



UNIVERSIDAD TÉCNICA
FEDERICO SANTA MARÍA



Universidad
de Valparaíso
CHILE

REGLAMENTO
ADMINISTRATIVO Y ACADÉMICO DEL
PROGRAMA CONJUNTO DE
DOCTORADO EN CIENCIAS MENCIÓN QUÍMICA

Aprobado en UTFSM por CCDIP de fecha noviembre 21 de 2013.

Este Reglamento está señalado en la CLÁUSULA SÉPTIMA del CONVENIO ENTRE UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA Y UNIVERSIDAD DE VALPARAÍSO referido al Programa Conjunto de Doctorado en Ciencias mención Química, de fecha 2 de enero de 2007 firmado por ambos Rectores. Este Reglamento regula los aspectos académicos del Programa Conjunto; no obstante, por completitud han sido incluidos en su texto aspectos administrativos expresados en el citado Convenio.

DISPOSICIONES GENERALES

Artículo 1

El presente Reglamento se enmarca en el Reglamento General de los Estudios de Postgrado y en el Reglamento de Graduación para Grados de Doctor y Magíster de la UTFSM, y en el Reglamento General de Estudios de Postgrado y Postítulo de la UV; y es complementario en todas aquellas materias no contempladas en ellos. Este regula la organización y desarrollo del Programa Conjunto de Doctorado en Ciencias mención Química (en adelante el Programa), entre las Instituciones: Universidad de Valparaíso (UV) y Universidad Técnica Federico Santa María (UTFSM).

Participan y poseen la tuición del Programa en sus respectivas instituciones, el Departamento de Química y Bioquímica de la Facultad de Ciencias, la Facultad de Farmacia, ambos pertenecientes a la UV, y el Departamento de Química de la UTFSM.

El Programa data del año 2003, según consta el Decreto de Rectoría N°033/2003 de la UTFSM y el Decreto Exento N° 00560 de la UV.

Artículo 2

La duración del Programa es de ocho semestres y el plazo máximo para obtener el grado no podrá exceder de doce semestres. El estudiante debe tener una permanencia activa mínima en el Programa equivalente a 150 SCT en las instituciones UTFSM y UV (2,5 años) en régimen de jornada completa (o equivalente en jornada parcial).

Artículo 3

Nuestro Programa busca formar un investigador con una sólida formación en Ciencias en Química, que sea capaz de enfrentar desafíos y problemas cada vez más complejos en el ámbito científico de esta disciplina. El egresado debe ser capaz de desarrollar investigación con estándares internacionales en alguna de las áreas de la química de acuerdo a la especialidad elegida, evidenciado con la aceptación de al menos una publicación en una revista ISI antes de su graduación. Se espera que el graduado de este Programa sea capaz de formar equipos de trabajo, ser investigador líder en su especialización, creativo e independiente.

Artículo 4

El Programa ofrece cuatro áreas de especialización:

1. Química Orgánica
2. Química Inorgánica
3. Fisicoquímica
4. Química Analítica y Ambiental

TÍTULO I

ADMINISTRACIÓN DEL PROGRAMA

Artículo 5

El Comité Académico del Programa es la entidad que gestiona y administra el Programa Conjunto de Doctorado en Ciencias mención Química. Este Comité estará integrado por un Director de Programa, un Secretario Académico, y dos Profesores Representantes por cada Universidad. Adicionalmente, también integrarán el Comité Académico del Programa los Directores de Investigación y/o Postgrado de la UV y UTFSM (en su defecto sus equivalentes o representantes), teniendo poder de decisión sólo en materias de tipo administrativa y no académica.

Para cada período, se alternarán los cargos de Director de Programa y Secretario Académico entre las dos universidades participantes.

Artículo 6

Los representantes de cada universidad en el Comité Académico del Programa son elegidos en Asamblea del Consejo de Departamento respectivo, de entre los miembros del Claustro del Programa. El periodo de cada cargo tendrá una duración de tres años, sin posibilidad de re-elección consecutiva.

Artículo 7

Corresponde al **Comité Académico del Programa**, en adelante el “Comité”.

- a) Establecer los lineamientos estratégicos del Programa, controlando y fiscalizando su cumplimiento.
- b) Nominar al Director y el Secretario Ejecutivo.
- c) Aprobar el Presupuesto a proposición del Director.
- d) Recibir la cuenta anual del Director y pronunciarse sobre ella, antes de que sea presentada a las autoridades superiores.
- e) Decidir sobre las proposiciones del Director y/o Secretario Académico respecto al proceso de selección y graduación de estudiantes, en particular:
 - Cupos de Ingreso.
 - Comisión de selección.
 - Programación semestral/anual.
 - Comisión de Examen de Calificación y Examen de Tesis
 - Solicitudes de convalidación y/o homologación.
 - Conformación de la Comisión Examinadora de seminarios
- f) Aprobar la asignación de becas cuando corresponda, a través del puntaje de ingreso al Programa, junto con la solicitud de los candidatos.

- g) Aprobar la modificación de los currículos y presentar los antecedentes correspondientes a las autoridades superiores.
- h) Nombrar los Profesores del Programa en base a los criterios establecidos en este Reglamento, previa solicitud o proposición y presentación de antecedentes curriculares, sin perjuicio de las atribuciones de los Consejos de Unidades que poseen la tuición del Programa en sus respectivas instituciones.
- i) Formar comisiones para desarrollar aquellas funciones específicas que se les encomiende.
- j) Conocer cualquier otra materia que le proponga el Director o le sea consultada por las Universidades participantes y todo otro asunto que la normativa interna de cualquiera de las Universidades someta a su pronunciamiento.
- k) Aplicar los mecanismos de evaluación del Programa establecidos.
- l) Participar en las actualizaciones de los planes de desarrollo de las unidades que poseen la tuición del Programa en sus respectivas instituciones.
- m) Exponer ante el cuerpo académico del Programa situaciones de conflicto académico o disciplinario que se presentaren, para una adecuada resolución.
- n) Velar por el cumplimiento del presente Reglamento, proponer modificaciones y determinar situaciones excepcionales, siempre que tenga competencia para ello.
- o) Establecer en casos excepcionales, un número de plazas disponibles superior a las establecidas cada año para la realización de tesis de doctorado, basados en la capacidad de cada uno de los académicos directores de tesis, de acuerdo al número de estudiantes de posgrado en realización de tesis en su área respectiva y del número y calidad de los proyectos en curso dirigidos por el profesor en cuestión.

Artículo 8

Corresponde al **Director de Programa**:

- a) Representar al Programa en los ámbitos internos y externos, en el marco de su competencia.
- b) Dirigir y administrar el Programa y ejecutar y fomentar iniciativas que tiendan a su desarrollo integral.
- c) Gestionar la ejecución de todos los acuerdos del Comité.
- d) Elaborar el Presupuesto del Programa en conjunto con el Secretario Académico y presentarlo al Comité para su sanción conjunta con el Plan anual de actividades, sin perjuicio de la aprobación definitiva que deberán hacer las instancias universitarias correspondientes.
- e) Rendir una cuenta anual de su gestión al Comité, remitiendo informe a las autoridades superiores.
- f) Proponer al Comité la incorporación de nuevos profesores o el recambio de los ya existentes, por razones justificadas.
- g) Proponer al Comité modificaciones al Reglamento.

- h) Proponer al Comité proyectos de modificación de los currícula.
- i) Realizar todos los demás actos y diligencias que le encomiende el Comité o las autoridades universitarias de conformidad a la reglamentación vigente.

Artículo 9

Corresponde al **Secretario Académico**:

- a) Subrogar al Director.
- b) Cursar citaciones, levantar y conservar las actas oficiales del Comité.
- c) Asesorar al Director en todas las materias que éste le solicite.
- d) Colaborar con el Director en la ejecución de los acuerdos del Comité, en la elaboración del Presupuesto, y en fomentar iniciativas que tiendan al desarrollo integral del Programa.
- e) Conocer y resolver las solicitudes de los estudiantes de conformidad con la reglamentación vigente de las Universidades participantes y del Programa en particular.
- f) Planificar la programación académica semestral/anual del programa.
- g) Proponer al Comité la formación de las Comisiones de Examen de Calificación y Examen de Tesis.
- h) Proponer al Comité la resolución de solicitudes de convalidación y/o homologación.

Artículo 10

Los Profesores Representantes son consejeros y asesores del Director del Programa y del Secretario Académico y velarán por el cumplimiento de este Reglamento y todas las actividades concernientes al Programa.

Artículo 11

En caso de ausencia o impedimentos temporales del Director, éste será subrogado por el Secretario Académico, el cual deberá cumplir con las mismas obligaciones del Director. En su defecto, el Director será subrogado por uno de los Profesores Representantes, el que será elegido de común acuerdo por el Comité en el momento de constituirse.

En caso de ausencia o impedimentos temporales del Secretario Académico, éste será subrogado por un Profesor Representante, el cual deberá cumplir con las mismas obligaciones del Secretario.

Artículo 12

El Comité sesionará a lo menos una vez cada dos meses y, en forma extraordinaria, cuando el Director lo convoque o lo solicite por escrito al menos un tercio de los integrantes del Comité.

El Director de Programa, previo a una reunión de Comité, informará a los Directores de Investigación y/o Postgrado de la UV y USM los temas a tratar en dicha reunión. De acuerdo a lo anterior, y fundamentado en el Artículo 5, los Directores de Investigación y/o Postgrado podrán optar libremente de asistir o no a dicha reunión.

Todas las materias académicas y/o administrativas del inciso precedente requerirán, para su aprobación y/o modificación, el voto de la mayoría absoluta del Comité la cual, en materias de tipo académico, excluye a los Directores de Investigación y/o Postgrado.

TITULO II

DEL CUERPO ACADÉMICO DEL PROGRAMA

Artículo 13

El Cuerpo Académico del Programa lo integrarán aquellos Profesores con Grado de Doctor y estará conformado por tres categorías:

1. Pertenecientes al Claustro del Programa y Directores de Tesis:

Para ser considerados en el Claustro del Programa, los académicos deben preferentemente pertenecer a las dos más altas jerarquías académicas de las instituciones y cumplir con los siguientes requisitos:

- a) Tener el Grado de Doctor.
- b) Poseer jornada completa en una de las Universidades.
- c) Poseer publicaciones indexadas igual o superior a 1,5 promedio por año desde hace 5 años o 7 publicaciones indexadas promedio por cada cinco años.
- d) Si el académico posee patentes de invención, una patente de invención se considerará equivalente a una publicación internacional.
- e) Si no se cumple con el número de publicaciones indexadas exigidas en el punto anterior, la sumatoria de los índices de impacto de éstas deberá ser superior o igual a 10 en los últimos cinco años.
- f) Demostrar línea de investigación independiente, avalada en publicaciones y proyectos concursables con financiamiento externo, como investigador responsable.

2. Profesores Colaboradores del Programa

Profesores con grado de Doctor, contratados en jornada completa por una de las dos universidades que participan de este Programa, quienes cuentan con una importante experiencia en docencia e investigación.

Podrán Co-Dirigir Tesis.

3. Profesores Visitantes

Deben poseer el grado de Doctor, cumplir con los mismos requisitos de los profesores pertenecientes al Claustro y contar con la aprobación del Comité Académico, con la diferencia que pertenecen a una universidad distinta a la USM y UV.

Podrán Co-Dirigir Tesis.

Artículo 14

Sin perjuicio de lo establecido en el Artículo anterior, cualquier profesor jornada completa en una de las dos Universidades, puede ser Académico Coordinador, quien tiene la responsabilidad de velar por el cumplimiento de las exigencias incluidas en cada uno de los programas de asignaturas.

TITULO III REQUISITOS DE INGRESO

Artículo 15

Para postular al Programa se requiere cumplir los siguientes requisitos básicos:

1. Estar en posesión de un grado académico de Licenciado o Magíster en la disciplina de Química. El Comité Académico del Programa podrá autorizar, excepcionalmente, mediante resolución, acorde con los requerimientos administrativos de cada Institución, el ingreso de personas que se encuentren en trámites finales de graduación o situaciones académicas que lo ameriten. Tales personas serán admitidas en forma condicional, estando su aceptación definitiva supeditada a la obtención del grado correspondiente, de conformidad al procedimiento que al efecto apruebe el Comité.
2. Tener promedio de notas en pregrado superior o igual a 70 (en escala de 0 a 100) o 5,0 (en escala de 1 a 7).
3. Perfil académico acorde a los objetivos del Programa.

Artículo 16

Si el postulante cumple los requisitos de postulación antes mencionados, debe presentar una solicitud escrita dentro de los plazos previstos con los antecedentes solicitados por el Programa.

Artículo 17

Los postulantes serán evaluados por medio de un Examen de Conocimientos, el cual tratará de un tema elegido por el estudiante dentro de un abanico de temas propuestos por Profesores con calidad de Directores de Tesis. El tema elegido será expuesto por el estudiante frente a una Comisión de Selección y al Director del Programa o (o el Secretario Académico), el que actuará como Ministro de Fe.

Esta misma Comisión realiza una entrevista personal a todos los postulantes, el mismo día en que se realiza el examen de conocimientos anteriormente descrito, con el objeto de conocer sus intereses y expectativas respecto al Programa.

Artículo 18

La Comisión de Selección, estará compuesta por 4 Directores de Tesis, dos de cada institución y de diferentes áreas de investigación. Esta Comisión es elegida y aprobada por el Comité Académico del Programa para cada ciclo de postulación (una vez al año).

Artículo 19

Los postulantes son ordenados en un “ranking de ingreso” según criterios definidos, donde cada postulante obtiene un puntaje según sus ANTECEDENTES ACADÉMICOS y los resultados del EXAMEN DE CONOCIMIENTOS, con una ponderación de 75% y 25% respectivamente., el cual es ordenado de mayor a menor (ranking).

Artículo 20

La Comisión de Selección propondrá al Comité la admisión o rechazo del postulante al Programa, de acuerdo a los resultados obtenidos del proceso de postulación, pudiendo establecer exigencias y plazos de nivelación, las que deberán quedar formalmente registradas en la ficha del estudiante.

La selección de postulantes, así como la provisión de becas de arancel y mantenimiento, finalmente está sujeta al ranking (Artículo 19) y a la entrevista personal.

El Comité cuidará que exista un adecuado equilibrio entre el número de estudiantes aceptados y el total de recursos disponibles.

Artículo 21

Ingreso especial: Podrán postular también aquellas personas que estén actualmente cursando un Programa de Doctorado o Magister equivalente dentro de otra Universidad Nacional y que deseen continuar sus estudios en el Programa Conjunto de Doctorado UV-USM. Para los estudiantes de ingreso especial, además de la documentación requerida para postular, se solicitará certificado de notas de los cursos del Programa de Doctorado o Magister aprobados y una carta explicando los motivos por los cuales abandona su actual Programa de Postgrado y los deseos de continuar sus estudios en el Programa Conjunto de Doctorado UV-USM.

Artículo 22

El Director del Programa, previa resolución del Comité, informará a las instancias pertinentes, la nómina de postulantes seleccionados adjuntando la documentación exigida por este Reglamento.

Artículo 23

Son estudiantes regulares del Programa las personas que, cumpliendo con la Reglamentación, se matriculen administrativa y académicamente en el Programa. Para que este proceso sea efectivo, el estudiante debe cancelar el 50% del total del monto de la matrícula en cada Universidad, de acuerdo a lo estipulado en cada una de sus respectivas Direcciones de Investigación y/o Postgrado.

Artículo 24

La homologación y convalidación de asignaturas tendrá carácter excepcional y se aplicará solamente a las asignaturas obligatorias del Programa. Para la homologación y convalidación, el estudiante deberá rendir los exámenes correspondientes. Si el estudiante reprueba los exámenes, tendrá que rendir los cursos nuevamente. En ningún caso podrá concederse homologación o convalidación de la Tesis de Grado. Las solicitudes de convalidación y homologación deberán ser presentadas al Comité.

TITULO IV DE LAS ACTIVIDADES ACADÉMICAS

Artículo 25

Nuestro Programa se basa en el Sistema de Créditos Transferibles (SCT) para definir la carga académica del Programa. Para un estudiante de doctorado con una carga académica de jornada completa, se considera un total de 30 SCT semestral, considerando horas directas (presenciales) e indirectas (no presenciales).

Artículo 26

Para obtener el grado de Doctor en Ciencias, mención Química, se requiere aprobar todas las actividades del Plan de Estudios, que se compone de 240 créditos SCT-Chile. Se exige además, aprobar un Examen de Calificación, la Tesis Doctoral y el Examen de Grado.

Artículo 27

Las actividades del Plan de Estudios del Programa son las siguientes:

1. **Asignaturas obligatorias:** Son aquellas asignaturas presenciales de nivel avanzado que todos los estudiantes deben cursar obligatoriamente, independiente de su área de especialización. Tienen 15 créditos SCT-Chile
2. **Asignatura Electiva de Especialización:** Son aquellas asignaturas presenciales destinadas a desarrollar líneas de especialización y a entregar conocimientos específicos para la realización de la Tesis Doctoral. Tienen 15 créditos SCT-Chile.
3. **Seminarios:** Son actividades obligatorias, en las que el estudiante expone un tema basado en un análisis bibliográfico de trabajos relevantes, propuesto por algún Profesor del Programa o por el mismo estudiante y es evaluado por una Comisión de Seminario elegida y aprobada por el Comité. Tienen 8 créditos SCT-Chile.
4. **Actividades de Tesis:** Corresponden a la Tesis Doctoral y otras asignaturas previas relacionadas con la misma: Introducción a la Tesis y Proyecto de Tesis, el cual culmina con un Examen de Calificación (defensa del mismo). La Tesis Doctoral es un trabajo individual de investigación original que debe representar un aporte al conocimiento y sustentarse en una hipótesis verificable. Estas Actividades de Tesis representan, en suma, no menos del 50% de los créditos SCT-Chile del Plan de Estudios del Programa.

Además el Programa ofrece:

5. **Asignaturas de Nivelación:** Aquellas que se exige cursar a estudiantes que tienen alguna debilidad de acuerdo a su formación original. No suman créditos.
6. **Asignaturas Complementarias:** Aquellas que contribuyen a la formación doctoral en las áreas no contempladas en su formación original, y pueden corresponder a prerrequisitos de las asignaturas de especialidad. No suman créditos.

Artículo 28

Al momento de pre-inscribir la Tesis, los estudiantes quedarán bajo la supervisión de un Director de Tesis, quien deberá velar por el buen desempeño del estudiante y desarrollo de su Proyecto de Tesis. De la misma manera, el Director

de Tesis deberá informar oportunamente al Comité del Programa sobre el desempeño del estudiante en sus labores del Proyecto de Tesis.

Artículo 29

Los estudiantes del Programa podrán cursar asignaturas en otras Universidades en programas acreditados, siempre y cuando posean una equivalencia en créditos igual o superior al curso impartido por el Programa Conjunto UV-USM, lo cual será validado por el Director de Tesis ante el Comité del Programa.

Artículo 30

Los estudiantes podrán interrumpir sus estudios por un plazo máximo de un año, previa solicitud, debidamente justificada, presentada al Comité.

Artículo 31

Toda actividad académica estará sujeta a evaluación, la que se expresará por medio de una calificación.

Las normas y criterios de evaluación de cada actividad serán comunicados a los estudiantes por el Profesor al inicio del período académico correspondiente.

Artículo 32

La escala de calificaciones para cada asignatura (Asignaturas Obligatorias, Asignaturas Electivas y Seminarios) será de 1,0 a 7,0 o de 0 a 100 y la calificación mínima de aprobación será de 5,0 o 70, según Tabla de conversión de notas definida.

Artículo 33

El Comité podrá autorizar, excepcionalmente y por una sola vez la repetición de una asignatura, obligatoria o electiva.

TITULO V

DEL EXAMEN DE CALIFICACIÓN

Artículo 34

En el semestre II del Plan de Estudios, el estudiante deberá estar incorporado en un grupo de Investigación del Programa y empezando con trabajos relacionados con su tesis Doctoral, lo cual será avalado por el Director de Tesis.

Artículo 35

Al final del Semestre III del Plan de Estudios, el estudiante deberá entregar su Proyecto de Tesis Doctoral y rendir el Examen de Calificación, basado en este Proyecto, ante la Comisión de Examen de Calificación.

El Proyecto de Tesis Doctoral consiste en una propuesta de investigación original elaborada en base a un formulario *ad-hoc* disponible en el documento Anexo 7 y en la página web del Programa.

Artículo 36

La Comisión de Examen de Calificación es propuesta por el Director de Tesis y aprobada por el Comité para cada estudiante. Estará integrada por 4 Profesores del Programa con al menos 1 profesor de área diferente al Director de Tesis, y 1 Profesor Externo a las Universidades experto en el área.

Artículo 37

El Examen de Calificación consiste en la defensa de la presentación oral del Proyecto de Tesis; y es evaluado como Aprobado, Rechazado o Aprobado con observaciones, de acuerdo a pauta de evaluación definida.

Cuando es Rechazado, el estudiante debe reformular su Proyecto de Tesis para someterse a un segundo y último Examen de Calificación, presentándolo en un plazo máximo de un mes, tomando en consideración las recomendaciones y observaciones que entregarán por escrito los integrantes de la Comisión de Examen de Calificación. Si en esta segunda oportunidad vuelve a ser mal evaluado, el estudiante perderá su condición de estudiante del Programa.

TITULO VI DE LA TESIS Y EXAMEN DE GRADO

Artículo 38

La Tesis Doctoral se debe inscribir formalmente una vez aprobado el Examen de Calificación, con lo cual el estudiante adquiere la condición de Candidato a Doctor.

Artículo 39

Durante el desarrollo del trabajo de Tesis Doctoral, después de la aprobación de su Examen de Calificación, el estudiante debe presentar un avance de tesis con presentación oral, frente a la comisión de Examen de Calificación, señalado en el Programa Curricular (Anexo 4). El criterio de evaluación se aplicará de acuerdo a lo establecido en Anexo 8.

Artículo 40

Una vez culminado el trabajo de Tesis, y previa aprobación del Director de Tesis, el Candidato a Doctor debe presentar su trabajo escrito de Tesis a la Comisión de Tesis, que dispondrá de un plazo máximo de 30 días corridos para su revisión y evaluación, de acuerdo a pauta de evaluación definida.

Será condición necesaria, que el candidato haya logrado la aceptación de un artículo para su publicación en una revista ISI o de corriente principal.

Artículo 41

La Comisión de Tesis estará constituida por el Director de Tesis y los miembros de la Comisión de Examen de Calificación. El evaluador externo será nominado por las instancias correspondientes de USM y UV a proposición del Comité.

El Director del Programa designará, de entre los miembros de la Comisión de Tesis, a quien la presida, no pudiendo recaer esta responsabilidad en el Director de Tesis.

Artículo 42

Una vez evaluado y aprobado el trabajo escrito de Tesis, el Director de Tesis solicitará la convocatoria a Examen de Grado.

Artículo 43

El Examen de Grado consiste en un Examen Privado y un Examen Público, no superando 15 días hábiles entre ellos.

Ambos exámenes serán presididos por el Director del Programa de Doctorado o quien lo represente, y consisten en una presentación oral y defensa de Tesis por parte del Candidato a Doctor ante la Comisión de Tesis.

Si por alguna situación muy justificada un miembro de la Comisión de Tesis no pudiera estar presente en el Examen de Grado, éste deberá enviar su informe por escrito antes del Examen Privado. Si esta situación se presenta para el Evaluador Externo, este examen no se podrá llevar a efecto hasta que una nueva fecha sea fijada.

Artículo 44

La Comisión de Tesis evaluará el Examen de Grado de acuerdo a pauta de evaluación definida, promediando las notas de Examen Privado y Examen Público.

Si la calificación fuese menor a 6.0 u 85, nota mínima de aprobación, la Comisión de Tesis dentro de los 5 días hábiles siguientes a la realización del Examen de

Grado, determinará conceder o no una última oportunidad para que el candidato al Grado rinda el Examen nuevamente en un determinado plazo.

Artículo 45

La evaluación final de la Tesis Doctoral se obtendrá del promedio entre las notas de: trabajo escrito, examen privado y examen público.

DISPOSICIONES FINALES

Artículo 46

El Grado de Doctor en Ciencias, mención Química, será único para las dos Universidades, y se conferirá al candidato que hubiere aprobado y cumplido todos los requisitos académicos y administrativos exigidos.

La calificación final del Programa resultará del promedio ponderado con la siguiente modalidad:

- 40% correspondientes al promedio ponderado de las notas de las asignaturas.
- 60% correspondiente a la nota final de la Tesis Doctoral.

