

PROGRAMA DE LA MATERIA:

CLAVE:

QUIMICA ORGANICA AVANZADA II

ETAPA FORMATIVA:

ASIGNATURA:

No. DE CREDITOS: 10

PROGRAMAS ACADEMICOS:

SEMESTRE RECOMENDADO:

Posgrado en Ciencias.

HORAS A LA SEMANA: 5

TEORIA: 5

PRACTICA: 0

REQUISITOS:

OBJETIVO: Al término del curso, el alumno será capaz de reconocer los diferentes tipos de reacción de los compuestos orgánicos. Además, deberá saber la estereoquímica y mecanismos que operan en cada una de estas reacciones.

CONTENIDO TEMÁTICO

NUMERO:

TEMA:

- | | |
|---|---|
| 1 | Reacciones por radicales libres y fotoquímica. |
| 2 | Reducciones. |
| 3 | Oxidación. |
| 4 | Adición nucleofílica a sistemas carbonílicos-insaturados. |
| 5 | Reordenamientos |

TEMARIO

- 1. Reacciones por radicales libres y fotoquímica.**
 - 1.1. Generación, Caracterización y Atrapamiento de Radicales
 - 1.2. Características de los Mecanismos que Involucran Radicales
 - 1.3. Reacciones de Substitución y Adición por Radicales.

- 2. Reducciones.**
 - 2.1. Hidrogenación heterogénea
 - 2.2. Hidrogenación homogénea
 - 2.3. Reducción con reactivos de aluminio
 - 2.4. Reducción con reactivos de boro
 - 2.5. Reducción con hidruros de estaño
 - 2.6. Reducción con hidruros de silicio
 - 2.7. Reducción con metales alcalinos

- 3. Oxidación.**
 - 3.1. Oxidaciones con reactivos metálicos
 - 3.1.1. Reactivos de cromo



- 3.1.2. Reactivos de manganeso
 - 3.1.3. Reactivos de rutenio
 - 3.1.4. Reactivos de plata
 - 3.2. Oxidación con otros metales.
 - 3.2.1. Tetraóxido de osmio
 - 3.2.2. MoO_5 -piridina
 - 3.2.3. Oxidación de Tsuji
 - 3.2.4. Oxidación de Oppenauer
 - 3.2.5. Tetra-acetato de plomo
 - 3.2.6. Dioxido de selenio
 - 3.2.7. Oxidación de Wacker
 - 3.2.8. Oximercuración
 - 3.3. Oxidación con dimetilsulfóxido activado
 - 3.3.1. Oxidación de Swern
 - 3.3.2. Oxidación de Moffatt
 - 3.3.3. Oxidación de Parikh-Doering
 - 3.3.4. Oxidación de Corey-Kim
 - 3.3.5. Oxidación de Kornblum
 - 3.4. Oxidación con perácidos y peroxiácidos.
 - 3.4.1. Reacción de Prilezhaev
 - 3.4.2. Epoxidación de cetonas α,β -insaturadas
 - 3.4.3. Epoxidación de Hembost
 - 3.4.4. Oxidación de Rubottom
 - 3.4.5. Epoxidación asimétrica de Jacobsen
 - 3.4.6. Epoxidación asimétrica de Sharpless
 - 3.4.7. Dihidroxiación asimétrica de Sharpless
 - 3.4.8. Aminohidroxiación asimétrica de Sharpless
 - 3.4.9. Oxidación con metiloxorutenio (MTO)
 - 3.4.10. Oxaziridinas
 - 3.4.11. Dioxiranos
 - 3.5. Oxidación con Oxígeno y ozono.
 - 3.5.1. Oxígeno singulete
 - 3.5.2. Ozonólisis
 - 3.6. Otros.
 - 3.6.1. IBX
 - 3.6.2. Dess-Martin Periodinano
 - 3.6.3. Rompimiento de 1,2-dioles
 - 3.6.4. Oxidación de Baeyer-Villiger
 - 3.6.5. Bromohidrinación
 - 3.6.6. Lactonización
 - 3.6.7. CAN
 - 3.6.8. DDQ
- 4. Adición nucleofílica a sistemas carbonílicos insaturados.**
- 4.1. Adición asimétrica conjugada de heteroátomos
 - 4.1.1. Adición diastereoselectiva de oxígeno como nucleófilo
 - 4.1.2. Adición enantioselectiva de oxígeno como nucleófilo

- 4.1.3. Adición diastereoselectiva de nitrógeno como nucleófilo
- 4.1.4. Adición enantioselectiva de nitrógeno como nucleófilo
- 4.1.5. Adición diastereoselectiva de azufre como nucleófilo
- 4.1.6. Adición enantioselectiva de azufre como nucleófilo
- 4.1.7. Adición diastereoselectiva de cloro

4.2. Adición asimétrica conjugada.

- 4.2.1. Adición de organocupratos
- 4.2.2. Adición enantioselectiva de reactivos de Grignard
- 4.2.3. Adición de reactivos litiodos
- 4.2.4. Adición de reactivos de aluminio
- 4.2.5. Adición de reactivos de zinc
- 4.2.6. Adición de 1,3-dicarbonilos
- 4.2.7. Adición de nitroalcanos
- 4.2.8. Reacción de Mukaiyama-Michael
- 4.2.9. Adición basada en radicales

4.3. Reacciones varias.

- 4.3.1. Reacción enantioselectiva de Meerwin
- 4.3.2. Reducción conjugada
- 4.3.3. Epoxidaciones
- 4.3.4. Reacción de Baylis-Hillman

5. Reordenamientos.

- 5.1. Contracción de anillos inducido por ácidos
 - 5.1.1. Reordenamiento de Wagner-Meerwein
 - 5.1.2. Reordenamiento pinacólico
 - 5.1.3. Reordenamiento de epóxidos
- 5.2. Contracción de anillos inducido por bases
 - 5.2.1. Reordenamiento de Favorskii, favorecido por alcóxidos y aminas
- 5.3. Reordenamientos oxidativos
 - 5.3.1. Contracción de anillos inducido por talio(III), plomo (IV), selenio (IV) y yodo hipervalente
- 5.4. Reordenamiento dienona-fenol
- 5.5. Reordenamiento de Fries
- 5.6. Reordenamiento de Tiffeneau-Demjanov
- 5.7. Reordenamiento de Wolf f
- 5.8. Síntesis de Arndt-Eistert
- 5.9. Reordenamiento de Beckmann
- 5.10. Reordenamiento de Stieglitz
- 5.11. Reordenamiento de Baeyer-Villiger
- 5.12. Reordenamiento de Hofmann
- 5.13. Reordenamiento de Lossen
- 5.14. Reordenamiento de Curtius
- 5.15. Reordenamiento de Schmidt
- 5.16. Reordenamiento becílico
- 5.17. Reacción de Ramberg-Backlund

BIBLIOGRAFIA

- (a) Rhoadt, T. R.; Sibi, M. P. "Radical-mediated annulations" *Synthesis* **2003**, 803. (b) Li, J. J. "Free Radical chemistry of three-membered heterocycles" *Tetrahedron* **2001**, *57*, 1. (c) Friestad, G. K. "Addition of carbon-centered radicals to imines and related compounds" *Tetrahedron* **2001**, *57*, 5461. (d) Zhang, W. "Intramolecular free radical conjugate additions" *Tetrahedron* **2001**, *57*, 7237. (e) Molander, G. A.; Harris, C. R. "Sequencing reactions with samarium(II) iodide" *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 307. (f) Dowd, P.; Zhang, W. "Free radical-mediated ring expansion and related annulations" *Chem. Rev.* **1993**, *93*, 2091.
- Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry- Parts A & B*. Plenum Press. **1990**.
- Lowry, Richardson. *Mechanism and Theory in Organic Chemistry*. Harper & Row. **1981**.
- Sibi, M. P.; Manyem, S. "Enantioselective Conjugate Additions" *Tetrahedron* **2000**, *56*, 8033.
- Silva, L. F. Jr. "Construction of cyclopentyl units by ring contraction reactions" *Tetrahedron* **2002**, *58*, 9137. H.
- O. House, "Modern Synthetic Reactions", 2nd Ed., W. A. Benjamin, **1972**.
- B. M. Trost and I. Fleming. "Comprehensive Organic Synthesis", Pergamon Press, **1992**.

PROGRAMA DE LA MATERIA:
QUÍMICA ORGANOMETÁLICA

CLAVE:

ETAPA FORMATIVA:
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:

ASIGNATURA:
PROGRAMAS ACADEMICOS:
Posgrado en Ciencias

HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA: 0
REQUISITOS:

OBJETIVO: Que el alumno sea capaz de analizar y discutir aspectos fundamentales y avanzados de la Química de los compuestos organometálicos, así como de conocer su importancia y aplicaciones en Química Orgánica y Catálisis.

CONTENIDO TEMATICO

1. Introducción a la Química Organometálica y clasificación de los compuestos organometálicos.
2. Química organometálica de los grupos 1 y 2.
3. Compuestos organometálicos del grupo 13.
4. Compuestos organometálicos del grupo 14 (Si, Ge, Sn, Pb).
5. Propiedades Generales de los Complejos Organometálicos de los elementos transicionales.
6. Los compuestos con enlaces Metal-Carbono y Metal-Hidrógeno.
7. Reacciones de sustitución de ligantes.
8. Complejos con ligantes P (símbolo).
9. La adición oxidativa y la eliminación reductiva.
10. Las reacciones de inserción y eliminación.
11. Adición y abstracción nucleofílica y electrofílica.
12. Catálisis con compuestos organometálicos.

TEMARIO

1.- Introducción a la Química Organometálica y clasificación de los compuestos organometálicos

- 1.1 Los compuestos de coordinación de Werner
- 1.2 El efecto trans
- 1.3 Ligantes duros y blandos
- 1.4 La teoría de Campo Cristalino
- 1.5 La teoría del Campo Ligante
- 1.6 La retrodonación y la electroneutralidad

- 1.7 Historia de la Química Organometálica
- 1.8 Energía, polaridad y reactividad del enlace M-C
- 1.9 Métodos generales de preparación de los compuestos organometálicos de los elementos representativos

2.- Química organometálica de los grupos 1 y 2

- 2.1 Compuestos organolitio
 - 2.1.2 Estructura en estado sólido y en disolución. Teorías de enlace.
 - 2.1.3 Métodos de preparación
 - 2.1.4 Reactividad
- 2.2 Compuestos organoberilio
 - 2.2.1 Estructura en estado sólido y en disolución. Teorías de enlace.
 - 2.2.2 Métodos de preparación
- 2.3 Compuestos organomagnesio
 - 2.3.1 Estructura en estado sólido y en disolución. Teorías de enlace.
 - 2.3.2 Métodos de preparación
 - 2.3.3 Reactividad

3. Compuestos organometálicos del grupo 13

- 3.1 Compuestos organometálicos de boro
 - 3.1.1 Enlace
 - 3.1.2 Hidroboración catalizada y no catalizada
- 3.2 Compuestos organoaluminio
 - 3.2.1 Estructura y teorías de enlace
 - 3.2.2 Síntesis industrial- proceso de Ziegler
 - 3.2.3 Aplicación técnica de compuestos tris(alquil)aluminio en la polimerización de olefinas

4. Compuestos organometálicos del grupo 14 (Si, Ge, Sn, Pb)

- 4.1 Características de enlace E-C en el grupo
- 4.2 Reactividad frente a nucleófilos y electrófilos
- 4.3 Compuestos organosilicio
- 4.4 Compuestos organoestaño

5 Propiedades Generales de los Complejos Organometálicos de los elementos transicionales

- 5.1 La regla de los 16 y 18 electrones y sus fundamentos en teoría de orbitales moleculares
- 5.2 Limitaciones de la regla de los 18 electrones
- 5.3 Cuenta electrónica en reacciones
- 5.4 Efectos en las características electrónicas de los ligantes debido a la complejación

