

PLAN DE ESTUDIOS DE DOCTORADO
DEL
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO
EN CIENCIAS QUÍMICAS

Grado que se otorga: **DOCTOR EN CIENCIAS**

Campo de conocimiento: **QUÍMICA**

Entidades Académicas Participantes:

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN

FACULTAD DE QUÍMICA

INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

INSTITUTO DE QUÍMICA

Fecha de aprobación del Comité Académico: 13 de febrero de 2012.

Fecha de opinión favorable del Consejo de Estudios de Posgrado: 24 de octubre de 2012.

Fecha de aprobación del Consejo Académico del Área de Ciencias Biológicas, Químicas y de la Salud: 3 de abril de 2013.

Objetivo general

El propósito del Doctorado es la formación de investigadores de competencia internacional en el campo de la Química, capaces de realizar investigación original e independiente y de contribuir al desarrollo de la ciencia y la tecnología mediante la identificación y solución de problemas del sector químico. Las actividades principales son el desarrollo de un proyecto de investigación, el cual debe tener un amplio componente de originalidad y la participación en seminarios académicos.

Con la preparación adquirida los graduados podrán:

- a) Realizar investigación original de alto nivel de manera independiente y contribuir al desarrollo e innovación tecnológicos ya que conocerán de manera profunda las bases científicas y tecnológicas de su campo de conocimiento.
- b) Plantear, realizar y evaluar proyectos de investigación original, en especial en el ámbito de su campo de especialización.
- c) Formar recursos humanos para la docencia y la investigación.

Perfiles del doctorado

De ingreso

El aspirante a ingresar al Plan de Estudios de Doctorado en Ciencias Químicas de la UNAM es deseable que sea un profesionista con: (a) una sólida formación en química, soportada por bases rigurosas y profundas del estudio científico de la materia, su estructura, transformaciones y relaciones con la energía, y un énfasis en la metodología y técnicas de investigación particularmente en las relacionadas con sus actividades de investigación previas, (b) experiencia en el planteamiento y la realización de trabajo de investigación la cual se manifieste a través de un conjunto de habilidades y destrezas prácticas que le permitan un desempeño independiente en su trabajo de investigación y (c) conocimientos del idioma inglés a nivel intermedio (al menos 350 puntos del TOEFL o su equivalencia, acordada por CA).

Intermedio

El alumno debe mostrar compromiso con los estudios de doctorado a través de las evaluaciones semestrales favorables. Al presentar y aprobar el examen de candidatura habrá demostrado poseer una sólida formación académica y capacidad para la investigación, particularmente en las relacionadas con la(s) línea(s) de trabajo y/o generación de conocimiento de sus actividades de investigación. La consolidación de la formación del candidato a doctor así como la calidad y originalidad de la investigación doctoral realizada se pondrá de manifiesto, principalmente, a través de la tesis y la publicación de sus resultados principales en una revista científica con arbitraje riguroso.

De egreso

El egresado del plan de estudios de doctorado de este Programa contará con lo siguiente:

Conocimientos

- Habrá adquirido un conocimiento sólido y profundo en las Ciencias Químicas, relacionado principalmente con su línea de trabajo y/o generación del conocimiento, que permita la realización de investigación original e independiente tanto en el ámbito de ciencia básica como de innovación tecnológica. Asimismo, será capaz de dirigir la formación de recursos humanos para el ejercicio profesional y la investigación química.

Habilidades y aptitudes

- Será capaz de proponer, desarrollar y evaluar proyectos de investigación, así como de plantear estrategias viables tendientes a su realización.
- Tendrá habilidades sólidas en diversos métodos y técnicas, particularmente en los relacionados con sus actividades de tesis.
- Manejará de manera crítica y ágil la información científica y técnica de fuentes especializadas de actualidad.
- Estará capacitado para realizar labores de docencia, colaborando con ello en la formación de recursos humanos en diversos niveles educativos.

Actitudes

- Superación constante.

- Trabajo en equipo.
- Conciencia social y ambiental.
- Razonamiento crítico y autocrítico.
- Liderazgo.
- Orientación al logro.

De graduado

El graduado de este Programa estará capacitado para realizar investigación original e independiente, la cual es fundamental en los procesos educativos y de descubrimiento, innovación y desarrollo de conocimiento básico y aplicado. Por consiguiente, será capaz de integrar un conjunto de conocimientos y razonamientos con objeto de establecer estrategias para la resolución de un problema científico en el área de la química y en disciplinas afines mediante el planteamiento, desarrollo o evaluación de un proyecto de investigación. Asimismo podrá participar en la formación de recursos humanos del más alto nivel.