Artículo 47

La calificación de Grados o Títulos de Especialistas se expresará en los siguientes conceptos: Aprobado, Aprobado con distinción, Aprobado con distinción máxima. Los rangos de notas asociados a cada concepto son los siguientes:

- **Aprobado:** Corresponde a una nota final comprendida entre 70-87 (5,0 y 6,1)
- **Aprobado con distinción:** Corresponde a una nota final comprendida entre 88-94 (6,2 y 6,6)
- **Aprobado con distinción máxima:** Corresponde a una nota final comprendida entre 95-100 (6,7 y 7,0)

En los certificados de grados o títulos deberá dejarse constancia de la nota y el concepto correspondiente. En los diplomas sólo figurarán los conceptos.

Artículo 48

El Director del Programa remitirá a las respectivas Direcciones de Investigación y/o Postgrado de las dos Universidades, los expedientes de los candidatos que

hubieren cumplido con los requisitos para optar al Grado de Doctor, indicando en cada caso la calificación final obtenida.

Artículo 49

El presente Reglamento regirá a contar del momento de su aprobación y corresponderá al Comité resolver las dudas que puedan plantearse y sus posibles vacíos.



UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA



Universidad
de Valparaíso
CHILE

ANEXOS

DE REGLAMENTO INTERNO ADMINISTRATIVO
Y ACADÉMICO DEL PROGRAMA CONJUNTO DE

DOCTORADO EN CIENCIAS MENCIÓN QUÍMICA

Dada la naturaleza del trabajo académico y en pos de un mejoramiento continuo, los Anexos del presente reglamento serán revisados y sancionados anualmente. Si se registraren cambios esenciales, éstos aplicarán solamente a nuevas cohortes de estudiantes.

ÍNDICE DE ANEXOS:

Anexo 1.	Conformación Comité Académico.....	18
Anexo 2	Composición del Cuerpo Académico	19
Anexo 3	Requisitos Admisión del Programa	20
Anexo 4.	Programa Curricular.	21
4.1	<i>Malla Curricular</i>	21
4.2	<i>Créditos Malla Curricular</i>	22
Anexo 5.	Tabla de Conversión de Notas	24
Anexo 6.	Ranking de postulación al Programa.	25
6.1	<i>Tabla de Evaluación de Antecedentes de Postulación</i>	25
6.2	<i>Evaluación Examen de Conocimientos</i>	28
Anexo 7.	Evaluación Proyecto de Tesis y Examen de Calificación	30
Anexo 8.	Evaluación de Tesis Doctoral	45
Anexo 9.	Programas de Asignaturas	49
Anexo 10.	Laboratorios disponibles para el desarrollo de Tesis Doctorales.....	49

Anexo 1. Conformación Comité Académico

El Comité Académico del Programa es la entidad que gestiona y administra el Programa Conjunto de Doctorado en Ciencias mención Química, cuyos integrantes se encuentran jerarquizados como muestra la figura1.

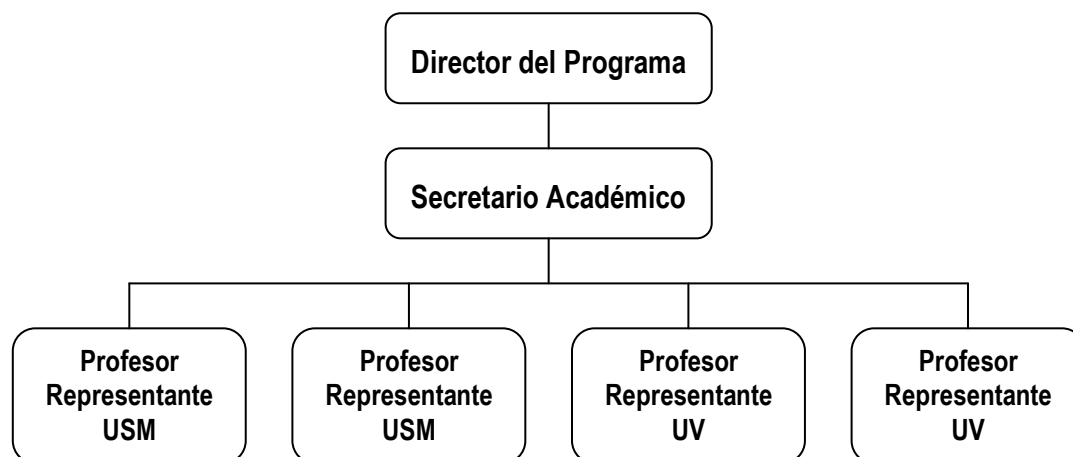


Figura 1. Integrantes del Comité Académico.

Actualmente, los académicos que conforman el Comité son (desde 2013 hasta 2015).

Cargo	Nombre	Institución
Director	Dr. Gonzalo Riveros Patroni	UV, Departamento de Química y Bioquímica (Facultad de Ciencias).
Secretario Académico	Dr. Luis Espinoza Catalán	UTFSM, Departamento de Química.
Representante	Dr. Mauricio Cuellar Fritis	UV, Facultad de Farmacia.
Representante	Dr. Rodrigo Segura Del Río	UV, Departamento de Química y Bioquímica (Facultad de Ciencias).
Representante	Dr. Arie Aizman Rosenblum	UTFSM, Departamento de Química.
Representante	Dr. Claudio Morgado Espinoza	UTFSM, Departamento de Química.

Anexo 2 Composición del Cuerpo Académico

NOMBRE Y APELLIDO ACADÉMICO	ÁREA PRINCIPAL	DIRECCIÓN DE TESIS	INSTITUCIÓN
Mauricio Cuellar	Química Orgánica	Sí	UV
Luis Espinoza	Química Orgánica	Sí	UTFSM
Marisol Tejos	Química Orgánica	No	UV
Juan Villena	Química Orgánica	No	UV
Cristián Salas	Química Orgánica	No	PUC
Jaime Mella	Química Orgánica	No	UV
Alejandra Urtubia	Química Orgánica	No	UTFSM
Carlos Areche	Química Orgánica	No	UCHILE
Héctor Carrasco	Química Orgánica	No	UNAB
Rodrigo Segura	Química Inorgánica	Sí	UV
Guillermo Díaz	Química Inorgánica	No	UPLA-UTFSM
Mario Ollino	Química Inorgánica	No	UTFSM
Patricio Reveco	Química Inorgánica	No	UTFSM
Arie Aizman	Fisicoquímica	Sí	UTFSM
Claudio Morgado	Fisicoquímica	No	UTFSM
Juan Ojeda	Fisicoquímica	No	UV
Daniel Ramírez	Fisicoquímica	Sí	UV
Gonzalo Riveros	Fisicoquímica	Sí	UV
Renato Contreras	Fisicoquímica	No	UCHILE
Patricio Leyton	Fisicoquímica	No	PUCV
Andrés Olea	Fisicoquímica	No	UNAB
Juan Guerrero Núñez	Fisicoquímica	No	USACH
Francisco Cereceda	Química Analítica y Ambiental	Sí	UTFSM
Michael Seeger	Química Analítica y Ambiental	Sí	UTFSM
María Gabriela Lobos	Química Analítica y Ambiental	Sí	UV
María Soledad Lobos	Química Analítica y Ambiental	No	UV
Roberto Quiroz	Química Analítica y Ambiental	No	UV

Anexo 3 Requisitos Admisión del Programa

Para postular al programa, cumpliendo los requisitos señalados en el Art. 15, debe realizar el siguiente procedimiento:

1. **Presentar los siguientes documentos:**

- Formulario de Solicitud de Admisión¹.
- Copia de Certificado de Título o Grado debidamente legalizado.
- Copia de Certificado de Notas correspondientes a asignaturas del Título o Grado de mayor nivel, debidamente legalizado.
- Dos cartas de Recomendación confidenciales en sobre cerrado dirigido al Director del Programa.
- Dos fotografías de tamaño 3 x 4 [cm].
- Breve explicación de las motivaciones para incorporarse al Programa y forma de financiamiento de los aranceles y estudios.

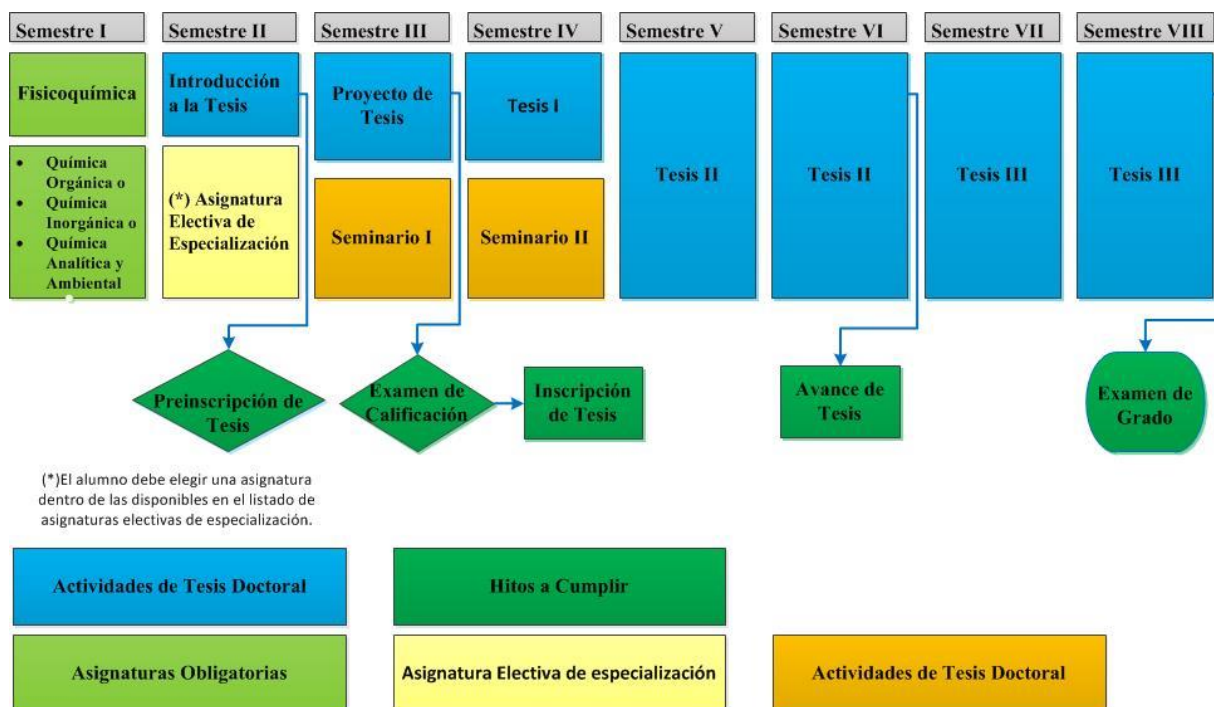
2. **Someterse a una entrevista de ingreso:**

A todos los postulantes se les realiza una entrevista, la cual, aunque no tiene influencia en el proceso de ranking, servirá como una instancia de selección entre los postulantes. Aquellos postulantes que, a pesar de obtener calificaciones suficientes en sus antecedentes académicos y en el Examen de Conocimientos, no cumplan con las expectativas de la Comisión en la entrevista personal, no serán admitidos en el Programa Conjunto de Doctorado UV-USM. De la misma manera, la entrevista podrá seleccionar entre aquellos postulantes que cumplan con las expectativas del Programa y se hagan merecedores de la Beca de Estudios entregada por el Programa de Doctorado, cuando éstas se hicieran escasas.

¹Descargables en: www.doctoradoconjuntoquimica.cl

Anexo 4. Programa Curricular.

4.1 Malla Curricular



Hitos:

- Pre-Inscripción de Tesis (Hito 1):** Al final del primer semestre, el estudiante debe pre-inscribir su tema de tesis. Si al final del primer semestre, el estudiante aún no define dónde o con quién realizará su tesis, este Hito se puede realizar hasta al final del segundo semestre.
- Examen de Calificación (Hito 2):** El Proyecto de Tesis culmina con el “Examen de Calificación”, en donde el estudiante defiende su Proyecto.
- Avance de tesis (Hito 3):** Al final del sexto semestre, el estudiante debe presentar un avance de tesis frente a la comisión del Examen de Calificación.
- Examen de Grado (Hito 4):** Al final del cuarto año, el estudiante deberá rendir su Examen de Grado.

4.2 Créditos Malla Curricular

Actividades del Plan de Estudios

NOMEN-CLATURA	TIPO DE ACTIVIDAD	NOMBRE ACTIVIDAD	HRS. CÁTEDRA SEMANA (SC USM)	SCT-CHILE	TOTAL SCT-CHILE
A-1	Asignatura Obligatoria	Fisicoquímica	4	15	30
		Química Orgánica o Química Inorgánica o Química Analítica Ambiental(*)	4	15	
A-2	Asignatura Electiva de Especialización	Listado de asignaturas electivas para elegir (**)	4	15	15
A-3	Seminarios	Seminarios I	2	8	16
		Seminarios II	2	8	
A-4	Actividades de Tesis	Introducción a la Tesis	10	15	179
		Proyecto de Tesis	20	22	
		Tesis I	12	22	
		Tesis II	32	60	
		Tesis III	32	60	
Total Créditos SCT-Chile					240

(*) El estudiante escoge una de las tres como Asignatura Obligatoria, de acuerdo al Área de Especialización que decida continuar.

(**) El estudiante escoge una Asignatura Electiva de Especialización dentro de las ofrecidas para el tipo de actividad A-2 de acuerdo al Área de Especialización que decida continuar.

A continuación se indican las asignaturas que ofrece el Programa, señalando el tipo de actividad y el Área de Especialización, de acuerdo a la siguiente Nomenclatura:

NOMENCLATURA ÁREA ESPECIALIZACIÓN

- 1** Asignatura recomendada para especialidad en **Química Orgánica**
- 2** Asignatura recomendada para especialidad en **Química Inorgánica**
- 3** Asignatura recomendada para especialidad en **Fisicoquímica**
- 4** Asignatura recomendada para especialidad en **Química Analítica & Ambiental**

Asignaturas del Plan de Estudios de acuerdo al Tipo de Actividad (Donde N.A.= No Aplica):

NOMBRE ASIGNATURA	SIGLA	DURACIÓN	TIPO DE ACTIVIDAD				NOMENCLATURA ÁREA ESPECIALIZACIÓN
			A-1	A-2	A-3	A-4	
Fisicoquímica Avanzada	PDQ – 501	1 Semestre	X				1, 2, 3, 4
Química Orgánica Avanzada (*)	PDQ – 502	1 Semestre	X				1
Química Inorgánica Avanzada (*)	PDQ – 503	1 Semestre	X				2
Química Analítica Ambiental (*)	PDQ – 519	1 Semestre	X				4
Introducción a la Tesis	PDQ – 514	1 Semestre				X	N.A.
Seminario I	PDQ – 505	1 Semestre			X		N.A.
Seminario II	PDQ – 513	1 Semestre			X		N.A.
Técnicas Espectroscópicas en Química Orgánica.	PDQ – 504	1 Semestre		X			1, 3
Química y Contaminación Atmosférica	PDQ – 506	1 Semestre		X			4
Heterociclos de Uso Farmacéutico	PDQ – 507	1 Semestre		X			1
Electroquímica Aplicada	PDQ – 508	1 Semestre		X			2, 3
Introducción a la Modelación Molecular	PDQ – 509	1 Semestre		X			1, 2, 3
Química de Materiales	PDQ – 510	1 Semestre		X			2, 3
Modelos de Evaluación Biológica	PDQ – 511	1 Semestre		X			1
Química de Suelos	PDQ – 512	1 Semestre		X			4
Química de Productos Naturales	PDQ – 520	1 Semestre		X			1
Electroquímica y Foelectroquímica de Semiconductores	PDQ – 521	1 Semestre		X			2, 3
Fundamentos de Química Computacional	PDQ – 522	1 Semestre		X			1, 2, 3
Química Teórica de Compuestos de Coordinación	PDQ – 523	1 Semestre		X			2
Proyecto de Tesis	PDQ – 515	1 Semestre				X	N.A.
TESIS I	PDQ – 516	1 Semestre				X	N.A.
TESIS II	PDQ – 517	2 Semestres				X	N.A.
TESIS III	PDQ – 518	2 Semestres				X	N.A.

Página 24 de 120

Anexo 6. Ranking de postulación al Programa.

6.1 Tabla de Evaluación de Antecedentes de Postulación

Para cada postulante se llena la siguiente tabla con sus antecedentes académicos.

N°	ASPECTOS A EVALUAR	PONDERACIÓN	EL POSTULANTE CUMPLE CON:	NOTA ASIGNADA (*)	NOTA ASIGNADA PONDERADA
1	Promedio Notas Pregrado	35%			
2	Título o Grado	20%			
3	Publicaciones	20%			
4	Congresos	8%			
5	Participación Proyectos	8%			
6	Cartas de Recomendación	5%			
7	Postulante recién egresado	4%			
TOTAL		100%			

(*) La nota asignada corresponde a los criterios de evaluación de acuerdo a la condición del estudiante en cada aspecto a evaluar, explicado en este documento.

6.1.1 Criterios de Evaluación

La Tabla anterior debe ser completada de acuerdo a los siguientes criterios establecidos para cada uno de los aspectos a evaluar, para cada uno de los postulantes.

1. Promedio de Notas Pregrado (35%)

El puntaje asignado para las notas corresponde al promedio de notas de todas las asignaturas cursadas y aprobadas por el postulante en su plan de estudio, incluyendo la defensa de tesis de pregrado o su equivalente, si corresponde. Se exige como nota mínima de aceptación al Programa un 4,3 (escala de 1 a 7) o su equivalente a 60 (escala de 0 a 100).

2. Título o Grado Académico (20%)

De acuerdo a los estudios cursados el postulante y su afinidad con el Programa, al postulante se le asignará el siguiente puntaje preestablecido:

TÍTULO O GRADO ACADÉMICO	PUNTOS
Magíster en Ciencias	5
Licenciado en Ciencias Químicas	4
Químico	4
Bioquímico	4
Químico Farmacéutico	4
Químico Industrial	3
Ingeniero Químico	3
Ingeniero Bioquímico	3
Otro*	2-1

**Dependerá de las asignaturas de química cursadas y aprobados en su malla curricular, la Comisión de Selección usará el criterio para asignar nota 1 o 2. (Ingeniería Ambiental, Ingeniería en Alimentos, Pedagogía en Química, etc.)*

3. Publicaciones (20%)

De acuerdo a los trabajos PUBLICADOS por el postulante, se le asignará por cada una de las publicaciones, el siguiente puntaje preestablecido:

- 3 puntos por cada publicación ISI
- 2 puntos por cada publicación no ISI
- 1 puntos por otro tipo de publicación académica.

4. Asistencia a Congresos (8%)

Si el postulante ha presentado, de manera presencial o no, trabajos en Congresos nacionales o internacionales en calidad de autor o co-autor de uno o varios trabajos (oral o póster), se le asignará la siguiente puntuación:

- 3 puntos por cada presentación oral en algún congreso nacional o internacional.
- 2 puntos por cada presentación en algún congreso nacional o internacional con un poster como autor (presencial o no presencial)
- 1 puntos por cada presentación en algún congreso nacional o internacional con un poster como co-autor (presencial o no presencial)

5. Trabajos en Proyectos de Investigación (8%)

Si el postulante ha participado como colaborador en uno algún proyecto de Investigación, se le asignará la siguiente puntuación de acuerdo a su participación:

- 3 puntos por cada proyecto de investigación en que haya participado.
- 1 puntos por cada proyecto de otra índole en cual haya participado

6. Cartas de Recomendación (5%)

De acuerdo a las cartas recomendación presentadas por los postulantes, se le asignará puntaje a cada carta de acuerdo a los siguientes valores preestablecidos:

- 3 puntos si ambas cartas son muy buenas.
- 2 puntos si una de las cartas es muy buena y la otra “aceptable”
- 1 punto si ambas cartas son “aceptables”
- Si ambas cartas o una de ellas fuera mala, se evaluará la situación de manera especial.

7. Postulante Recién Egresado (4%)

A los postulantes que hayan egresado recientemente de sus carreras, o estén recién titulados (a la fecha de la postulación el título tiene que estar en trámite o aún no haber iniciado los trámites para la titulación) y que por tales razones no han podido ver materializado su trabajo de tesis de pregrado en una publicación y/o asistencia a congreso, se le otorgarán 3 puntos adicionales.

6.2 Evaluación Examen de Conocimientos

El postulante debe ser evaluado mediante un Examen de Conocimientos, el cual se evalúa de acuerdo a los siguientes aspectos:

ASPECTOS A EVALUAR DEL EXAMEN	NOTA	OBSERVACIONES POR ASPECTO A EVALUAR
1. Presentación oral (30 %)		
Dominio del tema		
Estructurada de manera coherente y lógica		
Presentación clara del problema		
Material de apoyo audiovisual:		
Lenguaje utilizado		
PROMEDIO PONDERADO		
2. Defensa referente al tema de la ponencia (30%)		
Respuestas dadas por el postulante:		
Claridad en las respuestas		
Lenguaje utilizado:		
PROMEDIO PONDERADO		
3. Defensa conocimientos generales de Química (40%)		
Respuestas dadas por el postulante		
Claridad en las respuestas		
Lenguaje utilizado		
PROMEDIO PONDERADO		
Observaciones y Cometarios Adicionales, generales		
Puntaje Total:		

6.2.1 Criterios de Evaluación

Sobre la base de la presentación y defensa del postulante al tema escogido, se evalúan los siguientes aspectos de acuerdo al criterio descrito a continuación.

Nota (puntos)	Criterio
5	Muy Bueno
4	Bueno
3	Suficiente
2	Malo
1	Muy malo

6.3 Evaluación final del Postulante

De acuerdo a los puntajes obtenidos por cada uno de los postulantes en lo que refiere, a sus antecedentes y su examen de conocimientos, se completa la siguiente tabla para hacer un ranking de los postulantes de acuerdo al puntaje obtenido de mayor a menor.

Nombre Postulante	Puntaje Antecedentes de Postulación (75 %)	Puntaje Examen de Conocimientos (25 %)	Puntaje Total	Ranking

Anexo 7. Evaluación Proyecto de Tesis y Examen de Calificación

7.1 Evaluación del Manuscrito de Proyecto de Tesis

El manuscrito del Proyecto de tesis se evalúa de acuerdo a la siguiente tabla:

DATOS DE EVALUACIÓN	
Título de la propuesta de Tesis:	
Estudiante(a):	
Director(a):	
Co-Director(a):	
Evaluador (a):	

Se evalúan de 0 a 100 (o su equivalente de 1 a 7) los siguientes aspectos del manuscrito “Proyecto de Tesis” presentado por el estudiante (calificar con nota el punto 3 y 4, los demás se evalúan con sí o no).

EVALUACIÓN	Nota
1. ¿Corresponde el título al contenido? (si/no)	
Si su respuesta es negativa, por favor sugiera un título adecuado:	
2. ¿Es clara y coherente la estructura del manuscrito? (si/no)	
3. En los aspectos de forma:	
a) ¿Cumple el manuscrito con las normas del Programa?	
b) ¿La redacción es clara y precisa?	
c) Evalúe los aspectos ortográficos	
d) ¿Hay un correcto manejo conceptual y del lenguaje técnico?	
4. En la propuesta de la Investigación:	
a) ¿Queda manifiesta la originalidad/relevancia del trabajo?	
b) ¿Incluye una revisión bibliográfica suficiente (adecuada, relevante y actualizada) para el marco teórico presentado?	
En caso necesario, por favor sugiera referencias que considera importante que el estudiante deba consultar:	
c) En el marco teórico presentado, ¿queda bien definido el problema a resolver?	

d) ¿Se encuentra(n) la(s) hipótesis planteadas correctamente y sustentadas en lo expresado en el marco teórico?	
e) ¿Se encuentran los objetivos planteados correctamente y sustentados en lo expresado en el marco teórico?	
f) ¿Es clara y suficiente la descripción de la metodología a emplear?	
g) ¿Es adecuado el diseño experimental que empleará?	
h) ¿Es adecuado el tiempo estimado para cumplir cada uno de los objetivos planteados en el Plan de Trabajo?	

