



Vamos a comenzar en breve, a las 1 CDT / 2 EDT

El Carbono No es Como lo Pintan



La química del carbono es exquisita, basta combinarse con media docena de otros elementos para dar lugar a cadenas, anillos y poliedros, los cuales constituyen parte de lo que percibimos. Hoy es posible hallar en la literatura sistemas que poseen átomos pentacoordinados, hexacoordinados e incluso heptacoordinados de carbono. Es más, también se han capturado sistemas que poseen átomos de carbono tetracoordinados pero planos. Así, el objetivo de esta charla es mostrar que la Química de carbono va más allá de tetraedros. Lo anterior va de la mano con el desarrollo de nuevos modelos para entender la naturaleza del enlace de estas moléculas "exóticas".



Gabriel Merino
Centro de
Investigación y de
Estudios Avanzados
Unidad Mérida



Lena Ruiz Azuara
Universidad Nacional
Autónoma de México

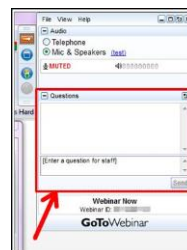
El Octavo Webinar en Español auspiciado por el ACS y la SQM

<http://bit.ly/ACS-SQMcarbono>

1



¿Tiene preguntas para el ponente?



“¿Por qué he sido “silenciado”?”

No se preocupe. Todo el mundo ha sido silenciado, excepto el ponente y la moderadora. Gracias, y disfruten de la presentación.

Escriba y someta sus preguntas durante la presentación

2



SOCIIDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química más allá"



ACS
Chemistry for Life®

¿Está en un grupo hoy viendo el webinar en vivo?



Díganos de dónde son ustedes y cuántas personas están en su grupo!

3



SOCIIDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química más allá"



ACS
Chemistry for Life®

La Diversidad de la Audiencia



Hoy tenemos representantes de 19 países

4



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



ACS
Chemistry for Life®

¡C&EN en Español!

C&EN pone a su disposición traducciones al español de sus artículos más populares.

May 15, 2017

Retirado un artículo sobre microplásticos en el pescado

El comité ético dice que es un caso de "falsedad científica", pero los autores no están de acuerdo.

Paper on microplastics in fish is retracted

Ethics board says case is one of "scientific dishonesty," but authors disagree.



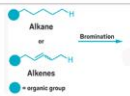
May 8, 2017

Un catalizador de níquel funciona como "engranaje" para producir ácidos grasos

La reacción catalítica añade dióxido de carbono a determinados enlaces C-H en alcanos y alquenos.

Nickel catalyst "chain walks" to produce fatty acids

Catalytic reaction adds carbon dioxide to selected C-H bonds in alkane and alkene derivatives.



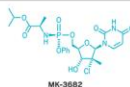
May 4, 2017

Transformando el fósforo en un centro quiral

Un catalizador sintetiza fosfatos y fosforamidatos con una gran estereoselectividad y rendimiento.

Whipping phosphorus into chiral shape

Catalyst synthesizes phosphates and phosphoramidates with high stereoselectivity and yield.



April 24, 2017

Un mejor futuro para la química en Cuba

Los investigadores son optimistas: mejorar las relaciones con EE.UU. producirá colaboraciones más eficaces.

Improving prospects for chemists in Cuba

Researchers are optimistic that improving relations with the U.S. will lead to stronger collaborations.



Gracias a una colaboración con la organización española Divúlgame.org, C&EN ahora es capaz de ofrecer traducciones al español de algunos de nuestros mejores contenidos. Queremos hacer de la ciencia de vanguardia más accesible a la comunidad química de habla española, y esta es nuestra contribución. Le da a los nacidos en España, América Latina, o los EE.UU., pero cuyo primer idioma es el español la oportunidad de leer este contenido en su lengua materna. Esperamos que les guste y sea de su utilidad.



Dr. Bibiana Campos Seijo
Editor-in-Chief of C&EN

<http://bit.ly/CENespanol>

5

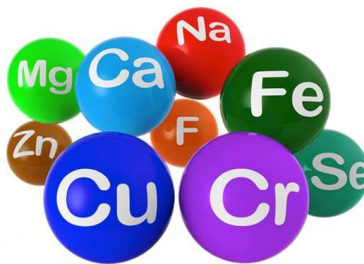


SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



ACS
Chemistry for Life®

¿Has descubierto el elemento que falta ?



<http://bit.ly/benefitsACS>

Entérate de los beneficios de ser miembro(a) de ACS !

6



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Beneficios de la afiliación al ACS



Chemical & Engineering News (C&EN)

The preeminent weekly news source



NEW! Free Access to ACS Presentations on Demand®

ACS Member only access to over 1,000 presentation recordings from recent ACS meetings and select events



NEW! ACS Career Navigator

Your source for leadership development, professional education, career services, and much more

<http://bit.ly/benefitsACS>

7



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Sociedad Química de México



Sociedad Química de México, A.C.
"La química nos une"

Desde sus comienzos de la Sociedad Química de México, se buscaba un emblema sencillo, no demostrar partidismo alguno y significar al gremio, debería representar un símbolo no sólo para los químicos, sino también para ingenieros, farmacéuticos, metalurgistas, en fin que englobe e identifique por igual a los científicos en todas sus áreas de la ciencia química.

www.sqm.org.mx

8



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química más allá"



ACS
Chemistry for Life®

Sugieran temas y expertos que les interesarían para los próximos webinars. acswebinars@acs.org



<http://bit.ly/ACS-SQMwebinars>

9



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química más allá"

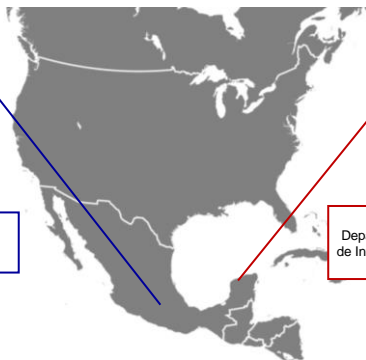


ACS
Chemistry for Life®

"El Carbono No es Como lo Pintan"



Dra. Lena Ruiz Azuara
Universidad Nacional
Autónoma de México



Dr. Gabriel Merino
Departamento de Física Aplicada, Centro
de Investigación y de Estudios Avanzados,
Unidad Mérida

Las imágenes de la presentación están disponibles para descargar ahora

<http://bit.ly/ACS-SQMcarbono>

El Webinar de hoy esta auspiciado por la Sociedad Química de México y the American Chemical Society

10



Cinvestav

Semblanza Dr. Gabriel Merino

Graduado del Colegio de Bachilleres en Puebla en 1993, cursó la licenciatura en Química en la Universidad de las Américas entre 1993 y 1997 becado por la Fundación Jenkins. Concluyó sus estudios de doctorado en 2003 bajo la dirección del Prof. Alberto Vela con la tesis "Estudio del Enlace Químico vía el Análisis de Campos Escalares Moleculares". En ese mismo año inició una estancia postdoctoral en el grupo de los profesores Gotthard Seifert y Thomas Heine en la Universidad Técnica de Dresden. A su regreso a México, en 2005, el Dr. Gabriel Merino se integró a la Facultad de Química (hoy Departamento de Química) de la Universidad de Guanajuato.

De su grupo de investigación se han graduado a la fecha: 8 estudiantes de doctorado, 5 de maestría, 8 de licenciatura y 7 investigadores han llevado a cabo estancia postdoctoral. A partir de abril de 2012, el Dr. Merino se incorporó al Departamento de Física Aplicada del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Unidad Mérida, donde en dos años ha formado y consolidado el Laboratorio de Físicoquímica Computacional.



11



Cinvestav

La red de intercambio y colaboraciones nacionales e internacionales que ha formado el Dr. Merino ha sido vital para la generación de nuevos conocimientos, para la producción científica y la formación de estudiantes. Actualmente se mantienen colaboraciones con diferentes grupos en el país y fuera de él en países como Estados Unidos, España, China, Alemania, Holanda, Suiza, Colombia, Chile, Brasil y la India, financiados a través de proyectos del Conacyt, de la Fundación Marie Curie y de la Fundación Marcos Moshinsky. Así, el grupo de investigación del Dr. Merino se ha consolidado como uno de los más activos en el área de la Química Teórica y Computacional en México y en Latinoamérica. Su trabajo ha generado hasta la fecha un total de aproximadamente 3000 citas y su índice h es de 32.



Editor Asociado de RSC Advances (RSC)

Miembro del Comité Editorial de ChemistrySelect (Wiley)

12



Cinvestav

Entre los reconocimientos recibidos se encuentran el premio Weizmann a la Mejor Tesis Doctoral en Ciencias Naturales y Exactas (2003), la beca de la DFG para llevar a cabo su estancia postdoctoral (2003-2005), la beca que otorga la Academia Mexicana de Ciencias dentro del Programa de Estancias de Verano (u Otoño) de Investigación Química en Laboratorios de Estados Unidos (2005), para llevar a cabo una estancia en el laboratorio del Prof. Roald Hoffmann (Premio Nobel de Química 1981), y finalmente la Beca Ikerbasque para Profesores Visitantes en 2011, otorgada a profesores consolidados para llevar a cabo una visita por un año. También ha sido editor invitado en revistas como Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Molecular Modeling y Theoretical Chemistry Accounts. Es Editor Asociado de RSC Advances (desde 2016) y miembro del Comité Editorial de ChemistrySelect (desde 2016). Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores desde 2005 y Nivel 3 a partir de enero de 2013 y miembro de la Academia Mexicana de Ciencias. En 2012 fue galardonado con el Premio Nacional de Investigación de la Academia Mexicana de Ciencias en el área de Ciencias Exactas y la Cátedra Moshinsky 2012.

