



UNIVERSITÀ DI PISA

CHIMICA FISICA ORGANICA

LAURA CARBONARO

Anno accademico 2021/22
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 di molecole organiche

Modalità di verifica delle conoscenze

La verifica delle conoscenze avverrà attraverso quesiti posti durante le lezioni

Capacità

lo studente saprà applicare metodi qualitativi e semi-quantitativi per la descrizione della reattività delle molecole organiche.

Modalità di verifica delle capacità

verrà richiesto di applicare metodi qualitativi e semi-quantitativi per la descrizione e interpretazione della reattività di alcune molecole organiche.

Comportamenti

lo studente saprà analizzare in modo critico lo studio della reattività di molecole organiche

Modalità di verifica dei comportamenti

allo studente sarà proposto di tenere un breve seminario su una classe di reazioni

Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Nozioni di chimica fisica, chimica organica.

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 Dunitz. Addizione al carbonile: traettoria di Burgi Dunitz. 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. Generalizzazioe delle relazioni extratermodinamiche. Orbitali di Hukel. Reazioni pericicliche. Regole di Woodward-Hoffmann.

Bibliografia e materiale didattico



UNIVERSITÀ DI PISA

Meccanismi di reazione della Chimica organica, Alser; Baker, Brown. Piccini editore
Physical organic Chemistry, Neil S. Isaacs. Longman Scientific & Technical

Modalità d'esame

Esame orale.

Ultimo aggiornamento 07/09/2021 09:48