Por favor, incluya los comentarios que justifican las calificaciones aquí consignadas directamente en el manuscrito-borrador, que fue sometido para su corrección. A continuación, incluya aquí sólo comentarios u observaciones adicionales, que considere pertinentes y una apreciación global del trabajo:

--	--	--

NOTA:		
FECHA:		
		FIRMA DEL(A) EVALUADOR(A)

7.2 Evaluación de la Presentación Oral del Proyecto de Tesis

La Presentación Oral del Proyecto de Tesis se evalúa de acuerdo a la siguiente tabla:

DATOS DE EVALUACIÓN	
Título de la propuesta de Tesis:	
Estudiante(a):	
Director(a):	
Co-Director(a):	
Evaluador (a):	

Se evalúan de 0 a 100 (o su equivalente de 1 a 7) los siguientes aspectos de presentación oral frente a la Comisión de Tesis.

EVALUACIÓN		Nota
1. En los aspectos de forma:		
a) ¿La presentación está estructurada y preparada de manera coherente y lógica?		
b) El material audiovisual empleado es claro y apoya la exposición oral del estudiante?		
c) Se hizo uso de esquemas, figuras, tablas y gráficos claros y adecuados?		
d) La expresión oral, ¿es adecuada, precisa y fluida		
2. En los aspectos de contenidos:		
a) ¿Se logró una síntesis adecuada, destacando los aspectos más relevantes del trabajo de Tesis y dando una clara idea global del mismo, en un tiempo adecuado (30 – 35 minutos)		
Comentarios u observaciones adicionales.		
NOTA:		
FECHA:		
		FIRMA DEL(A) EVALUADOR(A)

7.3 Evaluación de la Defensa del Proyecto de Tesis: Examen de Calificación

La Presentación Oral del Proyecto de Tesis se evalúa de acuerdo a la siguiente tabla

DATOS DE EVALUACIÓN	
Título de la propuesta de Tesis:	
Estudiante(a):	
Director(a):	
Co-Director(a):	
Evaluador (a):	

Se evalúan de 0 a 100 (o su equivalente de 1 a 7) los siguientes aspectos de la defensa por parte del estudiante del “Proyecto de Tesis” presentado.

EVALUACIÓN		Nota
1. Por favor, evalúe los siguientes aspectos de la defensa de Tesis.		
a) Responde adecuadamente, demostrando total conocimiento de los aspectos prácticos del trabajo de tesis?		
b) Responde adecuadamente, demostrando total conocimiento de los aspectos teóricos del trabajo de tesis?		
c) Responde adecuadamente, demostrando capacidad de integrar los conocimientos adquiridos en su formación profesional?		
Sobre la base de lo anterior, la defensa de Tesis debe ser: <i>(marque con una X)</i>		
Aprobado		
Rechazado		
Aprobado con Observaciones <i>(En esta última opción, indique las observaciones realizadas en una hoja adicional)</i>		
FECHA:	FIRMA DEL(A) EVALUADOR(A)	

7.4 Formato de presentación del Proyecto de Tesis



PROYECTO DE TESIS DOCTORAL, PROGRAMA CONJUNTO DE DOCTORADO EN CIENCIAS MENCIÓN QUÍMICA

I. ASPECTOS GENERALES

TÍTULO:

--

Escriba 3 palabras claves que identifiquen el proyecto

--	--	--

I.1. ALUMNO

APELLIDO PATERNO	APELLIDO MATERNO	NOMBRES	RUT

DIRECCIÓN DE CORREO ELECTRÓNICO	
INSTITUCIÓN	FIRMA INVESTIGADOR(A) RESPONSABLE

I.2. DIRECTOR DE TESIS

APELLIDO PATERNO	APELLIDO MATERNO	NOMBRES	RUT
DIRECCIÓN DE CORREO ELECTRÓNICO			
INSTITUCIÓN		FIRMA INVESTIGADOR(A) PATROCINANTE	

I.3. INSTITUCION(ES) PATROCINANTES: Unidad(es) Ejecutora(s)

Institución (Universidad/Facultad/Departamento)

1	
2	

II. RESUMEN:

Debe indicar claramente los principales puntos que se abordarán: objetivos, metodología y resultados que se espera obtener. Su extensión no debe exceder el espacio disponible. Considere que una buena redacción facilita la adecuada comprensión y evaluación del proyecto. **La extensión máxima de esta sección es de 1 página (letra tamaño 10, Arial)**

III. INVESTIGACIÓN PROPUESTA.

- III.1 FORMULACIÓN DEL PROYECTO, MARCO TEÓRICO Y DISCUSIÓN BIBLIOGRÁFICA:** Esta sección debe contener la exposición general del problema y su relevancia como objeto de investigación. Es importante precisar los aspectos nuevos a desarrollar a la luz del estado del arte de la investigación en el tema de la propuesta, así como el análisis bibliográfico que lo avala. **La extensión máxima de esta sección es de 8 páginas (letra tamaño 10, Arial).** En hojas adicionales incluya el listado de referencias bibliográficas citadas.

III.2 HIPÓTESIS DE TRABAJO: Explícite la(s) hipótesis de trabajo o preguntas que orientarán la investigación. La formulación de ésta(s) debe(n) articularse con la fundamentación teórico-conceptual contenida en el proyecto. **La extensión máxima de esta sección es de ½ página (letra tamaño 10, Arial).**

III.3 OBJETIVOS: Señale los objetivos generales y específicos. **La extensión máxima de esta sección es de ½ página (letra tamaño 10, Arial).**

- III.4 METODOLOGÍA:** Describa los métodos que planea utilizar para abordar cada uno de los objetivos del proyecto. (Por ej. Describa las técnicas experimentales, justifique los tamaños muestrales, precise los análisis estadísticos, etc.). **La extensión máxima de esta sección es de 3 páginas (letra tamaño 10, Arial).**

III.5 PLAN DE TRABAJO: En relación a los objetivos planteados, señale las etapas y actividades **para cada uno de los años** de ejecución del proyecto. **La extensión máxima de esta sección es de 1 página.** (letra tamaño 10, Arial). **Si es pertinente, utilice una carta Gantt.**

- IV. **TRABAJO ADELANTADO POR EL AUTOR DEL PROYECTO:** Si corresponde, resume los principales resultados de sus trabajos anteriores sobre el tema. **La extensión máxima de esta sección es de 1 página (letra tamaño 10, Arial).**

- V. **OTROS ANTECEDENTES:** Señale otros aspectos que usted considere relevantes para la evaluación del proyecto que no estén especificados en otras secciones. **La extensión máxima de esta sección es de 1 página (letra tamaño 10, Arial).**

VI. ANTECEDENTES CURRICULARES DE EL(LA) INVESTIGADOR(A)

VI.1. ANTECEDENTES PERSONALES

										-	
R.U.T (NO INCLUYA PUNTOS)											
APELLIDO PATERNO				APELLIDO MATERNO				NOMBRES			
				M		F					
FECHA DE NACIMIENTO			SEXO		NACIONALIDAD			FONO		FAX	

VI.2. ANTECEDENTES ACADÉMICOS

Títulos	UNIVERSIDAD	PAÍS	AÑO
Grados Académicos			
Otros			

Principales Líneas de Investigación

1.-
2.-
3.-

VI.3. PARTICIPACIÓN DEL(DE LA) ESTUDIANTE EN PROYECTOS DE INVESTIGACION.

AÑO		NUMERO PROYECTO Y TÍTULO	FUNCIÓN
Inicio	Término		

VI.5. PUBLICACIONES IN EXTENSO. Proporcione las referencias completas (autores, título de la publicación, nombre completo de la revista, volumen, páginas, año) de los trabajos **aceptados o publicados**.

a. PUBLICACIONES IN EXTENSO EN REVISTAS. Complete y marque con una X lo que corresponda.

Autor(es)							
Título de la Publicación							
Nombre completo de la Revista							Nº Proy. FONDECYT
Referencia Bibliográfica	Año	Vol.	Nº	Páginas	Estado de la publicación a la fecha.		
					Publicada <input type="checkbox"/>	En Prensa <input type="checkbox"/>	Aceptada <input type="checkbox"/>

Autor(es)							
Título de la Publicación							
Nombre completo de la Revista							Nº Proy. FONDECYT
Referencia Bibliográfica	Año	Vol.	Nº	Páginas	Estado de la publicación a la fecha.		
					Publicada <input type="checkbox"/>	En Prensa <input type="checkbox"/>	Aceptada <input type="checkbox"/>

Autor(es)							
Título de la Publicación							
Nombre completo de la Revista							Nº Proy. FONDECYT
Referencia Bibliográfica	Año	Vol.	Nº	Páginas	Estado de la publicación a la fecha.		
					Publicada <input type="checkbox"/>	En Prensa <input type="checkbox"/>	Aceptada <input type="checkbox"/>

b. PUBLICACIONES EN ACTAS DE CONGRESOS. Incluya publicaciones en Actas a Congresos que sean relevantes al proyecto.

Autor(es)				
Título de la Ponencia				
Nombre del Congreso				
Lugar, Fecha y Página	País:	Ciudad:	Fecha:	Páginas:

Autor(es)				
Título de la Ponencia				
Nombre del Congreso				
Lugar, Fecha y Página	País:	Ciudad:	Fecha:	Páginas:

Autor(es)				
Título de la Ponencia				
Nombre del Congreso				
Lugar, Fecha y Página	País:	Ciudad:	Fecha:	Páginas:

Anexo 8. Evaluación de Tesis Doctoral

8.1 Pauta de Evaluación del Manuscrito de Tesis

El manuscrito de Tesis se evalúa de acuerdo a la siguiente tabla:

DATOS DE EVALUACIÓN	
Título de la Tesis:	
Estudiante(a):	
Director(a):	
Co-Director(a):	
Evaluador (a):	

Se evalúa de 0 a 100 (o su equivalente de 1 a 7) los siguientes aspectos del manuscrito “Tesis” presentado por el estudiante (calificar con nota el punto 3 y 4, los demás se evalúan con si o no).

EVALUACIÓN	Nota
1. ¿Corresponde el título al contenido? (si/no)	
Si su respuesta es negativa, por favor sugiera un título adecuado:	
2. ¿Es clara y coherente la estructura del manuscrito? (si/no)	
3. En los aspectos de forma:	
a) ¿Cumple el manuscrito con las normas del Programa?	
b) ¿La redacción es clara y precisa?	
c) Evalúe los aspectos ortográficos	
d) ¿Hay un correcto manejo conceptual y del lenguaje técnico?	
4. En la investigación desarrollada:	
a) ¿Queda manifiesta la originalidad/relevancia del trabajo?	
b) ¿Incluye una revisión bibliográfica suficiente (adecuada, relevante y actualizada) para el marco teórico presentado?	
En caso necesario, por favor sugiera referencias que considera importante que el estudiante deba consultar:	
c) En el marco teórico presentado, ¿queda bien definido el problema a resolver?	
d) ¿Se encuentra(n) la(s) hipótesis planteadas correctamente y sustentadas en lo expresado en el marco teórico?	

e) ¿Se encuentran los objetivos planteados correctamente y sustentados en lo expresado en el marco teórico?	
f) ¿Es clara y suficiente la descripción de la metodología empleada?	
g) ¿Es adecuado el diseño experimental utilizado?	
h) ¿El tiempo fue el adecuado para cumplir cada uno de los objetivos planteados en el Plan de trabajo?	
<p>Por favor, incluya los comentarios que justifican las calificaciones aquí consignadas directamente en el manuscrito-borrador, que fue sometido para su corrección. A continuación, incluya aquí sólo comentarios u observaciones adicionales, que considere pertinentes y una apreciación global del trabajo</p>	
NOTA:	
FECHA:	
FIRMA DEL(A) EVALUADOR(A)	

8.2 Pauta de Evaluación de Examen Privado y Examen Público de Tesis

La Defensa Oral de la Tesis se evalúa de acuerdo a la siguiente tabla:

DATOS DE EVALUACIÓN	
Título de la Tesis:	
Estudiante(a):	
Director(a):	
Co-Director(a):	
Evaluador (a):	

Se evalúa de 0 a 100 (o su equivalente de 1 a 7) los siguientes aspectos de presentación oral frente a la Comisión de Tesis defendida por el estudiante:

EVALUACIÓN	Nota
1. En los aspectos de forma:	
a) ¿La presentación está estructurada y preparada de manera coherente y lógica?	
b) El material audiovisual empleado es claro y apoya la exposición oral del estudiante?	
c) Se hizo uso de esquemas, figuras, tablas y gráficos claros y adecuados?	
d) La expresión oral, ¿es adecuada, precisa y fluida	
2. En los aspectos de contenidos:	
a) ¿Se logró una síntesis adecuada, destacando los aspectos más relevantes del trabajo de Tesis y dando una clara idea global del mismo, en un tiempo adecuado (30 – 35 minutos)	
3. Por favor, evalúe los siguientes aspectos de la defensa de Tesis.	
a) Responde adecuadamente, demostrando total conocimiento de los aspectos prácticos del trabajo de tesis?	
b) Responde adecuadamente, demostrando total conocimiento de los aspectos teóricos del trabajo de tesis?	
c) Responde adecuadamente, demostrando capacidad de integrar los conocimientos adquiridos en su formación profesional?	
Comentarios u observaciones adicionales.	

NOTA FINAL:		
FECHA:		
		FIRMA DEL(A) EVALUADOR(A)

Anexo 9. Programas de Asignaturas

PROGRAMA N°1

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: FISICOQUÍMICA AVANZADA
SIGLA	: PDQ - 501
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA FISICOQUÍMICA III, IV O EQUIVALENTE
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>Introducir al alumno en los procesos de investigación científica a través del estudio en profundidad de los conceptos involucrados en los fenómenos fisicoquímicos, con énfasis en los métodos matemáticos y la interpretación de experimentos.</p> <p>Propender a la comprensión de la interrelación de los fenómenos naturales estudiados previamente en las asignaturas de Química Inorgánica, Química Orgánica y Química Analítica.</p>	
CONTENIDO:	
<p>1.- COMPLEMENTOS DE MECÁNICA CUÁNTICA.</p> <ul style="list-style-type: none"> - El formalismo y su interpretación: teoremas y postulados básicos - El concepto de observación y medida de Mecánica Cuántica. - Concepto de estado puro y estados enredados. El operador densidad de una y dos partículas. Concepto de probabilidad y probabilidad de transición. Valores medios. - Evolución temporal. Constantes de movimiento. Teorema de Liouville y principios de conservación. <p>2.- ESTRUCTURA Y ENLACE.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Átomo de Hidrógeno - El problema de N electrones, - Aproximación de Born-Oppenheimer. - Teoría de Orbitales Moleculares. - Enlace Químico. - Estructura Molecular. <p>3.- TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Mecánica Estadística de un sistema de partículas independientes. - Boltzmann, Fermi-Dirac, Bose-Einstein. Funciones termodinámicas. - Equilibrio químico. - Funciones de partición y funciones termodinámicas para átomos, moléculas diatómicas poliatómicas. Spin nuclear y efecto isotópico. - Ensembles Canónico y Gran Canónico. Aplicaciones y Funciones termodinámicas. - Fluctuaciones. Gases reales, segundo coeficiente del Virial. <p>4.- CINÉTICA QUÍMICA</p> <ul style="list-style-type: none"> - Teoría de las velocidades de procesos elementales. El estado activado. - Teoría de Colisiones de Reacciones bimoleculares y unimoleculares. - Teoría del Estado de Transición. Velocidades de descomposición unimolecular, tratamiento mecánico-estadístico de las velocidades. 	

- Efectos de entorno en las velocidades de reacción.		
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.		
El programa se desarrollará a través de la exposición en de los contenidos con apoyo de multimedia y resolución de ejercicios. También se entregarán temas específicos para desarrollar en forma de seminarios por parte de los estudiantes.		
EVALUACIÓN		
La evaluación del curso se realizará considerando:		
<ol style="list-style-type: none"> 1. Promedio de pruebas escritas sobre los contenidos del programa (50%) 2. Promedio de seminarios parciales (50 %) 		
Evaluación final:		
Promedio pruebas y seminarios (60%) + examen final (40%).		
BIBLIOGRAFÍA		
<ol style="list-style-type: none"> 1.- Ira N. Levine “Quantum Chemistry 3° Ed.”, Allyn and Bacon 1983. 2.- P.W. Atkins and R.S. Friedman “Molecular Quantum Mechanics”, 3° Ed. Oxford, University Press 1997. 3.- D.A. Mc Quarrie and J.D. Simon “Physical Chemistry, A Molecular Approach”, Ed. University Science Book, 1997. 4.- J.P. Lowe and K.A. Peterson “Quantum Chemistry” Ed. Elsevier Academic Press 2006. 5.- Frank L. Pilar “Elementary Quantum Chemistry”, McGraw-Hill 1968. 6.- Donald A. Mc Quarrie, “Statistical Thermodynamics”. University Science Books 1985. 7.- Norman Davidson “Statistical Mechanics”, McGraw-Hill 1962. 8.- J.W. Moore and R.G. Pearson, “Kinetics and Mechanism”, J.Wiley and Sons 1981. 9.- Sidney W. Benson, “The Foundations of Chemical Kinetics”, McGraw-Hill 1960. 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Arie Aizman, Guillermo Díaz, Gonzalo Riveros, Claudio Morgado.	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

PROGRAMA N°2

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: QUÍMICA ORGÁNICA AVANZADA
SIGLA	: PDQ - 502
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA, QUIMICA ORGANICA II O EQUIVALENTE
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>La finalidad de esta asignatura es completar y ampliar la formación adquirida por los alumnos en Química Orgánica general con nuevos contenidos de mayor especificidad y nivel en esta área de conocimiento, así como profundizar en algunos aspectos ya tratados de forma básica en cursos anteriores pero que por su trascendencia resulta conveniente volver a considerar con una visión más amplia y crítica.</p> <p>En el presente curso de Química Orgánica Avanzada se pretende del alumno:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Conseguir el dominio de los conceptos teóricos y prácticos relacionados con los Mecanismos de las reacciones. La utilización de aspectos estereoquímicos, termodinámicos, cinéticos y catalíticos como ayuda en la interpretación del mecanismo por el que transcurre una reacción química. 2. Alcanzar el conocimiento de las técnicas empleadas en la investigación de mecanismos de reacción. Distinción de los diferentes pasos que los componen y clasificación del tipo de reacciones que se producen en procesos complejos. Adquisición de la capacidad para diseñar un posible mecanismo de reacción lógico y válido para un proceso químico experimental descrito en cuanto a reactivos, condiciones de reacción y productos. 3. Profundizar en el estudio de la filosofía y estrategias propias de la Síntesis Orgánica, manejo de reactivos, condiciones y secuencias de reacción para la obtención de estructuras químicas más complejas. Estudio y aplicación de la técnica del Análisis Retrosintético, utilizando modelos aplicados a la síntesis de drogas y fármacos. 	
CONTENIDO:	
<p>CAPITULO I</p> <p>CONTENIDOS: MECANISMOS DE LAS REACCIONES ORGÁNICAS.</p> <p>TEMA 01. Fundamentos. Estudio general de la reacción química. Clasificación de las reacciones orgánicas. Estequiometría y velocidad de reacción. Definición de mecanismo de reacción. Objetivos del estudio de un mecanismo de reacción. Aproximación a un mecanismo de reacción y validación del mismo.</p> <p>TEMA 02. Características de la reacción química. Conversión y velocidad de reacción: aspectos termodinámicos. Cinética química. Diagramas de desarrollo de reacción: perfiles energéticos. Postulado de Hammond. Control cinético y control termodinámico. Reactividad: factores que la afectan. Clasificación de reactivos.</p> <p>TEMA 03. Estudio de intermediarios de reacción. Carbocationes, Carbaniones, Radicales, Carbenos, Nitrenos y Bencinos. Vida media, estructura, geometría, estabilidad, reactividad y procedimientos de formación de las especies intermedias de reacción.</p>	

TEMA 04. Mecanismos de las reacciones orgánicas: Aspectos claves en el estudio de un mecanismo de reacción. Reacciones vía radical o carbeno. Sustitución nucleófila alifática. Reacciones de eliminación alifáticas. Reacciones de adición electrófila y nucleófila a carbonos alifáticos insaturados. Sustituciones electrófila y nucleófila aromáticas.

TEMA 05. Reacciones de adición a carbonilo de aldehídos y cetonas. Reacciones vía centros electrónicamente deficitarios. Reacciones vía carbanión. Reacciones de sustitución nucleofílica sobre carbonilos. Transposiciones. Estudio de casos prácticos de todos los procesos.

TEMA 06. Mecanismos de ciclación. Reacciones de ciclación. Dificultades para la ciclación. Reglas de Baldwin. Ciclaciones intramoleculares. Procesos de alquilación, acilación, condensación, sustitución, adición y adición-eliminación. Carbociclos y heterociclos. Ciclaciones radicalarias. Ciclaciones vía carbeno y vía nitreno. Reacciones de apertura de anillos. Procesos de expansión y contracción de ciclos. Estudio de casos prácticos de todos los procesos.

TEMA 07. Procesos orgánicos catalizados. Definición y descripción de catalizador. Catálisis y conversión. Catálisis homogénea y heterogénea en sistemas orgánicos. Estudio de algunos casos prácticos de catálisis en reacciones orgánicas: ácida, básica, nucleofílica, enzimática. Catálisis por transferencia de fase.

TEMA 08. Ejercicios de aplicación, propuestas de mecanismos lógicos y razonables en reacciones de síntesis orgánica.

CAPITULO II

CONTENIDOS: SÍNTESIS ORGÁNICA.

TEMA 09. Introducción a la Síntesis Orgánica. Planificación de una síntesis. Método de las desconexiones. Sintones. Equivalentes sintéticos. Instrumentos para la planificación de síntesis.

TEMA 10. Estrategias en Síntesis Orgánica. Elección de la secuencia adecuada de pasos. Quimioselectividad. Protección de grupos funcionales para: alcoholes, dioles, ácidos carboxílicos, aminas, compuestos carbonílicos. Grupos protectores soportados sobre polímeros. Regioselectividad. Aspectos estereoquímicos. Estereoselectividad: síntesis asimétricas.

TEMA 11. Reacciones de transferencia de carbaniones mediante compuestos organometálicos. Reactivos de Grignard. Organolíticos. Derivados de organocobre. Derivados de organocadmio. Derivados de organozinc. Acetiluros metálicos.

TEMA 12. Reacciones de sustitución en posición α de un grupo electroatrayente vía carbaniones estabilizados. Características de los hidrógenos en α . Halogenación de compuestos carbonílicos. Formación de enolatos. Alquilación de enolatos. Acilación directa de cetonas, ésteres, nitrilos y nitroderivados. Síntesis malónica. Síntesis acetoacética.

TEMA 13. Reacciones de condensación de carbonos electrófilos con carbaniones estabilizados. Condensación aldólica y aldólica mixta. Condensación de Knoevenagel. Condensación de Claisen y Claisen mixta. Condensación de Dieckman. Condensación de Michael. Reacciones vía enamina (Stork). Ciclación de Robinson. Condensación de Stobbe. Reacción de Darzens. Reacción de Mannich.

TEMA 14. Reacciones vía carbanión estabilizado por heteroátomos. Reacción de Wittig. Formación de alquiluros. Procesos Umpolung (inversión de los patrones normales de la reactividad). Formación de bistiocarbaniones.

TEMA 15. Reacciones de formación de enlaces carbono-heteroátomo. Enlaces carbono-halógeno. Enlaces carbono-oxígeno. Enlaces carbono-azufre. Enlaces carbono-nitrógeno.

TEMA 16. Reacciones pericíclicas I: introducción. Fundamentación en la teoría orbital. Simetría orbital y reacción química. Teoría de orbitales frontera: HOMO y LUMO. Estados energéticos fundamental y excitado. Definición de reacción pericíclica. Características de las reacciones pericíclicas. Clasificación.

TEMA 17. Reacciones pericíclicas II: reacciones electrocíclicas. Definición y descripción. Procesos conrotatorios y disrotatorios. Reacciones electrocíclicas térmicas: estereoquímica de sistemas $4n$ y $4n+2$. Reacciones electrocíclicas fotoquímicas: estereoquímica de los sistemas $4n$ y $4n+2$. Reglas de selección. Estudio de casos prácticos.

TEMA 18. Reacciones pericíclicas III: reacciones de cicloadición concertada. Definición y descripción. Concepto de suprafacial y antarafacial. Procesos $[2+2]$: ciclodimerización de eteno. Procesos $[4+2]$: reacción de Diels-Alder. Estereoquímica y reactividad de Diels-Alder: geometría, inducción y orbitales frontera. Utilidad en síntesis. Reglas estereoquímicas.