Todas las tesis que ha dirigido a nivel licenciatura, maestría o doctorado han obtenido una distinción, ya sea Laureada o Cum Laude. La tesis de Abril Carolina Castro obtuvo el premio a la Mejor Tesis de Maestría en el Área de Termodinámica en el año 2012, otorgado por la Sociedad Mexicana de Termodinámica y la tesis de Rafael Islas recibió el premio Weizmann (Academia Mexicana de Ciencias) a la Mejor Tesis Doctoral en el área de Ciencias Exactas en 2013.



13



Cinvestav

Línea de investigación Dr. Gabriel Merino

El Dr. Gabriel Merino ha enfocado su investigación en la predicción de nuevos sistemas moleculares que violan completamente lo establecido por la Química Tradicional y que permiten llevar al límite conceptos básicos como la estructura, el enlace químico y la aromaticidad.

Su primera contribución fue mostrar que bajo ciertas condiciones es posible estabilizar hidrocarburos con carbonos tetracoordinados, pero donde todos los átomos que rodean al carbono central se colocan en el mismo plano, es decir, carbonos tetracoordinados planos. Las reglas que emergieron de este trabajo se extendieron a otros átomos de la tabla periódica como el boro y otros átomos del grupo 14 y constituyen ahora una de sus principales líneas de investigación. Para entender la naturaleza de estos sistemas, su grupo ha desarrollado nuevas herramientas para estudiar la deslocalización electrónica y aromaticidad, entre ellas el análisis de la respuesta electrónica de una molécula ante un campo magnético. Asimismo, con la finalidad de encontrar nuevas especies moleculares, el grupo del Dr. Merino ha desarrollado nuevos algoritmos para explorar la superficie de energía potencial y localizar las estructuras de mínima energía, lo que ha permitido encontrar una serie de cúmulos y moléculas con estructuras fuera de lo común.



14



El Carbono no es como lo pintan

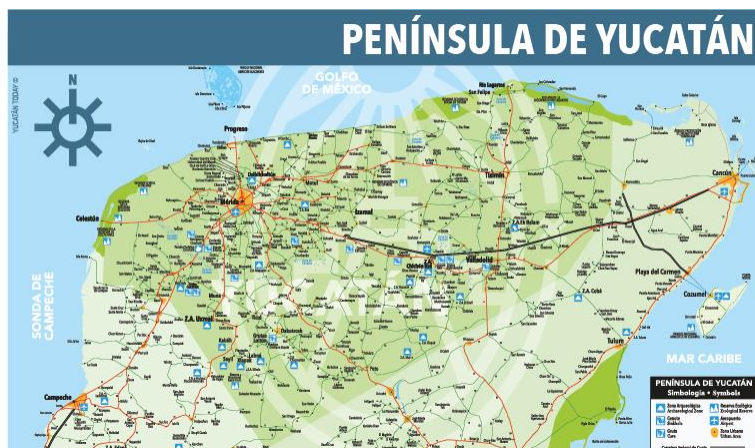


Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida

Sociedad Química de México
American Chemical Society
2017

15

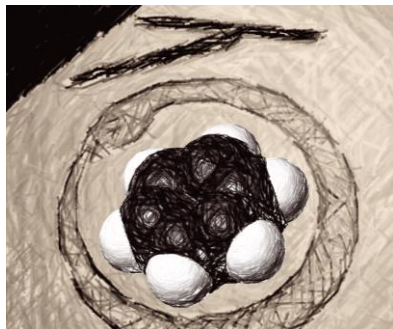


16



Introducción

1864. Friedrich August Kekulé concludes that the structure of benzene is a closed, hexagonal, six-membered ring after a visionary dream.



"...I was sitting writing on my textbook, but the work did not progress; my thoughts were elsewhere. I turned my chair to the fire and dozed. Again the atoms were gamboling before my eyes. This time the smaller groups kept modestly in the background. My mental eye, rendered more acute by the repeated visions of the kind, could now distinguish larger structures of manifold conformation; long rows sometimes more closely fitted together all twining and twisting in snake-like motion. But look! What was that? **One of the snakes had seized hold of its own tail, and the form whirled mockingly before my eyes.**

As if by a flash of lightning I awoke; and this time also I spent the rest of the night in working out the consequences of the hypothesis."

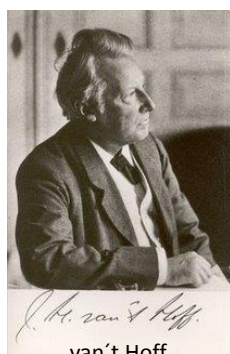
17



Introducción



LeBel



van't Hoff

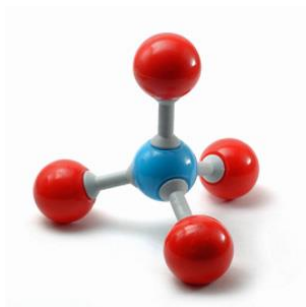
1872. van't Hoff y Lebel propusieron que una vez que el carbono se enlaza a cuatro ligantes, estos se distribuirán en las puntas de un tetraedro.



18

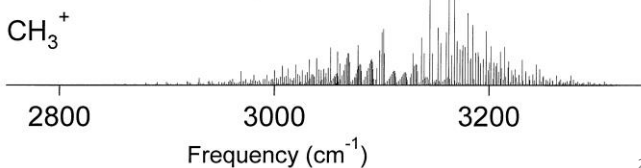
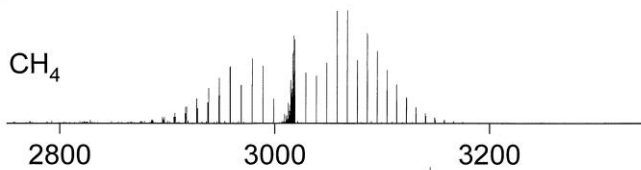
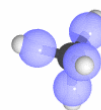
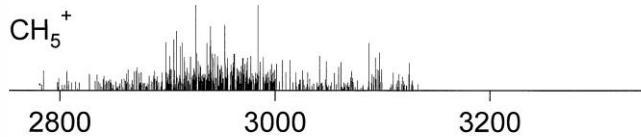


Cinvestav



Cinvestav

Espectro de infrarrojo del CH_5^+

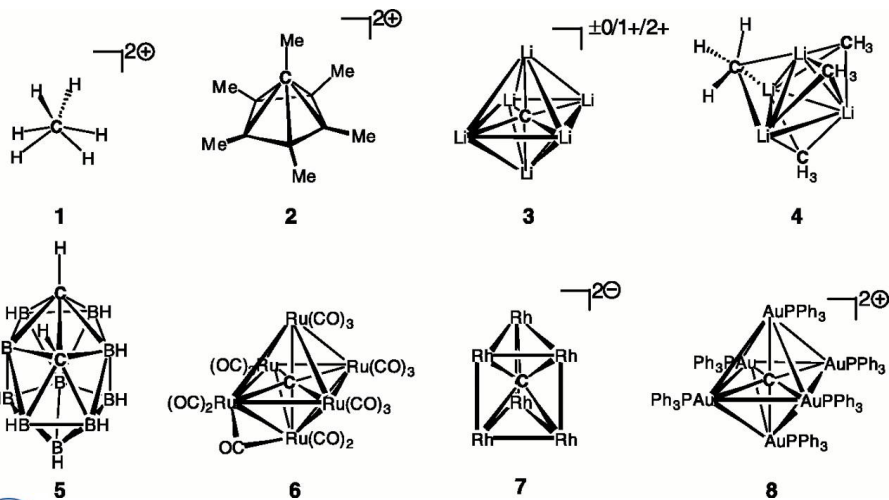


20



Cinvestav

Carbonos hexacoordinados *in vitro*



21



Cinvestav

Carbocations

International Edition: DOI: 10.1002/anie.201608795
 German Edition: DOI: 10.1002/ange.201608795

Crystal Structure Determination of the Pentagonal-Pyramidal Hexamethylbenzene Dication $C_6(CH_3)_6^{2+}$

Moritz Malischewski* and K. Seppelt

Dedicated to Professor Karl Otto Christe on the occasion of his 80th anniversary



Figure 1. Molecular structure of $C_6(CH_3)_6^{2+}$ in $C_6(CH_3)_6^{2+}$ (SbF_6^-) $_2 \cdot HSO_3F$, ellipsoids are shown at 50% probability, C grey, H white; counteranions and co-crystallized HSO_3F omitted for clarity.

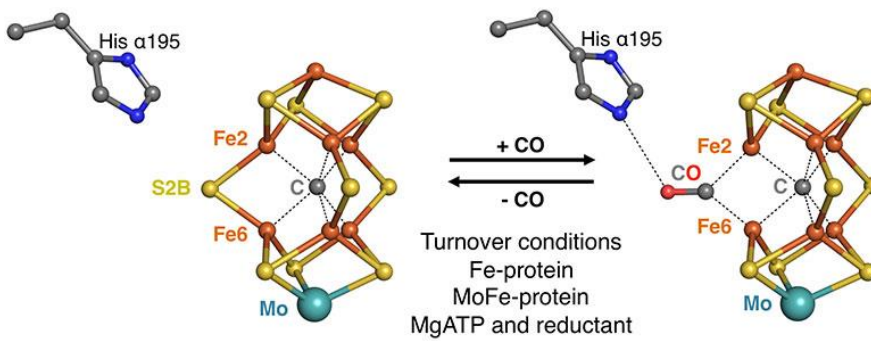


22



Cinvestav

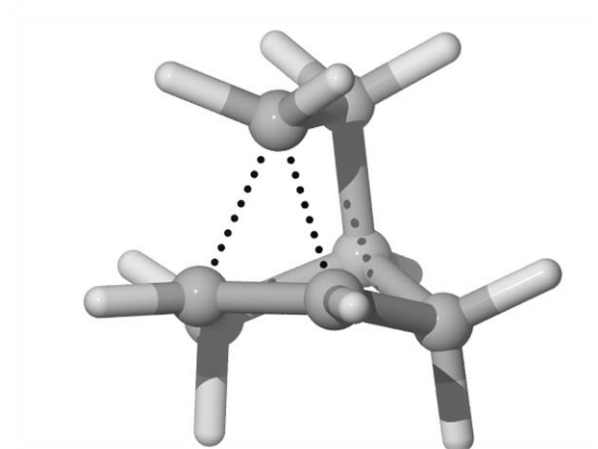
ATPasas en la fijación del nitrógeno



23



Cinvestav



Catión 2-norbornilo



24

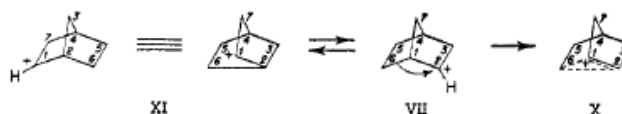


[CONTRIBUTION FROM THE DEPARTMENT OF CHEMISTRY, UNIVERSITY OF CALIFORNIA AT LOS ANGELES]

