



Ficha técnica de materias optativas

Nombre del curso: ESTRUCTURA MOLECULAR Y RETICULAR
Docente: CÉSAR SHIMIZU DURÁN
Días y horarios: Viernes 10 a 14 horas
Cupo máximo: 16 estudiantes
Criterios de inscripción (si aplica): Conocimientos básicos de química
Conceptos básicos: Simetría, estructura, quiralidad, celda unitaria, estereoquímica, cristalografía, cristalografía.
Justificación: Las propiedades y aplicaciones de la materia están directamente relacionadas con los elementos que la constituyen y por ende con su estructura, ya sea cristalina o molecular. El entendimiento y descripción de las estructuras moleculares y reticulares de las sustancias químicas es fundamental para la caracterización analítica, así como para el desarrollo y aplicación de nuevos materiales. Para alcanzar lo anterior es necesario estudiar las bases fundamentales de la estereoquímica, la cristalografía y la simetría.
Objetivo general: Que el alumno sea capaz de visualizar la disposición de los átomos que comprenden los compuestos moleculares y reticulares en el espacio tridimensional y deduzca las consecuencias de tal disposición, para sentar las bases de la correcta interpretación de las propiedades y reactividad de tales sustancias.
Objetivos específicos: Que el alumno aprenda a utilizar diferentes softwares para representar y estudiar estructuras cristalinas y moleculares
Método de trabajo: Exposición oral por parte del profesor, Análisis y Discusión sobre material bibliográfico, Diseño y representación de estructuras con programas computacionales.
Criterios de evaluación: Cumplir con un 80% de asistencia, puntualidad, participación en clase, tareas individuales y por equipo, examen
Temario: 1. CRISTALOGRAFÍA INTRODUCCIÓN - Cristales - Hábito cristalino - Ordenamiento de largo alcance - Propiedades de los cristales - Sólidos cristalinos - Sistema coordinado 2. SISTEMAS CRISTALINOS - Redes, tipos de redes - Celda unitaria - Sistema cristalino



Ficha técnica de materias optativas

- Redes de Bravais
- Índices de Miller
- 3. SIMETRÍA
 - Elementos de simetría
 - Operaciones de simetría
 - Notación de simetría
 - Clases de simetría
- 4. GRUPOS PUNTUALES
 - Elementos de simetría sin traslación
 - Las treinta y dos clases cristalinas
- 5. GRUPOS ESPACIALES
 - Elementos de simetría con traslación
 - Los doscientos treinta grupos espaciales
- 6. INTRODUCCIÓN
 - Poder rotatorio y exceso enantiomérico
 - Estructura molecular e isomería
 - Fórmulas estereoquímicas
 - Centro estereogénico. Centro quiral y notación configuracional
 - Modelos moleculares
 - Nomenclatura
- 7. QUIRALIDAD
 - Representación de estructuras tridimensionales
 - Isomería óptica
 - Elementos de simetría
 - Proyecciones de Fischer
 - Configuración absoluta
 - Racematos
 - Detección de la quiralidad
 - Moléculas con más de un carbono asimétrico
 - Asimetría de átomos diferentes al carbono
- 8. ESTRUCTURA MOLECULAR Y SIMETRÍA
 - Elementos de simetría y operaciones de simetría
 - Grupos de simetría
 - Propiedades que dependen de la simetría
 - Deformaciones moleculares y variación de la energía
- 9. ESTEREOISÓMEROS
 - Niveles de estereoisomería y límites de observación
 - Relaciones de enantiomería
 - Propiedades y aplicaciones
 - Quiralidad en ausencia de estereocentros
 - Estereoisomería debida a la presencia de varios elementos estereogénicos
 - Sistemas de designación de la configuración relativa de diastereoisómeros

Bibliografía:

- C. Hurlbut, C. Klein. Manual de Mineralogía: Basado en la Obra de J. D. DANA. Vol. I (1996). Editorial Reverté. México.
- C. Pico. Cristalografía de Materiales. Editorial Síntesis. (2007). Editorial Síntesis. España.
- M.L. Quiroga. Estereoquímica. (2007). Editorial Síntesis. España.
- D. WHITTAKER. Estereoquímica y mecanismos. (1977). Editorial al Manual Moderno. Serie Oxford de Química. (México)