TEMA 19. Reacciones pericíclicas IV: transposiciones sigmatrópicas. Definición. Clasificación. Mecanismo. Migración de hidrógeno y de grupos alquilo. Reglas de selección. Ejemplos.

TEMA 20. Reacciones de reducción. Sistemas de reducción. Hidrogenación catalítica heterogénea y homogénea. Condiciones experimentales. Hidrogenadores. Grupos funcionales reducibles por hidrogenación catalítica. Mecanismo y estereoquímica. Reducción mediante hidruros metálicos: mecanismo, estereoquímica y grupos funcionales reducibles. Reducción por metales en disolución: mecanismo, estereoquímica y grupos funcionales reducibles. Reducción de Clemensen. Reducción de Birch.

TEMA 21. Reacciones de oxidación. Concepto orgánico de oxidación. Procesos de oxidación. Reactivos oxidantes. Tipos y mecanismos de oxidación. Oxidación de hidrocarburos. Oxidación de funciones oxigenadas. Oxidación de funciones nitrogenadas y azufradas.

TEMA 22. Ejercicios de aplicación en la síntesis de fármacos.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

El programa se desarrollará fundamentalmente a través de la exposición en clase de los contenidos, aunque intercalando constantemente situaciones de aplicación práctica. Se empleará apoyo multimedia, resolución de ejercicios en pizarra, los cuales se entregarán con la antelación suficiente para que sean resueltos por el alumno y discutidos en dichas clases, además se tiene contemplado, por parte de los alumnos, la presentación y/o defensa de seminarios parciales programados.

EVALUACIÓN

Las evaluaciones de la asignatura se desarrollarán bajo tres modalidades:

1. Examen escrito I y II (20% cada uno, Capítulos I-II respectivamente)
2. Promedio de seminarios parciales (20%, Capítulos I-II)
3. Seminario final (40%, Capítulo II)

La calificación final de la asignatura viene determinada por la fórmula:

$$C.F = 1 \times 0,4 + 2 \times 0,2 + 3 \times 0,4$$

BIBLIOGRAFÍA

1. Carey, F.A., Sunberg, R.J. "Advanced Organic Chemistry. Part A: Structure and Mechanism. Part B: Reactions and Synthesis". 4th Edition, Kluwer, 2000.
2. Smith, M.B., March, J. March's. "Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanism and Structure". 5º Ed. John Wiley & Sons. 2001.
3. Bruckner, R., "Advanced Organic Chemistry" Elsevier, 2002.
4. Miller, B. "Advanced Organic Chemistry, Reactions and Mechanisms". Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey. 1998.
5. Miller, A., Solomon, P. H. "Writing Reaction Mechanisms in Organic Chemistry" Elsevier Science & Technology Books. 1999.
6. Sykes, P. "A Guidebook to Mechanism in Inorganic Chemistry", Pearson, Prentice Hall, Sixth Edition, 1986.
7. Grossman, R. B. "The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanisms" Springer, 2002.
8. Groutas, W.C. "Mecanismos de Reacción en Química Orgánica. Problemas selectos y soluciones". McGraw-Hill. 2002.
9. Alosonso, M. E., "The Art of Problem Solving in Organic Chemistry" John Wiley & Sons. 1987.
10. Fleming, I. "Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions" John Wiley.
11. Gómez-Gallego, M. M., Sierra, A. "Organic Reaction Mechanisms: 40 Solved Cases", Springer, 2003.
12. Greene, T. W. and Wuts, P. G. M. "Protective Groups in Organic Synthesis", John Wiley & Sons, 1999.
13. Fuhrhop, J.-H., Li, G. "Organic Synthesis: Concepts and Methods" 3rd Ed. Wiley-VCH, 2003.
14. Kocienski, P. J. "Protecting Groups" 3rd Edition, Georg Thieme Verlag, 2005.
15. Lednicher, D., and Mitscher, L. A. "The Organic Chemistry of Drug Synthesis", John Wiley & Sons, 1980.
16. Clayden, J., Greeves, N., Warren, S., Wothers, P. "Organic Chemistry". Oxford University Press, 2001.
17. Roth, H. J., Kleemann, A., Beisswenger, T. "Pharmaceutical Chemistry", Volume 1: Drug Synthesis. John Wiley & Sons, 1988.
18. Joule, J.A., Mills K. "Heterocyclic Chemistry" (4th Edition), Blackwell Publishing, 2000.
19. Brown, T., Holt Jr. H., Lee, M. "Topics in Heterocyclic Chemistry". Volume 2, Springer Berlin/Heidelberg. 2006.

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Luis Espinoza, Mauricio Cuellar, Cristian Salas	Observaciones:
Aprobado:	Actualizado Enero 2012.	

PROGRAMA N°3

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: QUÍMICA INORGÁNICA AVANZADA
SIGLA	: PDQ - 503
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA, QUIMICA INORGANICA II O EQUIVALENTE
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>1. Profundizar el estudio de algunos aspectos relacionados con la Química de los compuestos de coordinación y de compuestos Organometálicos: espectros electrónicos, asignar transiciones espectrales, correlacionar información espectral con características de estructura y enlace, aspectos de isomería y reactividad. Se requiere conocimientos básicos de simetría molecular y teoría de grupos.</p> <p>2. Estudiar aspectos estructurales y energéticos de los sólidos inorgánicos, métodos de difracción para la determinación estructural de sólidos cristalinos.</p>	
CONTENIDO:	
<p>1. Niveles energéticos en sistemas de un electrón y de muchos electrones. Teoría campo cristalino, Términos del ión libre, Términos de las funciones de onda, Acoplamiento spin-órbita.</p> <p>2. Campos fuerte y débil en sistemas de muchos electrones. Iones libre en diferentes campos cristalino débil: Efecto del campo cristalino cúbico sobre los términos S y P, D y, F G H e I. Iones libre en Campos cristalinos medios y fuertes: Configuración de campo fuerte, Transiciones de campo débil a fuerte, Diagramas de correlación de niveles de energía de los términos, Diagramas de Tanabe y Sugano.</p> <p>3. Teoría de grupos, Concepto de grupo, Tablas de multiplicación, Representaciones, Tablas de caracteres, Grupos de coordinación: Oh, Td, D4h, etc., Relación entre representación y funciones de onda, Producto directo.</p> <p>4. Teoría de orbitales moleculares para iones complejos: Elementos de teoría de orbitales moleculares, Enlace en complejos octaédricos, Enlaces en complejos tetraédricos, Cálculos de 10Dq.</p> <p>5. Espectroscopía electrónica de iones dn en compuestos de coordinación: Obtención del término fundamental de un ión libre: reglas de Hund. Niveles electrónicos de los compuestos de coordinación de metales de transición. Desdoblamiento de los términos para un ión libre bajo la influencia de ligandos en un determinado entorno. Reglas de selección. Intensidades de bandas, acoplamiento vibrónico, dicroísmo, y espectroscopía de emisión</p> <p>6. Tipos de isomería. Estéreo isomería. Quiralidad en los compuestos de coordinación. Nomenclatura estereoquímica de estos compuestos. Método de Bailar para el recuento de isómeros de un compuesto octaédrico. Técnicas instrumentales para dilucidar la configuración absoluta de un compuesto de coordinación: Dispersión rotatoria óptica y dicroísmo circular</p> <p>7. Compuestos organometálicos de metales de transición: Estructura y enlace. Carbonos donores σ</p>	

y π en diferentes ligandos. Diferentes tipos de reacciones.

8. Tipos de enlaces en estado sólido: Generalidades. Clasificación de los sólidos atendiendo al tipo de fuerzas involucradas en su constitución. Empaquetamientos cristalinos. Redes y celda unidad. Estructuras cristalinas simples: estructuras de metales, estructuras de sólidos iónicos derivadas de empaquetamientos compactos, estructuras de óxidos mixtos, redes covalentes extensas, redes moleculares. Ecuaciones de Born-Landé, y Bragg y West, Constante de Madelung, Entalpías reticulares, Ciclo de Born-Haber.
9. Introducción a la difracción de rayos X, Propiedades de los rayos X: Naturaleza, generación, espectro característico. Difracción de rayos X. Condición de difracción de Laue y de Bragg. Red recíproca. Direcciones de los rayos difractados. Factores que influyen en la intensidad difractada. Factor de estructura. Extinciones. Métodos de difracción. Compuestos organometálicos de metales de transición: Estructura y enlace. Carbonos donores σ y π en diferentes ligandos. Diferentes tipos de reacciones.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

El programa se desarrollará fundamentalmente a través de la exposición en clase de los contenidos. Se empleará apoyo multimedia, resolución de ejercicios en pizarra, discutidos en dichas clases, además se tiene contemplado por parte de los alumnos la presentación y/o defensa de seminarios parciales programados.

EVALUACIÓN

Las evaluaciones de la asignatura se desarrollarán bajo dos modalidades:

- 4 Exámenes escritos: 1 (Capítulos 1,2,3 y 4), 2 (Capítulos 5 y 6), 3 (Capítulos 7 y 8) y 4 (Capítulos 9,10 y 11)
- Tareas/seminarios parciales

La Nota Final de la asignatura (NF) se calculará de acuerdo a :

$$NF = \frac{NSeEx1 + NSeEx2 + NSeEx3 + NSeEx4}{4}$$

Donde:

Donde $NSeExi$ = Promedio de notas de Tarea/Seminarios y Examen tópico i . i ($i=1, 2, 3$ y 4)

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía general, de simetría molecular y teorías enlace:

1. F. A. Cotton. 1983 "La teoría de grupos aplicada a la Química" Limusa
2. Robert L.Carter. 1998 "Molecular symmetry and group theory" Wiley
3. A.Vincent. 2001 "Molecular symmetry and group theory" Wiley 2nd edition
4. G. L.Miessler and D. A.Tarr. 1999 "Inorganic chemistry" Prentice Hall 2nd edition.
5. J. E. Huheey, E. A.Keiter y R. L.Keiter. 1997 "Química Inorgánica . Principios de estructura y reactividad" Oxford University Press Harla 4ª edición.
6. Keith F.Purcell, John C.Kotz.2003 "Inorganic Chemistry".Ed. W.Saunders Company.
7. B. E. Douglas, D. H.McDaniel y J.J. Alexander. 1994 "Conceptos y modelos de Química

Inorgánica” Reverté 2ª edición.

8. C. E. Housecroft y A.G. Sharpe. 2006 “Química Inorgánica” Pearson-Prentice Hall 2ª edición.
9. J. Ribas Gispert. 2000 “Química de coordinación” Omega.
10. G.L.Miessler and D.A.Tarr. 1999 “Inorganic chemistry” Prentice Hall 2nd edition.

Bibliografía de espectros electrónicos en compuestos de coordinación de metales de transición:

1. D.Sutton. 1975 “Espectros electrónicos de los complejos de los metales de transición” Reverté.
2. G. L. Miessler and D. A.Tarr. 1999 “Inorganic chemistry” Prentice Hall 2nd edition.
3. J. Ribas Gispert. 2000 “Química de coordinación” Omega.

Bibliografía de Isomería, Factores termodinámicos, estabilidad en los compuestos de coordinación:

1. B. E. Douglas, D.H.McDaniel y J.J.Alexander. 1994 “Conceptos y modelos de Química Inorgánica” Reverté 2ª edición.
2. J.E.Huheey, E.A.Keiter y R.L.Keiter. 1997 “Química Inorgánica . Principios de estructura y reactividad” Oxford University Press Harla 4ªedición.
3. D.F.Shriver, P.W.Atkins y C.H.Langford. 1998 “Química Inorgánica” (Tomo 2) Reverté.
4. J. Ribas Gispert. 2000 “Química de coordinación” Omega.
5. C. E. Housecroft y A.G.Sharpe. 2006 “Química Inorgánica” Pearson-Prentice Hall 2ª edición.
6. R. H. Crabtree. 1997 “Química organometálica de los metales de transición” Universidad Jaume I.

Bibliografía estado sólido:

1. W.D.Callister Jr. 1997 “Introducción a la ciencia e ingeniería de materiales” (tomos 1 y 2) Reverté 3ªedición.
2. A.R.West. 1999 “Basic Solid State Chemistry” Wiley 2ndedition.
3. William F. Smith. 1998 “Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales” McGraw- Hill 3ª edición.
4. L. Smart y E. Moore. 1995 “Química del Estado Sólido: Una introducción” Addison-Wesley iberoamericana.
5. J.E. Huheey, E.A.Keiter y R. L. Keiter. 1997 “Química Inorgánica . Principios de estructura y reactividad” Oxford University Press Harla 4ªedición.
6. B.E. Douglas, D. H. McDaniel y J.J. Alexander. 1994 “Conceptos y modelos de Química Inorgánica” Reverté 2ª edición.
7. S.Barroso Herrero, J. R. Gil Bercero. 2004 “Construcción e interpretación de diagramas de fase binarios”. Madrid UNED.

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Mario Ollino, Patricio Revecó, Guillermo Díaz, Rodrigo Segura	Observaciones:
Aprobado:	Actualizado Enero 2012.	

PROGRAMA N°4

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: QUÍMICA ANALÍTICA AMBIENTAL
SIGLA	: PDQ 519
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA. ANÁLISIS INSTRUMENTAN QUI - 325 O EQUIVALENTE
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>Al final del curso el alumno será capaz de comprender y relacionar con profundidad los conceptos involucrados en la Química Analítica Ambiental, aplicándolos a problemas químico-analíticos reales, sobre diversas situaciones de contaminación ambiental y para distintas matrices ambientales como, suelo, agua y aire. El alumno podrá adquirir ciertos criterios para abordar un problema de Química Analítica Ambiental, siendo capaz de plantear la hipótesis del problema e identificar el problema analítico a resolver; planificar el estudio; organizar la toma de muestras, su transporte y almacenamiento hasta llegar al laboratorio; enfrentar la etapa de medición analítica; procesar e interpretar los resultados, para finalmente elaborar un informe analítico.</p>	
CONTENIDO:	
<p>1 Introducción a la Química Analítica Ambiental</p> <p>1.1 Definición de objetivos del curso</p> <p>1.2 Definición de contaminación y polución</p> <p>1.3 Clasificación de los contaminantes: inorgánico/orgánico-natural/antropogénico</p> <p>1.4 Muestreo, manejo y tratamiento de muestras ambientales</p> <p>1.5 Selección de los métodos analíticos para muestras ambientales</p> <p>2. Control de calidad en análisis químico ambiental</p> <p>2.1 Introducción</p> <p>2.2 Planificación del análisis químico ambiental</p> <p>2.3 Unidades de medidas</p> <p>2.4 Incertidumbre</p> <p>2.5 Tipos de Errores</p> <p> 2.5.1 Errores Sistemáticos</p> <p> 2.5.2 Errores Aleatorios</p> <p>2.4 Precisión y exactitud</p> <p> 2.4.1 aseguramiento de la precisión</p> <ul style="list-style-type: none"> • Desviación estándar relativa • Intervalo de confianza <p> 2.4.2 aseguramiento de la exactitud</p> <ul style="list-style-type: none"> • Error relativo medio • Test de Student <p>2.5 Determinación analítica</p> <p> 2.5.1 Calibración y estandarización</p> <ul style="list-style-type: none"> • Métodos de calibración • Método de la adición estándar • Método de la curva de calibrado • Método del estándar interno /externo 	

- Trazabilidad
- 2.5.2 Uso de blancos y muestras control
- 2.5.3 Recuperación
- 2.5.4 Selectividad
- 2.5.5 Rango de linealidad
- 2.5.6 Límite de detección y cuantificación
- 2.5.7 Validación de métodos nuevos
- 2.6 Representatividad
- 2.7 Completitud
- 2.8 Comparabilidad
- 2.9 Aseguramiento de la calidad
 - 2.9.1 Control de calidad
 - 2.9.2 Mantenimiento de la calidad
 - 2.9.3 Validación

3 Interpretación de resultados

- 3.1 Herramientas estadísticas en la interpretación de resultados
- 3.2 Datos escapados (outliers)
- 3.3 Comparación de la desviación estándar usando en test de Fisher (F)
- 3.4 Comparación entre valores conocidos y medidos (Aplicación del test de Student)
- 3.5 Comparación entre las medidas de dos poblaciones muestrales
- 3.6 Test de correlación lineal
- 3.7 Presentaciones gráficas
- 3.8 Informes de resultados
- 3.9 Divulgación de la información ambiental

4 Toma de muestras ambientales

- 4.1 Introducción
- 4.2 Relación entre el muestreo y otras etapas del procedimiento analítico
- 4.3 Características generales de las muestras ambientales
- 4.4 Como y porque seleccionar una muestra ambiental
- 4.5 Determinación del lugar y los puntos del muestreo
- 4.6 Determinación de la distribución espacial y temporal del muestreo
- 4.7 Modelos experimentales para manejo de muestras
- 4.8 Muestras compuestas
- 4.9 Estimación del número y tamaño mínimo de muestras
 - 4.9.1 Estimación del tamaño de muestras homogéneas
 - 4.9.2 Estimación del número y tamaño de muestras heterogéneas
 - 4.9.3 Estimación del número y tamaño de muestras para lograr una correlación espacial y temporal de los resultados
- 4.10 Problemas asociados a la recolección de muestras
 - 4.10.1 Perturbación del ambiente producido por el sistema de muestreo
 - 4.10.2 Contaminación de la muestra producto del sistema de muestreo
 - 4.10.3 Reacciones que ocurren durante la toma de muestras
- 4.11 Preservación e integridad de muestras ambientales
 - 4.11.1 Adiciones químicas
 - 4.11.2 Control de temperatura
 - 4.11.3 Contenedores de muestras (influencia de los materiales)
 - 4.11.4 Uso de técnicas de separación in-situ
 - 4.11.5 Transporte y almacenamiento
- 4.12 Evaluación del aseguramiento de calidad de datos de muestreo
 - 4.12.1 Estimación de la precisión del muestreo
 - 4.12.2 Estimación del error del muestreo
- 4.13 Cálculo del costo de muestreo

5 Tratamiento de muestras ambientales

5.1 Técnicas de homogeneización y submuestreo

5.2 Técnicas de digestión de muestras

5.3 Técnicas de separación de muestras

5.3.1 Extracción

- Extracción líquida-líquida
- Extracción en fase sólida
- Microextracción en fase sólida
- Extracción usando Soxhlet
- Extracción en equipos tipo Kuderna Dahnish
- Extracción usando solvente acelerado
- Extracción usando ultrasonido
- Extracción con fluido supercrítico
- Extracción con solvente acelerado

5.3.2 Precipitación

5.3.3 Electrólisis

5.3.4 Intercambio iónico

5.3.5 Agentes inmovilizantes (quelantes)

5.3.6 Desprendimiento gaseoso

5.3.7 Sistemas de ab/adsorción

- Trampas de absorción
- Trampas frías y criogénicas
- Filtros y tubos de adsorción químicos activos
- Derivatización

5.4 Preconcentración de muestras

5.4.1 Evaporación en rotavapor

5.4.2 Evaporación en corriente de N₂

5.4.3 Evaporación en bombas de teflón

6 Métodos para análisis de agua

6.1 Muestreo de aguas

6.1.1 Aguas superficiales

6.1.2 Aguas profundas

6.2 Transporte y almacenamiento de muestras de agua

6.3 Determinación de especies inorgánicas

6.3.1 Componentes mayoritarios

6.3.2 Elementos traza

6.3.3 Radioisótopos

6.4 Determinación de especies orgánicas

6.4.1 Determinación de compuestos orgánicos semivolátiles (COSVs)

6.4.2 Determinación de compuestos orgánicos volátiles (COVs)

6.5 Métodos de campo para análisis de agua in-situ

Seminario: Métodos para análisis de agua

7 Métodos para análisis de aire

7.1 Muestras de aire en fase gaseosa

7.1.2 Muestreo de gases

- Sistemas pasivos
- Sistemas activos

7.1.3 Determinación de especies inorgánicas

- Monóxido y dióxido de carbono
- Óxidos de azufre
- Óxidos de nitrógeno

- Ozono
- 7.1.4 Determinación de especies orgánicas
- Determinación de Hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs)
- Determinación de Bifenilos policlorados (PCBs)
- Determinación de compuestos orgánicos volátiles (COVs)

7.2 Muestras de aire en fase particulada

- 7.2.1 Muestreo de material particulado
 - Sistemas pasivos
 - Sistemas activos
- 7.2.2 Determinación de especies inorgánicas
 - Componentes mayoritarios
 - Elementos traza
 - Radioisótopos
- 7.2.3 Determinación de especies orgánicas
 - Determinación de Hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs)
 - Determinación de Bifenilos policlorados (PCBs)
 - Determinación de otros hidrocarburos

Seminario: Métodos para análisis de aire

8 Métodos para análisis de suelo

- 8.1 Muestreo de suelos
 - 8.1.1 Sistemas para muestras de suelo superficiales
 - 8.1.2 Sistemas para muestras de suelo profundas
- 8.2 Transporte y almacenamiento de muestras de suelo
- 8.3 Preparación de muestras de suelo
 - 8.3.1 Capacidad de campo
 - 8.3.2 Humedad
- 8.4 Determinación de especies inorgánicas
 - 8.4.1 Medición del pH del suelo
 - 8.4.2 Medición de conductividad del suelo
 - 8.4.3 Componentes mayoritarios
 - 8.4.4 Elementos traza
 - 8.4.5 Radioisótopos
- 8.5 Determinación de especies orgánicas
 - 8.5.1 Determinación de compuestos orgánicos semivolátiles (COSVs)
 - 8.5.2 Determinación de compuestos orgánicos volátiles (COVs)
- 8.6 Métodos de estudio de lixiviados en residuos sólidos
- 8.7 Métodos de campo para análisis de suelo in-situ

Seminario: Métodos para análisis de suelo

9 Bioindicadores

- 9.1 Tipos de bioindicadores
 - 9.1.1 Para muestras atmosféricas
 - 9.1.2 Para muestras de agua
 - 9.1.3 Para muestras de suelo
- 9.2 Monitoreo usando bioindicadores
- 9.3 Bioacumulación
- 9.4 Bioensayos

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

- **Clases teóricas:** se utilizará material multimedia
- **Estudio de Casos:** Durante las clases se desarrollarán estudio de casos correspondientes a la resolución de problemas químico-analíticos reales, aplicados a matrices ambientales como, suelo, agua y aire. Se desarrollará una discusión interactiva con los alumnos de forma de resolver durante la clase estos problemas, en ellos se aplicará directamente el conocimiento químico-analítico ambiental que se intenta incorporar en el alumno según el o los capítulos del temario que corresponda. Adicionalmente, se discutirán otros aspectos de la química analítica, como su relación con la contaminación ambiental, las alternativas de mitigación y la sustentabilidad desde la perspectiva de la química.
- **Seminarios:** cada alumno deberá profundizar en uno o varios temas relevantes que estén incluidos el temario correspondiente a los capítulos 6, 7 y 8 del curso, y realizar una revisión bibliográfica que deberá traducirse en un informe, en este se deberán tratar la toma de muestras, la metodología analítica para determinar los contaminantes ambientales en la matriz respectiva, las consecuencias negativas para el ecosistema incluyendo al hombre y la forma de abatir el problema de contaminación. Todo este material deberá transformarse en una presentación PPT, en la cual se abordará el o los temas asignados, para que finalmente el alumno realice una exposición oral sobre el tema en cuestión.

EVALUACIÓN

Exposición: Se realizará un trabajo de seminario a asignar, el cual tendrá como objetivo abordar el temario correspondiente a los capítulos 6, 7 y 8. En este seminario se evaluará tanto el informe escrito como la presentación PPT desarrollada por el alumno, aspectos a evaluar serán la elaboración del material para la exposición, la calidad de la exposición y la oratoria, así como la calidad de las respuestas a las preguntas durante la exposición. Esta actividad será obligatoria.

Certámenes escritos: Se realizarán certámenes a modo de tareas para la casa, en donde se preguntarán sobre la resolución de problemas químico-analíticos reales aplicados a matrices ambientales como, suelo, agua y aire. Estos deberán ser resueltos en el lapso de una semana.

Ponderación: La exposición valdrá como la nota de un certamen. Los certámenes y la exposición entregarán la nota de presentación a examen, correspondiente al 60% de la nota final. Además se realizará un Examen, que corresponderá al 40% de la nota final del ramo. Este examen se dará en forma oral y ante una comisión formada por al menos 3 profesores.

