

Unidade Curricular	Engenharia e Arquitetura Molecular de Polímeros	Área Científica	Polímeros
Mestrado em	Engenharia Química	Escola	Escola Superior de Tecnologia e de Gestão de Bragança
Ano Letivo	2022/2023	Ano Curricular	1
Tipo	Semestral	Semestre	2
Horas totais de trabalho	162	Horas de Contacto	T 30 TP - PL 30 TC - S - E - OT - O -
Nível	2-1	Créditos ECTS	6.0
Código	6362-756-1201-00-22		

T - Ensino Teórico; TP - Teórico Prático; PL - Prático e Laboratorial; TC - Trabalho de Campo; S - Seminário; E - Estágio; OT - Orientação Tutórica; O - Outra

Nome(s) do(s) docente(s) Rolando Carlos Pereira Simões Dias

### Resultados da aprendizagem e competências

No fim da unidade curricular o aluno deve ser capaz de:

1. Identificar e distinguir diferentes vias de controlo e adaptação da arquitetura molecular de polímeros, nomeadamente baseadas em mecanismos de síntese/modificação alternativos.
2. Identificar mecanismos de polimerização por policondensação, poliadição iónica, poliadição radicalar linear/não-linear ou polimerização radicalar controlada (RAFT, ATRP, NMRP).
3. Desenvolver em MATLAB ferramentas de cálculo para projeto da arquitetura molecular de polímeros com base na engenharia das reações e nos mecanismos cinéticos intervenientes no processo de formação.
4. Reconhecer diferentes vias para funcionalização e hibridização natural-sintético de polímeros e as suas aplicações atuais em engenharia.
5. Identificar aplicações de polímeros adaptados em conversão/armazenamento de energia e biotecnologia.
6. Identificar aplicações de polímeros adaptados em biomedicina; antivirais; reconhecimento molecular; adsorção ou diagnóstico/tratamento do cancro.

### Pré-requisitos

Antes da unidade curricular o aluno deve ser capaz de:

1. Dominar conceitos gerais sobre reatores químicos.
2. Dominar conceitos gerais sobre cinética química.
3. Estabelecer e resolver equações de conservação.

### Conteúdo da unidade curricular

Policondensação; Poliadições iónicas; Poliadição radicalar; Polimerização não-linear; RAFT; ATRP; NMRP; Funções geradoras de momentos; Cálculos em MATLAB; Graus de polimerização; Distribuições de Schulz-Flory e Poisson; Funcionalização; Híbridos sintético-natural; Funcionalização de redes de polímeros; Casos de estudo em engenharia; Conversão/armazenamento de energia; Biotecnologia; Biomedicina; Glicopolímeros; Antivirais; Impressão molecular; Adsorventes; Diagnóstico e tratamento do cancro.

### Conteúdo da unidade curricular (versão detalhada)

1. Policondensação linear
  - Policondensação linear com monómeros do tipo AB, distribuição Schulz-Flory. Cálculos em MATLAB.
  - Policondensação linear com monómeros do tipo A<sub>2</sub>+B<sub>2</sub>. Cálculos em MATLAB.
  - Projeto de poliâmidas, poliésteres, poliuretanos e outros tipos de polímeros relacionados.
  - Distribuições de tamanhos de seqüências.
  - Aplicações de polímeros resultantes de policondensação em engenharia e biomedicina
2. Poliadições iónicas lineares
  - Poliadição iónica ideal, funções geradoras de momentos, distribuição de Poisson. Cálculos em MATLAB.
  - Polimerização iónica de monómeros vinílicos e controlo da arquitetura molecular dos produtos.
  - Materiais com graus de polimerização por medida, copolímeros em bloco. Cálculos em MATLAB.
  - Polímeros funcionais obtidos por polimerização iónica em engenharia, biotecnologia e biomedicina.
3. Poliadição radicalar linear
  - Reações de iniciação, propagação, terminação e de transferência de cadeia.
  - Estado pseudo-estacionário para a concentração de radicais e outras hipóteses simplificativas.
  - Polímero morto. Modelos cinéticos.
  - Influência dos mecanismos cinéticos na distribuição de tamanhos de cadeia.
  - O método dos momentos. Cálculos em MATLAB com sistemas de equações diferenciais rígidas.
  - Polimerização radicalar linear no projeto e síntese de materiais híbridos sintético-natural.
4. Copolimerização radicalar linear
  - Composição de copolímeros em polimerizações radicalares.
  - Equação de Mayo-Lewis, influência das razões de reatividade.
  - Projeto e adaptação de tamanhos de seqüência de cadeia em polimerizações radicalares.
  - Obtenção de polímeros funcionais via copolimerização radicalar linear. Polímeros estimuláveis.
  - Cálculos em MATLAB com sistemas de equações diferenciais rígidas.
  - Aplicações de copolímeros em engenharia, biotecnologia e biomedicina.
5. Polimerização não-linear
  - Policondensação não-linear de monómeros do tipo Af, ponto de gelificação.
  - Distribuição de Stockmayer, fração de sol.
  - Policondensação não-linear com monómeros do tipo A<sub>3</sub>+B<sub>2</sub>, influência da razão molar de monómeros.
  - Polimerização iónica e polimerização radicalar não lineares.
  - Métodos de cálculo em MATLAB baseados em funções geradoras de momentos.
  - Projeto, adaptação e funcionalização de redes de polímeros e géis, raio de giração.
  - Redes de polímeros e géis em engenharia, armazenamento de energia, biotecnologia e biomedicina.
6. Polimerização através de Transferência de Cadeia Reversível por Adição-Fragmentação (RAFT)
  - Polimerização por desativação-ativação reversível de radicais com diferentes tipos de agentes RAFT.
  - Esquema cinético da polimerização RAFT. Polimerização RAFT em meio aquoso.
  - Cálculos em MATLAB com sistemas de equações diferenciais rígidas.
  - Polimerização RAFT linear e não-linear através do método dos momentos. Cálculos em MATLAB.
  - Controlo da arquitetura molecular e funcionalização de materiais através de polimerização RAFT.
  - Aplicações da polimerização RAFT com glicopolímeros para materiais antivirais.
  - Impressão molecular com polimerização RAFT. Aplicações no diagnóstico e tratamento do cancro.
7. Polimerização Radicalar por Transferência de Átomo (ATRP)
  - Sistemas químicos típicos em ATRP. Esquema cinético em ATRP. ATRP em meio orgânico e em fase aquosa.
  - Cálculos em MATLAB com sistemas de equações diferenciais rígidas para ATRP.
  - ATRP linear e não-linear através do método dos momentos. Cálculos em MATLAB.
  - Controlo da arquitetura molecular e funcionalização de materiais através do mecanismo ATRP.
  - Materiais híbridos sintético-natural projetados e sintetizados através de ATRP.
  - Impressão molecular com ATRP. Aplicações com adsorventes projetados por medida.
  - Aplicações em indústrias químicas e biotecnologia.
  - Aplicações em armazenamento de energia e no diagnóstico/tratamento do cancro.

