



UNIVERSITÀ DI PISA

CHIMICA FISICA ORGANICA

LAURA CARBONARO

Anno accademico	2017/18
CdS	CHIMICA
Codice	184CC
CFU	3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHIMICA FISICA ORGANICA	CHIM/02	LEZIONI	24	LAURA CARBONARO

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Al termine del corso lo studente avrà acquisito le conoscenze per affrontare in maniera critica e quantitativa i problemi che riguardano la reattività e le proprietà chimico-fisiche di molecole organiche

Modalità di verifica delle conoscenze

La verifica delle conoscenze avverrà attraverso quesiti posti durante le lezioni

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Il legame chimico: VB e MO. Entalpia di legame. Reazioni chimiche: variazione di Entalpia, entropia e di G, costante di equilibrio. Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura: equazione di Arrhenius. Cinetica formale: Definizioni. Reazioni monofasiche con un elemento di reversibilità. Reazioni multifasiche. Nitrazione del benzene: ipotesi meccanicistiche e analisi cinetica. Trasformata di Laplace. Superfici di energia potenziale (PES). Principio di Hammond. Principio di Rice teller. Metodo di Burgi Dunnitz. Addizione al carbonile: traettoria di Burgi Dunnitz. Teoria delle velocità assolute. Equazione di Eyring: critiche. Parametri di attivazione. Esempio: determinazione della geometria del ciclobutadiene. regole di Thorton. Diagrammi di Jencks-O'Farrel: reazioni di sostituzione nucleofila e di eliminazione. Critiche alla teoria delle velocità assolute. Effetto isotopico: usi cinetici e non cinetici. Effetto isotopico primario. Effetto isotopico secondario. Effetto isotopico del solvente. Metodi di rilassamento Catalisi acida e basica, specifica e generale. Equazione di Bronsted. Esempi di reazioni acido e/o basico catalizzate. Equazione di Hammond. Equazione di Taft. Generalizzazione delle relazioni extratermodinamiche. Orbitali di Hukel. Reazioni pericicliche. Regole di Woodward-Hoffmann.

Modalità d'esame

Esame orale.

Ultimo aggiornamento 16/07/2017 18:49