



## TEORÍA DE LA INTERACCIÓN ORBITAL

Este curso está enfocado al estudio de la Teoría de la Conservación de la Simetría Orbital en Reacciones Orgánicas. Inicialmente se presenta una breve introducción a la Mecánica Cuántica y las diferentes Teorías del Enlace Químico. A continuación se analiza el Método de Hückel y su uso para el Análisis de la Energía y Coeficientes de Participación Orbital de Sistemas  $\pi$ -Electrónicos. Finalmente se presenta el Análisis de la Simetría Orbital en Reacciones Pericíclicas útiles en Síntesis Orgánica; analizando como puntos principales, las Reglas de Woodward y Hoffmann, la Tropicidad, y la Regio y Estereoquímica de las Reacciones.

### Contenido

- Descripción Mecánico-Cuántica de los Orbitales
  - a. Historia
  - b. El átomo de Bohr
  - c. El modelo mecánico-cuántico
  - d. Los orbitales hidrogenoides
- Formación de Enlaces a partir de Orbitales Atómicos
  - a. Teoría de Enlace-Valencia
  - b. Orbitales Híbridos
  - c. Teoría de los Orbitales Moleculares
- El Método de Hückel
  - a. Combinación lineal de orbitales atómicos (CLOA)
  - b. Determinante secular
  - c. Determinación de la energía de deslocalización
  - d. Método nemotécnico
  - e. Cálculo de los coeficientes atómicos en el orbital molecular
- Teoría de la Conservación de la Simetría Orbital aplicada a las siguientes Reacciones Pericíclicas:
  - a. Cicloadición
  - b. 1,3-Dipolares
  - c. Quelotrópicas



Cinvestav

- d. Electrocíclicas
- e. Sigmatrópicas

### **Bibliografía**

- Introduction to quantum mechanics in chemistry. Mark A. Ratner, George C. Schatz. Upper Saddle River, NJ : Prentice Hall, 2001.
- Conceptos básicos de la teoría orbital. Eusebio Juaristi y Cosío. México, CINEVESTAV, 1988.
- Frontier orbitals : a practical manual. Nguyễn Trong Anh. Chichester, England ; Hoboken, NJ : John Wiley and Sons Ltd, 2007.
- Pericyclic reactions - a textbook : reactions, applications and theory. S. Sankararaman. Weinheim : Wiley-VCH, 2005.