BIBLIOGRAFÍA

1. Fifield, F.W. and Haines, P.J., "Environmental Analytical Chemistry", Second Edition., Ed. By Fifield & Haines, Faculty of Science Kingston University, Blackwell Science Pty Ltd., London, UK, 2000.
2. Pérez-Bendito, D. and Rubio, S., "Environmental Analytical Chemistry", Included in series: Comprehensive Analytical Chemistry, XXXII, Ed. Elsevier, London, UK, 1998.
3. Marr, Iain L., et al, "Química Analítica del Medio Ambiente", Editorial Universidad de Sevilla, Sevilla, España, 1989
4. Valcárcel, M, "Principios de Química Analítica", Editorial Springer Verlag Ibérica, S.A., Barcelona, España, 1999
5. Kebbekus, B.B. and Mitra, S., "Environmental Chemical Analysis", Ed. Blackie Academic & Professional, an imprint of Thomson Science, London, UK, 1998.
6. Bernd Markert, "Environmental Sampling for Trace Analysis", Ed B. Markert, published jointly by VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, Alemania, 1994
7. Subramanian, K.S. and Iyengar, G.V., "Environmental Biomonitoring", Ed Subramanian and Iyengar, published for the American Chemical Society, 1997
8. Georg Schedt, "Analytische Chemie, Grundlagen, Methoden und Praxis", Georg Thieme Verlag, Stuttgart, Alemania, 1995.
9. Nebel, B.J, Wright, R.T., "Environmental Science", (5ª ed.), Ed. Prentice Hall, New Jersey, U.S.A, 1996

10. Manahan, S.E., *“Environmental Chemistry”*, (6ª ed.), Ed. Lewis Publishers, Inc. Michigan, U.S.A., 1994
11. Baird Colin , S.E., *“Environmental Chemistry”*, (2ª ed.), o la última Editorial: W. H Freeman and Company, NY, U.S.A., 1999
12. Connell, D.W., *“Basic Concepts of Environmental Chemistry”*, Ed. Lewis Publishers, Boca Raton, New York, U.S.A., 1997.
13. Fu Yen, Teh, *“Environmental Chemistry: Essentials of Chemistry for Engineering Practice, Vol 4A”*, Ed. Prentice Hall, New Jersey, U.S.A, 1999
14. Miller, J.N., Miller, J.C., *“Estadística para Química Analítica”*, (2da edición), Editorial:, Editorial Addison-Wesley Iberoamerican, S.A., Wilmington, Delaware, E.U.A., 1993.

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Francisco Cereceda Balic	Observaciones:
Aprobado:	Enero 2012	

PROGRAMA N°5

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: INTRODUCCION A LA TESIS
SIGLA	: PDQ – 514
PRERREQUISITO	: FISICOQUIMICA AVANZADA PDQ-501 Y QUIMICA ORGANICA AVANZADA PDQ-502 O QUIMICA INORGANICA AVANZADA PDQ-503
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS SEMANAL	: 10 HORAS PRESENCIALES MÁS 12 HORAS INDIRECTAS
OBJETIVOS:	
<p>El objetivo principal de esta asignatura, es darle a conocer a los alumnos las diferentes áreas de investigación realizadas en cada Universidad del programa, de manera de darle una visión global del ámbito científico en el cual está inserto el programa. De esta manera, se espera que el alumno escoja libremente el área de especialización en el cual desarrollará su Tesis Doctoral.</p> <p>Como objetivo secundario, se espera que el alumno, en conjunto con un Profesor del área de especialización escogida, desarrolle un tema como propuesta introductoria a su Tema de Tesis Doctoral. Para lo anterior, el alumno deberá manejar información actualizada del tema propuesto, además, de estar informado del manejo de las técnicas experimentales necesarias para el desarrollo exitoso del tema escogido</p>	
CONTENIDO:	
<p>Al ser un tema de exploración, no se definen los contenidos del mismo. Sólo se especifica que es un tema de investigación desarrollado en los laboratorios de alguna de las dos Universidades participantes del Programa.</p>	
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.	
<p>La Metodología propuesta para esta asignatura consiste en una actividad exploratoria por parte del alumno junto a un profesor guía de cada universidad, que proporcione información y visitas relacionada con las actividades de los laboratorios de investigación de cada institución. De esta manera los alumnos tendrán una visión más amplia de las diferentes alternativas para el desarrollo de su Tesis Doctoral. De esta manera, el alumno escogerá un área de especialización, en el cual desarrollar su Tema de Tesis. Posteriormente, en conjunto con un profesor de área, desarrolle un tema como propuesta introductoria a su Tema de Tesis Doctoral, la cual deberá ser acompañada de una apropiada revisión bibliográfica del tema en cuestión, además del manejo básico de las técnicas experimentales necesarias para llevar a cabo este propósito.</p>	
EVALUACIÓN	
<p>El Profesor guía del alumno, en el área de especialización escogida, evaluará el desempeño del mismo poniendo énfasis en los siguientes aspectos</p> <ul style="list-style-type: none"> • Trabajo efectivo en el laboratorio. • Independencia en el trabajo realizado. • Análisis críticos de la información recolectada. <p>La evaluación se realizará de 1 a 7 o de 0 a 100, según corresponda. La nota final será el promedio</p>	

obtenido en estos tres aspectos.		
BIBLIOGRAFÍA		
<ul style="list-style-type: none"> • Publicaciones de revistas científicas indexadas directamente relacionadas al tema de Tesis. • Textos relevantes al tema en cuestión entregada y/o recomendada por el Tutor 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Luis Espinoza, Gonzalo Riveros	Observaciones:
Aprobado:	Julio 2011	

PROGRAMA N°6

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: SEMINARIO I
SIGLA	: PDQ - 505
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA
CRÉDITOS	: 8 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 2
OBJETIVOS:	
Al finalizar el Seminario, el alumno estará en condiciones de desarrollar y discutir en profundidad un tema específico en alguna área de la química relacionada con la futura Tesis de Grado. La idea es que este Curso entregue conocimientos que ayuden a potenciar el área de especialización del alumno.	
CONTENIDO:	
En esta asignatura se tratarán temas específicos del área temática general a la cual el estudiante se dedicará durante su Tesis. Estos contenidos deben ser designados por un Tutor (profesor del Claustro de Profesores o Profesor en calidad de Profesor Invitado al Programa) o definidos en común acuerdo con el estudiante. De esta forma, el contenido de la asignatura será variable, dependiendo del tema a desarrollar y estará basado en referencias bibliográficas y textos atinentes al tema en cuestión.	
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.	
<p>La Metodología propuesta para este Seminario, es la discusión periódica entre el alumno y el Tutor de diferentes trabajos relacionados al tema propuesto. La discusión se basará en trabajos presentados en revistas indexadas y/o textos relevantes al tema en cuestión. De esta forma, el alumno desarrollará el tema de Seminario, el cual debe ser expuesto y defendido públicamente en forma oral ante una Comisión Evaluadora al final del semestre. La Comisión Evaluadora será propuesta por el Profesor Tutor y ratificada por el Claustro de Profesores.</p> <p>Además de la exposición pública del Seminario, se exigirá la entrega de un escrito a cada uno de los miembros de la Comisión Evaluadora, a lo menos una semana antes de la exposición del tema de seminario.</p>	
EVALUACIÓN	
<p>La evaluación contempla los siguientes aspectos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Trabajo Escrito (40%): Redacción, lenguaje, desarrollo de las principales ideas del tema, capacidad de síntesis, conclusiones, referencias utilizadas y citadas, entre otros aspectos. • Exposición Pública (30%): Lenguaje empleado, desarrollo del tema, tiempo de exposición (30–35 minutos como tiempo óptimo), dominio del tema, material de apoyo empleado. • Defensa (30%): Respuestas entregadas a cada pregunta y/o cuestionamiento hechos por la Comisión Evaluadora o por el público en general, dominio del tema, fundamentos empleados en cada una de las respuestas dadas. <p>La Comisión Evaluadora dará una nota por cada uno de los aspectos descritos anteriormente, los cuales se ponderarán de acuerdo a los porcentajes definidos anteriormente y darán la Nota Final del Seminario.</p>	

BIBLIOGRAFÍA		
<ul style="list-style-type: none"> • Publicaciones de revistas científicas indexadas. • Textos relevantes al tema en cuestión. 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Gonzalo Riveros Rodrigo Segura	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

A continuación, se debe completar la siguiente ficha, la cual da cuenta del título del seminario, los nombres del alumno, del profesor tutor y de la comisión examinadora, además de la nota final y de la fecha de exposición y calificación del seminario. Esta ficha, junto al programa del seminario, se adjuntará a la ficha del alumno, de modo de reflejar la especialidad del seminario expuesto.

Título del Seminario	
Alumno:	
Profesor Tutor:	
Comisión examinadora:	
Observaciones:	
Nota	Fecha

PROGRAMA N°7

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: SEMINARIO II
SIGLA	: PDQ - 513
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA
CRÉDITOS	: 8 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 2
OBJETIVOS:	
<p>Al finalizar el Seminario, el alumno estará en condiciones de desarrollar y discutir en profundidad un tema específico en alguna área de la Química diferente a la que se dedicará durante su Tesis. La idea es que el alumno sea capaz de profundizar en temas diferentes al de su especialidad, lo que le otorgará una visión más amplia de la Química y fortalecerá su capacidad de interaccionar en un ambiente multidisciplinario.</p>	
CONTENIDO:	
<p>En esta asignatura se tratarán temas específicos. Estos contenidos deben ser designados por un Tutor (Profesor del Claustro de Profesores o Profesor en calidad de Profesor Invitado al Programa) o definidos en común acuerdo con el estudiante. De esta forma, el contenido de la asignatura será variable dependiendo del tema a desarrollar y estará basado en referencias bibliográficas y textos atinentes al tema en cuestión.</p>	
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.	
<p>La Metodología propuesta para este Seminario, es la discusión periódica entre el alumno y el Tutor de diferentes trabajos relacionados al tema propuesto. La discusión se basará en trabajos presentados en revistas indexadas y/o textos relevantes al tema en cuestión. De esta forma, el alumno desarrollará el tema de Seminario, el cual debe ser expuesto y defendido públicamente en forma oral ante una Comisión Evaluadora al final del semestre. La Comisión Evaluadora será propuesta por el Profesor Tutor y ratificada por el Claustro de Profesores.</p> <p>Además de la exposición pública del Seminario, se exigirá la entrega de un escrito a cada uno de los miembros de la Comisión Evaluadora, a lo menos una semana antes de la exposición del tema de Seminario.</p>	
EVALUACIÓN	
<p>La evaluación contempla los siguientes aspectos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Trabajo Escrito (40%): Redacción, lenguaje, desarrollo de las principales ideas del tema, capacidad de síntesis, conclusiones, referencias utilizadas y citadas, entre otros aspectos. • Exposición Pública (30%): Lenguaje empleado, desarrollo del tema, tiempo de exposición (30–35 minutos como tiempo óptimo), dominio del tema, material de apoyo empleado. • Defensa (30%): Respuestas entregadas a cada pregunta y/o cuestionamientos hechos por la Comisión Evaluadora o por el público en general, dominio del tema, fundamentos empleados en cada una de las respuestas dadas. <p>La Comisión Evaluadora dará una nota por cada uno de los aspectos descritos anteriormente, los cuales se promediarán y darán la nota final del Seminario.</p>	

BIBLIOGRAFÍA		
<ul style="list-style-type: none"> • Publicaciones de revistas científicas indexadas. • Textos relevantes al tema en cuestión. 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Gonzalo Riveros Rodrigo Segura	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010	

PROGRAMA N°8

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: TECNICAS ESPECTROSCÓPICAS EN QUÍMICA ORGÁNICA.
SIGLA	: PDQ - 504
PRERREQUISITO	: PDQ - 502
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>Los objetivos de la asignatura consisten en que el alumno sea capaz de determinar la estructura de compuestos desconocidos, sobre la base de la información espectroscópica obtenida a partir de los espectros de IR, RMN y EM. El alumno deberá comprender los principios físicos sobre los que se basa cada técnica, los aspectos experimentales e instrumentales, la información estructural que proporciona cada método y finalmente el alumno deberá hacer uso de la información estructural que le ha proporcionado cada método, para proponer estructuras de compuestos desconocidos.</p> <p>Al finalizar el Curso el alumno estará en condiciones de manejar los principales métodos espectroscópicos con una aplicación intensiva, de modo que tenga la oportunidad de familiarizarse con el análisis de los principales grupos funcionales de la Química Orgánica y las variaciones que se suelen presentar frente a diversos factores estructurales.</p>	
CONTENIDO:	
<p>CAPITULO I</p> <p>CONTENIDOS: ESPECTROSCOPIA INFRARROJA (IR).</p> <p>TEMA 01. Fundamentos. Tipos de vibraciones. Ley de Hooke. Factores que influyen en la posición y forma de las bandas: acoplamiento de bandas, enlace de hidrógeno, conjugación, efectos electrónicos y tensión anular. Aspectos instrumentales. Absorciones características de los grupos funcionales de las moléculas orgánicas.</p> <p>TEMA 02. Teoría de grupos aplicada a la simetría. Operaciones de simetría. Grupos puntuales. Caracteres y representaciones de simetría. Representaciones reducibles e irreducibles. Tablas de caracteres. Descomposición de una representación reducible. Producto directo.</p> <p>TEMA 03. Comparación entre IR y Raman: reglas de selección e intensidad de las señales. Modos normales de vibración y simetría. Aplicación de la teoría de grupos a la determinación del número de bandas activas en IR y Raman. Bandas no fundamentales. Efecto de la fase en los espectros. Frecuencias de grupos en compuestos inorgánicos. Efectos isotópicos.</p> <p>TEMA 04. Ejercicios de aplicación. Interpretación de espectros. Determinación estructural.</p> <p>CAPITULO II</p> <p>CONTENIDOS: ESPECTROMETRIA DE MASAS (EM).</p> <p>TEMA 01. Introducción. Clasificación de instrumentos según su método de separación de iones. Espectros de masas. Determinación de la fórmula molecular. Ión de masa molecular y señales de isótopos. Ión molecular con alta resolución (HRMS). Reconocimiento de la señal de Ión molecular. Técnicas de ionización. Uso de la fórmula molecular. Índice de Deficiencia de Hidrógeno (IDH). Iones metaestables. Reagrupamiento de McLafferty, retro Diels-Alder (RDA), fragmentación arílica y bencílica.</p> <p>TEMA 02. Procesos de ionización y fragmentación de moléculas orgánicas. Reglas de fragmentación. Reacciones de derivatizaciones químicas. Marcaje isotópico. Patrones de fragmentación de grupos</p>	

funcionales en moléculas orgánicas. Interpretación de espectros de compuestos de origen natural.

TEMA 03. Ejercicios de interpretación de espectros de masas combinados con espectros de IR.

CAPITULO III

CONTENIDOS: ESPECTROMETRIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR (RMN).

TEMA 01. Introducción. Aspectos generales del fenómeno físico de la RMN. Desplazamiento químico. Efectos electrónicos. Anisotropía diamagnética. Efectos estéricos. Integración. Acoplamiento escalar y constante de acoplamiento. Equivalencia química y magnética. Multiplicidad de señales y regla n+1.

TEMA 02. Orden de espectro. Experimento de Intercambio isotópico. Experimento de desacoplamiento de espín (doble irradiación). Experimento de RMN dependiente de la temperatura y medidas de propiedades termodinámicas.

TEMA 03. Descripción de RMN por el modelo vectorial y secuencias de pulsos. Ciclos de fases. Evolución del desplazamiento químico. Evolución del acoplamiento escalar. Experimento de espín-eco y secuencias de pulsos para experimentos clásicos de RMN en 1D. Procesos de relajación Longitudinal (T1), Transversal (T2) y Relajación cruzada; Efecto Nuclear Overhauser (NOE)

TEMA 04. Utilización de Software en la estimación del desplazamiento químico y multiplicidad de señales en espectros de 1HRMN y comparación con espectros reales. Ejemplos e interpretación de espectros de 1HRMN de moléculas orgánicas simples.

TEMA 05. Introducción a la RMN de ^{13}C . Efecto de la hibridación del carbono en el desplazamiento químico. Experimento de ^{13}C acoplado con ^1H . Modelo vectorial de RMN de ^{13}C . Experimento de ^{13}C desacoplado de ^1H . Principio de la transferencia de polarización. Experimento de ^{13}C INEPT. Experimento de ^{13}C DEPT 1350 y 900. Estimaciones semiempíricas para desplazamiento químico de ^{13}C en moléculas lineales alifáticas, olefínicas, aromáticas, estructuras de cicloheptano y efectos conformacionales.

TEMA 06. Utilización de Software en la estimación del desplazamiento químico en espectros de ^{13}C RMN y comparación con espectros reales. Determinación de estructuras de complejidad intermedia utilizando técnicas combinadas de IR, EM, ^1H y ^{13}C RMN.

TEMA 07. Introducción a los Gradientes de Campo Magnético Pulsantes (PFG). Operatoria con PFG y Caminos de Transferencias de Coherencias (CTC). Experimentos de excitación selectiva en 1D con PFG. Experimento PFG 1D TOCSY selectivo. Experimento PFG 1D NOESY selectivo. Experimento PFG 1D con supresión de disolvente.

TEMA 08. Introducción a la RMN de correlación bidimensional (RMN 2D). Principios de la RMN en 2D. Tipos de experimentos en 2D. Experimentos en 2D homonucleares con PFG. Experimento PFG 2D ^1H - ^1H COSY y sus variantes: COSY en modo y magnitud, COSY MQF en modo y magnitud, COSY DQF sensible a la fase. COSY con supresión de disolvente WATERGATE DQF sensible a la fase. Diferencias en resolución espectral entre experimentos COSY. Experimento PFG 2D ^1H - ^1H TOCSY y sus variantes: TOCSYMLEV-17, TOCSYDIPSI. Experimento PFG 2D ^1H - ^1H NOESY. Experimento PFG 2D ^1H - ^1H ROESY y su variante: t-ROESY. Diferencias y similitudes entre experimentos NOE y ROE.

TEMA 09. Experimentos en 2D heteronucleares con PFG y Detección Inversa. Tipos de experimentos en 2D heteronucleares. Experimento PFG 2D ^1H - ^{13}C HMQC. Experimento PFG 2D ^1H - ^{13}C HSQC sensible a la fase y HSQC sensible a la fase y multiplicidad editada. Experimento PFG 2D ^1H - ^{15}N HSQC. Experimento PFG 2D ^1H - ^{13}C HMBC en modo y magnitud y HMBC en modo y magnitud con filtro digital. Experimentos en 2D híbridos de correlación ^1H - ^{13}C . PFG 2D ^1H - ^{13}C HSQC-TOCSY con multiplicidad editada. ^1H - ^{13}C HSQC-NOESY.

TEMA 10. Experimentos de RMN en otros núcleos: ^2H , ^{15}N , ^{19}F (directa e indirecta a través de acoplamiento con ^{13}C) y ^{31}P .

TEMA 11. Ejemplo de aplicación en la determinación estructural de una molécula compleja, utilizando

las técnicas de IR, EM y RMN 1D y 2D.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

El programa se desarrollará fundamentalmente a través de la exposición en clases de los contenidos, aunque intercalando constantemente situaciones de aplicación práctica. Se empleará apoyo multimedia, resolución de ejercicios en pizarra, los cuales se entregarán con la antelación suficiente para que sean resueltos por el alumno y discutidos en dichas clases. Adicionalmente se realizará un trabajo de defensa tipo seminario, en la determinación estructural de una muestra problema, aplicando las técnicas espectroscópicas combinadas.

EVALUACIÓN

Las evaluaciones de la asignatura se desarrollarán bajo tres modalidades:

- Examen escrito I (15% cada uno, Capítulo I)
- Examen escrito II (20%, Capítulo II)
- Examen escrito III (25%, Capítulo III)
- Seminario final muestra problema (40%, Capítulos I-III)

La calificación final de la asignatura viene determinada por la fórmula:

$$C.F = 1 \times 0,15 + 2 \times 0,20 + 3 \times 0,25 + 4 \times 0,40.$$

BIBLIOGRAFÍA

1. Barbara Stuart, Hill George, Meter McIntyre, Modern Infrared Spectroscopy, John Willey and Sons, 1996.
2. John R. Ferraro, Kazuo Nakamoto, Chris W. Brown, Introductory Raman Spectroscopy 2nd. Ed., Academic Press, 2003.
3. Daimai Lin-Vien, Norman B. Colthup, William G. Fateley, Jeannette Graselli, Infrared and Raman Characteristic Frequencies of Organic Molecules, Academia Press, 1991.
4. Max Diem, Introduction to Modern Vibrational Spectroscopy, John Wiley and Sons, 1993.
5. “Introducción a la Espectrometría de Masas de Sustancias Orgánicas”, Secretaría de la Organización de los Estados Americanos (O.E.A.), Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico, Monografía N°17. 1983.
6. McLafferty, I. F., Turecek, F. Interpretation of Mass Spectra, 4Ed, University Science Book, 1993.
7. Espinoza C. L. “Curso Introducción a la Resonancia Magnética Nuclear de Alta Resolución 1D Y 2D” Universidad Técnica Federico Santa María, 2004.
8. Breitmaier, E. “Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry” Jhon Wiley & Sons Ltd. West Sussex PO19 1UD, England, 1993.
9. Friebohn, H. “Basic One and Two Dimensional NMR Spectroscopy”, VCH Verlagsgesellschaft, P.O. Box, 101161, D-6940 Weinheim, Germany, 1993.
10. Braun, S., Kalinowski, H.-O., Berger S. “150 and More Basic NMR Experiment”, Wiley-VCH, 1999.
11. Günther, H. “NMR Spectroscopy”, Basic Principles, Concepts and Applications In Chemistry, Ed. John Wiley & Sons. 1995.
12. Hore, P.J. “Nuclear Magnetic Resonance”, Oxford Science Publications, Zeneca, 1995.
13. Rahman, A. U. “Solving Problems With NMR Spectroscopy”, Choudhary Academic Press, 1996.
14. Silverstein, R. M., Webster, F. x., Kiemle, D.V. “Espectrometric Identification of Organic Compounds”, Seventh Edition, John Wiley & Sons. INC, 2005

ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Luis Espinoza, Guillermo Díaz.	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

PROGRAMA N°9

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: QUÍMICA Y CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA.
SIGLA	: PDQ - 506
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA. QUÍMICA AMBIENTAL QUI - 150.
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>Al final del curso el alumno será capaz de enunciar y relacionar los conceptos fundamentales de la Química de la Atmósfera, identificando los principales contaminantes atmosféricos: su rol, sus orígenes, su distribución y su acción sobre los distintos componentes ambientales, tanto en un contexto parcial como global. Será capaz de entender y relacionar los problemas más relevantes de contaminación atmosférica de carácter global, sus dimensiones y efectos sobre el planeta. Finalmente, el alumno adquirirá criterios para enfrentarse a nuevos problemas de química atmosférica tanto a escala urbana, regional, como global.</p>	
CONTENIDO:	
<p>1. Introducción</p> <p>1.1 Evolución y primeras formas de contaminación</p> <p>1.2 Influencia de la contaminación ambiental sobre el hombre</p> <p>1.3 Influencia de la actividad industrial sobre el medio ambiente</p> <p>2. Estructura de la atmósfera</p> <p>2.1.Estructura de la atmósfera</p> <p>2.2.Composición y dinámica atmosférica</p> <p>2.2.1.Movimiento horizontal de la atmósfera</p> <p>2.2.2.Movimiento horizontal de la atmósfera</p> <p>2.2.3.Condiciones meteorológicas</p> <p>2.2.4.Condiciones de vientos</p> <p>2.2.5.Factores geográficos</p> <p>2.3.Dispersión de contaminantes atmosféricos</p> <p>3. Tipos de contaminantes atmosféricos</p> <p>3.1 Contaminantes primarios</p> <p>3.1.1 Depositiones</p> <ul style="list-style-type: none"> - Secas - Húmedas (hidrometeoros) <p>3.1.2 Material particulado en suspensión</p> <p>3.1.3 Contaminantes inorgánicos atmosféricos</p> <p>3.1.4 Contaminantes orgánicos atmosféricos</p> <p>3.2 Contaminantes atmosféricos secundarios</p> <p>3.3 Tipos de smog</p> <p>3.4 Otros tipos de contaminación atmosférica</p> <p>4. Contaminación atmosférica en Chile</p> <p>4.1 Normativa</p> <p>4.2 Índices de calidad del aire</p> <p>4.3 Fuentes más importantes de contaminación atmosférica en Chile</p> <p>4.3 Fuentes más importantes de contaminación atmosférica en Santiago</p>	

4.4 Estudio de caso: Contaminación Atmosférica de Santiago

5. Ciclos químicos de la tropósfera

- 5.1 Ciclo del Oxígeno
- 5.2 Ciclo del Azufre
- 5.3 Ciclo del Nitrógeno
- 5.4 Ciclo del Carbón

6. Química de la estratósfera

- 6.1 Capa de ozono
- 6.2 Capa de Aerosol
- 6.3 Efecto invernadero
- 6.4 Lluvia ácida
- 6.5 Cambio climático global

7. Medición de contaminantes químicos atmosféricos

- 7.1 Representatividad en la toma de muestra
- 7.2 Determinación de la concentración en la fuente (isocinético)
- 7.3 Determinación de la concentración en el ambiente
- 7.4 Métodos de monitoreo
 - 7.4.1 Sistemas pasivos
 - 7.4.2 Sistemas activos
- 7.5 Calibraciones
- 7.6 Estaciones y Redes de monitoreo

8 Control de la contaminación atmosférica

- 8.1 Control de Material Particulado
- 8.2 Eliminación de contaminantes residuales del aire
- 8.3 Aplicaciones a la tecnología de control y abatimiento
- 8.4 Control de fuentes móviles

9 Seminarios en temas específicos

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

Clases teóricas: El programa se desarrollará a través de la exposición de los contenidos con apoyo de materiales de multimedia y análisis de casos de estudio hipotéticos y reales.