Neighboring Carbon and Hydrogen. X. Solvolysis of *endo*-Norbornyl Arylsulfonates^{1,2,3}

BY S. WINSTEIN AND D. TRIFAN

Solvolysis of *endo*-norbornyl arylsulfonates proceeds in glacial acetic acid, aqueous acetone and aqueous dioxane to give completely the corresponding *exo*-derivative. That this *endo* to *exo* change involves rearrangement is clear from the complete resolution of *endo*-norbornyl alcohol and the solvolysis of optically active *endo*-norbornyl *p*-bromobenzenesulfonate in glacial acetic acid, ethanol and 75% aqueous acetone. Nearly complete loss of activity attends the formation of *exo*-products, first-order polarimetric rate constants agreeing with titrimetric rate constants within experimental error. The facts are most simply explained with carbon migration in the norbornyl cation. While the geometry in the *endo*-norbornyl *p*-bromobenzenesulfonate is unfavorable to participation of the C₁-C₆ bonding electron cloud in the ionization process, ionization is, for the most part, followed by rearrangement to the presumably more stable bridged structure. Solvent intervention, with 7-8% inversion, competes with carbon migration in acetolysis.

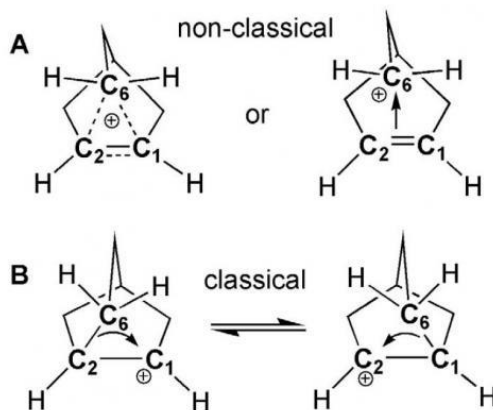


The pentacoordinate 2-norbornyl cation was proposed in 1949-1952 by Winstein and Trifan, as well as by Roberts, to clarify the seemingly exceptionally rapid solvolytic reactivity of 2-*exo*-norbornyl derivatives and their high *exo/endo* ratios, as well as the remarkable rearrangement behavior.



S. Winstein, D. S. Trifan, *J. Am. Chem. Soc.* **1949**, *71*, 2953. *J. Am. Chem. Soc.* **1952**, *74*, 1147. *J. Am. Chem. Soc.* **1952**, *74*, 1154.
J. D. Roberts, W. Bennett, R. Armstrong, *J. Am. Chem. Soc.* **1950**, *72*, 3329.

25



H. C. Brown, *The Nonclassical Ion Problem (with comments of P. v. R. Schleyer)*, Plenum, New York, **1977**.
H. C. Brown, *Acc. Chem. Res.* **1983**, *16*, 432.
H. C. Brown, *Acc. Chem. Res.* **1986**, *19*, 34.

26



Conclusion of the Classical–Nonclassical Ion Controversy Based on the Structural Study of the 2-Norbornyl Cation[†]

GEORGE A OLAH* and G. K. SURYA PRAKASH

Hydrocarbon Research Institute and Department of Chemistry, University of Southern California, Los Angeles, California 90089

MARTIN SAUNDERS*

*Department of Chemistry, Yale University, New Haven, Connecticut 06520
Received February 28, 1983 (Revised Manuscript Received September 27, 1983)*

P. v. R. Schleyer, W. E. Watts, R. C. Fort, M. B. Comisarow, G. A. Olah, *J. Am. Chem. Soc.* 1964, 86, 5679; b) M. Saunders, P. v. R. Schleyer, G. A. Olah, *J. Am. Chem. Soc.* 1964, 86, 5680; c) G. A. Olah, A. M. White, *J. Am. Chem. Soc.* 1969, 91, 3954; d) G. A. Olah, A. M. White, J. R. Demember, Commeyra, A. C. Y. Lui, *J. Am. Chem. Soc.* 1970, 92, 4627; e) G. A. Olah, *Acc. Chem. Res.* 1976, 9, 41; f) G. A. Olah, G. K. S. Prakash, M. Arvanaghi, F. A. L. Anet, *J. Am. Chem. Soc.* 1982, 104, 7105; g) G. A. Olah, G. K. S. Prakash, M. Saunders, *Acc. Chem. Res.* 1983, 16, 440; h) G. A. Olah, *Angew. Chem., Int. Ed.* 1995, 34, 1393; i) G. A. Olah, *J. Org. Chem.* 2001, 66, 5943; j) G. A. Olah, G. K. S. Prakash, M. Saunders, *Acc. Chem. Res.* 1985, 18, 292.



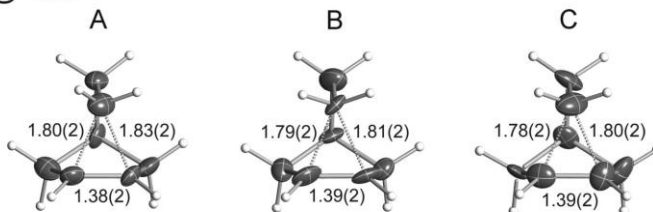
27



@120K:



@ 40K:

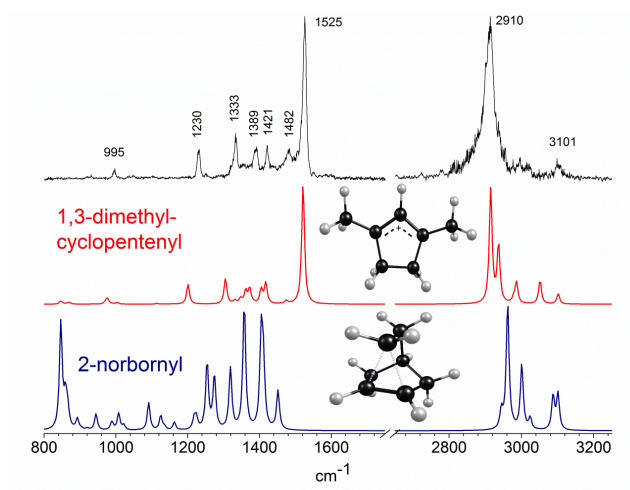


Mean value of all six C···C, x-ray: 1.80 Å (MP2: 1.825 Å)
Mean value of all three C=C, x-ray: 1.39 Å (MP2: 1.393 Å)



F. Scholz, D. Himmel, F. W. Heinemann, P. v. R. Schleyer, K. Meyer, I. Krossing, *Science* **2013**, 341, 62

28

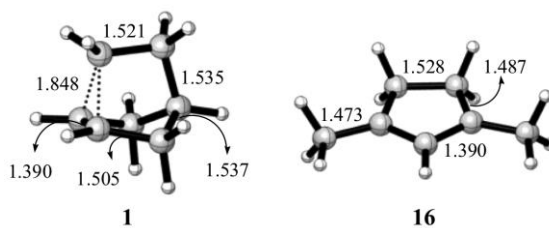


J. D. Mosley, J. W. Young, J. Agarwal, H. F. Schaefer, P. v. R. Schleyer, M. A. Duncan, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2014**, *53*, 5888.

29



Cuál es el mecanismo de isomerización del catión 2-norbornilo al catión 1,3-dimetilciclopentenilo?



MP2/6-311G(2d,2p) optimized structures of 2-norbornyl (**1**) and the 1,3-dimethylcyclopentyl (**16**) cations

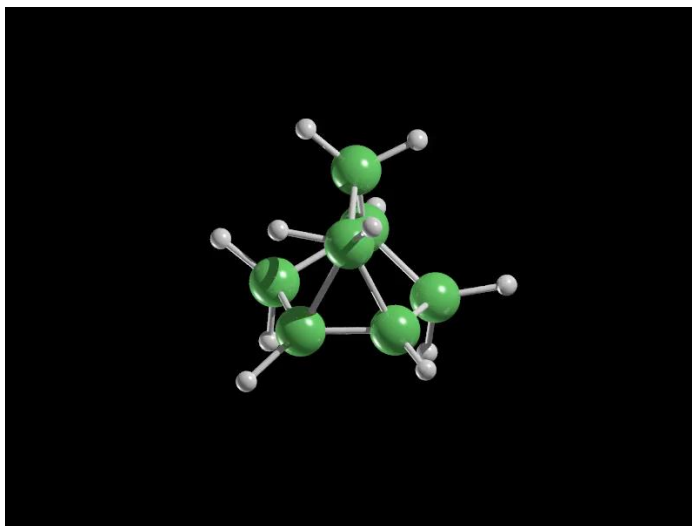


Jalife, S.; Martínez-Guajardo, G.; Fernández-Herrera, M. A.; Zavala-Oseguera, C.; Schleyer, P. v. R.; Merino, G. *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, *35*, 7955-7959.