**Conteúdo da unidade curricular (versão detalhada)**

8. Polimerização Radicalar Mediada por Nitróxidos (NMRP)
- Sistemas químicos típicos em NMRP. Compostos alkoxy-amina em NMRP.
  - Enxerto de polímeros através de NMRP. Esquema cinético em NMRP.
  - Cálculos em MATLAB com sistemas de equações diferenciais rígidas para NMRP.
  - NMRP linear e não-linear através do método dos momentos.
  - Controlo da arquitetura molecular e funcionalização de materiais através de NMRP.
  - Materiais híbridos sintético-natural projetados e sintetizados através de NMRP.
  - Bioconjugação (ex. conjugados de polímero-peptídeo) com NMRP.
  - Aplicações no projeto de sensores/recetores de açúcares e outras aplicações biomédicas.

**Bibliografia recomendada**

1. Principles of Polymerization, George Odian, Fourth Edition, Wiley-Interscience, 2004
2. Modeling and Simulation in Polymer Reaction Engineering: A Modular Approach 1st Edition, Klaus-Dieter Hungenberg, Michael Wulkow, Wiley-VCH, 2018
3. Polymeric Nanosystems, Theranostic Nanosystems, Volume 1, Md Saquib Hasnain, Amit Nayak, Tejraj Aminabhavi, Elsevier, 2023
4. Sustainable Hydrogels, Synthesis, Properties, and Applications, Sabu Thomas, Bhasha Sharma, Purnima Jain, Shashank Shekhar, Elsevier, 2023
5. Systems of Nanovesicular Drug Delivery, Amit Nayak, Md Saquib Hasnain, Tejraj Aminabhavi, Vladimir Torchilin, Elsevier, 2022

**Métodos de ensino e de aprendizagem**

A unidade curricular será lecionada com recurso a aulas expositivas, autoaprendizagem guiada pelo docente e aulas práticas de resolução de exercícios. Será fornecido um guia de estudo e material de suporte sendo também utilizada a plataforma de e-learning. Serão também analisados casos de estudo específicos em laboratório.

**Alternativas de avaliação**

1. Alternativa 1 - (Ordinário, Trabalhador) (Final, Recurso, Especial)
  - Temas de Desenvolvimento - 30% (Inclui trabalho experimental)
  - Apresentações - 10% (Inclui a apresentação do trabalho experimental realizado)
  - Exame Final Escrito - 60%
2. Alternativa 2 - (Ordinário, Trabalhador) (Especial)
  - Exame Final Escrito - 100%
3. Alternativa 3 - (Trabalhador) (Final, Recurso)
  - Exame Final Escrito - 100%

**Língua em que é ministrada**

Inglês

**Validação Eletrónica**

Rolando Carlos Pereira Simões Dias	Hélder Teixeira Gomes	Simão Pedro de Almeida Pinho	José Carlos Rufino Amaro
20-02-2023	21-03-2023	21-03-2023	25-03-2023