6. Los compuestos con enlaces Metal-Carbono y Metal-Hidrógeno

- 6.1 La estabilidad de los alquilos metálicos
- 6.2 La preparación de los alquilos metálicos
- 6.3 Caracterización y propiedades de los alquilos metálicos
- 6.4 Hidruros metálicos

7. Reacciones de sustitución de ligantes

7.1 Los carbonilos metálicos

7.1.1 Estructura y enlace

7.1.2 Propiedades

7.1.3 Reactividad

7.2 Las fosfinas como ligantes

7.3 El mecanismo de sustitución disociativa

7.4 El mecanismo asociativo

7.5 El mecanismo de intercambio

7.6 Rearreglos de especies coordinativamente insaturadas

7.7 Sustitución fotoquímica

7.8 Los disolventes y otros ligantes débilmente coordinantes

8. Complejos con ligantes P (símbolo)

8.1 Complejos de alquenos y alquinos

8.2 Complejos arílicos

8.3 Complejos diénicos

8.4 Complejos ciclopentadienílicos

8.5 Complejos arénicos

8.6 Otros complejos de ligantes π

8.7 La estabilidad de complejos poliénicos y polienílicos

9. La adición oxidativa y la eliminación reductiva

9.1 Las adiciones de tres centros

9.1.1 Complejos no clásicos con interacciones tipo sigma o agósticas

9.2 Reacciones tipo S_M2

9.3 Mecanismos por radicales libres

9.4 Mecanismos iónicos

9.5 La eliminación reductiva

9.6 El acoplamiento oxidativo y la extrusión reductiva

10. Las reacciones de inserción y eliminación

10.1 Reacciones que involucran CO

10.2 Reacciones que involucran alquenos

10.3 Otras inserciones

10.4 Eliminaciones

11. Adición y abstracción nucleofílica y electrofílica

11.1 Adición nucleofílica a CO

11.2 Adición nucleofílica a ligantes poliénicos y polienílicos

11.3 Abstracción nucleofílica en alquinos y alquenos

11.4 Adición electrofílica al metal

11.5 Abstracción electrofílica de grupos alquilo







12. Catálisis con compuestos organometálicos

12.1 Introducción

12.2 Ailación/vinilación de olefinas (reacción de Heck)

- 12.3 Oxidación de olefinas (proceso de Wacker)
- 12.4 Hidrogenación de alquenos
- 12.5 Proceso Monsanto para la síntesis del ácido acético
- 12.6 Hidroformilación

BIBLIOGRAFIA

-  Ch. Elschenbroich, A. Salzer, Organometallics, VCH, 1992.
-  R. H. Crabtree, The Organometallic Chemistry of the Transition Metals, John-Wiley&Sons, 1988.
-  G. L. Miessler, D. A. Tarr, Inorganic Chemistry, Prentice-Hall, 1998.
-  A. Yamamoto, Organotransition Metal Chemistry, Fundamental Concepts and Applications, 1986.
-  J. P. Collman, L. S. Hegeudus, J. R. Norton, R. G. Finke, Principles and Applications of Organotransition Metal Chemistry, 1987.
-  R. B. Jordan, Reaction Mechanisms of Inorganic and Organometallic Systems, Oxford University Press, 1998.



PROGRAMA DE LA MATERIA:

CLAVE:

QUIMICA CUANTICA

ETAPA FORMATIVA:

No. DE CREDITOS: 10

SEMESTRE RECOMENDADO:

HORAS A LA SEMANA: 5

TEORIA: 5

PRACTICA: 0

REQUISITOS:

ASIGNATURA:

PROGRAMAS ACADEMICOS:

Posgrado en Ciencias.

OBJETIVO: El alumno aprenderá en detalle las herramientas básicas de la química cuántica, así como una introducción al estudio riguroso de sistemas atómicos y moleculares. El énfasis de este primer curso es en los fundamentos y técnicas de aplicación general en problemas cuánticos. Nota: El curso supone que los alumnos tienen una formación en los elementos más básicos de la mecánica cuántica, así como las matemáticas asociadas de manera que el ritmo de trabajo será intensivo.

CONTENIDO TEMÁTICO

NUMERO:

TEMA:

- | | |
|---|--|
| 1 | Revisión e introducción de álgebra lineal y espacios de funciones. |
| 2 | Principios de la teoría cuántica. |
| 3 | Elementos de la teoría de grupos en mecánica cuántica. |
| 4 | Momento angular. |
| 5 | Métodos de aproximación. |
| 6 | Átomos y Moléculas |

TEMARIO

1. **Revisión e introducción de álgebra lineal y espacios de funciones.**
 - 1.1. Espacios vectoriales. Notación de Dirac. Producto escalar.
 - 1.2. Matrices, determinantes y trazas
 - 1.3. Cambios de base. Transformaciones unitarias/ortogonales. Cantidades invariantes (productos, trazas, determinantes...).
 - 1.4. Problema de valores propios. Propiedades de ortogonalidad de los autovectores. Valores propios degenerados y sus autovectores.
 - 1.5. Espacios de Hilbert de funciones, producto escalar y ortonormalidad. Subespacios finitos.
 - 1.6. Operadores lineales en el espacio de funciones.
 - 1.7. Autofunciones y autovectores de operadores Hermitianos: propiedades particulares.
2. **Principios de la teoría cuántica.**

- 2.1. Escalas de validez de las teorías clásica y cuántica. El significado físico de la constante de Planck.
 - 2.2. Formulación de Dirac de la mecánica cuántica. Vectores en un espacio de Hilbert como estados cuánticos. Operadores lineales como observables. El proceso de medición: estados preparados, autovectores y autovalores, principio de superposición.
 - 2.3. Compatibilidad de mediciones. Conmutador. Relación de incertidumbre de Heisenberg en su forma general. Principio de correspondencia de Bohr.
 - 2.4. Representación de Schroedinger: la función de onda. Propiedades que debe cumplir la función de onda. Interpretación probabilística. Forma diferencial de los operadores en el espacio de las funciones. Las ecuaciones de Schroedinger dependiente e independiente del tiempo. Los estados estacionarios y su relevancia en la descripción de algunos fenómenos cuánticos de interés en química.
 - 2.5. Indistinguibilidad cuántica: fermiones, bosones. Principio de antisimetría de los fermiones.
- 3. Elementos de la teoría de grupos en mecánica cuántica.**
- 3.1. Definiciones básicas. tablas de multiplicación, clases de equivalencia.
 - 3.2. Simetría. Operaciones matriciales de grupos de simetría. Simetría espacial: subgrupos de las traslaciones y subgrupos puntuales. Elementos y operaciones de simetría.
 - 3.3. Representaciones irreducibles y teoremas de ortogonalidad.
 - 3.4. Bases adaptadas por simetría y operadores de proyección.
 - 3.5. Productos directos.
 - 3.6. Reducción de integrales por simetría. Simetría del hamiltoniano.
 - 3.7. El grupo de las rotaciones. Generadores.
- 4. Momento angular .**
- 4.1. Propiedades de los operadores, valores propios y funciones propias del momento angular.
 - 4.2. Operadores escalera ("shift")
 - 4.3. Spin
 - 4.4. Momento angular en sistemas compuestos: coeficientes de Clebsch-Gordan
 - 4.5. Conservación del momento angular
- 5. Métodos de aproximación.**
- 5.1. Principio variacional. Método variacional lineal. Ejemplos.
 - 5.2. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo. Casos no degenerado y degenerado. Ejemplos.
- 6. Átomos y Moléculas.**
- 6.1. Atomo de helio. Principio de antisimetría (principio de exclusión).
 - 6.2. Determinantes de Slater. Propiedades y ejemplos.
 - 6.3. Espectro del átomo de helio. Evidencia experimental de la antisimetría.
 - 6.4. Aproximación de Born-Oppenheimer. Derivación de las ecuaciones de movimiento electrónico y nuclear. Aproximación adiabática. Concepto de superficie de energía.
 - 6.5. Estructura electrónica de H_2 . Interpretaciones del enlace químico.

BIBLIOGRAFIA

Atkins, P. W. Molecular Quantum Mechanics, 2a Edición, Oxford University

U.A.E.M.

Página 194 de 359



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

MAESTRÍA EN CIENCIAS



Instituto de
Investigación en
Ciencias
Básicas y
Aplicadas

Press 1983.

- ☐ Simons, J. and Nichols, J. Quantum Mechanics in Chemistry, Oxford University Press 1997.
- ☐ Lowe, J.P. Quantum Chemistry, Academic Press, NY 1978.
- ☐ Levine, I.R. Química Cuántica, Prentice Hall, Madrid, 2001.
- ☐ Pilar, F.L., Elementary Quantum Chemistry, 2ª edición, Dover, NY, 2001.

U.A.E.M.



SECRETARIA
GENERAL

PROGRAMA DE LA MATERIA:
RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE
PROTEÍNAS

ETAPA FORMATIVA:
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA:
REQUISITOS:

PROGRAMAS ACADÉMICOS:
Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: Introducir a los alumnos en el uso de la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) para el estudio de biomoléculas. Se hará hincapié en las aplicaciones de RMN a problemas bioquímicos y a la biología estructural.

CONTENIDO TEMÁTICO

NUMERO:	TEMA:
1	Introducción y Conceptos Básicos
2	Interacciones
3	Relajación
4	Experimental
5	Instrumentación
6	RMN en varias dimensiones
7	RMN en Proteínas
8	Determinación de Estructuras
9	Dinámica de Proteínas
10	Temas Selectos - Presentaciones

TEMARIO

1	Introducción y Conceptos Básicos
1.1	Introducción
1.2	Espín
1.3	Precesión
1.4	Magnetización Total - T1
1.5	Pulso - Resonancia
1.6	Detección
2.	Interacciones
2.1	Desplazamiento Químico
2.2	Acoplamiento J

- 2.3 Acoplamiento Dipolar

- 3 Relajación
 - 3.1 Longitudinal - T1
 - 3.2 Medición T1
 - 3.3 Transversal - T2
 - 3.4 Medición de T2

- 4 Experimental
 - 4.1 Diagrama
 - 4.2 Pulsos
 - 4.3 Gradientes
 - 4.4 Difusión
 - 4.5 Ciclo de fase

- 5 Instrumentación
 - 5.1 Instrumentación
 - 5.2 Adquisición de datos
 - 5.3 Procesamiento de datos
 - 5.4 Apodización
 - 5.5 Zero filling
 - 5.6 Corrección de fases

- 6 RMN en varias dimensiones
 - 6.1 Experimentos Homonucleares en 2D
 - 6.2 Experimentos Heteronucleares

- 7 RMN en Proteínas
 - 7.1 Preparación de Muestras
 - 7.2 Estrategias de Asignación

- 8 Determinación de Estructuras
 - 8.1 Experimentos NOES
 - 8.2 Anneling
 - 8.3 Validación Interacciones Moleculares
 - 8.4 CSP
 - 8.5 Otros

- 9 Dinámica de Proteínas
 - 9.1 Escalas de tiempo
 - 9.2 Escala Rápida
 - 9.3 Escala Lenta
 - 9.4 Escala intermedia

- 10 Temas Selectos - Presentaciones
 - 10.1 Acoplamientos dipolares residuales
 - 10.2 TROSY





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

MAESTRÍA EN CIENCIAS



- 10.3 Marcaje
- 10.4 Paramagnéticos efectos en la RMN
- 10.5 In Cell

BIBLIOGRAFIA

- 1. Rife & Hitchens, Fundamentals of Protein NMR Spectroscopy, Springer
- 2. Cavanagh et al, Protein NMR Spectroscopy, Elsevier/Academic Press
- 3. Downing, Protein NMR Techniques, 2nd Ed., (Methods in Molecular Biology, v.278)
- 4. Levitt, Spin Dynamics, Wiley



PROGRAMA DE LA MATERIA:
RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

CLAVE:

ETAPA FORMATIVA: Disciplinaria.
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5

ASIGNATURA:
PROGRAMAS ACADEMICOS:
Posgrado en Ciencias.

