

909  
E-1

QUÍMICA ORGÁNICA A

(Mecanismos de Reacciones Orgánicas)

2º Cuatrimestre 1979

Profesor: Dr. Jorge Sproviero  
Dra. N. Sbarbati Nudelman

Equilibrio (Revisión). Tratamiento estadístico. Ley de distribución de Boltzman. Funciones de partición. Tratamiento termodinámico. Influencia de la temperatura. Relación entre los parámetros termodinámicos y las funciones de partición.

Equilibrio en reacciones orgánicas: equilibrio de isomerización. Equilibrio conformacional. Efectos de solvente. Efectos isotópicos. Efectos estéricos. Efectos de los sustituyentes. Relaciones lineales de energía libre. Equilibrio ácido-base. Función de acidez y relacionadas. Ecuación de Hammett.

Cinética (revisión). Tratamiento de los datos cinéticos. Orden y molecularidad. Reacciones complejas. Teoría de colisiones. Efecto jaula. Teoría absoluta de velocidades de reacción. Efecto túnel.

Cinética de reacciones orgánicas. Efectos isotópicos. Efectos estéricos. Cálculo de velocidades de reacción usando parámetros estéricos. Efectos de solvente. Reacciones entre moléculas no polares, entre moléculas dipolares y entre iones. Efectos salinos primarios y secundarios.

Relaciones lineales de energía libre. Ecuación de Hammett. Efectos de cambios en el mecanismo de reacción sobre la relación de Hammett. Relaciones y . Ecuación de Taft. Desviación de la ecuación debido a efectos de resonancia e hidrógeno alfa. Efectos estéricos en reacciones alifáticas. Efecto orto. Sustitución aromática. Relación de Brown.

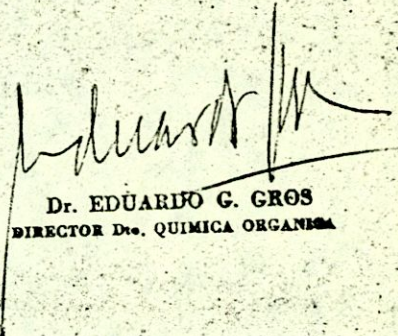
Catálisis ácido-base general y específica. Ley de Bronsted. Efectos de solvente. Ecuación de Grunwald-Winstein. Efecto del grupo entrante. Ecuación de Swain y Scott. Relación entre basicidad y nucleofiliidad. Efecto de las fuerzas de dispersión. Ecuación de Edwards. Relación entálpico-entrópica. Temperatura isocinética. Tratamiento cuantitativo de las energías potenciales de las distintas etapas. Predicción de la etapa determinante.

Cinética de la polimerización de monómeros vinílicos. Esquema. Ecuaciones, aplicación a ejemplos de polimerización de estireno y butadieno.

Cinética de la copolimerización de monómeros vinílicos monofuncionales. Esquema. Deducción de la ecuación fundamental de la copolimerización. Indices de reactividad. Relación de reactividad. Influencia de los factores termodinámicos. Teoría de Alfrey y Price aplicado a la copolimerización, valores semicuantitativos.

BIBLIOGRAFIA

- RATES AND EQUILIBRIA OF ORGANIC REACTIONS, J.E. Leffler y E. Grunwald, Wiley (1965)
- PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY, Wiberg, Wiley (1968)
- MECHANISM IN ORGANIC CHEMISTRY, Alder, Baker & Brown, Wiley-Inters.
- THE INVESTIGATION OF ORGANIC REACTIONS, Ross, Stewart, Prentice-Hall, 196
- STERIC EFFECTS IN ORGANIC CHEMISTRY, M.S. Newman, Wiley, 1956, cap. 13
- AN INTRODUCTION TO PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY, Kosower, 1968
- PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY, Hine, McGraw Hill (1962)
- TECHNIQUES IN ORGANIC CHEMISTRY, A. Weissberger, Ed., Vol 8 y 9
- "Rates and Mechanism of Reactions, Parte I y II, 1962
- FLORY "Chemistry of Polymer Science"



Dr. EDUARDO G. GROS  
DIRECTOR DE. QUIMICA ORGANICA