30



Cinvestav

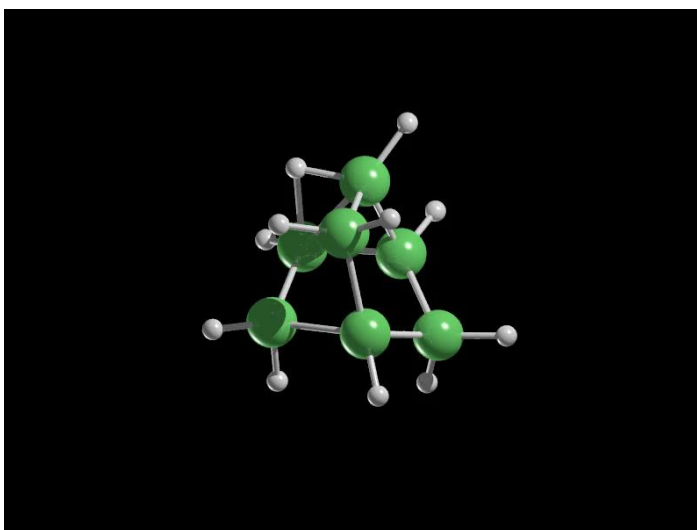


Jalife, S.; Martínez-Guajardo, G.; Fernández-Herrera, M. A.; Zavala-Oseguera, C.; Schleyer, P. v. R.; Merino, G. *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 35, 7955-7959.

31



Cinvestav



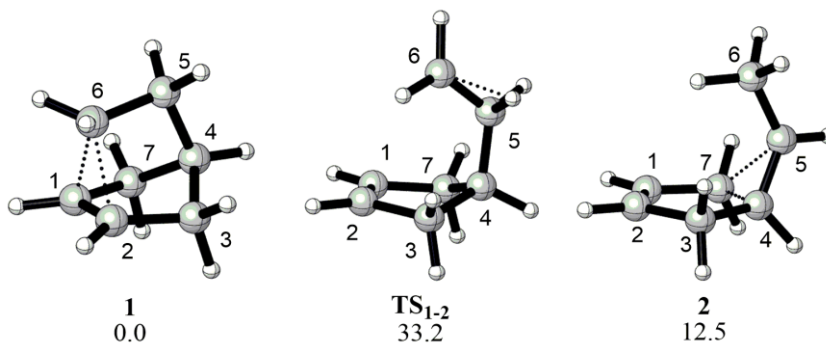
Jalife, S.; Martínez-Guajardo, G.; Fernández-Herrera, M. A.; Zavala-Oseguera, C.; Schleyer, P. v. R.; Merino, G. *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 35, 7955-7959.

32



Cinvestav

Primer paso, romper el enlace de 3c-2e
Una ruta retro-Lawton-Bartlett

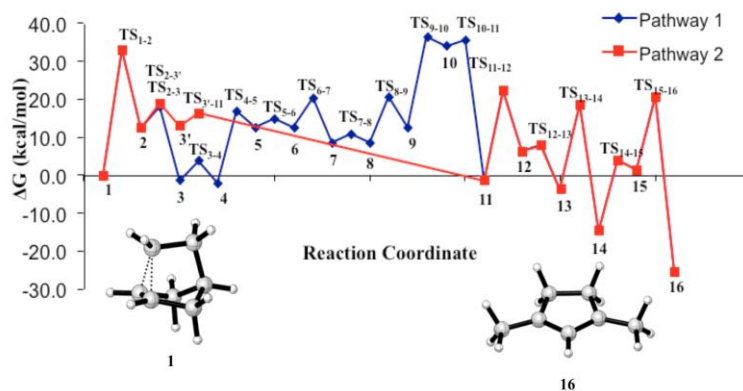


Jalife, S.; Martínez-Guajardo, G.; Fernández-Herrera, M. A.; Zavala-Oseguera, C.; Schleyer, P. v. R.; Merino, G. *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 35, 7955-7959.

33

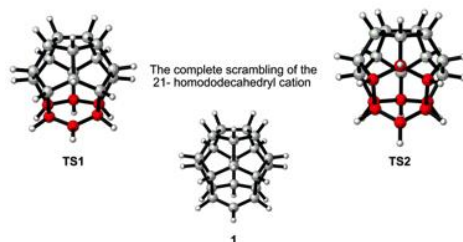


Cinvestav



Jalife, S.; Martínez-Guajardo, G.; Fernández-Herrera, M. A.; Zavala-Oseguera, C.; Schleyer, P. v. R.; Merino, G. *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 35, 7955-7959.

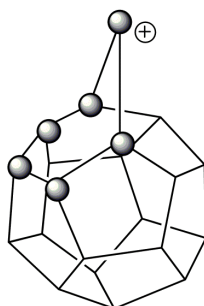
34



El catión 21-homododecaedriilo



35



21-homododecaedriilo

Paquette et al. describió a este catión como "a most interesting electron-deficient species that has the latent potential to be the record holder for all degenerate molecules" because it is capable of sustaining 2.56×10^{19} different arrangements!



Paquette, L. A. *Chem. Rev.* **1989**, *89*, 1051.

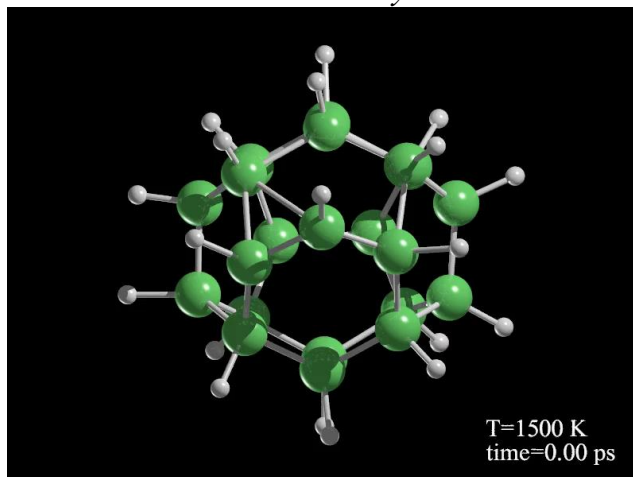
Paquette, L. A.; Kobayashi, T.; Kesselmayr, M. A. *J. Am. Chem. Soc.* **1988**, *110*, 6568.

Paquette, L. A.; Kobayashi, T.; Kesselmayr, M. A.; Gallucci, J. C. *J. Org. Chem.* **1989**, *54*, 2921.

36



Homododecahedryl Cation

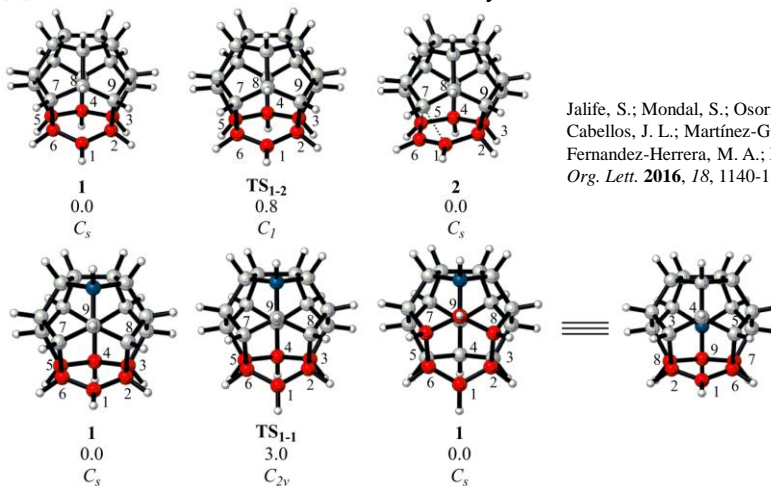


Jalife, S.; Mondal, S.; Osorio, E.; Cabellos, J. L.; Martínez-Guajardo, G.;
Fernandez-Herrera, M. A.; Merino, G. *Org. Lett.* **2016**, *18*, 1140-1143.

37



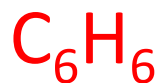
Homododecahedryl Cation



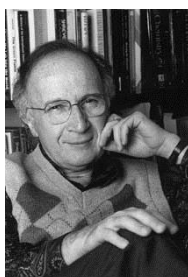
38

¿Qué hace diferente a una molécula de otra?

- Su composición.
- La distribución de los átomos en el espacio



39



Roald Hoffmann



Roger W. Alder



Charles F. Wilcox

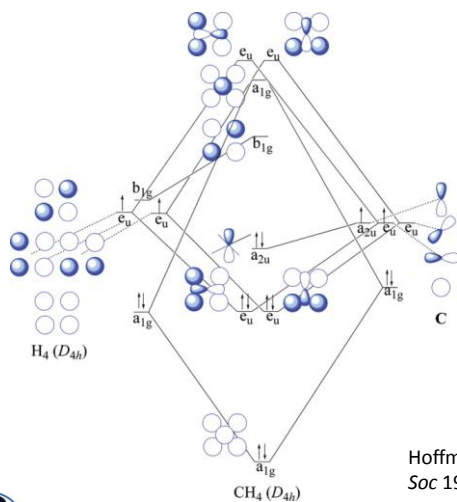
1970. Sugieren reglas simples para estabilizar estructuras tetracoordinadas planas involucradas en la racemización

Hoffmann, R.; Alder, R. W.; Wilcox, C. F. *J Am Chem Soc* 1970, **92**, 4992.

40



Cinvestav



- 1) Inclusión del ptC en un sistema aromático
- 2) Sustitución de los átomos de hidrógeno por metales

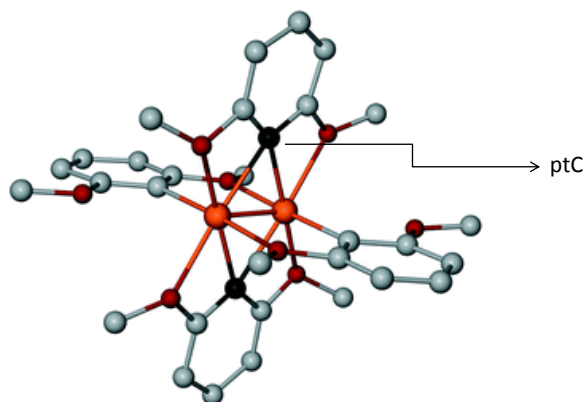
Hoffmann, R.; Alder, R. W.; Wilcox, C. F. *J Am Chem Soc* 1970, **92**, 4992.



