

## Título de la Tesis: "Síntesis de reacciones químicas"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Fornari, Tiziana

Director: Dr. Enrique Rotstein

### Resumen

La creación de nuevos caminos de reacción para obtener un producto deseado ha recibido creciente atención en los últimos tiempos.

El presente trabajo constituye una extensión del método de síntesis propuesto por Rotstein, Recacco y Stephanopoulos [7]. El método sistematiza la búsqueda de nuevas reacciones químicas dado un producto deseado y un conjunto de especies que pueden intervenir como materias primas o subproductos. En [7] se analizó el balance de átomos entre especies con un grado de libertad ( $m=1$ ).

En este trabajo se estudia el caso  $m=2$ . Se desarrollan propiedades importantes del plano  $\Delta G$  (cambio de energía libre de reacción de Gibbs) -  $T$  (temperatura), y ciertos tests de selección de alternativas como medio de evaluar los distintos caminos de reacción obtenidos.

La extensión de la teoría desarrollada por Rotstein y colaboradores amplía las posibilidades de aplicación del método de síntesis. En este trabajo se presentan ejemplos de interés práctico, particularmente referidos a la llamada Química del  $C_1$ .

Dado que muchas propiedades termodinámicas de sustancias químicas pueden determinarse usando la Teoría de Contribuciones Grupales, esta es una herramienta útil en el proceso de síntesis. Así, es posible analizar el balance de

**Título de la Tesis: "Síntesis de reacciones químicas"**

**Magister en Ingeniería Química**

**Autor: Fornari, Tiziana**

**Director: Dr. Enrique Rotstein**

átomos con  $m$  grados de libertad descomponiendo en las especies que participan en los grupos químicos que las componen. Este trabajo concluye desarrollando dicho análisis.