TEORIA: 5
PRACTICA: 0
REQUISITOS:

OBJETIVO: Al término del curso el alumno conocerá los métodos y técnicas de Resonancia Magnética Nuclear para la elucidación y determinación estructural.

CONTENIDO TEMÁTICO

NUMERO:

TEMA:

1. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear.
2. El desplazamiento químico.
3. Acoplamiento Químico de protón.
4. La RMN en el Análisis conformacional.
5. Modelo de magnetización macroscópica y las secuencias básicas de pulsos.
6. Experimentos de RMN unidimensionales con varios pulsos.
7. Experimentos de RMN bidimensionales.

TEMARIO

1. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear.

- 1.1. Introducción
 - 1.1.1. Propiedades magnéticas de los núcleos
 - 1.1.2. Núcleos susceptibles a la resonancia
 - 1.1.3. Excitación y relajación
- 1.2. El espectrómetro y la muestra
 - 1.2.1. Componentes del espectrómetro
 - 1.2.2. Preparación de la muestra
 - 1.2.3. Optimización de la señal
 - 1.2.4. Parámetros espectrales

2. El desplazamiento químico.

- 2.1. Introducción al desplazamiento químico
 - 2.1.1. Desplazamiento químico de protón
 - 2.1.2. Desplazamiento químico de ^{13}C

- 2.2. Factores que influyen en el desplazamiento químico
 - 2.2.1. Efecto de la concentración
 - 2.2.2. Efecto de la temperatura
 - 2.2.3. Efecto del sustituyente
 - 2.2.4. Efecto del disolvente
 - 2.2.5. Efecto isotópico

3. Acoplamiento Químico de protón.

- 3.1. Multiplicidad de la señal: el triángulo de Pascal
- 3.2. Espectros de primer y segundo orden
- 3.3. Equivalencia química y magnética (enantiotópicos y diastereotópicos)
- 3.4. Acoplamiento a un enlace
- 3.5. Acoplamiento geminal
- 3.6. Acoplamiento a larga distancia
- 3.7. Análisis de espectros

4. La RMN en el Análisis conformacional.

- 4.1. Preferencia conformacional
 - 4.1.1. Análisis de cicloalcanos de 5 y 6 miembros
 - 4.1.2. Análisis de Heterociclos de 5 y 6 miembros
- 4.2. La curva de Karplus
 - 4.2.1. Descripción del método de Karplus
 - 4.2.2. Problemas aplicados del método de Karplus
- 4.3. Análisis de la dinámica de sistemas cíclicos de 5 y 6 miembros

5. Modelo de magnetización macroscópica y las secuencias básicas de pulsos.

- 5.1. Modelo vectorial
- 5.2. Experimentos de un solo pulso
- 5.3. Experimentos de desacoplamiento y el efecto nuclear Overhauser
- 5.4. La secuencia *spin-echo*






6. Experimentos de RMN unidimensionales con varios pulsos.

- 6.1. Experimentos de transferencia de polarización: APT, INEPT y DEPT
- 6.2. Aplicación a problemas de elucidación estructural

7. Experimentos de RMN bidimensionales.

- 7.1. Experimentos bidimensionales de correlación homonuclear: COSY, DQFCOSY, TOCSY, NOESY, ROESY
- 7.2. Experimentos bidimensionales de correlación heteronuclear: HETCOR, COLOC, XCORFE, FLOCK.
- 7.3. Experimentos bidimensionales heteronucleares de detección inversa: HMQC, HSQC y HMBC.
- 7.4. Aplicación a problemas de elucidación estructural.

BIBLIOGRAFIA

-  Lambert J. B., Shurvell H. F., Lightner D. A. and Cooks R. G., Organic Structural Spectroscopy, Prentice Hall Ed. (1996).
- Whittaker D., Interpreting Organic Spectra, The Royal Society of Chemistry (2000).
-  Crews P., Rodríguez J. and Jaspars M., Organic Structure Analysis, Oxford Ed. (1998).
-  Sanders J. and Hunter B., Modern NMR Spectroscopy A guide for chemists, Oxford Ed. (1987)
-  Derome A. E., Modern NMR Techniques for Chemistry Research, Pergamon Ed. (1987).
-  A. Breitmeier, NMR Structure Elucidation, Springer Verlag 1992.
- C. Duddeck, NMR Organic Structure Elucidation, John Wiley



PROGRAMA DE LA MATERIA:
SIMETRÍA Y ORBITALES MOLECULARES

CLAVE:

ETAPA FORMATIVA:
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA: 0
REQUISITOS:

ASIGNATURA:
PROGRAMAS ACADEMICOS:
Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: Presentar una introducción a la teoría de orbitales moleculares cualitativa y sus aplicaciones en química orgánica e inorgánica.

CONTENIDO TEMÁTICO

1. Elementos básicos de mecánica cuántica.
2. Modelos sencillos con solución exacta.
3. Átomo de hidrógeno, orbitales atómicos y moleculares.
4. Métodos de aproximación y su aplicación a la teoría de orbitales moleculares.
5. Simetría y orbitales moleculares.
6. Aplicaciones de la teoría de orbitales moleculares en química orgánica.
7. Aplicaciones de la teoría de orbitales moleculares en química inorgánica.

TEMARIO

- 1.- Elementos básicos de mecánica cuántica.**
 - 1.1.-Dualidad onda-partícula, fenómenos de interferencia.
 - 1.2.-Principio de incertidumbre de Heisenberg.
 - 1.3.-Ecuación de Schrodinger independiente del tiempo.
 - 1.4.-Ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo.
 - 1.5.-Estados estacionarios.
 - 1.6.-Interpretación de Born para la función de onda.
 - 1.7.-Propiedades de la función de onda y cuantización.
- 2. Modelos sencillos con solución exacta**
 - 2.1. Partícula libre: movimiento traslacional.
 - 2.2. Efecto túnel.
 - 2.3. Partículas en cajas y barreras unidimensionales.
 - 2.4.-Partícula en una caja bidimensional: separación de variables.
 - 2.5.-Partícula en una anillo: movimiento rotacional.
 - 2.6.-Partícula en una esfera

Átomo de hidrógeno, orbitales atómicos y moleculares:

- 3.1.- Coordenadas esféricas y hamiltoniano.
- 3.2.-Separación de variables.
- 3.3.- Función de distribución radial, gráficas de la parte angular en coordenadas polares.

- 3.4. Direccionalidad, tamaño y energías de orbitales atómicos.
- 3.5. Diagramas de contorno de densidad de probabilidad electrónica.
- 3.6. Orbitales moleculares: internos, de valencia, Rydberg, híbridos y de varios centros.
- 3.7. Ejemplos

Métodos de aproximación y su aplicación a la teoría de orbitales moleculares:

- 4.1.-Principio variacional
- 4.2.-Teoría de perturbaciones
- 4.3.-Aplicaciones al método LCAO

Simetría y orbitales moleculares:

- 5.1.-Elementos y operaciones de simetría.
- 5.2.-Clasificación de grupos puntuales.
- 5.3.-Representaciones matriciales de grupos.
- 5.4. Construcción de orbitales híbridos y moleculares.
- 5.6. Diagramas de correlación.

4. Aplicaciones de la teoría de orbitales moleculares en química orgánica

- 6.1. Reglas de Woodward-Hoffmann
- 6.2. Método de Huckel: Ecuación característica, factorización por simetría y soluciones.
- 6.3. Aplicaciones del método de Huckel: hidrocarburos alternantes, distribuciones de carga, aromaticidad, índices de reacción, resonancia de espín electrónico, efectos estereoelectrónicos, orbitales de frontera y reactividad.
- 6.4. Simetría de modos normales de vibración: reglas de selección para transiciones en el infrarojo.

5. Aplicaciones de la teoría de orbitales moleculares en química inorgánica

- 7.1.-Diagramas de Walsh: estructura molecular y reactividad
- 7.2.-Separación de niveles degenerados y teoría del campo cristalino.
- 7.3.-Estructura electrónica de complejos de metales de transición.
- 7.4.-Efecto de Jahn-Teller.
- 7.5.-Cúmulos, cajas y compuestos sandwich

BIBLIOGRAFIA

- ☐ Cotton, F. Chemical applications of group theory, Wiley, 1990.
- ☐ Lowe, J.P. Quantum Chemistry, Academic Press, NY 1978.
- ☐ Atkins, P.W. Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press 1983.
- ☐ Murrell, J.N., Kettle, S.F. and Tedder, J.M. The Chemical Bond, John Wiley 1985.
- ☐ Simons, J. and Nichols, J. Quantum Mechanics in Chemistry, Oxford University Press 199

PROGRAMA DE LA MATERIA:

CLAVE:

SINTESIS ORGANICA

ETAPA FORMATIVA:

No. DE CREDITOS: 10

SEMESTRE RECOMENDADO:

HORAS A LA SEMANA: 5

TEORIA: 5

PRACTICA: 0

REQUISITOS:

ASIGNATURA:

PROGRAMAS ACADEMICOS:

Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: Al finalizar el curso, el estudiante será capaz de aplicar sus conocimientos en el diseño, estrategia y síntesis de productos naturales así como de interés químico y biológico utilizando la metodología moderna de la síntesis orgánica.

CONTENIDO TEMÁTICO

- | NUMERO: | TEMA: |
|---------|---|
| 1 | Estrategia y Diseño en Síntesis Orgánicas. |
| 2 | Formación Estereoselectiva de Enlaces Carbono-Carbono. (Métodos de la 1ª, 2ª, 3ª y 4ª Generación.). |
| 3 | Formación de Dobles Enlaces Carbono-Carbono. |
| 4 | Métodos Generales Para La Síntesis de Compuestos Cíclicos. |
| 5 | Síntesis de Péptidos. |
| 6 | Síntesis Selecta de Productos Naturales Complejos. |

TEMARIO

- 1. Estrategia y Diseño en Síntesis Orgánicas.**
 - 1.1. Aspectos históricos de la síntesis orgánica.
 - 1.2. Estrategia y análisis retrosintético.
 - 1.3. Interconversión entre grupos funcionales.
 - 1.4. Equivalentes sintéticos y "umpolung".
 - 1.5. Grupos protectores.
 - 1.6. Síntesis lineales y convergentes.
 - 1.7. Conceptos de quimioselectividad, regioselectividad, estereoselectividad.
- 2. Formación Estereoselectiva de Enlaces Carbono-Carbono. (Métodos de la 1ª, 2ª, 3ª y 4ª Generación.).**
 - 2.1. Adiciones al grupo carbonilo y modelos para la selectividad.
 - 2.2. Alquilación de enolatos, enaminas e hidrazonas.
 - 2.3. Alquilación de aniones estabilizados por heteroátomos.

U.A.E.M. . Página 204 de 359

- 2.4. Adiciones conjugadas.
- 2.5. La reacción aldol.
- 2.6. La reacción de Diels-Alder.
- 2.7. Acoplamientos de Heck, Suzuki, Sonogoshira, Kumada, Negishi y Stille.
- 2.8. Reacción Ireland-Claisen y variantes.
- 2.9. Ciclización catiónica de alquenos.
3. **Formación de Dobles Enlaces Carbono-Carbono.**
 - 3.1. Procesos de E_1 Eliminación.
 - 3.2. Eliminaciones *syn* (reacción de Hofmann, Cope, pirólisis de ésteres tipo xantato, pirólisis de selenóxidos, fragmentación de Grob).
 - 3.3. Reacción de Wittig y Horner-Wadsworth Emmons.
 - 3.4. Reacción de olefinación de Peterson.
 - 3.5. Olefinación Julia-Lythgoe.
 - 3.6. Acoplamiento de Carbonilos (Reacción de McMurry).
 - 3.7. Shapiro y métodos relacionados.
 - 3.8. Reactivo de Tebbe.
 - 3.9. Procesos metathesis.
4. **Métodos Generales Para La Síntesis de Compuestos Cíclicos.**
 - 4.1. Reacciones S_N2 y aldol intramoleculares.
 - 4.2. Reacción intramolecular de Wittig.
 - 4.3. Expansión y contracción de anillos.
 - 4.4. Reacciones de cicloadición.
 - 4.5. Ciclización de Nazarov.
 - 4.6. Ciclizaciones catiónicas y aniónicas.
 - 4.7. Ciclizaciones por radicales libres.
5. **Síntesis de Péptidos.**
 - 5.1. Principios básicos de síntesis de péptidos.
 - 5.2. Grupos protectores.
 - 5.3. Reactivos de acoplamiento.
 - 5.4. Síntesis en fase líquida.
 - 5.5. Síntesis en fase sólida.
 - 5.6. Unión de fragmentos libres. Procesos ortogonales y enzimáticos.
 - 5.7. Acoplamiento de tio ésteres.
 - 5.8. Síntesis de oligonucleótidos.
6. **Síntesis Selecta de Productos Naturales Complejos.**
 - a. Ejemplos de síntesis de productos naturales selectos serán debidamente intercalados en la discusión de los tópicos 1-5.

