



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Métodos para determinar mecanismos de reacción						
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química		No. Créditos: 6		
Carácter: Optativa de elección			Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre	
Tipo: Teórico			Teoría:	Práctica:	3	48
			3			
Modalidad: CURSO			Duración del programa: 16 semanas			

Actividad académica con seriación antecedente:
Objetivo general: Al concluir el curso el alumno será capaz de diseñar experimentos que le permitan obtener información para establecer un mecanismo de reacción razonable.
Objetivos específicos:

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Definición de mecanismo de reacción.		
2	Leguaje y simbolismo empleado en la descripción de un mecanismo de reacción. Proposición de un mecanismo de reacción con base en la estructura de reactivos y productos.		
3	Métodos no cinéticos para determinar mecanismos de reacción. 1. Marcaje Isotópico. 2. Estereoquímica y mecanismos de reacción. 3. Captura de intermediarios. 4. Experimentos cruzados. 5. Detección de intermediarios. 6. Aplicación de métodos computacionales para establecer mecanismos de reacción.		
4	Métodos cinéticos para determinar mecanismos de reacción. 1. Orden de reacción y molecularidad. 2. Parámetros de activación. 3. Teoría del estado de transición. 4. Efecto isotópico. 5. Relaciones de energía libre.		
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:		0	
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada: . Anslyn, E.V.; Dougherty, D.A. Modern Physical Organic Chemistry. University Science Book. USA. 2006. ISBN-13: 978-1891389313. Kumat R. P., Reaction Mechanisms in Organic Synthesis. Wiley. Ney York. 2008. ISBN: 978-1-4051-5072-9 Cuevas G. Problemas de Química Heterocíclica. Centro de Investigación y de Estudios Avanzados. I.P.N. México, D.F., 1993. ISBN: 970-91367-0-4. Lowery T.N.; Richardson, K.S. Mechanism and Theory in Organic Chemistry, Second Edition. Harper & Row. New York. 1981. Cuevas, G.; Cortes, F., Introducción a la Química Computacional. Fondo de Cultura Económica. . México, D.F. 2003. ISBN: 968-16-7105-8. Carpenter, B.K. Determination of Organic Reaction Mechanisms. Wiley and Sons, Inc. New York. 1981.
Bibliografía complementaria: Juaristi, E.; Cuevas, G. <i>The Anomeric Effect</i> . CRC press. Boca Ratón Fl. 1994. ISBN: 0-8493-8941-0-5.

José Enrique Barquera-Lozada, Gabriel Cuevas. Computational simulation of terminal biogénesis of sesquiterpenes: the case of 8-epiconferitin. In Quantum Biochemistry. Estructure and Biological Activity. Matta Cherif (Ed.) Wiley-VCH. New York. **2009**. Pp. 623-650. ISBN: 978-3-527-32322-7

León, F.; Tamariz, J.; Cuevas, G. Química Orgánica., en Cosmos, enciclopedia de las ciencias y la tecnología en México. Antonio Campero (Ed.) Química. Universidad Autónoma Metropolitana – Conacyt. ISBN: 978607477147. **2010**.

http://www.izt.uam.mx/cosmosecm/QUIMICA_ORGANICA.html

Ramírez-Gualito, K.; López-Mora, N.; Jiménez-Vázquez, H.; Tamariz, J.; Cuevas, G. The Role of Supramolecular Intermediates in the Potential Energy Surface of the Diels-Alder Reaction. *J. Mex. Chem. Soc.* **2013**, 57(4), 267-282.

Ramírez-Gualito, K.; Alonso-Rios, R.; Quiroz-García, B.; Rojas-Aguilar, A.; Diaz, D.; Jiménez-Barbero, J.; Cuevas, G. The Entalpic Nature of the CH/ π Interaction Involved in the Recognition of Carbohydrates by Aromatic Compounds is confirmed by a Novel Interplay of NMR, Calorimetry and Theoretical Calculations. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 18129-18138.

Juaristi, E.; Cuevas, G. Manifestation of Stereoelectronic Interactions in $^1J_{C-H}$ One Bond Coupling Constants. *Acc. Chem Res.* **2007**, 40, 961-970

Fernández-Alonso, M. C.; Cañada, J.; Jiménez-Barbero, J.; Cuevas, G. Molecular Recognition of Saccharides by Proteins. Insights on the Origin of the Carbohydrate-Aromatic Interactions. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, 127, 7379-7386.

Fernández-Alonso, M. C.; Cañada, J.; Jiménez-Barbero, J.; Cuevas, G. G2 and DFT Rigorous Description of the Inversion and Topomerization Processes of Substituted Cyclohexanes: The Case of Methylcyclohexane, Oxane and Thiane and the Relevance of Three-dimensional Representation of the Energy Surface in Conformational Analysis. *Chem. Phys. Chem.* **2005**, 6, 671-681.

Cuevas, G.; Martínez-Mayorga, K.; Fernández-Alonso, M. C.; Perrin C.L.; Jiménez-Barbero, J.; Juaristi, E.; López-Mora, N. One Bond C-H Coupling Constants in OCH Fragments Are Not Due to Primarily to $n_O \rightarrow \sigma^*_{C-H}$ Delocalization. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, 44, 2630-2633.

Martínez-Mayorga, K.; Juaristi, E.; Cuevas, G. Manifestation of Stereoelectronic Effects on the Calculated Carbon-Hydrogen Bond Lengths and One Bond $^1J_{C-H}$ NMR Coupling Constants. Relative Acceptor Ability of the Carbonyl (C=O), Thiocarbonyl (C=S), and Methylenedene (C=CH₂) Groups Towards C-H Donor Bonds. *J. Org. Chem.* **2004**, 69 7266-7276.

Cuevas, G.; Juaristi, E. Manifestation of Stereoelectronic Effects on the Calculated Carbon-Hydrogen Bond Lengths and One Bond $^1J_{C-H}$ NMR Coupling Constants in Cyclohexane, Six- Membered Heterocycles, and Cyclohexanone Derivatives. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 13088-13096.

Sugerencias didácticas:

Exposición oral	(X)
Exposición audiovisual	(X)
Ejercicios dentro de clase	(X)
Ejercicios fuera del aula	(X)
Seminarios	(X)
Lecturas obligatorias	(X)
Trabajo de investigación	(X)
Prácticas de taller o laboratorio	()
Prácticas de campo	()
Otras: _____	()

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

Exámenes parciales	()
Examen final escrito	()
Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Exposición de seminarios por los alumnos	(X)
Participación en clase	(X)
Asistencia	()
Seminario	(X)
Otras:	()