41



Cinvestav



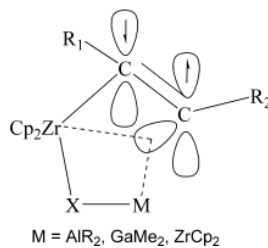
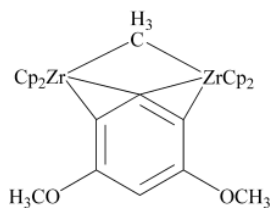
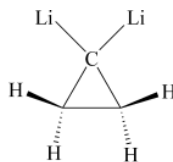
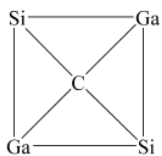
F. A. Cotton and M. Millar, *J. Am. Chem. Soc.*, 1977, **99**, 7886

42





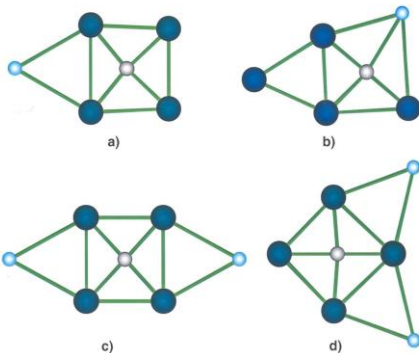
Cinvestav

Keese, R. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 4787

43



Cinvestav

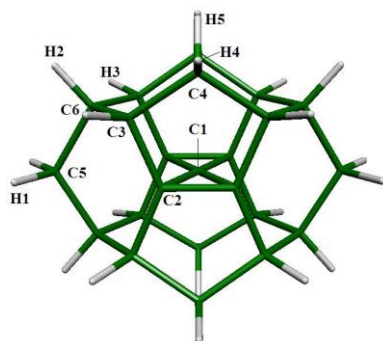


Observation of Pentaatomic Tetracoordinate Planar Carbon Containing Molecules

L. S. Wang, A. I. Boldyrev, X. Li, and J. Simons
J. Am. Chem. Soc. **122**, 7681-7687 (2000).



44



Rasmussen, D. R.; Radom, L. *Angew Chem Int Ed Engl* 1999, **38**, 2876



45

Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO
CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL



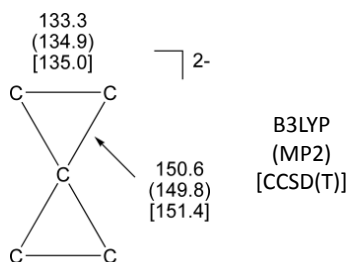
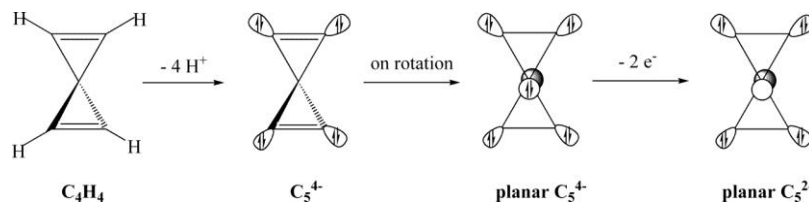
¿Cuál es el número máximo de coordinación de un átomo de carbono hipercoordinado plano?

- 4
- 5
- 6
- 7
- 8

46



The Brave World of C_5^{2-}



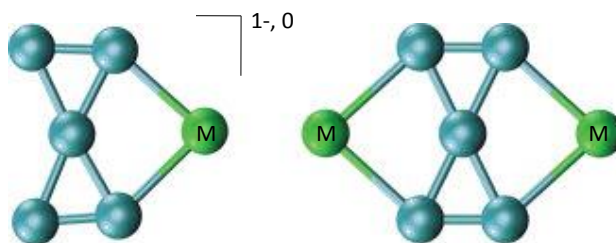
Merino, G.; Méndez-Rojas, M. A.; Vela, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 6026-6027.



47



The Brave World of C_5^{2-}



$n = 1-; M = \text{Li, Na, K}$
 $n = 0; M = \text{Be-Ca, Zn, Cd}$

$M = \text{Li, Na, K}$

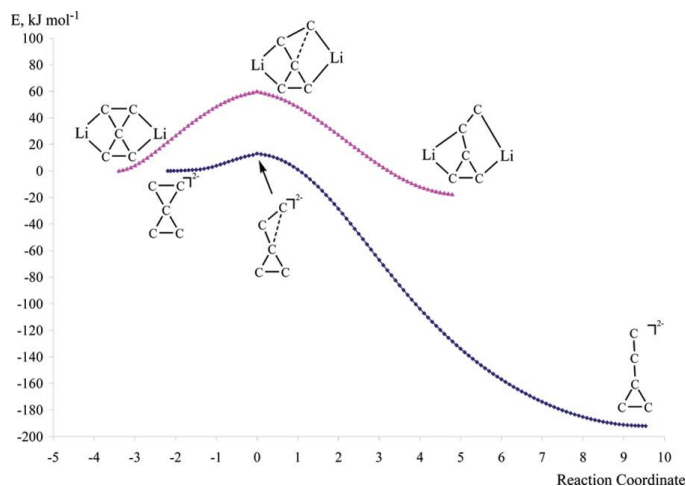
Merino, G.; Méndez-Rojas, M. A.; Vela, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 6026-6027.
 Merino, G.; Méndez-Rojas, M. A.; Beltrán, H. I.; Corminboeuf, C.; Heine, T.; Vela, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 16160-16169.



48



The Brave World of C_5^{2-}

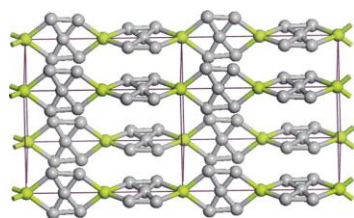


Merino, G.; Méndez-Rojas, M. A.; Vela, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 6026-6027.
 Merino, G.; Méndez-Rojas, M. A.; Beltrán, H. I.; Corminboeuf, C.; Heine, T.; Vela, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 16160-16169.

49

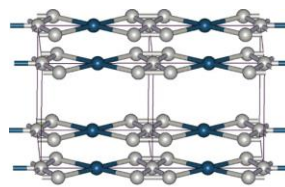


The Brave World of C_5^{2-}



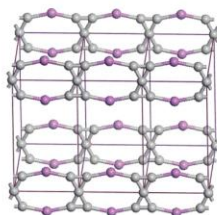
M = Zn

I



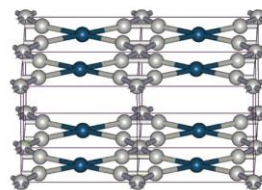
M = Pt

III



M = Li

II



IV

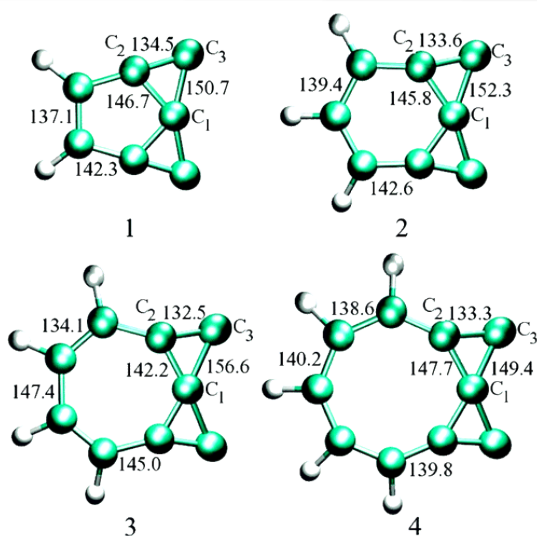


Pancharatna, P. D.; Méndez-Rojas, M. A.; Merino, G.; Vela, A.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 15309.

50



The Brave World of C_5^{2-}

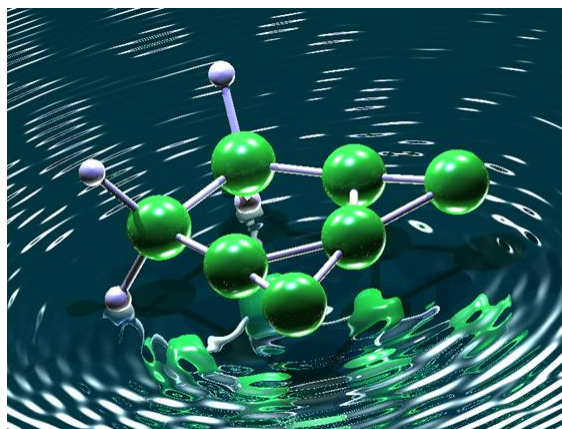


- a) Perez, N.; Heine, T.; Barthel, R.; Seifert, G.; Vela, A.; Mendez-Rojas, M. A.; Merino, G. *Org. Letters*. **2005**, 7, 1509.
 b) Perez-Peralta, N.; Sanchez, M.; Martin-Polo, J.; Islas, R.; Vela, A.; Merino, G. *J. Org. Chem.* **2008**, 73, 7037–7044.