BIBLIOGRAFIA

1. E.J. Corey X. Chengm "The Logic of Chemical Synthesis", John Wiley 1989. (ISBN 0-471-50979-5)
2. K.Cc. Nicolaou, E.J. Sorenson, "Classics in Total Synthesis, VCH 2004. (ISBN 3-527-29284-5).



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

MAESTRÍA EN CIENCIAS



Instituto de
Investigación en
Ciencias
Básicas y
Aplicadas

- 📖 T.W. Greene, "Protecting Groups in Organic Synthesis" (2nd edition), J. Wiley & Sons, 1999.
- 📖 Michael B. Smith and Jerry March, "March's Advanced Organic Chemistry" Fifth Ed., Wiley 2001 (ISBN 0-471-58589)
- 📖 W. Carruthers, "Some Modern Methods in Organic Synthesis", Cambridge University Press 1989. (ISBN 0-521-31117-9)
- 📖 J. Seyden-Penne, "Chiral Auxiliaries and Ligands in Asymmetric Synthesis", John Wiley & Sons Inc. (ISBN 0-471-11607-6).
- 📖 G. Procter, "Asymmetric Synthesis", Oxford University Press, 1996. (ISBN 0 19855725 6).



PROGRAMA DE LA MATERIA:

QUÍMICA COMPUTACIONAL

ETAPA FORMATIVA: Disciplinaria

No. DE CREDITOS: 10

SEMESTRE RECOMENDADO:

HORAS A LA SEMANA: 5

TEORIA: 5

PRACTICA:

REQUISITOS:

PROGRAMAS ACADEMICOS:

Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: Este curso da una introducción a las técnicas intermedias de la química computacional. En curso dedica dos terceros del tiempo en la teorías relevantes y el resto en las secciones laboratorios. Habrán cuatro tareas acompañando cada capítulo y los exámenes parciales. A parte de las tareas, cada alumno va a llevar a cabo un proyecto relacionado al temario del curso.

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:

TEMA:









- | | |
|----|---|
| 1 | Interacciones Intermoleculares |
| 2 | Análisis de la densidad y la matriz del orden uno |
| 3 | Más alta de B3LYP |
| 45 | Efectos de Disolvente |

TEMARIO

- 1 Interacciones Intermoleculares
 - (a) La energía interacción de dos cuerpos.
 - (b) La teoría de perturbación adaptado por simetría SAPT.
 - (c) La expansión multipolar.
 - (d) La distribución de Williams-Stone-Misquitta
2. Análisis de la densidad y la matriz del orden uno
 - (a) La teoría átomos en moléculas
 - I. El campo de gradiente de la densidad electrónica.
 - II. La superficie de no flujo y la cuenca atómica.
 - III. La densidad de la energía potencial y cinética.
 - (b) La matriz del orden uno y el enlace químico
- 3 Más alta de B3LYP
 - (a) El método de MP2 con componente de espín escalado SCS-MP2

- (b) La escalera de Jacobe
 - (c) El método de DFT con la interacción de dispersión DFT-D y de van der Waals no local VDW-DFT.
 - (d) Los métodos de correlación localizados
- 4 Efectos de Disolvente
- (e) El modelo de supermolécula
 - (f) El conituum.
 - (g) El modelo de dipolo de Langevin
 - (h) La teoría de agregados acoplado para la ecuación de movimiento aplicado al modelo de continuum polarizable PCV-EOM-CC.

BIBLIOGRAFIA

-  F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley (1999)
-  R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules*, Oxford (1994)
-  I. G. Kaplan, *Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials*, Wiley (2006)
-  B. Jaziorski, R. Moszynski y K. Szalewicz, Perturbation Theory Approach to Intermolecular Potential Energy Surfaces of van der Waals Complexes, *Chem. Rev.*, 94, 1887 (1994).
-  J. Misquitta y A. J. Stone, "Distributed polarizabilities obtained using a constrained density-fitting algorithm", *J. Chem. Phys.*, 124, 024111 (2006)
-  E. Goll, T. Leininger, F. Manby, A. Mitushchenkov, H.-J. Werner y H. Stoll, "Local and density fitting approximations within the short-range/long-range hybrid scheme: Application to large non-bonded complexes". *Phys Chem. Chem Phys.* 10, 3553 (2008)
-  S. Grimme, "Accurate description of van der Waals complexes by density functional theory including empirical corrections", *J. Comp. Chem.* 25, 1463 (2004)
-  J. Tomasi, B. Mennucci, y R. Cammi, "Quantum mechanical continuum solvation models", *Chem Rev.* 105, 2999 (2005).

PROGRAMA DE LA MATERIA:

QUIMICA MEDICINAL

ETAPA FORMATIVA: Disciplinaria

No. DE CREDITOS: 10

SEMESTRE RECOMENDADO:

HORAS A LA SEMANA: 5

TEORIA: 5

PRACTICA:

REQUISITOS:

PROGRAMAS ACADEMICOS:

Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: El estudiante conocerá los fundamentos para el diseño de Fármacos y entenderá como éstos actúan a nivel molecular. Una vez que estos conceptos sean comprendidos podrán ser usados para elucidar los mecanismos de acción de los diferentes medicamentos descritos en cualquier libro de texto.

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:	TEMA:
1	Descubrimiento de fármacos
2	Neurotransmisores
3	Receptores
4	Enzimas
5	Canales iónicos
6	Relaciones cuantitativas estructura- actividad
7	Metabolismo de fármacos

TEMARIO

- 1 Descubrimiento de fármacos**
 - 1.1 Perspectivas Históricas
 - 1.2 Mecanismos de Descubrimiento de un Fármaco
 - 1.3 Planificación e Identificación de un Compuesto Modelo
 - 1.4 Desarrollo de Compuestos

- 2. Neurotransmisores**
 - 2.1 Descripción del Sistema Nervioso
 - 2.2 Neurotransmisores en el Sistema Nervioso Periférico
 - 2.3 Acetilcolina, Sinapsas y Anticolinesterasas
 - 2.4 Efectos Colinérgicos
 - 2.5 Catecolaminas
 - 2.6 Neurotransmisores en el Sistema Nervioso Central

- 3 Receptores**
 - 3.1 Definición y Clasificación
 - 3.2 Estructura de los Receptores y su Función
 - 3.3 Agonistas y Antagonistas
 - 3.4 Modelos Teóricos
 - 3.5 Teoría de Receptores Múltiples
 - 3.6 Caracterización de Receptores

- 4 Enzimas**
 - 4.1 Estructura de Enzimas
 - 4.2 Mecanismo y Cinética de Enzimas
 - 4.3 Inhibición Enzimática
 - 4.4 Inhibidores Enzimáticos como Fármacos
 - 4.5 Enzimas como Fármacos

- 5 Canales iónicos**
 - 5.1 Canales Iónicos y sus Propiedades
 - 5.2 Clasificación de Canales Iónicos
 - 5.3 Canales Iónicos como Receptores Farmacológicos
 - 5.4 Estructura y Función de Canales Iónicos

- 6 Relaciones cuantitativas estructura-actividad**
 - 6.1 Propiedades Físicoquímicas de los Fármacos
 - 6.2 Principio de Hansch
 - 6.3 Correlación con Coeficientes de Partición
 - 6.4 Modelo Lineal de Hansch
 - 6.5 Métodos de Selección Batch
 - 6.6 Biotosterismo

- 7 Metabolismo de fármacos**
 - 7.1 Reacciones de Oxidación
 - 7.2 Reacciones de Reducción e Hidrolisis
 - 7.3 Reacciones de Conjugación
 - 7.4 Efectos Tóxicos del Metabolismo

BIBLIOGRAFIA

- ① P. Krosggaard-Larsen, P. A. Bundgaard, Textbook of Drug Design and Development. Harwood Academic Publishers. 1991.
- ② Rang, H.P., Dale, M.M. Pharmacology. Churchill Livingstone. 1991

- ☐ T. Nogrady, Medicinal Chemistry A Biochemical Approach. Oxford University Press 1988
- ☐ S. M. Roberts, B. J. Price, Medicinal Chemistry. The Role of Organic Chemistry in Drug Research. Academic Press. 1985
- ☐ Taylor, J.B., Kennewell, P.D. Introductory Medicinal Chemistry. Ellis Horwood Publishers. 1981.
- ☐ Goodman L., Gilman, A. The Pharmacological Basis of Therapeutics. Pergamon Press. 1991
- ☐ Literatura Reciente Relacionada al Tema

PROGRAMA DE LA MATERIA:
QUÍMICA HETEROCÍCLICA

ETAPA FORMATIVA:

No. DE CREDITOS: 10

SEMESTRE RECOMENDADO:

HORAS A LA SEMANA: 5

TEORIA: 5

PRACTICA:

REQUISITOS:

PROGRAMAS ACADEMICOS:

Posgrado en Ciencias

PRESENTACIÓN. La Química Heterocíclica se ocupa del estudio de compuestos orgánicos que poseen un anillo y en los que, al menos uno de los miembros de ese anillo es un elemento químico diferente del carbono, es decir un heteroátomo, generalmente O, N y S. Los compuestos heterocíclicos son de gran abundancia en sistemas biológicos, además de que representan un número importante como principios activos en fármacos de uso comercial, así su aplicación en diferentes áreas de la química.

OBJETIVO: Este curso se centra fundamentalmente en el estudio de los compuestos heterocíclicos que contienen nitrógeno, oxígeno o azufre en su estructura, en virtud de ser los sistemas más empleados y conocidos. Al final del curso el alumno conocerá los aspectos generales de nomenclatura de heterociclos, su importancia y clasificación, y los métodos sintéticos y reacciones químicas de los principales sistemas heterocíclicos.

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:

TEMA:

- | | |
|----|---|
| 1 | Nomenclatura de heterociclos |
| 2 | Heterociclos alifáticos |
| 3 | Anillos heterocíclicos de tres miembros |
| 4 | Anillos heterocíclicos de cuatro miembros |
| 5 | Heterociclos aromáticos |
| 6 | Furano, pirrol y tiofeno |
| 7 | Indol |
| 8 | Azoles |
| 9 | Piridina |
| 10 | Quinolina e Isoquinolina |
| 11 | Diazinas |
| 12 | Azepinas, diazepinas y benzodiazepinas |

J. A. E. M.



SECRETARIA
GENERAL

TEMARIO

- 1 Nomenclatura de heterociclos
 - 1.1 Introducción
 - 1.2 Nomenclatura de Hantzsch-Widman.
 - 1.3 Nomenclatura sistemática de heterociclos condensados

- 2 Heterociclos alifáticos
 - 2.1 Enlace y geometría de compuestos cíclicos
 - 2.2 Nucleofilia de compuestos heterocíclicos saturados

- 3 Anillos heterocíclicos de tres miembros
 - 3.1 Introducción: aziridina, oxirano y tirano
 - 3.2 Métodos de síntesis.
 - 3.2.1 Inserción directa de un heteroátomo en un doble enlace C-C.
 - 3.2.2 Reacciones de inserción de metileno
 - 3.2.3 Métodos de ciclación
 - 3.2.4 Reacciones de condensación
 - 3.3 Reactividad
 - 3.3.1 Apertura nucleofílica del anillo.
 - 3.3.2 Apertura electrofílica del anillo.
 - 3.3.3 Otros procesos de apertura del anillo.
 - 3.3.4 Reacciones con extrusión del heteroátomo

- 4 Anillos heterocíclicos de cuatro miembros
 - 4.1 Introducción: azetidina, oxetano y tietano
 - 4.2 Métodos de síntesis
 - 4.2.1 Reacciones de ciclación
 - 4.2.2 Rutas de combinación directa
 - 4.3 Reactividad
 - 4.3.1 Apertura electrofílica de anillos
 - 4.3.2 Apertura nucleofílica de anillos.

