

## **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.