51



The Brave World of C_5^{2-}

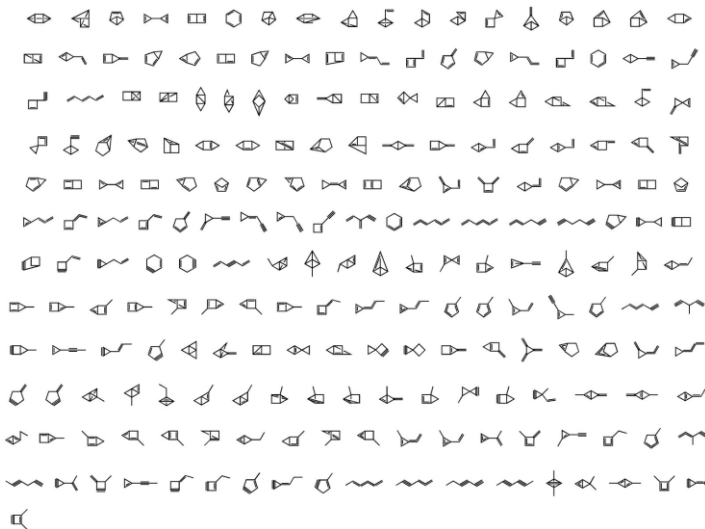


- a) Perez, N.; Heine, T.; Barthel, R.; Seifert, G.; Vela, A.; Mendez-Rojas, M. A.; Merino, G. *Org. Lett.* **2005**, 7, 1509.
 b) Perez-Peralta, N.; Sanchez, M.; Martin-Polo, J.; Islas, R.; Vela, A.; Merino, G. *J. Org. Chem.* **2008**, 73, 7037–7044.

52



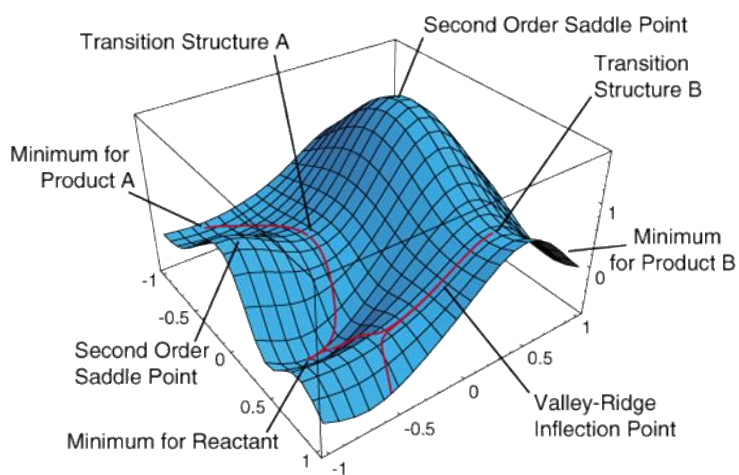
Cinvestav

Isómeros del C_6H_6

53



Cinvestav



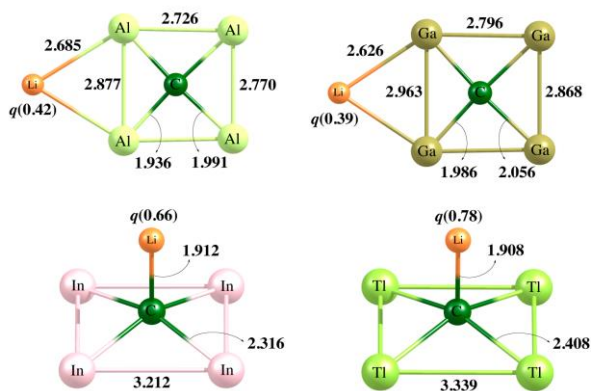
54



Cui, Z.-H.; Contreras, M.; Ding, Y.-h.; Merino, G. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 13228.



55



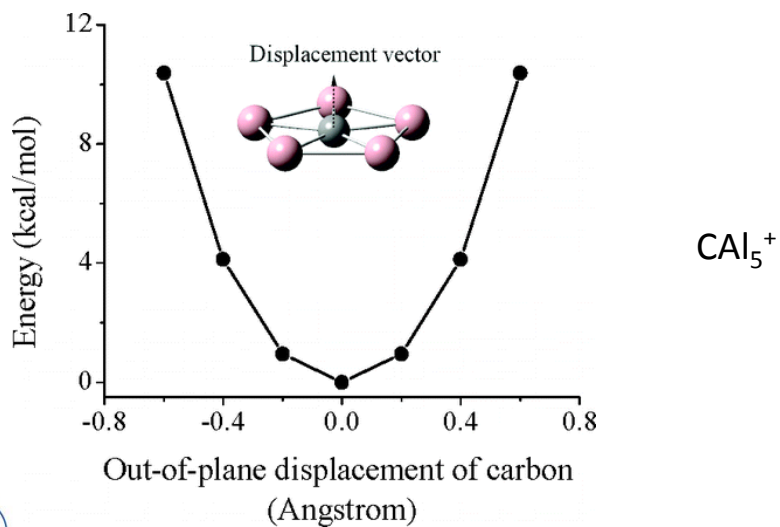
Castro, A. C.; Audiffred, M.; Mercero, J. M.; Ugalde, J. M. Mendez-Rojas, M. A.; Merino, G. *Chem. Phys. Lett.* **2012**, 519, 29-33.



56



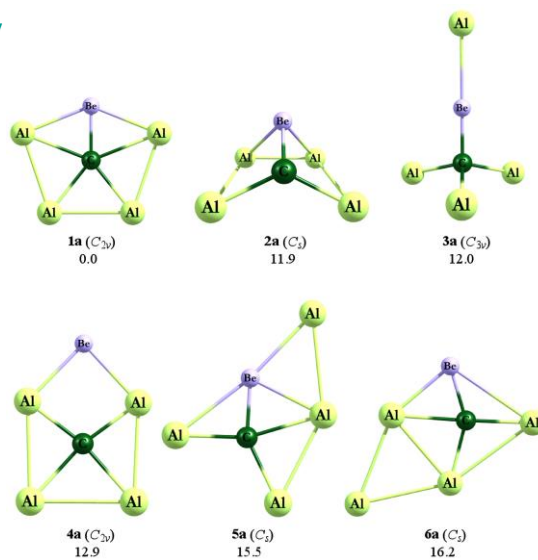
Cinvestav

Pei, Y.; An, W.; Ito, K.; Schleyer, P. v. R.; Zeng, X. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 10394

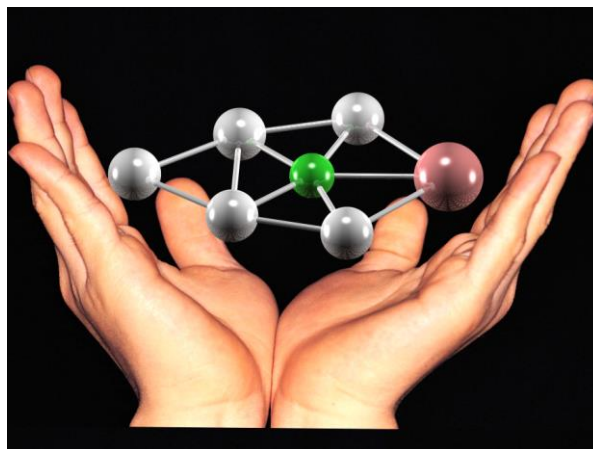
57



Cinvestav

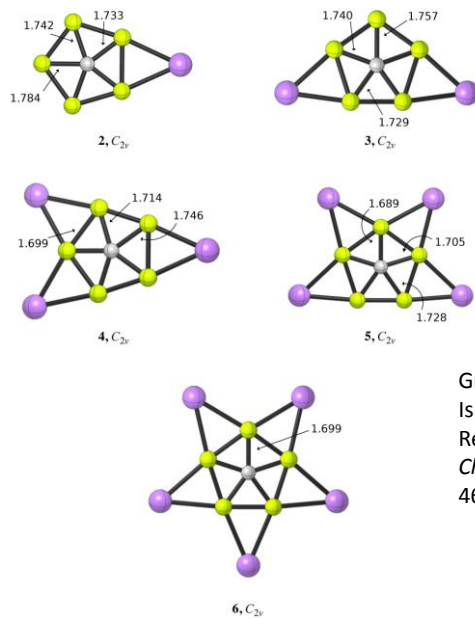
Jimenez-Halla, J. O. C.; Wu, Y.-B.; Wang, Z.-X.; Islas, R.; Heine, T.; Merino, G. *Chem. Commun.* **2010**, *46*, 8776-8778.

58



Castro, A. C.; Martínez-Guajardo, G.; Johnson, T.; Ugalde, J. M.; Wu, Y. B. Mercero, J. M.; Heine, T.; Donald, K. J.; Merino, G. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2012**, 14, 14764-14768.

59



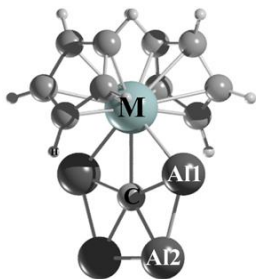
Grande-Aztatzi, R.; Cabellos, J. L.; Islas, R.; Infante, I.; Mercero, J. M.; Restrepo, A.; Merino, G. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, 17, 4620-4624.



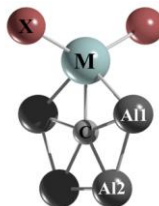
60



Cinvestav



	C-Al1	C-Al2	C-M
Zr	2.091	2.065	2.457
Hf	2.114	2.066	2.426



	C-Al1	C-Al2	C-M
F	2.201	2.098	2.248
Cl	2.235	2.105	2.185
Br	2.244	2.105	2.165
I	2.255	2.107	2.146
F	2.204	2.090	2.258
Cl	2.236	2.097	2.197
Br	2.245	2.098	2.178
I	2.255	2.099	2.159

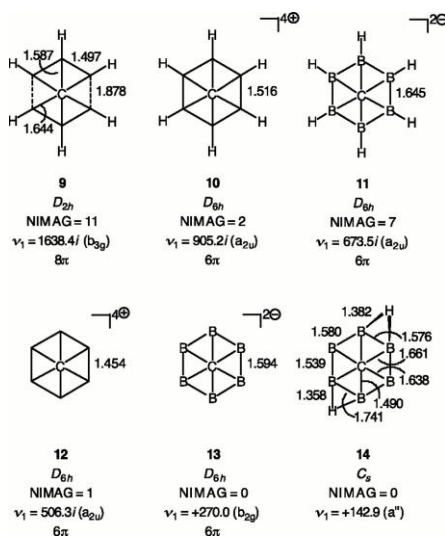
Cui, Z.-H.; Vassilev-Galindo, V.; Cabellos, J. L.; Osorio, E.; Orozco, M.; Pan, S.; Ding, Y.-H.; Merino, G. *Chem. Commun.* **2017**, *53*, 138-141.