- 5 Heterociclos aromáticos
 - 5.1 Aromaticidad en heterociclos
 - 5.2 Tautomería en heterociclos aromáticos

- 6 Furano, pirrol y tiofeno
 - 6.1 Introducción.
 - 6.2 Métodos de síntesis.
 - 6.2.1 Síntesis de Paal-Knorr
 - 6.2.2 Síntesis de pirroles de Hantzsch
 - 6.2.3 Síntesis de pirroles de Knorr
 - 6.2.4 Síntesis de tiofenos de Hinsberg
 - 6.2.5 Otras síntesis
 - 6.3 Reactividad



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

MAESTRÍA EN CIENCIAS



- 6.3.1 Sustitución electrofílica.
- 6.3.2 Sustitución nucleofílica.
- 6.3.3 Ruptura del anillo y otras reacciones

- 7 Indol
- 7.1 Introducción.
- 7.2 Métodos de síntesis
- 7.2.1 Síntesis de Fischer
- 7.2.2 Síntesis de Madelung
- 7.2.3 Síntesis de Reissert
- 7.2.4 Síntesis de Nenitzescu
- 7.2.5 Otras síntesis
- 7.3 Reactividad
- 7.3.1 Sustitución electrofílica
- 7.3.2 Sustitución nucleofílica
- 7.3.3 Otras reacciones

- 8 Azoles
- 8.1 Introducción.
- 8.2 Métodos de síntesis.
- 8.2.1 Azoles 1,2
- 8.2.2 Azoles 1,3
- 8.3 Reactividad
- 8.3.1 Sustitución electrofílica
- 8.3.2 Sustitución nucleofílica
- 8.3.3 Otras reacciones

- 9 Piridina
- 9.1 Introducción.
- 9.2 Métodos de síntesis.
- 9.2.1 Síntesis de Hantzsch.
- 9.2.2 Otras síntesis.
- 9.3 Reactividad.
- 9.3.1 Sustitución electrofílica.
- 9.3.2 Sustitución nucleofílica.
- 9.3.3 Reacciones de las cadenas laterales

- 10 Quinolina e isoquinolina
- 10.1 Introducción.
- 10.2 Métodos de síntesis.
- 10.2.1 Síntesis de Skraup.
- 10.2.2 Síntesis de Friedlander.
- 10.2.3 Síntesis de Bischler-Napieralski.
- 10.2.4 Síntesis de Pictet-Spengler.
- 10.2.6 Otras síntesis.
- 10.3 Reactividad.
- 10.3.1 Sustitución electrofílica.

U.A.E.M.










SECRETARÍA
GENERAL

- 10.3.2 Sustitución nucleofílica.
- 10.3.3 Reactividad de las cadenas laterales

- 11 Diazinas
- 11.1 Introducción.
- 11.2 Métodos de síntesis. Reactividad. Azepinas, diazepinas y benzodiazepinas
Introducción.
Métodos de síntesis. Reactividad.

BIBLIOGRAFÍA

-  Theophil E.; Siegfried H.; Ed. The Chemistry of Heterocycles, 2003 Wiley-VCH.
-  Joule, J.; Mills K. Heterocyclic Chemistry, 2000, Blackwell Science, New York.
-  Katritzky A. Handbook on Heterocyclic Chemistry, 2000, Pergamon Press, New York.
-  Gilchrist T. Química Heterocíclica. 1995, Addison-Wesley, México.
-  Acheson R. Química Heterocíclica. 1981, Publicaciones Culturales, México.
-  Paquete, L. Fundamentos de Química Heterocíclica, 1986, Limusa, México.
-  Publicaciones recientes en diferentes Journals

PROGRAMA DE LA MATERIA:
ELECTROQUÍMICA.

ETAPA FORMATIVA: Disciplinaria
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA:
REQUISITOS:

PROGRAMAS ACADEMICOS:
Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: El alumno aprenderá los conceptos fundamentales y básicos en el análisis electroquímico. Conocerá las técnicas generales y modernas implementadas en el área de la electroquímica.

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:	TEMA:
1	Introducción a los conceptos fundamentales de la Electroquímica
2	Cinética de las reacciones electroquímicas
3	Transferencia de Masa
4	Técnicas de barrido de potencial y voltametría cíclica
5	Técnicas basadas en conceptos de impedancia
6	Estructura de la doble capa
7	Instrumentación electroquímica
8	Diseño de experimentos electroquímicos
9	Espectro-electroquímica

TEMARIO

- 1 **Introducción a los conceptos fundamentales de la Electroquímica**
 - 1.1 Introducción a la electroquímica
 - 1.2 Celdas electroquímicas
 - 1.3 Potenciales estándar
 - 1.4 Potencial y termodinámica de las celdas

2. **Cinética de las reacciones electroquímicas**
 - 2.1 Reacciones redox en electrodos metálicos
 - 2.2 Diagramas de Pourbaix
 - 2.3 Equilibrio químico entre dos electrolitos en la interfase
 - 2.4 Modelo de Butler-Volmer para cinética del electrodo
 - 2.5 Teorías microscópicas de transferencia de carga

- 3 Transferencia de Masa
 - 3.1 Derivación de una ecuación general de transferencia de masa
 - 3.2 Migración y difusión
 - 3.3 Mezcla de migración y difusión cerca de un electrodo activo
- 4 Técnicas de barrido de potencial y voltametría cíclica
- 5 Técnicas basadas en conceptos de impedancia
 - 5.1 Impedancia de un sistema electroquímico
 - 5.2 Función de Transferencia
 - 5.3 Interpretación de la impedancia de Faraday
 - 5.4 Parámetros cinéticos para medición de impedancia
- 6 Estructura de la doble capa
 - 6.1 Estructura de la doble capa y adsorción
 - 6.2 Termodinámica de la doble capa
 - 6.3 Modelos para la estructura de doble capa
 - 6.4 Efectos de la doble capa en velocidades de reacción del electrodo
- 7 Amplificadores operacionales
 - 7.1 Retroalimentación de corriente y voltaje
 - 7.2 Potenciostatos y galvanostatos
 - 7.3 Medición de corrientes pequeñas
- 8 Espectro-electroquímica
 - 8.1 Espectroscopia ultravioleta y visible
 - 8.2 Espectroscopia vibracional
 - 8.3 Espectrometría de ión-electrón
 - 8.4 Métodos de rayos X

BIBLIOGRAFIA

- ☐ Allen J. Bard, Larry R. Faulkner. Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications. John Wiley & Sons 1980.
- ☐ Elis Horwood. Instrumental Methods in Electrochemistry. Series in physical chemistry 1993.
- ☐ Derek Pletcher. A first Course in Electrode Processes. The Electrochemical Society. 1991.

PROGRAMA DE LA MATERIA:
QUIMIOMETRÍA

ETAPA FORMATIVA:
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA:
REQUISITOS:

PROGRAMAS ACADEMICOS:
Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: Dar al estudiante las herramientas básicas para una interpretación adecuada de los datos analíticos obtenidos en la parte experimental

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:

TEMA:





- | | |
|----|---|
| 1 | Conceptos básicos |
| 2 | Medidas de precisión |
| 3 | Cuál es el mejor estimador para la precisión |
| 4 | Promedios |
| 5 | Curvas de calibración y otras predicciones |
| 6 | Validación de métodos analíticos |
| 7 | Análisis de varianza |
| 8 | Análisis de varianza para dos variable independientes |
| 9 | Análisis de varianza para tres variables independientes |
| 10 | Análisis multivariado |

TEMARIO

- | | |
|-----|---|
| 1 | Conceptos básicos |
| 1.1 | Tipos de distribución |
| 1.2 | Independencia |
| 1.3 | Efectos de la distribución no normal en la varianza |
| 1.4 | Transformación de datos |
| 1.5 | Datos anómalos |
| 2. | Medidas de precisión |
| 2.1 | Formas para medir la precisión |
| 2.2 | La mejor expresión para la varianza |
| 2.3 | Desviación estándar |
| 2.4 | Coficiente de variación |

- 2.5 Estimación de la precisión en el tamaño de una muestra
- 3 Cuál es el mejor estimador para la precisión?
- 4 Promedios
- 5 Curvas
- 6 Validación de métodos analíticos
 - 6.1 Especificidad
 - 6.2 Límite de detección
 - 6.3 Límite de cuantificación
 - 6.4 Intervalo de trabajo lineal
 - 6.5 Porcentajes de recuperación
 - 6.6 Repetibilidad
 - 6.7 Reproducibilidad
 - 6.8 Sensibilidad
 - 6.9 Robustez
- 7 Análisis de varianza
 - 7.1 Introducción al análisis de varianza
 - 7.2 Medida del efecto de una variable sobre el promedio
 - 7.3 Clasificación de variables de una vía
- 8 Análisis de varianza para dos variable independientes
 - 8.1 Análisis de varianza por dos vías
- 9 Análisis de varianza para tres variables independientes
 - 9.1 Medida del efecto de diferentes niveles para tres variables
 - 9.2 Cuadrado latino
- 10 Análisis multivariado
 - 10.1 Análisis de componentes principales
 - 10.2 Análisis de conglomerados
 - 10.3 Análisis discriminante
 - 10.4 Regresión múltiple

BIBLIOGRAFIA

-  Miller and Miller. Estadística y Quimiometría para Química Analítica. Prentice Hall. 2002.
-  Wolfgang Härdle Léopold Simar. Applied Multivariate Statistical Analysis. Method and Data Tecnologies. 2003.
-  David Harvey. Modern Analytical Chemistry. Mc Graw Hill. 2000.
-  Robert Anderson. Practical Statistics for Analytical Chemistry. VNR. 1987.

PROGRAMA DE LA MATERIA:

TÓPICOS SELECTOS EN QUÍMICA
ANALÍTICA

ETAPA FORMATIVA:

No. DE CREDITOS: 10

SEMESTRE RECOMENDADO:

HORAS A LA SEMANA: 5

TEORÍA: 5

PRACTICA:

REQUISITOS:

PROGRAMAS ACADÉMICOS:

Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: Al final del curso el estudiante habrá adquirido conocimientos sólidos sobre el comportamiento de las soluciones iónicas, las técnicas experimentales para sus estudios y las teorías que explican el equilibrio iónico.