Seminarios: cada alumno deberá profundizar en uno más temas relevantes que se hayan tocado durante el curso y presentará una revisión bibliográfica escrita, para finalmente realizar una exposición oral sobre el tema en cuestión

Salidas a terreno: se considerará al menos la visita a las distintas secciones del Laboratorio de Química Ambiental y a las estaciones de monitoreo de calidad del aire, ambas pertenecientes al Departamento de Química de la UTFSM

EVALUACIÓN

La evaluación del curso se realizará considerando:

- Evaluación 1: Pruebas escritas que consideran una parte en preguntas de selección múltiple correspondiente al 40% de la nota final del certamen y otra parte de análisis de casos de estudios correspondiente al 60% restante.
- Evaluación 2: Seminarios sobre temas específicos del curso, los cuales serán evaluados tanto en el trabajo escrito como la exposición oral que realicen los estudiantes en forma individual.
- Evaluación 3: Un examen final del curso que considera todos los capítulos, el cual tendrá preguntas de análisis de casos. El día del examen al estudiante se le dará un tiempo para preparar y

organizar las respuestas a las preguntas del examen, la cuales serán expuestas oralmente ante una Comisión de al menos 3 profesores de la especialidad, donde 2 de ellos serán de la Universidad Técnica Federico Santa María y uno de la Universidad de Valparaíso, o de otra Universidad. Esta Comisión pondrá la nota final del examen.

La nota final del curso se obtendrá de las 3 evaluaciones antes descritas, donde la Evaluación 1 tendrá un 50% de la nota final, la Evaluación 2 un 10% y la Evaluación 3 un 40%.

BIBLIOGRAFÍA

1. Strauss, W., Mainwaring, S.J., "Contaminación del aire, causas efectos y soluciones" (3ª reimpresión), Editorial Trillas, Mexico 1997.
2. López Bonillo, Diego, "El Medio Ambiente", (2ª ed.), Ediciones Cátedra S.A., Madrid, España, 1997.
3. Nebel, B.J, Wright, R.T., "Environmental Science", (5ª ed.), Ed. Prentice Hall, New Jersey, U.S.A, 1996
4. Manahan, S.E., "Environmental Chemistry", (6ª ed.), Ed. Lewis Publishers, Inc. Michigan, U.S.A., 1994
5. Stern, A.C., et al., "Fundamentals of Air Pollution", Ed. Academic Press Inc, London, United Kingdom, 1984.
6. De Nevers, Noel, "Ingeniería de control de la contaminación del aire", Ed. McGraw-Hill Interamericana Editores, S.A. de C.V., México D.F, México, 1996.
7. Glynn Henry J., Heinke G., "Ingeniería Ambiental" (2ª ed.), Ed. Prentice Hall Hispanoamericana, SA, Naulcalpan de Juárez, México, 1999
8. Baird Colin, S.E., "Environmental Chemistry", (2ª ed.), o la última Editorial: W. H Freeman and Company, NY, U.S.A., 1999
9. Seinfeld, H. and Pandis, S.N.; "Atmospheric Chemistry and Physics". Ed. John Wiley & Sons, Inc., USA, 1998 (libro de referencia principal)

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Francisco Cereceda.	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

PROGRAMA N°10

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: HETEROCICLOS DE USO FARMACEUTICO.
SIGLA	: PDQ - 507
PRERREQUISITO	: PDQ - 502
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>Al finalizar el Curso el alumno deberá ser capaz de distinguir los diferentes Heterociclos, así como predecir sus reactividades. Además, utilizando la Química Orgánica convencional el alumno deberá saber proponer, de manera sencilla, diferentes síntesis de cualquier Heterociclo. Por último, el alumno debe aplicar los conocimientos de la Química de los Heterociclos en compuestos de Uso Farmacéutico.</p>	
CONTENIDO:	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Heterociclos. Clasificación. Nomenclatura y estructura. Síntesis: estrategia y procesos más relevantes. 2. Heterociclos aromáticos pi deficientes I. Piridina. Estructura y reactividad. Reacciones con electrófilos. Oxidación. Reacciones con nucleófilos. Reducción. Piridinas sustituidas: C-derivados y N-derivados. Métodos de síntesis. Derivados de uso farmacéutico. 3. Heterociclos aromáticos pi deficientes II. Quinolina e Isoquinolina. Estructura y reactividad. Reacciones con electrófilos. Oxidación. Reacciones con nucleófilos. Reducción. C- y N-derivados. Métodos de síntesis. Derivados de uso farmacéutico. 4. Heterociclos aromáticos pi deficientes III. Diazinas. Estructura y reactividad. Reacciones con electrófilos. Oxidación. Reacciones con nucleófilos. Reducción. C- y N-derivados. Métodos de síntesis. Derivados de uso farmacéutico. 5. Heterociclos aromáticos pi excedentes I. Pirrol, Tiofeno y Furano. Estructura y reactividad. Reacciones con electrófilos. Oxidación. Reducción. Derivados. Métodos de síntesis. Derivados de uso farmacéutico. 6. Heterociclos aromáticos pi excedentes II. Indol. Estructura y reactividad. Reacciones con electrófilos. Oxidación. Reacciones con nucleófilos. Reducción. Reacciones concertadas. Derivados. Métodos de síntesis. Derivados de uso farmacéutico. 7. Heterociclos aromáticos pi excedentes III. 1, 3-azoles: estructura, reactividad y derivados. Métodos de síntesis. Derivados de uso farmacéutico. 8. Heterociclos aromáticos pi excedentes IV. 1, 2-azoles, 1,2-azoles: estructura y reactividad. Métodos de síntesis. Derivados de uso farmacéutico. 	
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.	
<p>El programa se desarrollará fundamentalmente a través de la exposición en clases de los contenidos, aunque intercalando constantemente situaciones de aplicación práctica. Se empleará apoyo multimedia, resolución de ejercicios en pizarra, los cuales se entregarán con la antelación suficiente para que sean resueltos por el alumno y discutidos en dichas clases, además se tiene contemplado</p>	

por parte de los alumnos la presentación y/o defensa de seminarios parciales programados.

EVALUACIÓN

Las evaluaciones de la asignatura se desarrollarán bajo tres modalidades:

1. Examen escrito contenidos 1-4 y contenidos 5-8 (20% cada uno)
2. Promedio de seminarios parciales (20%, Capítulos I-III)
3. Seminario final (40%, Capítulo III)

La calificación final de la asignatura viene determinada por la fórmula:

$$C.F = 1 \times 0,4 + 2 \times 0,2 + 3 \times 0,4$$

BIBLIOGRAFÍA

1. L. A. Paquette "Fundamentos de química heterocíclica" Limusa. Méjico (1987).
2. T. L. Gilchrist "Heterocyclic Chemistry" 2nd. Ed. Longman Scientific & Technical. Essex (1992).
3. T. Eicher, S. Hauptmann "The Chemistry of Heterocycles" G. Thieme Verlag (1995)
4. A. F. Pozharskii, A. T. Soldatenkov, A. R. Katritzky, A. T. Soldatenko "Heterocycles in Life and Society" J. Wiley Sons. N. York (1997)
5. A. R. Katritzky y A. F. Pozharskii "Handbook of Heterocyclic Chemistry" 2ª Ed. Pergamon Press. Amsterdam (2000).
6. J. A. Joule, K. Mills "Heterocyclic Chemistry" 4ª Ed. Blackwell. Oxford (2000).
7. T. Eicher, S. Hauptmann "The Chemistry of Heterocycles: Structure, Reactions, Syntheses, and Applications" John Wiley & Sons, N. York (2003).
8. Brown, T., Holt Jr. H., Lee, M. "Topics in Heterocyclic Chemistry". Volume 2, Springer Berlin/Heidelberg. 2006.

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Mauricio Cuellar, Luis Espinoza.	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

PROGRAMA N°11

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: ELECTROQUÍMICA APLICADA
SIGLA	: PDQ - 508
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>El objetivo principal del Curso es el conocimiento y aplicación por parte del alumno de diferentes técnicas electroquímicas, en orden de complementar técnicas experimentales en el área de la Química Orgánica, Química Inorgánica y Química de Materiales, según los requerimientos de los alumnos.</p> <p>Para lo anterior, se abordarán diversas técnicas clásicas, como la Voltametría Cíclica, Técnicas Potenciométricas y Amperométricas, entre otras, y técnicas de última generación, tales como Espectroelectroquímica y Espectroscopía de Impedancia Electroquímica. Previo a esto, se introducirá a los alumnos en conocimientos básicos de los fenómenos fisicoquímicos que gobiernan los procesos electroquímicos, así como los diferentes modelos de interfase electrificada.</p> <p>Además, el Curso contempla una revisión bibliográfica actualizada para interiorizar al alumno de los últimos avances y métodos empleados en el área de la Electroquímica, atinente a su área de desarrollo.</p>	
CONTENIDO:	
<p>INTRODUCCIÓN Y REPASO</p> <p>Tema 1: Procesos electródicos.</p> <p>Tema 2: Potenciales y termodinámica de celdas electroquímicas. Cálculos de potencial de celda. Celdas galvánicas y electrolíticas. Clasificación de electrodos. Movimientos de iones en solución: Difusión y migración. Conductividad y movilidad. Potenciales de unión líquida. Electrodos selectivos de iones. Potenciales y diagramas de estado de oxidación.</p> <p>Tema 3: Cinética electroquímica. Mecanismo de transferencia electrónica en el electrodo y en solución homogénea. Expresión de velocidad para reacciones electroquímicas: Ecuación de Butler–Volmer. Mecanismos de múltiples etapas. Relación entre corriente y velocidad de reacción: Densidad de corriente de intercambio. Interpretación microscópica de la transferencia electrónica.</p> <p>Tema 4: Transferencia de masa por migración y difusión. Corriente limitada por difusión en electrodos planos y semiesféricos. Microelectrodos. Capa de difusión. Difusión y convección: Sistemas hidrodinámicos. Parámetros usados en sistemas hidrodinámicos. Electrodo de disco rotante.</p> <p>TÉCNICAS DE BARRIDO DE POTENCIA. VOLTAMETRÍA CÍCLICA Y BARRIDO LÍNEAL</p> <p>Tema 5: Consideraciones experimentales. Voltametría cíclica en electrodos planos: Procesos reversibles, irreversibles y cuasireversibles. Electrodos esféricos. Microelectrodos.</p> <p>Tema 6: Procesos conteniendo más de una especie. Sistemas involucrando reacciones homogéneas acopladas. Tratamiento de datos en voltametría cíclica. Barrido de potencial lineal con electrodos hidrodinámicos.</p> <p>Tema 7: Laboratorio experimental: Determinación de área de Pt por voltametría en ácido sulfúrico. Ilustración de la ecuación de Nernst mediante voltametría cíclica de una pareja redox dependiente del pH.</p>	

Tema 8: Seminario bibliográfico. Exposición por parte del alumno de un tema actual relacionado con voltametría cíclica y/o voltametría de barrido lineal.

Métodos Amperométricos y potenciométricos

Tema 9: Escalón de potencial: Cronoamperometría. Doble escalón de potencial. Cronocoulombimetría. Escalón de corriente: Cronopotenciometría. Doble escalón de corriente.

Tema 10: Métodos usando derivadas de cronopotenciogramas. Pulsos coulóstáticos. Voltametría de pulsos.

Tema 11: Laboratorio experimental: Uso de técnicas amperométricas y potenciométricas para el estudio del sistema Fe(III)/Fe(II) en solución.

Tema 12: Seminario bibliográfico. Exposición por parte del alumno de un tema actual relacionado con métodos potenciométricos y/o amperométricos.

Métodos involucrando técnicas hidrodinámicas.

Tema 13: Corrientes límites en electrodos hidrodinámicos. Electrodo de gota de mercurio. Electrodos hidrodinámicos en el estudio de procesos electroquímicos. Electrodos dobles hidrodinámicos.

Tema 14: Procesos multielectrónicos: Aplicación del disco rotante de disco y anillo. Electrodos hidrodinámicos en el estudio de reacciones homogéneas acopladas.

Tema 15: Laboratorio experimental: Uso de técnicas hidrodinámicas para el estudio de la reducción de iones cinc(II) y cobre(II) en solución acuosa.

Tema 16: Seminario bibliográfico. Exposición por parte del alumno de un tema actual relacionado con métodos electroquímicos hidrodinámicos.

IMPEDANCIA ELECTROQUÍMICA

Tema 17: Detección y medición de la impedancia. Circuito equivalente de una celda electroquímica. Impedancia Faradaica para un proceso electródico simple. Impedancia total desde parámetros experimentales.

Tema 18: Gráficos de impedancia en el plano complejo. Uso de la admitancia. Voltametría AC. Efectos de segundo orden. Sistemas más complejos: Electrodos porosos y fractales.

Tema 19: Laboratorio experimental: Uso técnicas de impedancia electroquímica para el estudio de la pareja Fe(II)/Fe(III) en solución.

Tema 20: Seminario bibliográfico. Exposición por parte del alumno de un tema actual relacionado con métodos de impedancia electroquímica

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

El Curso contempla clases expositivas de los temas tratados, junto con material multimedia como apoyo. Además, los alumnos presentarán temas de seminarios durante el semestre, para complementar las técnicas estudiadas durante el desarrollo del Curso. Conjuntamente, se realizarán laboratorios donde los alumnos podrán aplicar las diferentes técnicas a diversos sistemas modelos.

EVALUACIÓN

La Evaluación de la asignatura se realizará de acuerdo a las siguiente modalidad:

- Evaluación de cada uno de los seminarios expuestos por los alumnos (30% del Curso).
- Evaluación de los informes realizados por los alumnos de cada una de las prácticas realizadas

(30% del Curso).		
<ul style="list-style-type: none"> - Una evaluación escrita que contenga los puntos 2 y 3 del temario (Voltametría Cíclica y Métodos Amperométricos y Potenciométricos) (20% del Curso). - Una evaluación escrita que contenga los puntos 4 y 5 del temario (Métodos Hidrodinámicos e Impedancia Electroquímica) (20% del Curso). 		
BIBLIOGRAFÍA		
<ol style="list-style-type: none"> 1. Allen J. Bard, Larry R. Faulkner, "Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications" John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001. 2. Christopher M. A. Brett, Ana Maria Oliveira Brett, "Electrochemistry. Principles, Methods, And Applications". 3. S. Menolasina, "Fundamentos y Aplicaciones de Electroquímica", Consejo de Publicaciones, Universidad de los Andes, 2004. 4. H. M. Vilullas, E. A. Ticianelli, V. A. Macagno, E. R. González, "Electroquímica: Fundamentos y Aplicaciones en un Enfoque Interdisciplinario", Editorial Universidad Nacional de Córdoba. 5. J. M. Pingaron Carrazón. P. Sánchez Batanero, "Química electroanalítica. Fundamentos y aplicaciones", Editorial Síntesis 2003. 6. J. O'M. Bockris, A. K. N. Reddy, "Electroquímica Moderna Volumen 2", Editorial Reverté, S.A. 1980. 7. Cynthia G. Zoski, "Handbook of Electrochemistry", Ed. Elsevier, 2007. 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Gonzalo Riveros Daniel Ramírez.	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

PROGRAMA N°12

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: INTRODUCCION A LA MODELACIÓN MOLECULAR
SIGLA	: PDQ - 509
PRERREQUISITO	: PDQ - 501
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>El objetivo general de la asignatura consiste en introducir los conceptos fundamentales junto con la metodología básica empleada en Química Computacional. Se destacan el concepto de Superficie de Energía Potencial, modelos y métodos empleados por la Mecánica Cuántica, el concepto de Campo de Fuerzas y algunos principios generales comunes de los Métodos de Simulación Estadísticos. Con este conjunto de conocimientos generales, se pretende que el alumno obtenga una visión general de la disciplina y su conexión con otros campos de la ciencia Química, Bioquímica y Ciencia de Materiales etc.</p> <p>Los estudiantes deberán desarrollar capacidad crítica frente a la metodología y técnicas empleadas. Asimismo, el alumno deberá desarrollar las competencias adecuadas en las técnicas de investigación con el fin de interpretar críticamente los resultados obtenidos.</p>	
CONTENIDO:	
<p>Módulo 1: Introducción a la Mecánica Molecular y Métodos Químico Cuánticos.</p> <ol style="list-style-type: none"> Conceptos esenciales. <ul style="list-style-type: none"> Mecánica Molecular Métodos de estructura electrónica Modelos en Química Optimización de geometría. <ul style="list-style-type: none"> Superficies de energía potencial. Localización de un mínimo. Criterios de convergencia. Localización de estructuras de transición. Conjuntos de bases <ul style="list-style-type: none"> Mínimas. De Valencia. Polarizadas. Difusas. Selección de métodos teóricos. <ul style="list-style-type: none"> Métodos semi-empíricos Métodos SCF Hartree-Fock 	

- Configuración cuadrática

5. Modelos de gran exactitud en la energía.

- Predicciones termodinámicas.
- Energía de atomización.
- Potenciales de afinidad.
- Afinidad protónica.

6. Reacciones químicas y reactividad.

- Interpretación de la densidad electrónica.
- Computación de entalpía de reacción.
- Estudio de superficies de energía potencial.
- Optimización de la estructura de transición.
- Verificación de la estructura optimizada.
- Predicción de la energía de activación.
- Determinación de estructuras de transición.
- Seguimiento del camino de reacción.
- Reacciones Isodésmicas.
- Reacciones de hidratación.
- Disociación de enlaces.
- Calores de formación vía reacciones isodésmicas.
- Reacciones SN2.

7. Modelación de estados excitados.

- Optimización.
- Estudios fotoquímicos.

8. Modelación de sistemas en solución.

- Modelo de Onsager.
- Cálculos de volumen molecular.
- Cálculos SCRF.
- Cálculos de barrera rotacional.

Módulo 2: Relaciones Cuantitativas Actividad-Estructura (QSAR).

1. Introducción a QSAR.

2. Clasificación de las metodologías QSAR.

3. Descriptores moleculares.

4. Validación de datos.

5. Métodos estadísticos usados en la construcción de un modelo QSAR.

6. Validación de Modelos QSAR.

7 Diseño de un modelo QSAR clásico.

8. Metodologías 3D-QSAR.
9. Análisis conformacional de las moléculas.
10. Determinación de las conformaciones bioactivas de las moléculas.

Módulo 3: Introducción a los Métodos de Acoplamiento Molecular.

1. Teoría de Análisis de Datos de Interacciones Introducción y aplicaciones de acoplamiento molecular en el diseño de la drogas.
2. Bases de datos moleculares y minería de datos:
 - secuencias y estructuras de proteínas
 - interacción ligando-proteína.
3. Predicción de la estructura de proteínas y acoplamiento molecular.
 - Modeller y modelación por homología vía servidores web.
4. Práctica de modelación (Molecular Docking):
 - ArgusLab para Windows
 - Autodock4.0 en Linux.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

Los contenidos de cada Módulo serán cubiertos mediante clases expositivas, seminarios dirigidos de temas selectos y un taller de herramientas informáticas aplicadas.

EVALUACIÓN

Módulo 1. Seminario (50%), Prueba presencial (25%), Tarea (25%)
 Módulo 2. Seminario
 Módulo 3. Seminario, Taller

Nota Final = (Mod1x0,35+Mod2x0,35+Mod3x0,30)

BIBLIOGRAFÍA

1. “Molecular Modelling. Principles and Applications”. Second Edition, A.R. Leach, (Prentice Hall, 2nd Edition, 2001)
2. “Molecular Modelling for Beginners”, A. Hinchliffe, (J. Wiley, 2003).
3. “Química Cuántica. 5^{ta} Edición”, I.N. Levine, (Prentice Hall, 2001)

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Guillermo Díaz Claudio Morgado Patricio Leyton.	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

PROGRAMA N°13

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: QUÍMICA DE MATERIALES
SIGLA	: PDQ - 510
PRERREQUISITO	: PDQ - 503
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>Introducir a los alumnos a los aspectos más relevantes de la química en estado sólido, dentro de lo que destaca la clasificación de los materiales, los métodos de síntesis y caracterización, y las propiedades físicas y químicas para cada uno de materiales, en conjunto con las características moleculares de estos compuestos (geometría molecular, fuerzas intermoleculares, enlace químico)</p> <p>Al final del curso el alumno debe ser capaz de clasificar los diferentes tipos de materiales de acuerdo a sus propiedades y características. Además, deberá manejar los aspectos más relevantes de los métodos de síntesis empleados en la actualidad para la obtención de diferentes materiales, como también las técnicas de caracterización utilizadas, según las características del material.</p>	
CONTENIDO:	
<p>1. Introducción</p> <p>1.1 Tipos de sólidos: Moleculares, iónicos, covalentes, metálicos, intermedios.</p> <p>2. Enlaces en Sólidos.</p> <p>2.1 Enlace Iónico.</p> <p>2.2 Iones y Radios iónicos.</p> <p>2.3 Estructuras Iónicas–Principios generales.</p> <p>2.4 Energía de las redes cristalinas. El ciclo de Born–Haber.</p> <p>2.5 Estabilidad de de compuestos iónicos hipotéticos y reales.</p> <p>2.6 Enlace Covalente y Longitud de Enlace.</p> <p>2.7 Efecto de los electrones no–enlazantes.</p> <p>3. Clasificación de los Materiales.</p> <p>3.1 Clasificación por su estructura: Materiales Cristalinos y Amorfos. Cristales perfectos e imperfectos.</p> <p>3.2 Tipos de defectos. Defectos puntos.</p> <p>3.3 Clasificación por sus propiedades: Cerámicos, Metálicos, Semiconductores, Polímeros, Materiales Compuestos.</p> <p>3.4 Clasificación por tamaño - Introducción a los nanomateriales.</p>	

4. Métodos de síntesis de materiales y nanomateriales.

- 4.1 Reacciones en estado sólido.
- 4.2 Métodos Sol–Gel.
- 4.3 Síntesis Hidrotermal.
- 4.4 Preparación de películas delgadas.
- 4.5 Deposición Química y Física en fase vapor.
- 4.6 Otros que determine el grupo de materiales.

5.-Propiedades de los Materiales.

- 5.1 Electrónicas.
- 5.2 Magnéticas.
- 5.3 Ópticas.
- 5.4 Superconductividad.
- 5.5 Mecánicas.
- 5.6 Catalíticas.

6.-Caracterización de los Materiales.

- 6.1 TEM.
- 6.2 HRTEM.
- 6.3 SEM.
- 6.4 SPMs.
- 6.5 XPS.
- 6.6 Raman.
- 6.7 UV-Vis.
- 6.8 AFM.
- 6.9 Otros.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

El curso consta de clases teóricas expositivas semanales dirigidas por el profesor, con participación directa de los alumnos. Los profesores que impartirán el curso tomarán cada uno de los diferentes tópicos de la asignatura, de acuerdo a su especialidad.