61



Cinvestav



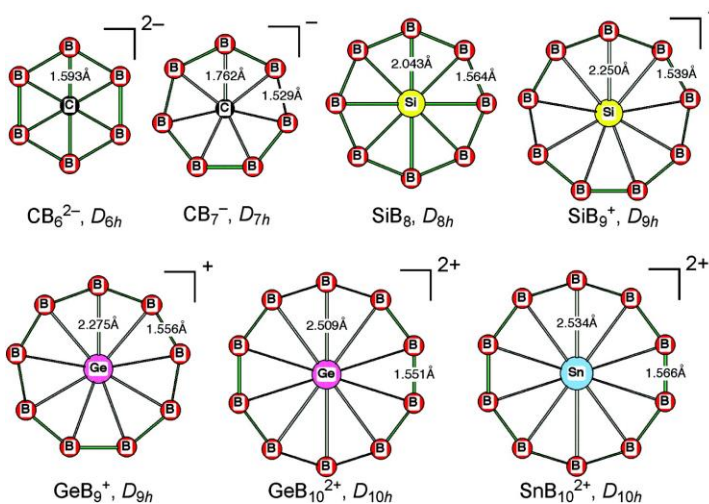
Exner K., Schleyer P.v.R., *Science* **2000**, *290*, 1937.



62



Cinvestav

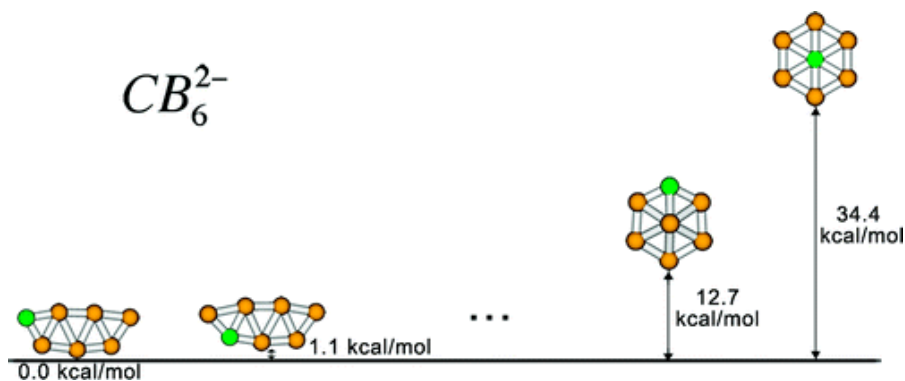


Islas, R.; Heine, T.; Ito, K.; Schleyer, P. v. R.; Merino, G. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 14767.

63



Cinvestav



Carbon Avoids Hypercoordination in CB_6^{2-} , CB_5^{2-} , and $C_2B_5^{2-}$ Planar Carbon-Boron Clusters

B. B. Averkiev, D. Yu. Zubarev, L.-M. Wang, W. Huang, L. S. Wang, A. I. Boldyrev
J. Am. Chem. Soc. 2008, *130*, 9248-9250

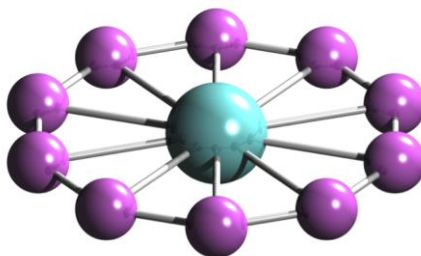


64



Cinvestav

Cual es el número máximo de coordinación en una estructura plana?



T. R. Galeev, C. Romanescu, W. L. Li, L. S. Wang, A. I. Boldyrev, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 124, 2143

[Heine, T.; Merino, G. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 51, 4275-4276.](#)

65

Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO
CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL



¿Cuál es el número máximo de coordinación de un átomo (no sólo carbono) hipercoordinado plano?

- 5
- 7
- 8
- 10
- 12

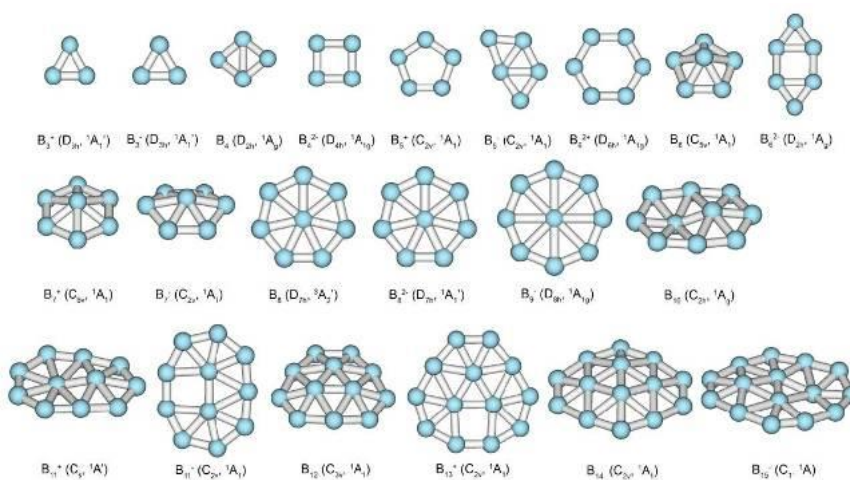
66



Ruedas de boro



67

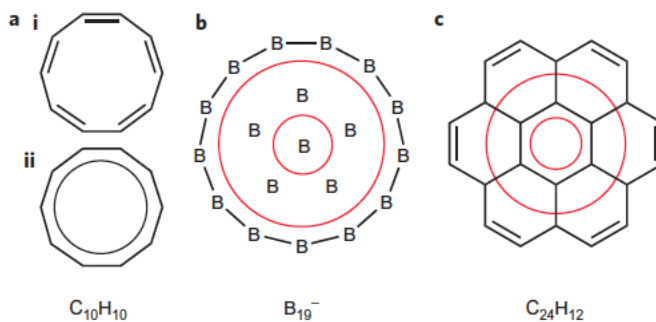


Zubarev, D. Yu., Boldyrev, A. I. "Comprehensive analysis of chemical bonding in boron clusters" *J. Comput. Chem.* **2007**, *28*, 251.

68



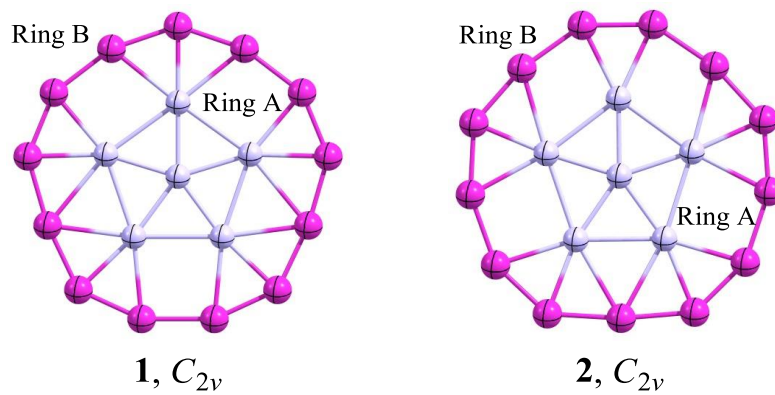
Wankel Motor



W. Huang, S. A. P., H. J. Zhai, B. B. Averkiev, L.-S. Wang, A. I. Boldyrev *Nature Chem.* **2010**, *2*, 202-206.



69

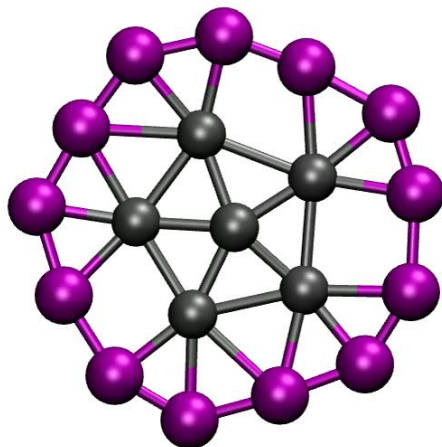


Jiménez-Halla, J. O. C.; Islas, R.; Heine, T.; Merino, G. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *5668-5671*.

70



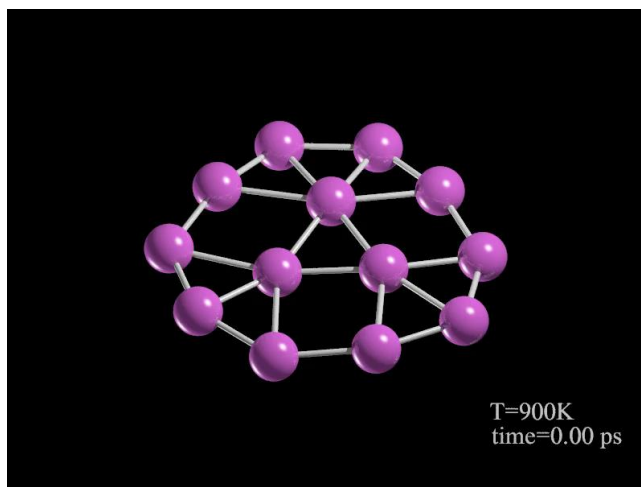
El primer motor molecular tipo Wankel



Level:	PW91/DZVP-A2
Temperature	600 K
Bath:	Nosé-Hoover
Equilibration:	20 ps.
Time:	60 ps.

