

Título: CINETICA QUIMICA COMPUTACIONAL. APLICACION DE UN METODO NUMERICO GENERALIZADO PARA LA EVALUACION DE PARAMETROS CINETICOS Y DISCRIMINACION ENTRE MECANISMOS DE REACCION.

Nombre: CANEDO ALONSO M. MAR

Universidad: Universidad de Salamanca

Fecha de lectura: 01/01/1992

Programa de doctorado: DESCONOCIDO

Dirección:

> **Director:** GONZALEZ HERNANDEZ JOSE LUIS

Tribunal:

> **presidente:** JULIO CASADO LINAREJOS

> **secretario:** JOSÉ MARÍA LEAL VILLALBA

> **vocal:** RAMÓN ARDANUY ALBAJAR

> **vocal:** CACHAZA SILVERIO JUAN M.

> **vocal:** ANDRES ORDAX FRANCISCO JOSE

Descriptores:

> FISICA

> CINETICA QUIMICA

> QUIMICA FISICA

El fichero de tesis no ha sido incorporado al sistema.

Resumen: EN EL TRABAJO SE DESARROLLA UN METODO COMPUTACIONAL NUMERICO, GENERALIZADO Y POLIVALENTE, QUE INCORPORA EL ALGORITMO DE OPTIMIZACION AGDC Y QUE PERMITE LA DETERMINACION DE PARAMETROS CINETICOS Y DISCRIMINACION ENTRE MECANISMOS DE REACCION. ESTE TRATAMIENTO SE EMPLEA PARA EL ESTUDIO DE LOS DATOS CINETICOS EXPERIMENTALES PROCEDENTES DE DOS REACCIONES EXPERIMENTALES:

A) REACCION DE ISOMERIZACION DEL GOLEST-5-EN-3-ONA, DETERMINANDOSE LAS CONSTANTES INDIVIDUALES DE VELOCIDAD, LA CONCENTRACION DE TODAS LAS ESPECIES REACCIONANTES Y SE EVALUAN OTROS POSIBLES MECANISMOS DE REACCION.

B) REACCION DE AMINOLISIS DE TRES ANTIBIOTICOS BETA-LACTAMICOS: ACIDO 6-AMINOPENICILAMICO CARBONICILINA,

ACIDO 7-AMINOCEFALOSPORANICO Y CEFALOTINA, DETERMINANDOSE
LAS CONSTANTES EXPERIMENTALES OBSERVADAS Y LAS CONSTANTES
INDIVIDUALES DE VELOCIDAD.