EVALUACIÓN

Las evaluaciones de la asignatura se desarrollarán bajo tres modalidades:

- Examen escrito I y II (60%)
- Promedio de seminarios parciales 20%
- Seminario final 20%

La calificación final de la asignatura viene determinada por la fórmula:

$$C.F = 1 \times 0,6 + 2 \times 0,2 + 3 \times 0,2$$

Además de las clases expositivas, se contempla la discusión de los diferentes temas, en conjunto con análisis y exposición de artículos científicos (seminarios parciales) por parte del alumno relacionados con los diferentes tópicos que componen la estructura general del curso. Estos seminarios serán presentados periódicamente durante el semestre, de manera que el alumno relacione lo aprendido teóricamente en clases con situaciones reales dentro del ámbito de la investigación científica. La exposición de los seminarios se realizará en presencia de a lo menos 2 profesores del área, los cuales tendrán la misión de evaluar la exposición del alumno.

El seminario final consta de la exposición por parte del alumno de un trabajo en particular, de manera que abarque en forma global lo aprendido durante el curso. La exposición del seminario final, será en presencia de todos los profesores del curso, los que evaluarán la exposición y defensa del alumno.

El examen escrito I, contempla los tres primeros puntos del programa (Introducción, Enlace en Sólidos y Clasificación de los Materiales) y el examen escrito II los tres últimos (Método de Síntesis, Propiedades de los Materiales y Caracterización de los Materiales). Las fechas de cada una de estos exámenes serán fijadas durante el Semestre en común acuerdo entre los alumnos y los profesores del Ramo.

BIBLIOGRAFÍA

1. R. West, "Basic Solid State Chemistry", John Wiley & Sons, Chichester, 1999.
2. L. L. Smart, E. A. Moore, "Solid State Chemistry: An introduction", CRC press, 2005.
3. R. West, "Solid State Chemistry and its Application", John Wiley and Sons, 1987.
4. Geoffrey A. Ozin, André C. Arsenault, Ludovico Cademartiri "Nanochemistry: A Chemical Approach to Nanomaterials", Segunda Edición, RSC Publishing, 2008.
5. S. Zhang L. Li, A. Kumar "Materials Characterization Techniques" CRC Press; 1 edition, December 22, 2008.
6. Artículos científicos de revistas indexadas.

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Gonzalo Riveros, Rodrigo Segura, Daniel Ramirez, Marisol Tejos.	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

PROGRAMA N°14

IDENTIFICACIÓN:		
ASIGNATURA	:	MODELOS DE EVALUACION BIOLÓGICA
SIGLA	:	PDQ - 511
PRERREQUISITO	:	INGRESO AL PROGRAMA, BIOLOGIA GENERAL
CRÉDITOS	:	15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	:	4
OBJETIVOS:		
El objetivo principal del curso es conocer los diferentes modelos utilizados en el estudio de la actividad de compuestos químicos orgánicos sobre algunos sistemas biológicos.		
CONTENIDO:		
1. Modelos moleculares. Introducción a los modelos moleculares usados en la evaluación de compuestos químicos orgánicos bioactivos. 2. Modelos biológicos. Introducción a los modelos biológicos usados en la evaluación de compuestos químicos orgánicos bioactivos. 3. Modelos celulares y sus procesos biológicos. Generalidades sobre diferentes procesos celulares: proliferación, muerte celular, migración, invasión, diferenciación y angiogénesis. 4. Ensayos biológicos relacionados con el estudio de estos procesos celulares. 5. Propiedades físico-químicas de compuestos bioactivos necesarias para los bioensayos.		
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.		
El curso contempla Clases teórico-prácticas. Presentación y discusión por los alumnos de resultados obtenidos en el laboratorio del grupo de trabajo. Seminario bibliográfico de cada alumno. Presentación y discusión de un artículo de revistas ISI.		
EVALUACIÓN		
La Evaluación de la asignatura se realizará de acuerdo a las siguiente modalidad: <ul style="list-style-type: none"> • Exposición de un artículo del tema (25%), • Proposición proyecto de investigación (35%) y • Examen conocimientos (40%). 		
BIBLIOGRAFÍA		
1. Literatura especializada: Phytochemistry, J. Natural Products, Planta Médica Natural Product Reports, Chemico-Biological Interactions, etc. 2. Current Protocols in Cellular Biology. 3. Molecular Biology of the Cell. Alberts et al. 4. Natural Products. Their Chemistry and Biological Significance, J. Marin, RS. Davidson, J.B. Hobbs, D.V. Banthorpe and J.B. Harborne, Longman Scientific and Technical.		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Joan Villena	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2010.	

PROGRAMA N°15

IDENTIFICACIÓN:

ASIGNATURA	: QUÍMICA DE SUELOS
SIGLA	: PDQ - 512
PRERREQUISITO	: INGRESO AL PROGRAMA
CRÉDITOS	: 8 (12 SCT-CHILE)
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 3

OBJETIVOS:

Al finalizar el curso el alumno estará en condiciones de enunciar y relacionar los conceptos fundamentales de la química de suelos en cuanto a: a) estructura y composición química. b) procesos químicos naturales. c) impacto de los componentes edáficos sobre el equilibrio natural. d) métodos de depuración de suelos contaminados.

CONTENIDO:

1. Estructura y composición química del suelo

- Introducción
- Estructura y composición
- La disolución del suelo
- Meteorización. Mecanismos químicos.

2. Constituyentes químicos del suelo

- La fracción inorgánica del suelo
- La fracción orgánica del suelo
- La fracción húmica
- Propiedades químicas de la materia orgánica del suelo

3. Procesos de adsorción e intercambio

- Coloides
- Adsorción de compuestos orgánicos
- Intercambio catiónico
- Intercambio aniónico
- Intercambio iónico de iones más importantes

4. Procesos ácido-base. Salinización

- Procesos de acidificación del suelo
- Medida del pH del suelo
- Rehabilitación de suelos ácidos
- Salinización
- Tipos de suelos afectados por sales
- Acidez y procesos redox en el suelo
- Diagrama potencial pH en el suelo

5. Procesos de óxido reducción

- Reacciones de redox en el suelo
- Donadores de electrones
- Aceptadores de electrones
- Procesos redox para especies más importantes

6. La contaminación del suelo

<ul style="list-style-type: none"> • Introducción a los contaminantes edáficos • Contaminantes metálicos. • Contaminantes orgánicos • Fertilizantes • Impacto ambiental de los fertilizantes • Pesticidas • Comportamiento químico de los pesticidas 		
7. Depuración de suelos		
<ul style="list-style-type: none"> • Aspectos generales • Extracción • Depuración química. Electroremediación • Depuración biológica. Bioremediación • Depuración térmica 		
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.		
<p>Clases teóricas: Se efectuarán clases expositivas utilizando material multimedia.</p> <p>Seminarios: Cada alumno deberá profundizar sobre un tema relevante que se haya desarrollado durante el curso y mediante trabajo personal presentará una revisión bibliográfica escrita, para finalmente realizar una exposición oral sobre el tema en cuestión y establecer una discusión sobre los distintos científicos.</p> <p>Salidas a terreno: Se considerará una salida a terreno y/o centro especializado en esta temática.</p>		
BIBLIOGRAFÍA		
<ul style="list-style-type: none"> • El Medio Ambiente. López Bonillo, Diego. Ed. Cátedra S.A., Madrid, España. 2ª Edición. 1997. • Environmental Science. Nebel, B. J., Wright, R.T. Ed. Prentice Hall. New Jersey, USA. 5ª Edición 1996. • Environmental Chemistry. Manan, S.E. Ed. Lewis Publishers Inc., Michigan, USA. 6ª Edición. 1994. • Química del suelo. Doménech, Xavier. Miraguano Ediciones, Madrid, España. 1995. • Environmental Chemistry. Teh Fu Yen. Ed. Prentice Hall PTR, New Jersey, USA. 1999. • Edafología Aplicada. Cobertera, Eugenio. Ed. Cátedra, Madrid, España. 1993. • Química del suelo. Bohn, H., McNeal, B., O'Connor, G. Ed. Limusa S.A. de C.V., México DF. 1993. 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	María Soledad Lobos, Michael Seeger	Observaciones:
Aprobado:	Agosto 2003	

PROGRAMA N°16

IDENTIFICACIÓN:		
ASIGNATURA	:	PROYECTO DE TESIS
SIGLA	:	PDQ – 515
PRERREQUISITO	:	INTRODUCCION A LA TESIS PDQ – 514 Y ASIGNATURA DE ESPECIALIZACION
CRÉDITOS	:	22 SCT-CHILE
HORAS SEMANAL	:	20 HORAS PRESENCIALES MÁS 13 HORAS INDIRECTAS
OBJETIVOS:		
Se espera que al final de la asignatura, el alumno sea capaz de formular un proyecto de investigación en formato FONDECYT (u otro formato de Concurso externo), que esté directamente relacionado con el trabajo de tesis a desarrollar. Se debe considera que la Tesis Doctoral es un trabajo individual de investigación original que debe representar un aporte al conocimiento y sustentarse en una hipótesis verificable.		
CONTENIDO:		
En esta asignatura el alumno desarrollará un proyecto en formato FONDECYT de un tema en común acuerdo entre el estudiante y su director. De esta forma, el contenido de la asignatura será variable, dependiendo del trabajo a desarrollar y estará fundamentado en referencias bibliográficas, textos atingentes al tema en cuestión.		
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA DE APRENDIZAJE.		
La Metodología propuesta para la elaboración del proyecto de tesis se basará fundamentalmente en los aspectos considerados en la presentación de proyectos anunciados por FONDECYT..		
EVALUACIÓN		
<ul style="list-style-type: none"> • Evaluación del Manuscrito de Proyecto de Tesis (50%) • Evaluación de la Presentación Oral del Proyecto de Tesis (50%) 		
BIBLIOGRAFÍA		
<ul style="list-style-type: none"> • Publicaciones de revistas científicas indexadas directamente relacionadas al tema de Tesis. • Textos relevantes al tema en cuestión entregadas y/o sugeridas por el Director de Tesis 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Luis Espinoza, Gonzalo Riveros	Observaciones:
Aprobado:	Julio 2011	

PROGRAMA N°17

IDENTIFICACIÓN:		
ASIGNATURA	:	TESIS I
SIGLA	:	PDQ – 516
PRERREQUISITO	:	PROYECTO DE TESIS PDQ – 515, SEMINARIO I PDQ-505 Y EXAMEN DE CALIFICACION
CRÉDITOS	:	22 SCT-CHILE
HORAS SEMANAL	:	12
OBJETIVOS:		
Comenzar con el trabajo de investigación experimental o según sea el caso, desarrollar los primeros objetivos planteados en el proyecto de tesis.		
CONTENIDO:		
En esta asignatura se tratarán temas específicos del área a la cual el estudiante se dedicará durante su trabajo de Tesis. Estos contenidos deben estar explicitados de acuerdo al proyecto de tesis y definidos en común acuerdo entre el estudiante y su director. De esta forma, el contenido de la asignatura será variable, dependiendo del tema a desarrollar y estará basado en referencias bibliográficas, textos atinentes al tema en cuestión y principalmente por los conocimientos teóricos y/o experimentales que el Director de Tesis debe traspasar al tesista.		
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.		
La Metodología propuesta para la Tesis dependerá exclusivamente del tema en el cual ésta se desarrollará. Consistirá en la discusión periódica entre el alumno y el Director de Tesis de diferentes trabajos relacionados al tema propuesto. La discusión se basará en trabajos presentados en revistas indexadas y/o textos relevantes al tema en cuestión. De esta forma, el alumno desarrollará su tema de tesis en investigación bibliográfica y experimental según sea el caso y los avances de esta serán discutidos en forma periódica entre el alumno y su Director de Tesis.		
EVALUACIÓN		
No hay evaluación.		
BIBLIOGRAFÍA		
<ul style="list-style-type: none"> • Publicaciones de revistas científicas indexadas directamente relacionadas al tema de Tesis. • Textos relevantes al tema en cuestión. 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Luis Espinoza, Gonzalo Riveros	Observaciones:
Aprobado:	Julio 2011	

PROGRAMA N°18

IDENTIFICACIÓN:		
ASIGNATURA	:	TESIS II DE DOCTORADO
SIGLA	:	PDQ – 517
PRERREQUISITO	:	TESIS I DE DOCTORADO PDQ – 516 Y SEMINARIO II PDQ-513
CRÉDITOS	:	60 SCT-CHILE
HORAS SEMANAL	:	32
OBJETIVOS:		
Continuar con los trabajos de investigación iniciados en la asignatura de Tesis I, de acuerdo a los objetivos planteados en el proyecto inicial.		
CONTENIDO:		
Los contenidos siguen la línea de trabajo y de investigación planteados en la asignatura de Tesis I, en el cual se espera que el alumno avance de acuerdo al plan de trabajo previamente establecido.		
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.		
La Metodología se desarrollará siguiendo con el trabajo previo de la asignatura de Tesis I. Consistirá en la discusión periódica entre el alumno y el Director de Tesis de diferentes trabajos relacionados al tema propuesto. La discusión se basará en trabajos presentados en revistas indexadas y/o textos relevantes al tema en cuestión. De esta forma, el alumno desarrollará su tema de tesis en investigación bibliográfica y experimental según sea el caso y los avances de esta serán discutidos en forma periódica entre el alumno y su Director de Tesis		
EVALUACIÓN		
La evaluación será el Avance de Tesis		
BIBLIOGRAFÍA		
<ul style="list-style-type: none"> • Publicaciones de revistas científicas indexadas directamente relacionadas al tema de Tesis. • Textos relevantes al tema en cuestión. 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Luis Espinoza, Gonzalo Riveros	Observaciones:
Aprobado:	Julio 2011	

PROGRAMA N°19

IDENTIFICACIÓN:		
ASIGNATURA	:	TESIS III DE DOCTORADO
SIGLA	:	PDQ – 518
PRERREQUISITO	:	TESIS II DE DOCTORADO PDQ – 517
CRÉDITOS	:	60 SCT-CHILE
HORAS SEMANAL	:	32
OBJETIVOS:		
Continuar con los trabajos de investigación iniciados en la asignatura de Tesis II, de acuerdo a los objetivos planteados en el proyecto inicial y que finalice con al menos una publicación de los resultados en una revista científica y con el trabajo escrito de la Tesis.		
CONTENIDO:		
Los contenidos siguen la línea de trabajo y de investigación planteados en la asignatura de Tesis II, en el cual se espera que el alumno avance de acuerdo al plan de trabajo previamente establecido.		
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.		
La Metodología se desarrollará siguiendo con el trabajo previo de la asignatura de Tesis II. Consistirá en la discusión periódica entre el alumno y el Director de Tesis de diferentes trabajos relacionados al tema propuesto. La discusión se basará en trabajos presentados en revistas indexadas y/o textos relevantes al tema en cuestión. De esta forma, el alumno desarrollará su tema de tesis en investigación bibliográfica y experimental según sea el caso y los avances de esta serán discutidos en forma periódica entre el alumno y su Director de Tesis.		
EVALUACIÓN		
La evaluación se incorpora al examen final		
BIBLIOGRAFÍA		
<ul style="list-style-type: none"> • Publicaciones de revistas científicas indexadas directamente relacionadas al tema de Tesis. • Textos relevantes al tema en cuestión. 		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Luis Espinoza, Gonzalo Riveros	Observaciones:
Aprobado:	Julio 2011	

PROGRAMA N° 20

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES
SIGLA	: PDQ - 520
PRERREQUISITO	: PDQ - 502
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>Conocer las moléculas orgánicas que se generan en los organismos autótrofos como las plantas, centrado en las reacciones metabólicas que tienen lugar en dentro de las células.</p> <p>Comprender el papel fundamental de los metabolitos secundarios que desempeñan en los organismos, como también los potenciales usos en la industria farmacológica de estos compuestos biológicamente activos.</p> <p>Asociar la creencia popular de las plantas medicinales con el contenido de ciertos metabolitos secundarios que poseen estos organismos.</p> <p>Dominar los conocimientos de la utilización de la síntesis como herramienta para generar compuestos biológicamente activos.</p>	
CONTENIDO:	
<p>TEMA 1. Introducción al estudio de los Productos Naturales. Reacciones anabólica y catabólica. Enzimas y Co-Enzimas. Aspectos termodinámicos asociados a las reacciones enzimáticas. Factores que alteran la función enzimática. Formación de productos naturales a través de la fotosíntesis. Elucidación de rutas metabólicas.</p> <p>TEMA 2. Ruta del mevalonato y formación de terpenos. Formación de mevalonato. Clasificación de terpenos. Formación, diversidad estructural y estereoquímica de Monoterpenos, Sesquiterpenos, Sesquiterpenlactonas, Diterpenos, Triterpenos pentacíclicos y Esteroides, Tetraterpenos y Carotenoides.</p> <p>TEMA 3. Ruta del acetato. Formación, diversidad estructural y estereoquímica de ácidos grasos saturados e insaturados, Prostaglandinas, Poliactenos y Polifenoles: ácidos fenólicos, naftoquinonas, antraquinonas y derivados. Tetraciclinas y macrólidos.</p> <p>TEMA 4. Ruta del ácido shikímico. Formación, diversidad estructural y estereoquímica de Fenilpropanoides, Cumarinas, Ligninas y Lignanos, Ácidos cinámicos y derivados. Diferenciación de fenoles derivados de ácido shikímico y derivados de acetatos.</p> <p>TEMA 5. Alcaloides. Definición. Clasificación. Formación, diversidad estructural y estereoquímica de los principales grupos de alcaloides: etilfenilamina, pirrolidina, tropano, indol, piridina, quinoleína, isoquinoleína y fenantreno.</p> <p>TEMA 6. Rutas biogenéticas Mixtas. Metabolitos derivados de acetato-mevalonato: cannabinoides. Metabolitos derivados de shikamato-mevalonato: quinonas isoprenicas, furanocumarinas y furanoquinoleínas, alizarina. Metabolitos derivados de acetato-shikamato: flavonoides y derivados, xantonas, estilbenos y metabolitos relacionados. Metabolitos derivados de triptófano-mevalonato: stricnina, reserpina, camptotecina, quinina, cornezuelos.</p> <p>TEMA 7. Farmacognosia y Plantas medicinales. Métodos de detección, cuantificación, aislamiento y caracterización de compuestos biológicamente activos.</p>	

TEMA 8. Hemisíntesis, síntesis total, síntesis enantioespecíficas y enantioselectivas de Productos Naturales de interés biológico. Estudio retrosintéticos.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

Se desarrollarán las clases utilizando la exposición de contenidos mediante la utilización de equipos multimedia como primera estrategia de aprendizaje, sin dejar de lado las interacciones en la resolución de situaciones problemáticas.

Como segunda estrategia del proceso de aprendizaje, se asignarán tareas individuales y/o en grupos, las cuales deberán ser expuestas en forma de seminarios.

Finalmente, y como tercera estrategia de aprendizaje, se efectuará la exposición de un artículo relacionado con la temática de Productos Naturales.

EVALUACIÓN

Las evaluaciones de la asignatura se desarrollarán bajo tres modalidades:

Examen escrito I (Tema 1-2), II (Tema 3-4), III (Tema 5-6) y IV (Tema 7-8) (40% en total, 20% cada Examen)

Promedio de seminarios parciales (20%, Temas 1-7)

Seminario final (40%, Temas 1-7)

La calificación final de la asignatura viene determinada por la fórmula:

$$C.F = 1x0,4 + 2x0,2 + 3x0,4$$

BIBLIOGRAFÍA

1. Mann, J. "Secondary Metabolism" Oxford Chemistry Series. 1980.
2. Kiyota, H. "Marine Natural Products" Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany. 2006.
3. Dewick, P. M. "Medicinal Natural Products: A Biosynthetic Approach" Secon Edition, John Wiley & Sons, 2001.
4. Kurt, B., Torsell, G. "Natural Product Chemistry: A Mechanistic Biosynthetic and Ecological Approach". Apotekarsocieteten, 1997.
5. Mann, J., Davidson, R. S., Hobbs, J. B., Banthorpe, D. V., Harborne J. B. "Natural Products, their Chemistry and Biological Significance". Longman Publishing Group, 1994.
6. Cragg, G. M., Kingston, D. G. I., Newman, D. J. "Anticancer Agents from Natural Products" Taylor & Francis, 2005.

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Luis Espinoza, Mauricio Cuellar.	Observaciones:
Aprobado:	Enero 2012.	

PROGRAMA N°21

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: ELECTROQUÍMICA Y FOTOELECTROQUÍMICA DE SEMICONDUCTORES
SIGLA	: PDQ - 521
PRERREQUISITO	: PDQ - 501
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
Instruir al estudiante en los procesos electródicos que ocurren en la interfase semiconductor/electrolito tanto en oscuridad como en presencia de luz, y la utilización de dichos procesos en dispositivos fotovoltaicos y fotoelectroquímicos.	
CONTENIDO:	
<p>1. Introducción a los materiales semiconductores</p> <p>1.1 Niveles de energía de un sólido: Estructura de bandas en un cristal y ancho de banda electrónica prohibida. Banda de valencia y de conducción; comportamiento conductor, aislante y semiconductor.</p> <p>1.2 Propiedades ópticas de un sólido: Transmisión, reflexión y coeficiente absorción de un sólido; transiciones ópticas directas e indirectas en un sólido; electrones y huecos.</p> <p>1.3 Densidad de estados y concentración de portadores de carga: Ocupación de estados de energía por electrones y huecos; semiconductores intrínsecos (densidad de electrones y huecos, distribución de Fermi-Dirac); semiconductores extrínsecos.</p> <p>1.4 Transporte de portadores de carga: Conductividad de semiconductores; parámetros de electrones y huecos (movilidad, coeficiente de difusión); Efecto Hall.</p> <p>1.5 Excitación y recombinación de portadores de carga: Aspectos cinéticos después de la excitación de portadores de carga.</p> <p>1.6 Nivel de Fermi en condiciones de no-equilibrio: Quasi nivel de Fermi; diagramas de banda en condiciones de no-equilibrio.</p> <p>2. Superficie de semiconductores y uniones sólido-sólido</p> <p>2.1 Descripción de la superficie de un metal y un semiconductor en el vacío: Nivel energético del vacío; función trabajo; energía de ionización y afinidad electrónica; potencial químico; diagramas de potencial de superficie; niveles de energía adicionales (estados superficiales intrínsecos y extrínsecos).</p> <p>2.2 Contacto Metal-Semiconductor (Junturas de Schottky): Barrera energética y altura; potencial de contacto; diagrama de energía (bandas) para una interfaz metal-semiconductor antes y después del contacto (y su influencia de estados superficiales y de diferentes funciones de trabajo metálico); concepto de los regímenes de acumulación, deserción e inversión.</p> <p>2.3 Cinética de procesos de transferencia de portadores mayoritarios: modelo de emisión termiónico; densidad de corriente semiconductor-metal, metal-semiconductor y de intercambio; diagrama de banda resultante; variación de corriente con el voltaje.</p> <p>2.4 Cinética de procesos de transferencia de portadores minoritarios: diagrama de banda y deducción de la densidad de corriente minoritaria.</p> <p>2.5 Uniones n-p: Diagramas de energía; aspectos cinéticos (densidad de corriente de electrones y huecos); comportamiento de diodo (ecuación de Shockley).</p> <p>2.6 Contactos óhmicos: Diagramas de energía; comportamiento fuera del equilibrio (bajo la influencia de polarización).</p> <p>2.7 Fotovoltaje y fotocorriente: Diagramas de energía bajo iluminación; aspectos cinéticos</p>	

(fotocorriente); condición de circuito abierto y de cortocircuito.

2.8 Recombinación superficial: Rol de los estados superficiales, aspectos cinéticos.

3. Sistemas electroquímicos

3.1 Electrolito: repaso de transporte iónico en soluciones y de aspectos termodinámicos de las interacciones ion-disolvente.

3.2 Potenciales y termodinámica de celdas electroquímicas: Potencial químico y electroquímico; reacciones en fase homogénea y heterogénea; potencial de celda; potencial de referencia; potencial estándar y nivel de Fermi de sistemas redox; comparación de diagramas de energía para interfaz metal/electrolito y semiconductor/electrolito.

4. Técnicas experimentales

4.1 Preparación de electrodos: condición superficial del semiconductor y elección de electrolitos.

4.2 Mediciones corriente-voltaje: voltametría; medición de la fotocorriente.

4.3 Medidas de impedancia: Reglas básicas y técnicas; evaluación de un espectro de impedancia.

5. Interfaz sólido-líquido

5.1 Estructura de la interfaz y adsorción: condición superficial del semiconductor en función del electrolito

5.2 Carga y distribución de potencial en la interfaz: doble capa de Helmholtz; capa de Gouy en el electrolito; zona de carga espacial en un semiconductor (ecuación de Poisson); comparación de la distribución de potencial y carga en la interfaz metal/electrolito y semiconductor/electrolito; capacidad del semiconductor y regímenes de acumulación, deserción e inversión; ecuación de Mott-Schottky; distribución de carga en estados superficiales.