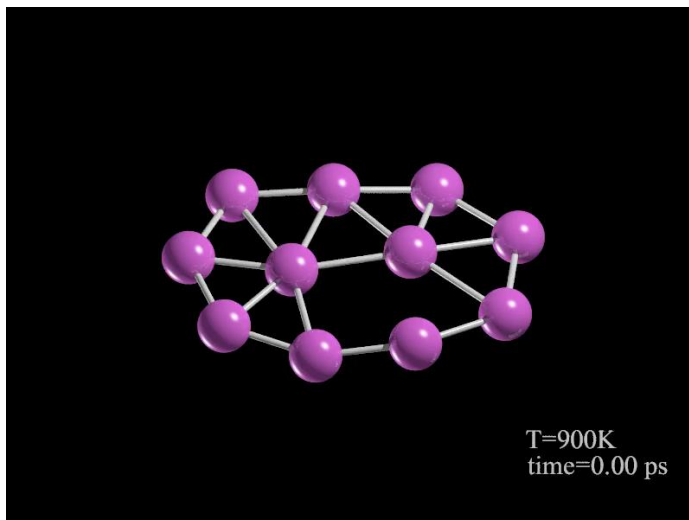
Jiménez-Halla, J. O. C.; Islas, R.; Heine, T.; Merino, G. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, 5668-5671.

71



Martínez-Guajardo, G.; Sergeeva, A. P.; Boldyrev, A. I.; Heine, T.; Ugalde, J. M.; Merino, G. *Chem. Commun.* **2011**, 47, 6242-6244.

72



73



	Cation	Neutral	Anion
B_{10}	 C_{2v} 17.1	 C_{2v} 12.7	 C_1 15.7
B_{11}	 C_1 1.1	 C_{2v} 0.6	 C_{2v} 0.4
B_{12}	 C_1 7.6	 C_{2v} 19.5	 C_1 17.1
B_{13}	 C_{2v} 0.1	 C_{2v} 0.4	 D_{3h} 1.1
B_{14}	 C_{2v} 10.8		 C_{2v} 10.7
B_{15}	 C_1 1.4	 C_1 1.4	 C_1 0.8

S. Jalife, L. Liu, S. Pan, J. L. Cabellos, E. Osorio, C. Lu, T. Heine, K. J. Donald, G. Merino *Nanoscale* **2016**, *8*, 17639-17644.

74



Boron Clusters

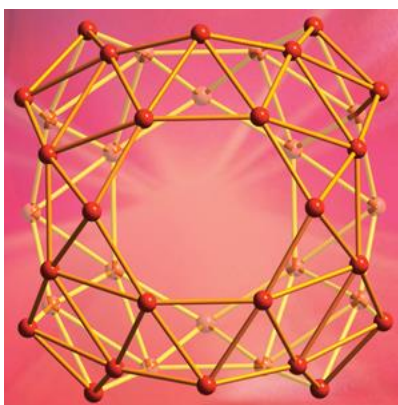
International Edition: DOI: 10.1002/anie.201609766
 German Edition: DOI: 10.1002/ange.201609766

Structure and Fluxionality of B_{13}^+ Probed by Infrared Photodissociation Spectroscopy

Matias R. Fagiani, Xiaowei Song, Petko Petkov, Sreekanta Debnath, Sandy Gewinner, Wieland Schöllkopf, Thomas Heine,* André Fielicke,* and Knut R. Asmis*



75



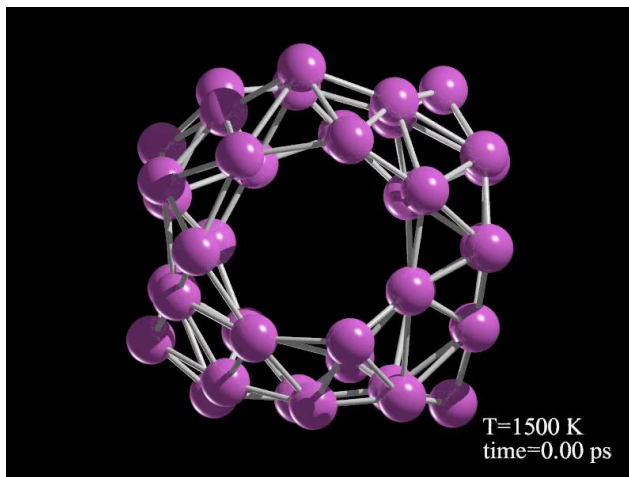
Zhai, H.-J. *et al.* Observation of an all-boron fullerene. *Nature Chem.* **6**, 727-731 (2014).



76



Cinvestav

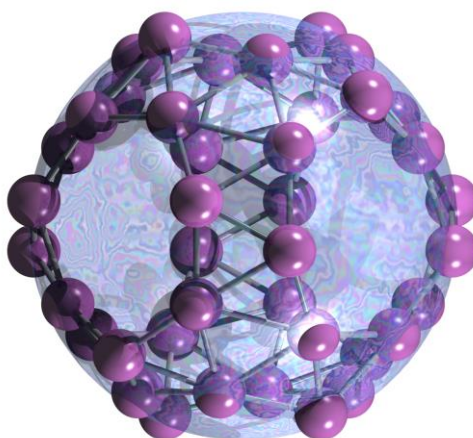


Martínez-Guajardo, G.; Cabellos, J. L.; Díaz-Celaya, A.; Pan, S.; Islas, R.; Chattaraj, P. K.; Heine, T.; Merino, G. *Sci. Rep.* **2015**, 5, 11287.

77



Cinvestav



Martínez-Guajardo, G.; Cabellos, J. L.; Díaz-Celaya, A.; Pan, S.; Islas, R.; Chattaraj, P. K.; Heine, T.; Merino, G. *Sci. Rep.* **2015**, 5, 11287.

78



CUALQUIER DUDA: gmerino@cinvestav.mx



79



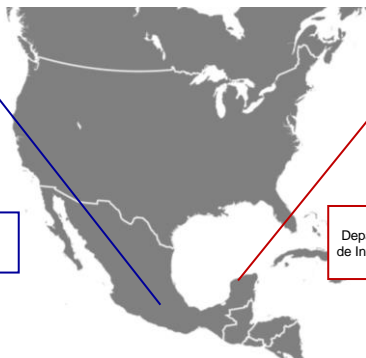
SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química más allá"



"El Carbono No es Como lo Pintan"



Dra. Lena Ruiz Azuara
Universidad Nacional
Autónoma de México



Dr. Gabriel Merino
Departamento de Física Aplicada, Centro
de Investigación y de Estudios Avanzados,
Unidad Mérida

Las imágenes de la presentación están disponibles para descargar ahora

<http://bit.ly/ACS-SQMcarbono>

El Webinar de hoy esta auspiciado por la Sociedad Química de México y the American Chemical Society

80



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



ACS
Chemistry for Life®

Sugieran temas y ponentes que les interesarían para los próximos webinars. acswebinars@acs.org



<http://bit.ly/ACS-SQMwebinars>

81



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



ACS
Chemistry for Life®

¡C&EN en Español!

C&EN pone a su disposición traducciones al español de sus artículos más populares.

May 15, 2017

Retirado un artículo sobre microplásticos en el pescado
El comité ético dice que es un caso de "falsedad científica", pero los autores no están de acuerdo.

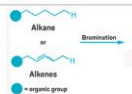
Paper on microplastics in fish is retracted
Ethics board says case is one of "scientific dishonesty," but authors disagree.



May 8, 2017

Un catalizador de níquel funciona como "engranaje" para producir ácidos grasos
La reacción catalítica añade dióxido de carbono a determinados enlaces C-H en alcanos y alquenos.

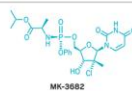
Nickel catalyst "chain walks" to produce fatty acids
Catalytic reaction adds carbon dioxide to selected C-H bonds in alkane and alkene derivatives.



May 1, 2017

Transformando el fósforo en un centro quiral
Un catalizador sintetiza fosfatos y fosforamidatos con una gran estereoselectividad y rendimiento.

Whipping phosphorus into chiral shape
Catalyst synthesizes phosphates and phosphoramidates with high stereoselectivity and yield.



April 24, 2017

Un mejor futuro para la química en Cuba
Los investigadores son optimistas: mejorar las relaciones con EE.UU. producirá colaboraciones más eficaces.

Improving prospects for chemists in Cuba
Researchers are optimistic that improving relations with the U.S. will lead to stronger collaborations.



Gracias a una colaboración con la organización española Divúlgame.org, C&EN ahora es capaz de ofrecer traducciones al español de algunos de nuestros mejores contenidos. Queremos hacer de la ciencia de vanguardia más accesible a la comunidad química de habla española, y esta es nuestra contribución. Le da a los nacidos en España, América Latina, o los EE.UU., pero cuyo primer idioma es el español la oportunidad de leer este contenido en su lengua materna. Esperamos que les guste y sea de su utilidad.



Dr. Bibiana Campos Seijo
Editor-in-Chief of C&EN

<http://bit.ly/CENespanol>

82



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



ACS

Chemistry for Life®

"El Carbono No es Como lo Pintan"



Dra. Lena Ruiz Azuara
Universidad Nacional
Autónoma de México



Dr. Gabriel Merino
Departamento de Física Aplicada, Centro
de Investigación y de Estudios Avanzados,
Unidad Mérida

Las imágenes de la presentación están disponibles para descargar ahora

<http://bit.ly/ACS-SQMcarbono>

El Webinar de hoy esta auspiciado por la Sociedad Química de México y the American Chemical Society

83



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



ACS

Chemistry for Life®

La Diversidad de la Audiencia



Hoy tenemos representantes de **19 países**

84



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Sociedad Química de México



Sociedad Química de México, A.C.
"La química nos une"

Desde sus comienzos de la Sociedad Química de México, se buscaba un emblema sencillo, no demostrar partidismo alguno y significar al gremio, debería representar un símbolo no sólo para los químicos, sino también para ingenieros, farmacéuticos, metalurgistas, en fin que englobe e identifique por igual a los científicos en todas sus áreas de la ciencia química.

www.sqm.org.mx

85



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Sugieran temas y ponentes que les interesarían para los próximos webinars. acswebinars@acs.org



<http://bit.ly/ACS-SQMwebinars>

86