CONTENIDO TEMÁTICO

NUMERO:

TEMA:

- | | |
|---|---|
| 1 | INTRODUCCIÓN AL EQUILIBRIO IÓNICO |
| 2 | SOLUBILIDAD, FORMACIÓN DE COMPLEJOS Y PARES IONICOS |
| 3 | TERMODINAMICA DE SOLUCIONES IONICAS |
| 4 | CONCEPTOS Y TEORÍA DE SOLUCIONES NO IDEALES |
| 5 | TEORÍA DE LA CONDUCTANCIA |
| 6 | SOLVATACION |

TEMARIO

- | | |
|-----|--|
| 1 | Introducción al equilibrio iónico |
| 1.1 | El concepto del equilibrio |
| 1.2 | Ácidos y Bases |
| 1.3 | Cálculos del equilibrio de ácidos y bases |
| 1.4 | Cálculos del equilibrio de sales y amortiguadores |
| 1.5 | Neutralización y curvas de titulación |
| 1.6 | Análisis de curvas de titulación y determinación potenciométrica de la constante de acidez |
| 2. | Solubilidad, formación de complejos y pares iónicos |
| 2.1 | Formación de pares iónicos |

- 2.2 Formación de complejos
- 2.3 Solubilidad de sales escasamente solubles
- 2.4 Determinación experimental del producto de solubilidad, constantes de formación de complejos iónicos en solución (potenciometría)
- 3 Termodinámica de soluciones iónicas
 - 3.1 No idealidad de soluciones iónicas, Fuerza iónica
 - 3.2 Potencial químico y coeficiente de actividad iónica media
 - 3.3 Correcciones para la no-idealidad de soluciones iónicas
 - 3.4 Efecto de la fuerza iónica en el equilibrio iónico
 - 3.5 Métodos para tratar las desviaciones de la no-idealidad
- 4 Conceptos y teoría de las soluciones no ideales
 - 4.1 Enfoque teórico de las soluciones iónicas
 - 4.2 La teoría de Debye-Huckel
 - 4.3 La ley límite de Debye
 - 4.4 Limitaciones de la Teoría de Debye
 - 4.5 El Modelo de Bjerrum
 - 4.6 Desarrollos modernos de la teoría de electrolitos
- 5 Teoría de la conductancia de soluciones de Electrolitos
 - 5.1 Aspectos experimentales de la medición de la conductancia
 - 5.2 La teoría de Kohlraush de la conductividad iónica
 - 5.3 Aplicaciones de la conductividad al estudio de los sistemas iónicos
 - 5.3.1 Determinación conductimétrica de los números de transporte y constantes de equilibrio
 - 5.4 Conductividad iónica en soluciones de régimen concentrado
 - 5.5 Teoría de Debye-Huckel-Osanger
 - 5.6 Teoría y modelo de Fuoss-Osanger
- 6 Solvatación
 - 6.1 Clasificación de los disolventes, estructura del disolvente
 - 6.2 Hidratación de los iones
 - 6.3 Métodos para estudiar la hidratación iónica: Resonancia Magnética nuclear, Difracción de rayos X y de Neutrones, Espectroscopia Raman e infrarroja.
 - 6.4 Fluorescencia molecular.
Modelos teóricos para estudiar la hidratación iónica

BIBLIOGRAFIA

- ☐ Wright M.R. *Aqueous Electrolyte Solutions*. John Wiley and Sons: West Sussex, England 2007.
- ☐ Robinson, R.A.; Stokes R.H. *Electrolyte solution*. Dover: Mineola, New York. 2002.
- ☐ Bockris J.O'M.; Reddy, A.K.N. *Modern Electrochemistry 1. Ionics*. Plenum Press New York. 1998.
- ☐ Harris, D.C. *Quantitative Chemical Analysis*. W.H. Freeman and Company: New York. 2007.

PROGRAMA DE LA MATERIA:

TÓPICOS SELECTOS DE FISCOQUÍMICA

ETAPA FORMATIVA:

No. DE CREDITOS: 10

SEMESTRE RECOMENDADO:

PROGRAMAS ACADEMICOS:

Posgrado en Ciencias

HORAS A LA SEMANA: 5

TEORIA: 5

PRACTICA:

REQUISITOS:

OBJETIVO: Este curso da una introducción a los métodos numéricos básicos de la química computacional. El alumno va a aprender las técnicas básicas de la química computacional como: transformaciones numéricas, esquemas de cuadratura, problema de valores propios. A lo largo del curso, el alumno va a trabajar con ejemplos numéricos empleando programas como Garness, Gaussian98, Mathematica, y varios lenguajes de computación (fortran, C, perl) para implementar los métodos aprendidos en clase. El curso contiene una sesión de laboratorio cada semana. A parte de las tareas, cada alumno va a llevar a cabo un proyecto relacionado al temario del curso.

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:

TEMA:

- | | |
|---|--|
| 1 | Método Hartree-Fock |
| 2 | Introducción a las Funciones de Base |
| 3 | Evaluación de integrales moleculares - Relación de recursión |
| 4 | El esquema del método auto consistente |
| 5 | Análisis de la función de onda (si tiempo permite) |

TEMARIO

- 1 Método Hartree-Fock (2 semanas)
 - (a) Revisión de fundamentos de la mecánica cuántica
 - (b) Derivación de las ecuaciones de Hartree-Fock

2. **Introducción a las Funciones de Base (2 semanas)**
 - (a) Función de tipo Slater
 - (b) Función de tipo Gauss. Combinación lineal de las GTO
 - (c) Función de polarización
 - (d) Función de difusión.

3. **Evaluación de integrales moleculares - Relación de recursión (8 semanas)**
 - (a) El problema de polo. Transformación de Laplace y Fourier (2 semana)
 - (b) Esquema de Rhy-Dupuis-King. Cuadratura de Chebyshev. (2 semanas)
 - (c) Integral de traslape (1 semana)
 - (d) Integral de la energía cinética. La derivada de función de tipo Gauss. (1 semana)
 - (e) Integral de atracción nuclear-electrón. El polo. (1 semana)
 - (f) Integral de repulsión electrón-electrón. El cuello de botella (1 semana)

4. **El esquema del método auto consistente (2 semanas)**
 - (a) Ortogonalización de Loewdin
 - (b) El problema de valores propios: rotación de Jacobe

5. **Análisis de la función de onda (si tiempo permite)**
 - (a) Evaluación de la carga atómica de tipo Mulliken, Loewdin
 - (b) Evaluación del momento dipolar y el potencial electroestático

BIBLIOGRAFIA

- ❏ Extractos del libro: M. Hó y J-M. Hernández-Pérez, Basic Techniques of Computational Chemistry, en preparación.
- ❏ A. Szabo y N.S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry. Dover 1982
- ❏ T. Helgaker, P. Jorgensen, J. Olsen, Molecular Electronic Structure Theory, Wiley, 2000
- ❏ D. A. McQuarrie, Mathematical Methods for Scientists and Engineers, University Science Book, 2003
- ❏ J. B. Dence, Mathematical Techniques in Chemistry, Wiley, 1975
- ❏ J. P. Chesick, Subroutines for evaluation of integrals for student quantum chemistry calculations J. Chem. Ed. v46, p432, 1969.

PROGRAMA DE LA MATERIA:

TÓPICOS SELECTOS DE QUÍMICA
INORGÁNICA

ETAPA FORMATIVA: Disciplinaria
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:

PROGRAMAS ACADÉMICOS:
Posgrado en Ciencias

HORAS A LA SEMANA: 5
TEORÍA: 5
PRACTICA:
REQUISITOS:

OBJETIVO: El alumno conocerá las principales fuerzas de interacción que dominan la asociación de sistemas moleculares, será capaz de distinguir los aspectos más relevantes que son tomados en cuenta para entender como ocurren los procesos de asociación en el reconocimiento molecular.

CONTENIDO TEMÁTICO

NUMERO:	TEMA:
1	Conceptos
2	Receptores de cationes
3	Receptores de aniones
4	Ingeniería de Cristales
5	Formación de redes de sólidos
6	Auto ensamble
7	Maquinas Moleculares

TEMARIO

- 1 Conceptos
- 1.1 Definición y desarrollo de la química supramolecular
- 1.2 Clasificación de compuestos supramoleculares huésped-anfitrión
- 1.3 Receptores, coordinación y analogía con el principio llave-cerradura
- 1.4 Constantes de asociación
- 1.5 Efecto quelato y efecto cooperativo
- 1.6 Preorganización y complementariedad
- 1.7 Selectividad termodinámica y cinética
- 1.8 Naturaleza de las interacciones supramoleculares

- 1.8.1 Interacciones Ion-Ion
- 1.8.2 Interacciones Ion Dipolo
- 1.8.3 Interacciones Dipolo-Dipolo
- 1.8.4 Enlace de hidrógeno
- 1.8.5 Interacciones Cation-x
- 1.8.6 Interacciones Anión-z
- 1.8.7 Interacciones n-n
- 1.8.8 Fuerzas Van der Waals
- 1.9 Efectos de Solvatación e hidrofóbico

- 2. Receptores de cationes
 - 2.1 Introducción
 - 2.2 Eteres corona
 - 2.3 Eteres Lariat y podandos
 - 2.4 Criptandos
 - 2.5 Esferandos
 - 2.6 Selectividad
 - 2.7 Comportamiento en solución
 - 2.8 Efecto de homnado y alta dilución
 - 2.9 Ligantes suaves para iones metálicos suaves
 - 2.10 El catión más simple: protón
 - 2.11 Complejación de cationes orgánicos
 - 2.12 Calixarenes
 - 2.13 Sideroforos

- 3. Receptores de aniones
 - 3.1 Introducción
 - 3.2 Receptores Biológicos
 - 3.3 Conceptos en el diseño de receptores de aniones
 - 3.4 De receptores de cationes a receptores de aniones - un cambio simple de pH
 - 3.5 Receptores Neutros
 - 3.6 Receptores conteniendo metales inertes
 - 3.7 Receptores del par iónico
 - 3.8 Receptores para Zwitter-iones

- 4. Ingeniería de Cristales
 - 4.1 Conceptos
 - 4.2 Análisis de estructuras cristalinas
 - 4.3 Uso de la Base de datos del Cambrigde
 - 4.4 Polimorfismo
 - 4.5 Ca-cristales
 - 4.6 Predicción de la estructura cristalina
 - 4.7 Sintones con enlace de hidrógeno
 - 4.8 Anillos aromáticos
 - 4.9 Enlace con halógenos y otras interacciones

- 5. Formación de redes de sólidos

- 5.1 Que son las redes de sólidos (networks)
- 5.2 Zeolitas
- 5.3 Sólidos en capas e intercalación
- 5.4 Diferencia entre compuestos de inclusión y clatratos
- 5.5 Polímeros de coordinación

- 6 Auto ensamble
- 6.1 Introducción
- 6.2 Consideraciones cinéticas y termodinámicas
- 6.3 Auto ensamble de compuestos de coordinación
- 6.4 auto ensamble por puentes de hidrógeno
- 6.5 Catenanos y Rotaxanos
- 6.6 Hélicatos

- 7 Maquinas Moleculares
- 7.1 Máquinas electrónicas moleculares
- 7.2 Cables Moleculares
- 7.3 Rectificadores moleculares
- 7.4 interruptores
- 7.5 Análogos moleculares de máquinas mecánicas

BIBLIOGRAFIA

LIBROS

J. W. Steed, J. L. Atwood, *Supramolecular chemistry*, Ed. Wiley, 2009 J.M. Lehn, *Supramolecular Chemistry, Concepts and perspective* Ed. VCH, Germany, 1995 B. Dietrich, P. Yiot, J.-M. Lehn, *Macrocyclic Chemistry*, Ed. VCH, Germany 1993.

ARTÍCULOS EN REVISTAS

D.J. Cram *Angew. Chem. Int. Ed.* 27 (1988) 1021
C. A. Mirkin *Angew. Chem. Int. Ed.* 43 (2004) 2334-2376
J.M. Lehn *Angew. Chem. Int. Ed.* 27 (1998) 89
K. Susumu, K. Ryo, N. Shin-ichiro *Angew. Chem. Int. Ed.* 43 (2004) 2334

PROGRAMA DE LA MATERIA:
QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO

ETAPA FORMATIVA:
Nº. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA:
REQUISITOS:

PROGRAMAS ACADEMICOS:
Posgrado en Ciencias

1. Caracterización de la asignatura

Este curso consta de cinco temas fundamentales enfocados al empaque, la estructura, la energía y el enlace químico en el estado sólido. En los primeros temas se abordan principios que rigen la organización estructural de sólidos así como modelos que permiten un análisis y una clasificación básica de sólidos cristalinos. La segunda parte se dedica a la descripción de fuerzas de unión entre los componentes de un sólido y el origen de imperfecciones naturales y artificiales, y la última a la interpretación de diagramas de fases.