De tal manera que el graduado podrá desempeñar sus actividades en Instituciones de Educación Superior, centros de investigación, en la industria química, en el sector gubernamental y de manera independiente.

Descripción general de la organización académica del plan de estudios:

La actividad principal a nivel de doctorado es la realización del trabajo de investigación original, a través del cual el estudiante integrará, sistematizará y aplicará conocimientos, pondrá en práctica su creatividad así como su destreza para el diseño de estrategias y metodologías para la resolución de un problema de investigación, que sea relevante en la química.

De acuerdo con el Reglamento de General de Estudios de Posgrado el alumno de doctorado deberá presentar semestralmente un plan de trabajo establecido con su tutor principal y avalado por su comité tutor; dicho plan deberá contener las actividades contempladas en el plan de estudios, las relacionadas

con su investigación y las adicionales que le sean asignadas por su tutor principal y su comité tutor.

El plan de trabajo debe incluir las siguientes actividades académicas:

a) Trabajo de Investigación I, II, III, IV, V, VI, VII y VIII

Estas actividades se configuran a partir del trabajo experimental que realiza el alumno bajo la asesoría directa de su tutor. Cada semestre el alumno deberá presentar un informe escrito y hacer una presentación oral detallada de los avances de su investigación a su comité tutor.

Los alumnos deberán inscribirse a Trabajo de Investigación los 8 semestres de forma obligatoria, eximiéndose la obligatoriedad para inscribirse en los siguientes semestres a la conclusión de la redacción de la tesis doctoral y cuenten con el aval de su comité tutor y del Comité Académico.

b) Seminario de Investigación I, II, III, IV, V y VI

Los seminarios de investigación abordarán, principalmente, temas de frontera dentro de las líneas de trabajo y/o generación de conocimiento del Programa y serán impartidos por un académico que debe cumplir los requisitos para tutores de doctorado. La evaluación del seminario será considerada por el tutor y el comité tutor en la evaluación semestral.

Los alumnos deberán cursar el Seminario de Investigación durante los 6 primeros semestres de forma obligatoria, sin valor en créditos. Eximiéndose la obligatoriedad para inscribirse en los siguientes semestres con el fin de que concluyan la redacción de la tesis doctoral, deberán contar con el aval de su comité tutor y del Comité Académico.

c) Seminario General del Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas

Esta actividad es de asistencia obligatoria, la cual tendrá las características y periodicidad que dicte el Comité Académico. Este seminario es el espacio académico en el cual los alumnos del Programa asisten y/o presentan sus avances de investigación, de acuerdo con el mecanismo que establezca el Comité Académico. Asimismo podrán incluir conferencias sobre diversos tópicos de química impartidos por profesores visitantes o por tutores del propio Programa, así como otras actividades que defina el Comité Académico. La no asistencia y/o participación en el Seminario General del Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas será revisada por el Comité Académico quien determinará lo procedente.

d) Otras actividades académicas que complementen su formación

De acuerdo con el RGEP los alumnos de doctorado podrán complementar su formación académica mediante las actividades indicadas por su comité tutor en el plan de trabajo, tales como: cursos, seminarios, talleres, actividades docentes y aquellas otras que proporcionen una formación académica sólida en los conocimientos generales de la disciplina y en los específicos de la o las LTGC de interés del alumno. Asimismo, el alumno deberá tener una participación activa en la vida académica del Programa y de la entidad académica en donde efectúe sus actividades de investigación.

Actividades adicionales para los alumnos que ingresen sin estudios de maestría:

El alumno que ingrese al doctorado sin estudios previos de maestría, deberá cursar y aprobar durante los dos primeros semestres del doctorado, sin valor en créditos pero de manera obligatoria, las actividades académicas teóricas del plan de estudios de la maestría que le asigne su comité tutor, por un mínimo de 24 créditos. La no aprobación de dos actividades académicas teóricas en un mismo semestre dará lugar a una evaluación semestral desfavorable.

