

Doctorado en Ciencias Químicas
Semestre 2017-1 (8 de agosto al 25 de noviembre de 2016)

Seminario: Superficies modificadas: propiedades y aplicaciones tecnológicas

Responsable: **Dra. Margarita Rivera Hernández**

Horario: Martes de 10:00 a 12:00 h, Instituto de Física, UNAM.

Número de alumnos: 7

Temas generales a tratar:

- Propiedades químicas y físicas de superficies
- Técnicas actuales de modificación y caracterización de superficies
- Procesos y aplicaciones asociados a superficies “ad hoc”
- La importancia de modificar superficies para maximizar respuestas y reducir costos

Resumen:

Es bien sabido que toda superficie presenta propiedades físicas y químicas únicas que determinan en gran medida su posible aplicación práctica. Sin embargo, en la actualidad, gracias a nuevas tecnologías de punta tanto de modificación de superficies como de caracterización, es posible alterar de manera controlada a micro y nano escala estas propiedades, de tal manera que se pueden controlar procesos físicos, químicos o biológicos ad hoc para una aplicación específica. Así entonces, en este seminario, se cubrirán aspectos relacionados a la modificación de superficies que permitan cambiar radicalmente las propiedades de la superficie original, y así, mejorar y/o potencializar sus aplicaciones prácticas a nivel científico, industrial o tecnológico. Ejemplos claros de la importancia de estos procesos se encuentra en áreas de catálisis, semiconductores, sensores, medicina e industria farmacéutica, entre muchas otras.

Doctorado en Ciencias Químicas
Semestre 2017-1 (8 de agosto al 25 de noviembre de 2016)

Seminario: Intersecciones cónicas en procesos de interés químico

Responsable: **Dr. J Jesús Hernández Trujillo**

Horario: Miércoles 17:00-18:30 h, Facultad de Química, UNAM

No. alumnos: Mínimo 5 y máximo 10

Descripción:

Este seminario se enfoca en el estudio de superficies de energía potencial de sistemas moleculares cuyos estados electrónicos presentan intersecciones cónicas con relevancia en procesos fotoquímicos y fotofísicos. Inicia con una discusión teórica sobre superficies de energía potencial y algunas metodologías actuales para la caracterización de intersecciones cónicas. Posteriormente, se revisan casos específicos tanto desde el punto de vista teórico como experimental donde éstas son relevantes. La elección de los ejemplos puede incluir mecanismos de reacciones fotoquímicas, espectroscopia electrónica-vibracional y técnicas experimentales según los intereses de la audiencia.

Metodología:

Los alumnos expondrán el material bibliográfico que consiste en artículos y libros especializados sobre el tema. Se realizarán las discusiones correspondientes en cada sesión.

Contenido:

Tema 1. Aproximación de Born-oppenheimer y superficies de energía potencial.

Tema 2. Cruces evitados e intersecciones cónicas.

Tema 3. Conceptos básicos de fotoquímica.

Tema 4. Aplicaciones a diversos problemas químicos y biológicos.

Bibliografía:

1. Excited states and photochemistry of organic molecules.

M. Klessinger, J. Michl. VHC, 1995.

2. Femtochemistry.

F. C. de Schryver, S. de Feyter, G. Schwitzer. Wiley, 2001

3. Conical intersections. Theory, computation and experiment.

W. Domcke, D. R. Yarkony, H. Köpel. Advanced series in Physical Chemistry.

Vol 17. World Scientific, 2011.

4. Conical Intersections: The New Conventional Wisdom.

D. R. Yarkony. Journal of Physical Chemistry, v. 105, p. 6277-6293 (2001).

Doctorado en Ciencias Químicas
Semestre 2017-1 (8 de agosto al 25 de noviembre de 2016)

Seminario: Modelado molecular en nanomateriales de carbono

Responsable: **Dr. Vladimir Bassiouk Evdokimenko**

Horario: Miércoles 13:00-16:00 h, Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

No. alumnos: Mínimo 5 y máximo 10

Temario:

Tipos de nanomateriales

Modelos tipo "cluster" y periódicos (1D, 2D y 3D)

Mecánica molecular

Métodos semi-empíricos

Métodos DFT

Técnica ONIOM

Paquetes de programas

Optimización de geometría y cálculos "single-point"

Reacciones químicas e interacciones no-covalentes

Cálculos de propiedades (orbitales, potencial electrostático, etc.)

Cálculos en fullerenos

Cálculos en nanotubos de carbono

Cálculos en nanocúmulos de metales

Doctorado en Ciencias Químicas
Semestre 2017-1 (8 de agosto al 25 de noviembre de 2016)

Seminario: Química medicinal

Responsable: **Dra. Lena Ruiz Azuara**

Horario: Viernes 12:00-14:00 h, Facultad de Química, UNAM

No. alumnos: Máximo 15

Temario:

1-Introducción Histórica

2-Desarrollo de fármacos

2.1 Fases involucradas

2.2 Descubrimiento

2.3 Fases preclínicas

2.4 Fases Clínicas

2.5 Transferencia y comercialización

3. Química Orgánica Medicinal

3.1 Mecanismo de acción

4. Química Inorgánica Medicinal

4.1 Mecanismo de acción

5. Perspectivas