

Curso de Cinéticas de Polimerización (2024)

Profesores:

Dr. Walter Schroeder

Dr. J. Pablo Tomba

Condiciones para el dictado

Mínimo de 10 alumnos, entre grado y posgrado. Se tiene en cuenta que no todos los alumnos que se anotan inicialmente siguen efectivamente el curso y justifican el esfuerzo de darlo.

Forma de dictado

Se trata de un curso intensivo, de 12 clases teóricas y de clases de consulta y resolución de problemas. La forma de dictado es de dos clases teóricas semanales, seguida de una semana dedicada a la resolución de problemas sobre el tema, al final de la cual el alumno debe realizar una entrega. Se prevén entonces 12 semanas de curso.

Comienzo de clases

Semana del 12 de agosto del 2024.

Objetivos del curso

El objetivo de esta asignatura es que el alumno conozca los diferentes mecanismos para reacciones de polimerización asociados a la producción de las principales familias de polímeros. A partir de cada uno de ellos, se busca comprender como dependen las velocidades de reacción con parámetros operativos como tiempo de reacción, temperatura y/o concentración de monómero e iniciadores. Se espera que el alumno sea capaz de predecir la relación existente entre la cinética de la reacción de polimerización y las propiedades finales del producto obtenido. Además, que conozca las técnicas experimentales con las que se puede monitorear la velocidad de una reacción de polimerización y que comprenda cómo analizar los datos obtenidos.

Nuestra expectativa es que, al finalizar el curso, el alumno sea capaz de:

- conocer las condiciones y mecanismos por los cuales pueden polimerizar distintos monómeros reactivos;
- plantear racionalmente ecuaciones de velocidad de polimerización y predecir las propiedades del producto final;
- utilizar naturalmente herramientas computacionales que faciliten las tareas de cálculo;
- comprender la estructura de datos cinéticos para discernir qué información deberá buscar en la literatura, estimar o eventualmente medir para realizar estos cálculos;
- expresar correctamente y con precisión, tanto en forma escrita como oral, argumentos, ideas, planteos o propuestas.

PROGRAMA ANALÍTICO

Unidad 1: Introducción. Definición de macromolécula. Clasificación de polímeros. Clasificación de reacciones de polimerización. Propiedades: distribución de pesos moleculares y grado de polimerización, temperatura de transición vítrea y tacticidad. Estructura de cadena: Polímeros ramificados, redes y copolímeros. Técnicas de polimerización: en masa, en solución, en fase gas, en suspensión, en emulsión y en fase sólida. Expresión matemática de la cinética de una reacción química. Resolución de ecuaciones cinéticas con Mathcad.

Unidad 2: Mecanismo de polimerizaciones en cadena por radicales libres. Características de los monómeros polimerizables. Velocidades de reacción y de crecimiento de cadena. Control de pesos moleculares. Reacciones de transferencia de cadena. Esquemas cinéticos básicos. Limitaciones. Resolución de ecuaciones cinéticas con Mathcad.

Unidad 3: Polimerizaciones controladas. Control de peso molecular, de distribuciones de peso molecular y de arquitectura de cadena. Mecanismo de polimerizaciones iónicas. Características de los monómeros polimerizables. Velocidades de reacción y de crecimiento de cadena. Control de pesos moleculares. Esquemas cinéticos básicos. Mecanismo de polimerizaciones controladas por radicales libres. Atom Transfer Radical Polymerization (ATRP). Resolución de ecuaciones cinéticas con Mathcad.

Unidad 4: Copolímeros. Mecanismo de copolimerización. Cinética del Modelo Terminal. Composición instantánea y composición acumulada. Longitud promedio de secuencias. Influencia de las relaciones de reactividad: Copolimerización ideal, alternante, y azeotrópica. Determinación de las relaciones de reactividad. Integración de la ecuación del copolímero. Efectos de la temperatura de copolimerización. Copolímeros de uso comercial.

Unidad 5: Polimerización en etapas. Monómeros polimerizables. Cinética de la polimerización en etapas. Reacciones autocatalíticas y reacciones catalizadas externamente. Control del peso molecular en la polimerización lineal. Distribución de pesos moleculares en la polimerización lineal. Reacciones de intercambio. Distribución de pesos moleculares en la polimerización no-lineal. Análisis estadístico de la gelación. Polímeros de condensación de uso comercial.

Unidad 6: Adquisición y modelado de datos cinéticos de polimerización. Calorimetría diferencial de barrido (DSC): Tratamiento de datos en ensayos isotérmicos y en ensayos dinámicos. Modelos fenomenológicos. Espectroscopía infrarroja (IR). Modos vibracionales. Tratamiento de datos espectroscópicos. Cromatografía de exclusión por tamaños (SEC). Adquisición de datos cinéticos a partir de ensayos cromatográficos.