2. Intención Didáctica.

En nuestro mundo estamos rodeados de sólidos cuya composición y estructura determina sus propiedades y funcionalidades. El contenido de este programa intenta enfocar o relacionar al alumno con los conceptos relacionados con sólidos que poseen estructuras periódicas infinitas (cristalinas). Esto se pretende llevar a cabo por medio del uso de modelos que permiten visualizar como se lleva a cabo la organización de átomos y moléculas en el espacio tridimensional. Una vez comprendida esta parte se pretende transmitir el conocimiento sobre los factores estructurales y energéticos que rigen esta organización, como puede ser modificada y como puede ser analizada

3. Competencias a desarrollar.

Al final de esta asignatura el estudiante debe haber desarrollado la habilidad de entender cuáles son los factores estructurales y energéticos que contribuyen a la organización de redes cristalinas, así como las imperfecciones que pueden tener o introducirse con el fin de modificar sus propiedades, además de que debe ser competente en el análisis de sus propiedades en función de la temperatura, composición y presión.

4. Objetivos

Los estudiantes comprenderán los principios básicos que rigen a la organización y las interacciones de los compuestos químicos en el estado sólido.

5. Objetivos específicos

- a) Conocer los principios básicos que rigen la organización de átomos y moléculas en el espacio tridimensional.
 - b) Aprender modelos de descripción y análisis de estructuras de compuestos cristalinos.
 - c) Conocer los tipos de enlace químico y los factores que rigen la unión e organización entre los componentes de un sólido.
 - d) Aprender sobre defectos en redes cristalinas y su impacto en la generación de sólidos con aplicaciones en Ciencia de Materiales.
 - e) Interpretar y analizar diagramas de fases.
6. **Competencias Previas.** Enlace químico, origen y tipo de propiedades físicas de compuestos químicos, tendencias periódicas, simetría molecular, conceptos básicos de química de coordinación.

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:	TEMA:
1	Estructuras cristalinas
2	Tipos estructurales
3	Enlaces en el estado sólido
4	Defectos
5	Diagramas de Fase

TEMARIO

- 1 Estructuras cristalinas
 - 1.1 Celda unitaria e unidad asimétrica
 - 1.2 Sistemas cristalinas
 - 1.3 Simetría en estructuras cristalinas
 - 1.4 Redes de Bravais
2. Tipos estructurales
 - 2.1 Empaques densos cúbicos y hexagonales
 - 2.2 Modelos para la descripción de redes cristalinas
 - 2.3 Empaques no densos
- 3 Enlaces en el estado sólido
 - 3.1 Regla de las proporciones de radios iónicos
 - 3.2 Ciclo Born-Haber e energía de redes cristalinas
 - 3.3 Teoría de bandas
- 4 Defectos
 - 4.1 Tipos de defectos en sólidos
 - 4.2 Soluciones Sólidas
 - 4.3 Sistemas no estequiométricos

- 5 Diagramas de Fase
- 5.1 Regla de Gibbs
- 5.2 Sistemas de una componente
- 5.3 Sistemas de dos componentes

BIBLIOGRAFIA

- ☐ Ulrich Müller, Structural Inorganic Chemistry, Teubner-Verlag, 1991.
- ☐ R. West, Basic solid state chemistry, 2nd edition, Wiley, 1999

PROGRAMA DE LA MATERIA:
MECÁNICA CUÁNTICA AVANZADA.

CLAVE:

ETAPA FORMATIVA:
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORÍA: 5
PRACTICA: 0
REQUISITOS:

ASIGNATURA:
PROGRAMAS ACADÉMICOS:
Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: El estudiante deberá manejar con soltura los conceptos más importantes de la teoría cuántica y deberá ser capaz de resolver problemas avanzados de los tópicos fundamentales como son aquellos que aparecen en los puntos del temario. A pesar de hacerse énfasis en la teoría y en los sutiles conceptos físicos subyacentes a la teoría cuántica, deberá también conocer y mostrar maestría en las técnicas matemáticas requeridas en la formulación y solución de problemas de dichos temas. Dada la enorme extensión del temario obligatorio se han designado algunos tópicos no obligatorios, que podrán ser cubiertos por el profesor si el tiempo así lo permite

CONTENIDO TEMÁTICO

NUMERO:

TEMA:

- | | |
|---|-----------------------------------|
| 1 | Conceptos fundamentales |
| 2 | Teoría general de momento angular |
| 3 | Métodos de aproximación |
| 4 | Interacción radiación-materia |
| 5 | Tópicos optativos |

TEMARIO

- 1 Conceptos fundamentales (6 semanas)
 - 1.1 Formulación hamiltoniana de la mecánica.
 - 1.2 Formulación de la mecánica cuántica en un espacio de Hilbert.
 - 1.3 Principio de incertidumbre de Heisenberg.
 - 1.4 Teoría de representaciones: r-representaciones y p-representaciones.
 - 1.5 Operadores, matrices, transformaciones, valores esperados y probabilidades.
 - 1.6 Cambios de representación.
 - 1.7 Aplicaciones -
 - 1.8 Evolución temporal de un sistema cuántico: Esquemas de Schrodinger. De

- 1.9 Heisenberg y De Dirac (o de Interacción). Aplicaciones y ejemplos
- 1.10 Sistemas de partículas idénticas: Características de las funciones de onda y propiedades
- 1.11 Paridad. Construcción de soluciones para sistemas bosónicos y fermiónicos.

- 2. Teoría general de momento angular (2 semanas)
 - 2.1 Momentos angulares orbitales y no orbitales.
 - 2.2 Adición de dos momentos angulares arbitrarios. Coeficientes de Clebsch-Gordan
 - 2.3 Acoplamiento de dos espines. Acoplamiento L-S. Aplicaciones a sistemas atómicosAtomo de hidrógeno y soluciones hidrogenoides. (1 semana)

- 3 Métodos de aproximación. (2 semanas)

- 4 El teorema variacional. El método variacional lineal.
 - 4.1 Teoría de perturbaciones independientes del tiempo para sistemas no degenerados.
 - 4.2 Teoría de perturbaciones independientes del tiempo para sistemas degenerados.
 - 4.3 Particiones del Hamiltoniano. Aplicaciones a problemas específicos.

- 5 Tópicos optativos (3 semanas en total):
 - 5.1 Principio de mínima acción generalizada: Principios de Schwinger y Schwinger-Weiss
 - 5.2 Segunda cuantización: Operadores para el oscilador armónico. Aplicación a sistemas fermiónicos y teoría de perturbaciones.
 - 5.3 Sistemas polielectrónicos: átomos, moléculas, fases condensadas. Modelo de partículas independientes: Hartree y Hartree-Fock El átomo de helio y estados excitados. Átomos con muchos electrones. La correlación electrónica. Aplicación de métodos de aproximación: Variacionales y perturbativos.
 - 5.4 Teoría de dispersión. Sección diferencial e intensidad de haz. Aproximación de Born. Teoría de ondas parciales. Relaciones de dispersión. Dispersión por un potencial. El Teorema óptico.
 - 5.5 Mecánica cuántica relativista: Ecuación de Klein-Gordon Ecuación de Dirac. Efectos relativistas en átomos y moléculas.
 - 5.6 Teoría de Perturbaciones de Muchos Cuerpos (MBPT): Aplicaciones a sistemas moleculares o de estado sólido.

BIBLIOGRAFIA

- 1) Cohen-Tannoudi, Diu, Laloe, Quantum Mechanics, John Wiley, New York. 1977
- 2) Davdov, A. Quantum Mechanics, Neo Press, Ann Arbor Mich. 1966
- 3) Schiff. Quantum Mechanics, Mc.Graw-Hill, New York. 1955

- ☐ Sakurai, J.J. Advanced Quantum Mechanics. Addison-Wessley, New York, 1967
- ☐ Bohm, David. Quantum Theory, Dover inc., New York, 1989
- ☐ Bohm, Arno. Quantum Mechanics, Foundations anda Applications. Springer-Verlag, Berlin, 1993

PROGRAMA DE LA MATERIA:
FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO.

CLAVE:

ETAPA FORMATIVA:
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA: 0
REQUISITOS:

ASIGNATURA:
PROGRAMAS ACADEMICOS:
Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: El estudiante debe comprender los fundamentos de la física del estado sólido, así como desenvolverse en las distintas áreas que componen esta disciplina. Debe ser capaz de explicar los distintos tipos de problemas que se enfrentan en esta área.

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:	TEMA:
1	Electrones en potenciales periódicos unidimensionales
2	Descripción geométrica de los cristales. Red directa y red recíproca
3	La teoría de los electrones libres en un metal
4	Más allá de la aproximación mono-electrónica
5	Teoría de bandas en los cristales
6	Dinámica de la red cristalina
7	Propiedades ópticas y transporte en metales
8	Semiconductores
9	Ordenamiento magnético en los cristales
10	Superconductividad

TEMARIO

- 1 Electrones en potenciales periódicos unidimensionales (1 Semana).
 - 1.1 El teorema de Bloch para la periodicidad en 1D
 - 1.2 Niveles de energía en un arreglo periódico de pozos cuánticos.
 - 1.3 Tunelamiento electrónico y bandas de energía.
 - 1.4 Reflexión y transmisión de electrones a través de un potencial arbitrario.
 - 1.5 Tunelamiento electrónico a través de un potencial periódico
 - 1.6 La aproximación de enlace fuerte. Desarrollo en estados localizados.
 - 1.7 Método de ondas planas y aproximación del electrón casi libre. Desarrollo en ondas planas
2. Descripción geométrica de los cristales. Red directa y red recíproca (1 Semana).
 - 2.1
 - 2.2 Redes simples y redes compuestas.

- 2.3 Periodicidad y redes de Bravais.
 - 2.4 Estructuras cristalinas simples y compuestas.
 - 2.5 Descripción geométrica de algunas estructuras cristalinas simples.
 - 2.6 Celdas primitivas de Wigner-Seitz.
 - 2.7 Redes recíprocas
 - 2.8 Definiciones y propiedades básicas.
 - 2.9 Planos y direcciones de las redes de Bravais.
 - 2.10 Zonas de Brillouin
Simetría traslacional. Aspectos mecano-cuánticos.
- 3 La teoría de los electrones libres en un metal (1 Semana).**
- 3.1 Teoría cuántica del gas de electrones libres.
 - 3.2 Distribución de Fermi-Dirac y potencial químico.
 - 3.3 Funciones termodinámicas y calor específico de los electrones en el metal
- 4 Mas allá de la aproximación mono-electrónica (1 Semana).**
- 4.1 Introducción al formalismo de la segunda cuantificación para fermiones idénticos.
 - 4.2 Ecuaciones de Hartree.
 - 4.3 Partículas idénticas y funciones de onda determinantes.
 - 4.4 Elementos de matriz entre estados determinantes.
 - 4.5 Las ecuaciones de Hartree-Fock.
 - 4.6 Algunos métodos mas allá de la aproximación de un solo electrón.
 - 4.7 Propiedades electrónicas y diagrama de fases del gas electrónico homogéneo.
 - 4.8 La teoría del funcional densidad y las ecuaciones de Kohn-Sham.
- 5 Teoría de bandas en los cristales (2 Semanas).**
- 5.1 El método de enlace fuerte (Combinación lineal de orbitales atómicos).
 - 5.2 El método de onda planas ortogonalizadas.
 - 5.3 El método de los pseudo potenciales.
 - 5.4 El método de ondas planas aumentadas.
 - 5.5 El método de las funciones de Green (método de Kórringa-Kohn-Rostoker).
 - 5.6 Otros métodos en el cálculo de la estructura electrónica.
 - 5.7 Estructuras de bandas y energía de cohesión en sólidos de gases nobles.
 - 5.8 Propiedades electrónicas de cristales iónicos.
 - 5.9 Cristales covalentes. Cristales con estructura de diamante.
 - 5.10 Estructura de bandas y superficies de Fermi en metales.
- 6 Dinámica de la red cristalina (2 Semanas).**
- 6.1 Dinámica de redes cristalinas unidimensionales monoatómicas.
 - 6.2 Dinámica de redes cristalinas unidimensionales diatómicas.
 - 6.3 Dinámica de los cristales en tres dimensiones.
 - 6.4 Teoría cuántica del cristal armónico.
 - 6.5 Capacidad calorífica de la red. Modelos de Einstein y Debye.
 - 6.6 Efectos de anarmonicidad y fusión de los sólidos.
 - 6.7 Fonones ópticos en cristales polares.
- 7 Propiedades ópticas y transporte en metales (2 Semanas)**



