

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA
PROGRAMAS DE ESTUDIO
SEMESTRE
SÉPTIMO, OCTAVO O NOVENO

Asignatura OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS DE SÍNTESIS II	Ciclo TERMINAL Y DE PRE ESPECIALIZACIÓN	Área QUÍMICA ORGÁNICA	Departamento QUÍMICA ORGÁNICA
--	---	---------------------------------	---

HORAS/SEMANA/SEMESTRE

OPTATIVA	Clave: 0086	TEORÍA 3 h/48 h	PRÁCTICA 0 h	CRÉDITOS 6
-----------------	--------------------	------------------------	---------------------	-------------------

Tipo de asignatura:	TEÓRICA
Modalidad de la asignatura:	CURSO

ASIGNATURA PRECEDENTE: Seriación sugerida con Optimización y Procesos de Síntesis I.

ASIGNATURA SUBSECUENTE: Ninguna.

OBJETIVOS:

1. En esta materia se pretende que el alumno utilice los conocimientos de las materias que ha tenido a lo largo de su carrera, para poder aplicarlos a la resolución de casos concretos.
2. El alumno podrá analizar circuitos electrónicos sencillos y ver cuáles son sus fallas, así como aprender a realizar remotamente el control de proceso químico.
3. El alumno aprenderá a razonar el comportamiento de las reacciones químicas.
4. El alumno aprenderá a utilizar las herramientas de modelación molecular para poder analizar los compuestos químicos y ver cuáles pueden ser sus propiedades o reactividades.
5. Será capaz de utilizar diferentes programas de modelación molecular para la resolución de problemas químicos.
6. Aprenderá el uso de programas de manejo macromolecular para evaluar actividad de moléculas.

UNIDADES TEMÁTICAS

NÚMERO DE HORAS POR UNIDAD	UNIDAD
3 T 3 H	1. DISEÑO DE PRODUCTOS QUÍMICOS. 1.1. Uno de los aspectos más importantes en la actualidad es ver la utilidad e impacto que puede tener un producto químico en el mercado, y si puede tener éxito. Se analizarán varios casos prácticos.
6 T 6 H	2. SIMULACIÓN DE DIAGRAMAS ELECTRÓNICOS Y SUS ANÁLISIS. 2.1. Uso de programas de simulación electrónica. Debido a la complejidad de los procesos químicos la instrumentación es una parte esencial para su control se verán programas como LabView, para control y análisis.
6 T 6 H	3. ORBITALES MOLECULARES Y UNIONES QUÍMICAS. 3.1. La teoría de los orbitales moleculares no sólo es una teoría de uniones, si no que puede dar información de las reacciones químicas y obtención de productos de una forma racional.
6 T 6 H	4. ESTRUCTURAS DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS Y REACCIONES QUÍMICAS. 4.1. Entender los factores importantes para explicar una reacción química.
9 T 9 H	5. MODELACIÓN MOLECULAR. 5.1. Antecedentes. 5.2. Mecánica molecular.

	5.3. Cálculos semiempíricos. 5.4. Cálculos Ab Initio. 5.5. Estados de transición. 5.6. Solución de problemas químicos. 5.7. Introducción a programas I. 5.8. Introducción a programas II. 5.9. Programas para macromoléculas.
3 T 3 H	6. PROPILENO, BUTILENO Y PRODUCTOS DERIVADOS DE INTERÉS INDUSTRIAL. 6.1. Conocerán las materias primas más importantes que se obtienen del petróleo: propileno y butileno. Se analizará el amplio rango de posibilidades de productos de síntesis derivados de estos productos.
15 T 15 H	7. USO DE PROGRAMAS DE CÓMPUTO PARA EL ANÁLISIS DE PROCESOS INDUSTRIALES.

SUMA: 48 T = 48 H

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

1. Bachrach, S. M., *Organic Chemistry*, John Wiley and Sons, 2007.
2. Lewars, E. G., *Computational Chemistry*, Springer Science and Business Media, 2011.
3. Anh, N. T., *Frontier Orbitals, A Practical Manual*, Wiley, 2007.
4. Rauk, A., *Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry*, UK, John Wiley and Sons, 1994.
5. Fleming, I., *Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions*, Student Edition, Wiley, 2009.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

1. Hehre, W. J., *Practical Strategies for Electronic Structure Calculation*, USA, Wavefunction Inc., 1995.
2. Hehre, W. J., Huah, W., *Chemistry with Computation*, USA, Wavefunction Inc., 1995.
3. *Hyperchem Computational Chemistry*, Hypercube Inc. 1994.
4. Gaussian, J. B., Foresman, E. F., *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, A Guide to Using*, USA, Gaussian Inc., 1993.
5. Frisch, M. J., Frisch, E., Foresman, J. B., *Gaussian 94 users reference*, USA, Gaussian Inc., 1995.
6. Douglas, B., McDaniel, D, Alexander, J., *Concepts and Models of Inorganic Chemistry*, 3rd Ed., John Wiley and Sons, 1994.
7. Young, D., *Computational Chemistry, A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*, Wiley Interscience, 2001.

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS

Se requiere un trabajo constante por parte del alumno para poder aprender la materia, ya que gran parte de ella requiere que él personalmente resuelva los problemas presentados a lo largo del curso, se apoya el curso en el uso constante de computadoras por parte de los alumnos.

FORMA DE EVALUAR

Se realizan 3 exámenes, 2 trabajos y problemas cada semana.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DE QUIENES PUEDEN IMPARTIR LA ASIGNATURA

Químicos que tengan experiencia en la Industria y en la informática computarizada.