ESTRUCTURA DE LOS SEMINARIOS DE INVESTIGACIÓN DE DOCTORADO

En la sesión del 14 de junio de 2004, el Comité Académico del Programa acordó comunicar a los estudiantes de Doctorado lo siguiente respecto de los **Seminarios de Doctorado**:

1) De acuerdo al Plan de Estudios del Programa en Ciencias Químicas, los Seminarios tienen carácter obligatorio durante los primeros 6 semestres de permanencia en el Doctorado. El Comité Académico decidirá los Seminarios que se ofrecerán semestralmente.

2) Cada semestre los estudiantes de Doctorado deberán inscribirse a uno de los Seminarios, sólo será posible llevar dos veces un mismo Seminario. **Cada Seminario consistirá de siete u ocho sesiones quincenales de dos horas cada una durante el semestre y sin valor en créditos.**

3) Los objetivos del Seminario son los siguientes:

- Aumentar la cultura química de los estudiantes.
- Incrementar las habilidades de búsqueda, síntesis y análisis de información.
- Incrementar las habilidades para la discusión de información científica.
- Incrementar las habilidades de comunicación oral.
- Fomentar la interacción entre estudiantes de las diferentes Líneas de Trabajo y/o Generación de Conocimiento.

4) El Comité Académico procura que los temas de los Seminarios cubran una amplia gama de áreas de la química y, en lo posible, sean de actualidad o se ubiquen en áreas emergentes de la química. Se considera que es importante y necesario que los estudiantes se inscriban a Seminarios cuya temática no se encuentre dentro del área en la que desarrollan su tesis.

5) Para decidir los Seminarios se solicitará cada semestre a los alumnos de Doctorado y a los tutores participantes en el Programa que sugieran temas, así como la propuesta de profesores responsables, o bien, si los propios tutores están interesados en impartirlos.

6) La propuesta de seminarios se presenta al SPIED y la determinación es realizada el Comité Académico. El responsable debe ser uno de los tutores del Programa cuya línea de investigación esté relacionada con el tema y, preferentemente, tenga un artículo publicado en dicho tema. El responsable puede invitar a dar una plática, dentro de las sesiones del Seminario, a un experto en la temática del Seminario.

7) La evaluación de los estudiantes se realizará por asistencia a las sesiones (con un mínimo del 80%) y con observaciones respecto a su desempeño. El responsable del seminario llena un acta por cada alumno y hará entrega de ellas a la Coordinación del Programa. Como un elemento más de juicio, esta evaluación estará en poder del Comité Tutor del estudiante cuando dicho comité se reúna

para evaluar los avances en el trabajo de investigación y el desarrollo académico alcanzado en ese mismo semestre.

8) Si el alumno no cumple con la asistencia requerida o con su compromiso en la participación, se emitirá una Evaluación Semestral Desfavorable.

Seminarios autorizados para el semestre 2017-1:

| No. | Seminario | Profesor (es) | Horario | No. de alumnos | Lugar |
|-----|--|---|--|-----------------|--|
| 1 | Catálisis biomimética | Dra. Claudia Paola Gómez-Tagle Chávez | Miércoles y viernes 10:00 a 11:30 h | 3-15 alumnos | Facultad de Química, Edificio B. |
| 2 | Degradación y reciclaje de hules | Dra. Selena Gutiérrez Flores | Jueves 8:00 a 10:00 h | Min. 2 Máx. 14 | Facultad de Química, Edificio B. |
| 3 | Determinación estructural de productos naturales por resonancia magnética nuclear | Dr. Mario Alberto Figueroa Saldívar | Martes y jueves 10:00 a 12:00 h, del 3 de octubre al 18 de noviembre | Min. 4 Máx. 15 | Facultad de Química, Edificio E. |
| 4 | Diseño de fármacos mediante métodos computacionales | Dr. Enrique García Hernández | Del 17 al 21 de Octubre, 9:00 a 19:00 h | Máximo 15 | SICA, Facultad de Química, Edificio B. |
| 5 | Diversas aplicaciones de complejos organometálicos del grupo 10 | Dr. Fernando Ortega Jiménez | Tentativo lunes de 10:00 a 14:00 h o viernes de 10:00 a 14:00 h | Min. 1 Máx. 8 | FES-Cuautitlán |
| 6 | Ecomateriales para ahorro de energía y remediación ambiental | Dr. Dwight Roberto Acosta Najarro | Miércoles a las 18:00 h | Máximo 15 | Instituto de Física |
| 7 | Evaluación de farmoquímicos y el papel que desempeñan en la biología molecular del cáncer | Dr. Marco Antonio Velasco Velázquez | Lunes de 17:00 a 19:00 h, inicia el 15 de agosto. | Min. 5 Máx. 15 | Unidad de Posgrado |
| 8 | Intersecciones cónicas en procesos de interés químico | Dr. J. Jesús Hernández Trujillo | Miércoles 17:00 a 18:30 h | Min.5 máx. 10 | Facultad de Química, Edificio B. |
| 9 | La química de la biomineralización | Dr. Sergio Ramos Bernal y Dra. María Colín García | lunes 15:00 a 17:00 | Min. 1 Máx. 8 | Instituto de Ciencias Nucleares |
| 10 | Metales de transición en sistemas biológicos: centros activos de metaloenzimas, metaloproteínas, modelos biomiméticos e inorgánica medicinal | Dra. Noráh Yolanda Barba Behrens | Lunes 12:00 a 15:00 h | Min. 3 máx. 12 | Facultad de Química, Edificio B. |
| 11 | Modelado molecular en nanomateriales de carbono | Dr. Vladimir Bassiouk Evdokimenko | Miércoles 13:00 a 16:00 h | Min. 1 Máx. 15 | ICN |
| 12 | Nanocarbonos: estructura, propiedades y aplicaciones. | Dra. Elena Golovataya Dzhymbeeva | Jueves 12:00 a 15:00 h | Min. 1 Máx. 15 | CCADET |
| 13 | Nanotecnología para sistemas biológicos | Dra. Ma. de la Luz Zambrano Zaragoza y Dra. Elizabeth Piñón Segundo | Jueves 10:00 a 12:00 h | Min. 3 máx. 12 | FES-Cuautitlán |
| 14 | Nuevas propiedades y aplicaciones de los materiales semiconductores nanoestructurados | Dra. América Rosalba Vázquez Olmos | Martes 10:00 a 13:00 h | Mín. 3 y máx 10 | CCADET |
| 15 | Preparación de artículos científicos: edición y seguimiento (2a. Parte) | Dr. José Luis Medina Franco y Dra. Karina Martínez Mayorga | Jueves 8:30 a 10:30 h | Máximo 16 | Instituto de Química |
| 16 | Preparación de artículos científicos: Organización y desarrollo | Dra. Karina Martínez Mayorga y Dr. José Luis Medina Franco | Martes 8:30 a 10:30 h | Máximo 16 | Instituto de Química |
| 17 | Propiedades Luminiscentes y Cinética en Sólidos Inorgánicos | Dr. EPIFANIO CRUZ ZARAGOZA | Jueves de 16:00 a 18:00 h | Min.2 máx. 10 | Instituto de Ciencias Nucleares |
| 18 | Química de productos naturales | Dr. Eduardo Guillermo Delgado Lamas | Martes 12:00 a 12:30 h | Máx. 15 | Instituto de Química |
| 19 | Química medicinal | Dra. Lena Ruiz Azuara | Viernes 12:00 a 14:00 h | Máx. 15 | Facultad de Química, Edificio B. |
| 20 | Química supramolecular y autoensamblaje | Dra. Martha Verónica Escárcega Bobadilla | Lunes 11:00 a 13:00 h | de 2 a 10 | Facultad de Química, Edificio B. |
| 21 | Química verde | Dr. René Miranda Ruvalcaba | Consultar con el profesor al correo mirruv@yahoo.com.mx | Máximo 15 | FES-Cuautitlán |

| | | | | | |
|----|---|---|---|----------------|----------------------|
| 22 | Química y salud integrativas | Dr. Raúl Guillermo Enríquez Habib | Consultar con el profesor al correo habib@unam.mx | Min. 2 máx. 10 | Instituto de Química |
| 23 | Superficies modificadas: propiedades y aplicaciones tecnológicas | Dra. Margarita Rivera Hernández | Martes 10:00 a 12:00 h | Min. 1 máx. 15 | Instituto de Física |
| 24 | Topología cuántica y análisis de función de onda | Dr. Fernando Cortés Guzmán y Dr. José Enrique Barquera Lozada | Miércoles 10:00 a 13:00 h | Máx. 25 | Instituto de Química |
| 25 | transporte de fármacos a través de membranas empleando nanoacarreadores | Dra. Flora Adriana Ganem Rondero | Jueves de 11:00 a 14:00 h | Máx. 15 | FES-Cuautitlán |

Ejemplos de contenido de los seminarios:

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