- 7.1 Teoría microscópica de las constantes ópticas en materiales homogéneos.
- 7.2 Teoría de Drude de las propiedades ópticas de portadores libres.
- 7.3 Propiedades de transporte y ecuación de Boltzmann.
- 7.4 Conductividad estática y conductividad dinámica en los metales.
- 7.5 Conductividad estática con la ecuación de Boltzmann.
- 7.6 Dependencia de la conductividad con la frecuencia y el vector de onda.
- 7.7 La ecuación de Boltzmann con campos eléctricos y gradientes de temperatura
Fenómenos termoelectrónicos
- 8 Semiconductores (2 Semanas)**
- 8.1 Nivel de Fermi y densidad de portadores en semiconductores intrínsecos.
- 8.2 Niveles de impurezas en semiconductores.
- 8.3 Nivel de Fermi y densidad de portadores en semiconductores dopados.
- 8.4 Emisión termiónica en semiconductores.
- 8.5 Distribuciones de portadores en no equilibrio. Corrientes de difusión y de arrastre.
- 8.6 Generación y recombinación de pares electrón-hueco.
- 8.7 Expresión cuántica de la función dieléctrica transversal en semiconductores.
- 8.8 Constantes ópticas de medios homogéneos dentro de la teoría de la respuesta lineal.
- 8.9
- 8.10 Constantes ópticas y la función de Green del sistema electrónico.
- 8.11 teoría cuántica de las transiciones ópticas y puntos críticos.
- 8.12 Transiciones indirectas asistidas por fonones.
- 8.13 Absorción bifotónica.
- 8.14 Efectos excitónicos sobre las propiedades ópticas.
- 8.15 Propiedades de la unión pn en equilibrio.
- 8.16 Características corriente-voltaje de la unión pn.
- 8.17 El transistor de unión bipolar. El transistor de unión de efecto de campo (JFET). Heterojunturas semiconductoras.
- 9 Ordenamiento magnético en los cristales (2 Semanas)**
- 9.1 Ferromagnetismo y el campo molecular de Weiss.
- 9.2 Origen microscópico del acoplamiento entre momentos magnéticos localizados.
- 9.3 Antiferromagnetismo en la aproximación del campo medio.
- 9.4 Ondas de spin y magnones en cristales ferromagnéticos.
- 9.5 El modelo de Ising.
- 10 Superconductividad (2 Semanas).**
- 10.1 Aspectos fenomenológicos de los superconductores.
- 10.2 La idea del par de Cooper.
- 10.3 La teoría Bardeen-Cooper-Schrieffer a temperatura cero.
- 10.4 Estados excitados de los superconductores a $T=0$. Teoría de Bogoliubov.
- 10.5 Tratamiento de los superconductores a temperatura finita. Capacidad calorífica.
- 10.6 Diamagnetismo de los superconductores. Efecto Meissner. Modelo fenomenológico de London y
- 10.7
- 10.8 Teoría de Pippard.
- 10.9 Fenómenos cuánticos microscópicos. Teoría de Ginzburg-Landau. Cuantificación del flujo magnético. Superconductores tipo I y tipo II.
- 10.10 Efecto Josephson



BIBLIOGRAFIA

- ☐ N. Ashcroft, D. Mermin "Solid State Physics".
- ☐ A. Davydov "Teoría del Sólido".
- ☐ G. Grosso, G. Pastori-Parravicini "Solid State Physics".

PROGRAMA DE LA MATERIA:
MECÁNICA ESTADÍSTICA

CLAVE:

ETAPA FORMATIVA: Disciplinaria.
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA: 0
REQUISITOS:

ASIGNATURA:
PROGRAMAS ACADÉMICOS:
Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: El estudiante deberá conocer con soltura los conceptos fundamentales de la mecánica Estadística, tanto la clásica como la cuántica. Deberá conocer la forma en como se aplica estos conceptos en la soluciones de problemas concretos.

CONTENIDO TEMÁTICO

NUMERO:	TEMA:
1	MECANICA ESTADISTICA CLASICA
2	MECANICA ESTADISTICA CUANTICA
3	SISTEMAS IDEALES
4	TEORIAS DE CAMPO MEDIO
5	OPTATIVO

TEMARIO





- 1 MECANICA ESTADISTICA CLASICA
 - 1.1 El Problema general y representación en el espacio fase. Teoría ergódica
 - 1.1.1 Postulados sobre promedios y funciones de distribución
 - 1.1.2 Conjuntos microcanónico y canónico
 - 1.1.3 Otros conjuntos.
- 2 MECANICA ESTADISTICA CUANTICA
 - 2.1 Conjuntos y promedios en mecánica cuántica y estadística cuántica
 - 2.2 Postulados sobre promedios y la matriz de densidad
 - 2.3 Límite clásico
 - 2.4 Termodinámica y mecánica estadística
 - 2.5 Fluctuaciones
 - 2.6 Fluctuaciones en las cantidades termodinámicas
 - 2.7 Equivalencia entre conjuntos
 - 2.8 Correlaciones
- 3 SISTEMAS IDEALES

- 3.1 Gases poliatómicos
 - 3.1.1 Rotaciones
 - 3.1.2 Vibraciones
- 3.2 Estadísticas de Fermi-Dirac, Bose Einstein y Maxwell Boltzmann
- 3.3 Gases cuánticos degenerados
 - 3.3.1 Fermiones
 - 3.3.2 Bosones
- 3.4 Condensación de Bose
- 3.5 Radiación de cuerpo negro

- 4 TEORIAS DE CAMPO MEDIO
 - 4.1 Sistemas de fluidos
 - 4.2 Sistemas magnéticos
 - 4.3 Medios elásticos.

- 5 OPTATIVO
 - 5.1 Desarrollo Del virial
 - 5.1.1 Coeficientes del virial en el límite clásico
 - 5.1.2 2°. Coeficiente del virial
 - 5.1.3 Expresión general en cúmulos
 - 5.1.4 Esferas duras
 - 5.2 Transiciones de fase
 - 5.2.1 Termodinámica. Exponentes críticos
 - 5.2.2 Teorías de campo medio de Van der Wals
 - 5.3 Sustancias ferromagnéticas. Modelo de Ising 1D y 2D.

BIBLIOGRAFIA

-  Huang, Statistical Mechanics
-  Mc Quarrie, Statistical Mechanics
-  Kubo, Statistical Mechanics
-  Landau y Lifschitz, Statistical Mechanics

PROGRAMA DE LA MATERIA:
MÉTODOS NUMÉRICOS

CLAVE:

ETAPA FORMATIVA:
No. DE CREDITOS: 10
SEMESTRE RECOMENDADO:
HORAS A LA SEMANA: 5
TEORIA: 5
PRACTICA: 0
REQUISITOS:

ASIGNATURA:
PROGRAMAS ACADEMICOS:
Posgrado en Ciencias

OBJETIVO: Al finalizar el curso el estudiante estará familiarizado con las técnicas estándar para resolver numéricamente problemas de cálculos con matrices y de optimización. El curso está dividido en dos contenidos temáticos principales: 1) Álgebra Lineal Numérica, y 2) Optimización, conteniendo respectivamente los seis primeros y los dos últimos items de la lista de unidades temáticas. Se suponen conocimientos suficientes de Álgebra Lineal.

CONTENIDO TEMATICO

NUMERO:

TEMA:

- | | |
|---|--|
| 1 | Análisis de Matrices |
| 2 | |
| 3 | Sistemas de Ecuaciones Lineales Generales |
| 4 | Sistemas de Ecuaciones Lineales Especiales |
| 5 | |
| 6 | Ortogonalización y Mínimos Cuadrados |
| 7 | Problemas de Valores Propios |
| 8 | Métodos Iterativos |
| | Optimización Lineal |
| | Optimización no Lineal |

TEMARIO

- | | |
|-----|---|
| 1 | Análisis de Matrices (1 semana) |
| 1.1 | Ideas básicas del álgebra lineal |
| 1.2 | Aritmética de precisión finita |
| 1.3 | Condicionamiento del problema de mínimos cuadrados |
| 1.4 | Descomposición en Valores Singulares |
| 2 | Sistemas de Ecuaciones Lineales Generales (1 semana) |
| 2.1 | Eliminación Gaussiana |
| 2.2 | Pivoteo |

- 3 **Sistemas de Ecuaciones Lineales Especiales (2 semanas)**
 - 3.1 Matrices definidas positivas
 - 3.2 Matrices de bandas
 - 3.3 Matrices de Vandermonde
 - 3.4 Matrices de Toeplitz

- 4 **Ortogonalización y Mínimos Cuadrados (2 semanas)**
 - 4.1 Factorización QR
 - 4.2 Problema de mínimos cuadrados de rango completo
 - 4.3 Problema de mínimos cuadrados de rango deficiente


- 5 **Problemas de Valores Propios (2 semanas)**
 - 5.1 Panorama de algoritmos para problemas de eigenvalores
 - 5.2 Forma de Hessenberg
 - 5.3 Iteración del cociente de Rayleigh
 - 5.4 Cálculo de la descomposición en valores singulares

- 6 **Métodos Iterativos (3 semanas)**
 - 6.1 Panorama de métodos iterativos
 - 6.2 Método de Jacobi
 - 6.3 Iteración de Arnoldi
 - 6.4 Iteración de Lanczos y el método de Davidson
 - 6.5 Gradiente conjugado
 - 6.6 Precondicionamiento

- 7 **Optimización Lineal (2 semanas)**
 - 7.1 Método Simplex
 - 7.2 Dualidad
 - 7.3 Problema de transporte y otros problemas de optimización

- 8 **Optimización no Lineal (3 semanas)**
 - 8.1 Métodos con gradiente: Descenso más pronunciado. Gradientes Conjugados,
 - 8.2 Newton-Raphson, Métrica Variable (Fletcher-Powell, BFGS, etc)
 - 8.3 Optimización sin restricciones
 - 8.4 Sistemas no lineales sobredeterminados
 - 8.5 Optimización con restricciones

BIBLIOGRAFIA

-  Numerical Linear Algebra. L. Trefethen, D Bau III. SIAM. ISBN 0-89871-361-7

-  Matrix Computations, G Golub, C. F. van Loan. John Hopkins, University Press. ISBN 0-8018-5414-8

-  Numerical Methods. G. Dahlquist, A Björck. Prentice Hall. ISBN 0-13-627315-7



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

MAESTRÍA EN CIENCIAS



- ☐ "Numerical Recipes – The Art of Scientific Computing", Cambridge University Press, Second Edition, 1999
- ☐ Numerical Linear Algebra and Applications. Biswa Nath Datta. Pacific Grove: Brooks/Cole Pub. ISBN: 0634174663. 1995
- ☐ Applied Numerical Linear Algebra. J. W. Demmel. SIAM. ISBN 0898713897. 1997
- ☐ Global Optimization: Deterministic Approaches. Horst, R. and H. Tuy. 3rd ed., Springer Verlag, Heidelberg, 1996.
- ☐ Convex Optimization. Stephen Boyd, Lieven Vandenberghe. Cambridge University Press. ISBN 0521833787. 2004

U.A.E.M.



SECRETARIA
GENERAL

Página 241 de 359