5^o período da Tabela Periódica. O primeiro funde a 2620 °C e tem dureza de 5.5 na escala de Mohs; o segundo é macio

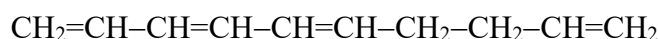
(dureza de 1.2 na escala de Mohs) e funde a 157 °C. Justifique estes factos com base nos diagramas de bandas de energia para os dois metais. (2.0 val)

- 3) A estrutura do cloreto de cádmio (CuCl_2) pode ser descrita como uma rede CFC de iões cloreto em que os catiões ocupam interstícios octaédricos. Determine a % de interstícios ocupada. Sabendo que o cloreto de manganês (MnCl_2) tem a mesma estrutura, compare os dois compostos em termos de energia reticular. Justifique a sua resposta. Considere desprezável o efeito da constante de compressibilidade de Born. (2.0 val)

Questões de Laboratório

I (1 val)

Utilizando o modelo da partícula livre numa caixa de energia potencial a uma dimensão, preveja o comprimento de onda da transição electrónica de menor energia para o seguinte polieno:



Considere que $d_{\text{C}=\text{C}}$ tem o valor médio de 141 pm. Critique as aproximações feitas.

II (1 val)

Discuta a miscibilidade do éter dimetílico ($\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$) com água e com acetona (CH_3COCH_3), fazendo uma análise detalhada das forças intermoleculares envolvidas.

Formulário:

$$E_n = n^2 h^2 / (8m_e L^2)$$

Constantes Físicas:

Velocidade da luz no vácuo: $c = 2.998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

Constante de Avogadro: $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Constante de Planck: $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$

Carga do electrão (em módulo): $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$

Massa do electrão: $m_e = 9.110 \times 10^{-31} \text{ kg}$

Factores de Conversão:

1 Debye = 1 D = $3.336 \times 10^{-30} \text{ C.m}$

1 eV = $1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$

1 nm = 10^{-9} m

1 Å (Ångström) = 10^{-10} m

1 pm = 10^{-12} m