

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
**FACULTAD DE QUÍMICA**

**PROGRAMAS DE ESTUDIO**  
**SEMESTRE**

<b>ASIGNATURA:</b> MODELADO Y SIMULACIÓN DE PROCESOS POLIMÉRICOS	<b>Ciclo:</b> TERMINALES Y DE ESPECIALIZACIÓN	<b>Área:</b> INGENIERÍA QUÍMICA
---	--	------------------------------------

**HORAS/SEMANA**

<b>OPTATIVA</b>	<b>Clave: 0272</b>	<b>TEORÍA 3 h</b>	<b>PRÁCTICA</b>	<b>CRÉDITOS 6</b>
-----------------	--------------------	-------------------	-----------------	-------------------

<b>Tipo de asignatura:</b>	<b>TEÓRICA</b>
<b>Modalidad de la asignatura:</b>	<b>CURSO</b>

**ASIGNATURA PRECEDENTE:** Seriación indicativa con INTRODUCCIÓN A LA CIENCIA DE POLÍMEROS.

**ASIGNATURA SUBSECUENTE:** Ninguna.

**OBJETIVOS:**  
Aplicar los conocimientos adquiridos en los cursos de polímeros previos así como la integración de los conceptos de los cursos fundamentales de ingeniería química, con el objeto de desarrollar modelos matemáticos a partir de ecuaciones de cambio (primeros principios, balances de especies y de energía) de los procesos relacionados a la ciencia de los polímeros. Se considera principalmente la resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales mediante programación, paquetes matemáticos o simuladores de procesos de polimerización comerciales o propios.

**UNIDADES TEMÁTICAS**

<b>NÚMERO DE HORAS POR UNIDAD</b>	<b>UNIDAD</b>
8	<b>1. Introducción</b> 1.1. Temas generales y definiciones básicas 1.2. Ecuaciones de cambio 1.3. Pesos moleculares y tipos de distribución 1.4. Técnicas de diseño experimental y estimación de parámetros
8	<b>2. Polimerización por pasos</b> 2.1. Mecanismos de reacción para polímeros lineales 2.2. Reactividad de grupos funcionales 2.3. Control de peso molecular y estequiometría 2.4. Cinética de reacción 2.5. Implicaciones experimentales sobre cinética de reacción y estimación de parámetros 2.6. Planteamiento de sistemas con reticulación
8	<b>3. Polimerización por crecimiento de cadena</b> 3.1. Esquema general 3.2. Polimerización iónica: aniónica y catiónica 3.3. Polimerización por radicales libres; esquema cinético, sensibilidad paramétrica y cálculo de pesos moleculares 3.4. Efectos difusinales 3.5. Termodinámica de la polimerización por radicales libres 3.6. Calor de polimerización 3.7. Introducción a polimerización radicalica controlada

<b>6</b>	<b>4. Copolimerización</b> 4.1. Características generales 4.2. Mecanismo de reacción (modelo terminal) 4.3. Composición y deriva de composición 4.4. Modelado con uso de pseudo-constantes cinéticas 4.5. Reactores por lotes y semi-lotes 4.6. Control de composición 4.7. Estudios cinéticos con diseños experimentales 4.8. Estimación de parámetros 4.9. Introducción a copolimerización no-lineal (ramificación y entrecruzamiento).
<b>6</b>	<b>5. Procesos de polimerización</b> 5.1. Polimerización en masa/solución 5.2. Polimerización en fase dispersa: suspensión, emulsión, dispersión 5.3. Otros procesos de polimerización
<b>6</b>	<b>6. Control de un reactor de polimerización</b> 6.1. Planteamiento del modelo en términos de momentos de la distribución 6.2. Estimación de parámetros cinéticos 6.3. Verificación de la robustés 6.4. Sensibilidad paramétrica 6.5. Sintonización de un control en cascada
<b>6</b>	<b>7. Procesado de polímeros</b> 7.1. Generalidades 7.2. Establecimiento de las ecuaciones de cambio 7.3. Extrusión 7.4. Inyección 7.5. Soplado 7.6. Introducción al uso de simuladores comerciales

#### **BIBLIOGRAFÍA BÁSICA**

1. ODIAN, G. "Principles of Polymerization", Wiley, (1981), USA
2. DOTSON, N.A., R. GALVÁN, R.L.LAURENCE Y M. TIRRELL, "Polymerization Process Modelling", N.Y.: VCH Publishers, Inc., (1996)
3. HAMIELEC, A.E. Y H. TOBITA, "Polymerization Processes", Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Vol. A21, VCH Publishers, Inc., (1992)

#### **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

1. BIESENBERGER, J.A., y D.H. SEBASTIAN, "Principles of polymerization Engineering", (1983) John Wiley
2. Artículos de revisión recientes (review articles) de grupos líderes en ingeniería en reacciones de polimerización

#### **SUGERENCIAS DIDÁCTICAS**

1. Recomendable que el profesor y el alumno tengan experiencia en el uso de al menos un paquete matemático y un lenguaje de programación.
2. Combinar tareas teóricas (planteamiento de modelos) con ejercicios de simulación.
3. Usar al menos un simulador de procesos comercial, semi-comercial, o propio.

#### **FORMA DE EVALUAR**

A través de tareas (distintos grados de complejidad), exámenes en clase y desarrollo de un proyecto de investigación de corto alcance.

#### **PERFIL PROFESIOGRÁFICO DE QUIENES PUEDEN IMPARTIR LA ASIGNATURA**

El profesor que imparta esta materia deberá tener formación básica de ingeniero químico, tener estudios de posgrado o experiencia laboral con enfoque hacia ingeniería de reactores de polimerización, además de sólida formación en el área de polímeros.