5.3 Análisis de la distribución de potencial: Caso del germanio y silicio; caso de compuestos semiconductores; potencial de banda plana y posición de las bandas de energía en la interfaz; diagrama de bandas planas de varios semiconductores en oscuridad e iluminación.

6. Aspectos teóricos de la transferencia de electrones

6.1 Teoría de Marcus: Transferencia electrónica en fase homogénea, energía de reorganización, transferencia electrónica en electrodos.

6.2 Modelo de Gerisher: Estados energéticos en la disolución, transferencia electrónica.

7. Procesos de transferencia de carga en la interfaz semiconductor/electrolito

7.1 Transferencia de carga en interfaz metal/electrolito: cinética de transferencia de electrones; procesos controlados por difusión; criterio de reversibilidad

7.2 Descripción cualitativa de curvas corriente-potencial en electrodos semiconductores: curvas características.

7.3 Reacciones redox de una etapa: descripción energética del proceso de transferencia de carga, derivación cuantitativa de curvas corriente-potencial, procesos inducidos por luz, reacciones de portadores mayoritarios y minoritarios de carga (en ambos sentidos en la interfaz semiconductor/solución), transferencia electrónica en la región invertida.

7.4 Concepto del cuasi nivel de Fermi

8. Descomposición electroquímica de semiconductores

8.1 Reacciones de disolución anódica: caso de semiconductores elementales (Ge y Si) y compuestos (SiC, GaAs, CdS)

8.2 Descomposición catódica

8.3 Descomposición a circuito abierto

Laboratorios:

1. Caracterización de un semiconductor de tipo-n y de tipo-p, Parte I: Voltametría cíclica en oscuridad e iluminación

Objetivos:

- a. Definir cualitativamente el tipo de comportamiento semiconductor de un material mediante polarización en condiciones de oscuridad e iluminación.
- b. Determinar los regímenes de un semiconductor de acuerdo a su respuesta a la polarización en un electrolito (acumulación, deserción o inversión).

2. Caracterización de un semiconductor de tipo-n y de tipo-p, Parte II: Determinación de la densidad de portadores mayoritarios de carga a través de Espectroscopia de Impedancia Electroquímica (Gráficos de Mott-Schottky)

Objetivos:

- a. Cuantificar el valor de la densidad de portadores mayoritarios de carga de un material semiconductor (electrones para un semiconductor de tipo-n huecos para un semiconductor de tipo-p).
- b. Estimar el valor del potencial de banda plana de un material semiconductor (¿a distintos valores de pH?).

3. Caracterización óptica de un semiconductor de tipo-n y de tipo-p, Parte I: Determinación del ancho de banda electrónica prohibida de un semiconductor de tipo-n y de tipo-p a través de Espectroscopia UV-Visible (semiconductores de band gap directo e indirecto).

Objetivos:

- a. Cuantificar el valor de la densidad de portadores mayoritarios de carga de un material semiconductor (electrones para un semiconductor de tipo-n huecos para un semiconductor de tipo-p).

Estimar el valor del potencial de banda plana de un material semiconductor.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

El curso consta de clases teóricas semanales con ejercicios y módulos de práctica dirigidos por el profesor y ejecutados por los estudiantes. Además se contempla el análisis y discusión de artículos por parte de los estudiantes durante las clases.

EVALUACIÓN

Para la evaluación se considerará el promedio de notas (30%) del análisis y discusión de los artículos, 2 evaluaciones escritas (30%) y un informe de todas las actividades de laboratorio (40%).

BIBLIOGRAFÍA

1. R. Memming, “*Semiconductor Electrochemistry*”, Wiley VHC, 2001.
2. Apuntes “*Photoelectrochimie des Semiconducteurs*” D. Lincot.
3. S. Roy Morrison, “*Electrochemistry at semiconductor and oxidized metal electrodes*”, 1980, Plenum press, New York.
4. A.J. Bard, M. Stratmann, S. Licht, « *Encyclopedia of Electrochemistry, Vol. 6 : Semiconductor*

<p><i>electrodes and photoelectrochemistry</i> », Wiley VHC, 2002.</p> <p>5. M. X. Tang, Paul E. Laibinis, S. T. Nguyen, J. S. Kesselman, C. E. Stanton, N. S. Lewis, “<i>Principles and applications of semiconductor photoelectrochemistry</i>”, 1994, John Wiley and Sons.</p> <p>6. J. McHardy, F. Ludwig, “<i>Electrochemistry of semiconductors and electronics</i>”, 1992, Noyes publications, Park Ridge, New Jersey.</p> <p>7. Artículos relevantes al tema</p>		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	G. Riveros y D. Ramírez	Observaciones:
Aprobado:	Julio 2013.	

PROGRAMA N°22

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: FUNDAMENTOS DE QUIMICA COMPUTACIONAL
SIGLA	: PDQ - 522
PRERREQUISITO	: PDQ - 501
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
<p>El objetivo del curso es introducir a los alumnos a experimentos computacionales básicos donde puedan apreciar la aplicación de una variedad de métodos teóricos, haciendo énfasis en qué es lo que pasa exactamente en un cálculo computacional cuyo propósito es entender un determinado fenómeno químico. Se espera que los alumnos desarrollen las habilidades necesarias ya sea para emprender cursos más avanzados o para aprender a manejar software de química computacional en forma independiente, invitándolos de este modo a usar estas técnicas computacionales en sus respectivas áreas de especialización.</p>	
CONTENIDO:	
<p>Capítulo 1. Introducción al sistema operativo Linux. Arquitectura del sistema operativo. Uso básico de la línea de comandos. Comandos avanzados. Edición de texto. Extracción de texto. Usuarios, grupos, y seguridad. Control de procesos. Comandos de red. Comandos para la administración de hardware. Sistema de archivos. Comandos para respaldar. Comandos de impresión. Monitoreo del sistema. Instalación de programas.</p> <p>Capítulo 2. Coordenadas moleculares y software de visualización molecular. Coordenadas Cartesianas. Coordenadas internas. Proyecciones de Newman. La matriz Z. Formatos de archivos de coordenadas moleculares. Software para visualizar y construir moléculas.</p> <p>Capítulo 3. Simetría molecular. Operaciones y elementos de simetría. Grupos. Grupos puntuales de simetría. Tablas de multiplicación. Tablas de caracteres. Funciones de base. Teoría de grupos y mecánica cuántica.</p> <p>Capítulo 4. Métodos teóricos para cálculos de energía molecular. Métodos de campo de fuerza. Conjuntos de base para sistemas moleculares. Teoría de Hartree-Fock. Métodos semi-empíricos. Métodos de correlación electrónica. Teoría del funcional de densidad.</p> <p>Capítulo 5. Optimización de geometría molecular. La superficie de energía potencial. Fuerzas en una molécula diatómica. Optimización de funciones cuadráticas. Método de máxima pendiente. Métodos del gradiente conjugado. Métodos de Newton-Raphson. La matriz Hessiana. Elección de coordenadas. Búsqueda de estados de transición.</p> <p>Capítulo 6. Búsqueda conformacional. Muestreo conformacional y el problema del mínimo global. Método de Monte Carlo. Simulaciones de dinámica molecular. Método de simulated annealing. Algoritmos genéticos. Métodos geométricos de distancia.</p> <p>Capítulo 7. Distribución de carga y propiedades espectroscópicas. Propiedades relacionadas con la distribución de carga. Potenciales de ionización y afinidades electrónicas. Espectroscopía del movimiento nuclear. Resonancia magnética nuclear.</p> <p>Capítulo 8. Propiedades termodinámicas. La conexión microscópica-macroscópica. La energía vibracional del punto cero. Mecánica estadística</p>	

básica. Calor y energía libre de formación y reacción en el estado estándar.

Capítulo 9. Dinámica molecular.

Condiciones iniciales y propagación de átomos en el tiempo. Algoritmo de Verlet. Algoritmo de Verlet de la velocidad. Conservación de cantidades físicas fundamentales. Funciones de energía potencial. Termodinámica básica. La temperatura y el teorema ergódico. Conexión con sistemas macroscópicos reales. Termostatos. Cálculo de promedios. La superficie de energía potencial. El método de simulated annealing.

Capítulo 10. Métodos híbridos QM/MM.

Motivación de los métodos híbridos. Fronteras a través del espacio. Fronteras a través de enlaces químicos. El método ONIOM.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

La cátedra consistirá en la exposición de los contenidos en combinación con experimentos computacionales en aula

EVALUACIÓN

El curso será evaluado con dos trabajos computacionales de igual ponderación.

BIBLIOGRAFÍA

- Jensen F. (2006) *Introduction to Computational Chemistry*, 2^{da} edición, Wiley.
- Cramer C. (2004) *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, 2^{da} edición, Wiley

ACTUALIZACIÓN

Elaborado:	Claudio A. Morgado	Observaciones:
Aprobado:	Julio 2013.	

A-5.23 PROGRAMA N°23

IDENTIFICACIÓN:	
ASIGNATURA	: QUIMICA TEÓRICA DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN
SIGLA	: PDQ - 523
PRERREQUISITO	: PDQ - 503
CRÉDITOS	: 15 SCT-CHILE
HORAS CÁTEDRA SEMANAL	: 4
OBJETIVOS:	
1. Complementar los contenidos de los cursos de Fisicoquímica Avanzada PDQ-501 y Química Inorgánica Avanzada PDQ-503 en los aspectos referidos a química cuántica y espectroscopía electrónica de compuestos de coordinación. 2. Dar al estudiante una visión razonablemente detallada de los métodos teóricos usados para investigar la estructura electrónica de compuestos de coordinación. 3. Ilustrar al estudiante sobre la forma en que la mecánica cuántica puede ser aplicada para la interpretación de los fenómenos físicos, especialmente en el campo de la espectroscopía.	
CONTENIDO:	
I Introducción a. Métodos avanzados de Teoría de Grupos: Grupos de permutación $S(N)$, grupos dobles O y grupos de rotación completa $R(3)$. Teoremas de elementos de matriz. Reglas de selección y paridad. b. Revisión de conceptos de Química Cuántica: El átomo de hidrógeno, funciones armónicas esféricas. c. Revisión de conceptos de Teoría del Campo Cristalino y de Orbitales Moleculares.	
II Cálculos de energía estados electrónicos a. Espectroscopía atómica: Teoría de los átomos libres y iones, hamiltoniano monoeléctrico. b. Sistemas multielectrónicos: Aproximación del campo central, operador de repulsión interelectrónica, microestados, determinación de términos multipletes L , operadores escalera, funciones determinantes de los símbolos. c. Cálculo de energía de multipletes: Funciones determinantes y determinante secular, elementos de matriz de la repulsión interelectrónica: funciones armónicas esféricas, coeficientes c^k , cálculo de las integrales bielectrónicas J_{ij} y K_{ij} en función de los parámetros de Slater- Condon F y de Racah A, B, C . d. Campo de ligantes: Expansión del campo potencial V : operador de campo cristalino definido por simetría. Desdoblamiento de los términos multipletes del ion libre, relación entre los términos L y las funciones armónicas esféricas, comportamiento de estas funciones frente a las operaciones de simetría de grupos de punto (O_h, T_d) mediante las trazas de las representaciones del grupo doble O , obtención de términos Γ . e. Cálculo de elementos de matriz $\langle \Gamma'IV\Gamma \rangle$: Expansión de V en funciones armónicas esféricas mediante operadores de proyección: parámetros Dq , solución del determinante secular para interacción de configuraciones	

(términos Γ de la misma multiplicidad).		
f. Diagramas de correlación campo fuerte-campo débil para diferentes configuraciones d^n y correlación Oh-Td.		
g. Construcción de diagramas de Orgel y de Tanabe-Sugano		
III Teoría de intensidades de transiciones electrónicas		
a. Coeficiente de absorción: Momento de transición		
b. Fuerza del oscilador		
c. Interacción del vector dipolo eléctrico con el estado inicial y final		
d. Algebra de tensores irreducibles y el teorema de Wigner-Eckart, símbolos 3-J y 6-J, Acoplamiento vectorial de 3 momentos angulares		
e. Mecanismos de intensidad: Campo cristalino y polarización de ligandos.		
f. Acoplamiento vibrónico: Adiabático (Herzberg-Teller) y no adiabático (Born-Oppenheimer) , operadores vibrónicos		
g. Análisis de espectros electrónicos para configuraciones d^n .		
METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.		
1. Exposición en clase de los contenidos.		
2. Resolución de ejercicios.		
3. Discusión de artículos		
EVALUACIÓN		
1. Pruebas cortas en clases: ponderación 30%		
2. Ejercicios o tareas para desarrollar fuera de clases: ponderación 30%		
3. Seminarios sobre la base de lectura de artículos : 40 %		
BIBLIOGRAFÍA		
1. M. Gerloch, R.C. Slade, <i>Ligand Field parameters</i> , Cambridge University Press, 1973		
2. T.M. Dunn, D.S. McClure, <i>Crystal Field Theory</i> , Harper and Row, 1965		
3. C. J. Ballhausen, <i>Introduction to Ligand Field Theory</i> , McGraw Hill, 1962		
4. A.B.P. LEVER., <i>Inorganic electronic spectroscopy</i> . 2ª Ed., Elsevier, New York, 1986		
5. Michael Tinkham, <i>Group Theory and Quantum Mechanics</i> , McGraw-Hill, New York, San Francisco, Toronto, London, 1964		
6. J.S. Griffith, <i>The irreducible Tensor Method for Molecular Symmetry Groups</i> , Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New jersey, 1962		
ACTUALIZACIÓN		
Elaborado:	Guillermo Díaz Fleming.	Observaciones:
Aprobado:	Julio 2013.	

Anexo 10. Laboratorios disponibles para el desarrollo de Tesis Doctorales.

Laboratorios Universidad de Valparaíso.

Facultad de Ciencias

LABORATORIO 1

Laboratorio de docencia de pregrado, disponible para los alumnos del programa.

Encargado

Director del Departamento

Ubicación:

Depto. de Química y Bioquímica,
Facultad de Ciencias, Universidad de
Valparaíso.

EQUIPAMIENTO

- Balanzas analíticas
- Espectrofotómetros digitales UV-VIS (Scanning 190-1100 nm, 2 nm Ancho Banda, Porta celda para 8 celdas, Programa Barrido Espectral, Calibración automática). Manejo manual y a través de computador.
- Juego de Micropipetas Vol. Variable
- pH-metros
- Destilador de agua marca Lab–Tech modelo WD-1008 interior construido en acero inoxidable.
- Balanzas Granatarias

LABORATORIO 2

Laboratorio de docencia de Análisis Instrumental, disponible para los alumnos del programa

Encargado

Director del Departamento

Ubicación:

Depto. de Química y Bioquímica,
Facultad de Ciencias, Universidad de
Valparaíso.

EQUIPAMIENTO

- Cromatografía de alta Resolución (HPLC) modelo Sy-8100, marca Beijing Rayleigh Analytical Instruments Corp.
- Cromatografía de gases (CG) modelo Sp-3420^a, marca Beijing RayleighAnalytical Instruments Corp.
- Absorción Atómica con accesorios (AAS) Wfx-130b, marca Beijing RayleighAnalytical Instruments Corp.
- Polarografía de Pulso diferencial con electrodo de mercurio

LABORATORIO 3

Nombre Laboratorio: **Química Analítica y Ambiental**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dra. María Gabriela Lobos V.	Depto. de Química y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valparaíso.	35 m ²

EQUIPAMIENTO

- pHmetro sobremesa, pH Metro HANNA, Modelo pH 21,
- Placa Agitadora-calefactora Modelo HP-3000 marca LABCompanion
- MicropipetaVol Var. 10-100 µL modelo Transferpette S, marca BRAND
- MicropipetaVol Var. 100-1000 µL, Transferpette S, marca BRAND
- MicropipetaVol Var. 0.5-5 mL, Transferpette S, marca BRAND
- Estufa de secado Modelo UL 30 790986, marca Memmert
- Estufa de secado Modelo DHG-9053A, marca Drying Oven
- Fermentador de Sobremesa con panel de control para: pH, Temperatura, Aireación, Agitación, bomba peristáltica. Modelo LiflusGX Marca Biotron Compresor de aire, Marca Biotron
- Bomba HPLC Cuaternaria, Inc. Sistema de lavado, Panel Bomba L2130, Accesorio de gradientes cuaternarios y Inyector Rheodyne manual 7725 i. Marca HTA LaChrom Elite L2130
- Refrigerador, Modelo Progress 3603, Marca Fensa
- Refrigerador, Modelo Celsius MR320, Marca Mademsa
- Congelador, Modelo MFV 540B, Marca Mademsa
- Placa calefactora, modelo Cimarec 3, Modelo Thermolyne
- Desionizador, Modelo BarnsteadEASypure II, Marca ThermoScientific
- Destilador capacidad de 8 litros por hora. MARCA Labtech LWD 108.
- Balanza Analítica Modelo AUX 220, Marca Shimadzu
- MultiparamétricoPortátil , marca Hanna modelo 2898. Incluye GPS.
- HPLC-HG/CV-UV-AFSAcoplamiento de Cromatografía Líquida de alta resolución a Fluorescencia Atómica previa foto oxidación y generación de Hidruros o vapor frío (en línea). Para la especiación de Arsénico y Mercurio. P.S.A Analytical Ltd. Kent UK: MilleniumExcalibur (1 er FONDEQUIP)

Además se tiene acceso al siguiente equipamiento:

ICP-OES , Espectroscopia de emisión atómica con plasma acoplado inductivamente (ICP –OES) con distintos sistemas de nebulización y sistema anexo para la generación de Hidruros.ICP- OES OPTIMA 2000 DV, Marca Perkin Elmer®

ICP-MS, marca Argilent 7000 (Dr. Francisco Cereceda (UTFSM)), que se instalará en Laboratorio PUCV (Dr. Waldo Quiroz). Utilización, mantención y funcionamiento se coordina entre las tres Universidades.

LABORATORIO 4

Nombre Laboratorio: **Electroquímica y Nanociencias**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dr. Daniel Ramírez Ruiz	Depto. de Química y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valparaíso.	28 m ²

EQUIPAMIENTO

- Fuente de poder (voltaje corriente) potenciostática y galvanostática
- 1 Balanza analítica Scitech
- 1 campana de extracción de gases
- 1 Multímetro Keithley modelo 2410
- 2 Potenciostato/galvanostato Gamry G300
- Sistema de control de velocidad de electrodo de disco rotante-Origalys
- Electrodo de disco rotante-Origalys
- 3 Computadores
- 1 Tester
- 1 Aparato soldador
- 1 Dremel
- 1 baño ultrasónico y térmico
- 1 Criostato
- 3 Placas agitadoras magnéticas y calefactoras
- 1 Jaula de Faraday
- 1 Refrigerador Frigidaire
- 1 UPS Buron
- 1 Estabilizador de Voltaje Buron
- 1 Generador de señales triangulares Tacussel

LABORATORIO 5

Nombre Laboratorio: **Electroquímica y semiconductores**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dr. Gonzalo Riveros Patroni	Depto. de Química y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valparaíso.	18 m ² (Laboratorio) + 8 m ² (UV-Visible)

EQUIPAMIENTO

- Campana de Extracción de Gases
- 2 Placas agitadoras-calefactoras Heidolph modelo MR Hei-Standard
- Balanza Analítica Radwag modelo AS 200/C/2
- Estufa de convección forzada DHG modelo DHG 9053^a
- Equipo ultrasonido Branson modelo 2510
- Potenciostato CH-Instruments modelo CHI 604C
- Potenciostato-Galvanostato CH-Instruments modelo CHI 660D
- Espectrofotómetro UV-visible Perkin-Elmer modelo Lambda 35, con esfera de integración para medida de muestras opacas

- Material de vidrio
- Diferentes electrodos de referencia, trabajo y auxiliar
- Celdas electroquímicas varias

LABORATORIO 6

Nombre Laboratorio: **Nanomateriales**

Encargado (a):

Dr. Rodrigo Segura del Río

Ubicación:

Depto. de Química y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valparaíso.

Superficie App.

30 m²

EQUIPAMIENTO

- Sistema de deposición química en fase vapor (CVD) compuesto por: Horno horizontal para tubo MTI OTF-1200X (1200 °C), reactor de cuarzo, Conexiones y accesorios para vacío, Controlador de vacío y bomba para vacío mecánica rotatoria de dos etapas, 3 controladores digitales de flujo másico (MFC) (calibrados para 30 gases, con sensor de presión y temperatura), caseta exterior de gases con líneas de acero inoxidable para Ar, N₂, H₂, O₂, C₂H₂, CH₄. Accesorios para liberación de precursores líquidos. Software para control de horno y MFCs.
 - Espectrómetro RamanDeltaNuAdvantage 532 con accesorios para muestras sólidas y líquidas.
 - Espectrofotómetro UV-Vis Shimadzu UV2600 con accesorio Esfera de Integración ISR 2600 plus para mediciones de Reflectancia Difusa.
 - Picoamperímetro con fuente de voltage (500V) Keithley 6487.
 - Microscopio óptico Amscope, 1,600X, con cámara digital de 9.1 M, sistema de iluminación episcópico y por transmisión.
 - Equipo de deposición programable “Vacuum Spin Coater” MTI VTC-100 (0-8000 rpm)
 - MicrocentrífugaYingtai (velocidad máx: 16000 rpm, rfcmax: 19.000 g).
 - Balanza analítica Radwag.
 - Campana extractora de gases (150 x 70 cm²)
 - Estufa secadora Labtech.
 - Menores: Baño de ultrasonido, 2 placas calefactores con agitación magnética, 2 agitadores magnéticos, Multímetro digital, Módulo termocupla para multímetro (termómetro digital), Peachímetro digital de bolsillo Corning pH-30, Micropipeta 20 ul, Pie de metro, Tornillo micrométrico, aparatos para microfiltración, herramientas varias.
 - 3 computadoras de escritorio y un notebook.
 - 4 puntos de red
- Durante el periodo 2013-2014 se adquirirá un espectrofotómetro FTIR a través del proyecto Anillo ACT1108. Durante el año 2014 se incorporará un Potenciostato, Simulador Solar AAA y Cromatógrafo de gases por proyecto Fondecyt 1121203.

LABORATORIO 7

Nombre Laboratorio: **Materiales Orgánicos**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dra. Marisol Tejos, Dr. Jaime Mella	Depto. de Química y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valparaíso.	30 m ²

EQUIPAMIENTO

- Balanza semi-analítica CHYO (0.01g) y balanza analítica Scaltex (0,0001)
- Refrigerador
- Estufa secado
- RotavaporFisatom. Bombas de vacío
- Equipos diversos para síntesis micro y macro orgánica e inorgánica, columnas para cromatografía flash, material general como mantas calefactoras desde 50 a 1000 ml, placas calefactoras/agitadoras. Todo tipo de material volumétrico
- Sonicador Bronson 200
- Microscopio Óptico Leitz Wetzlan Germani.
- Lámpara UV 254 nm .Fotoreactor Rayonet con lámparas de 254 nm, 300nm y 350 nm. Lámpara de irradiación solar.
- Sistema de Spin-Coating para deposición de películas (1000-5000 rpm)
- Data logging multimeter
- Tubos de gases.
- Medidor de intensidad de luz.
- Mufla tubular.
- Spin-Coater spi supplies structure probe, inc
- 2 campanas de extracción

LABORATORIO 8

Nombre Laboratorio: **Laboratorio de Extracción de Microcontaminantes (LEM)**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Roberto Quiroz	Depto. de Química y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valparaíso.	20 m ²

EQUIPAMIENTO

- Campana
- Congelador
- Estufa
- Rotavapor
- Sistema de vacío para extracción en Fase sólida
- Sistema de extracción Soxhlet
- Centrifuga

Facultad de Farmacia

LABORATORIO 9

Nombre Laboratorio: **Productos Naturales**

Encargado (a):

Mauricio Cuellar

Ubicación:

Facultad de Farmacia,
Universidad de
Valparaíso

Superficie App.

50 M2

EQUIPAMIENTO

- Equipo FTIR con accesorios y prensa
- Estufa de secado de material Fine Tech
- Balanzas analíticas Radwag
- Rotavapores Büchi
- Campana de extracción turbo
- Equipo punto de fusión multiopción STUART
- Agitadores Magnéticos Heidolph
- Mantos calefactores Fine Therm
- Aparato Soxhlet Duran-Schott
- Equipos de destilación Tempra
- Liofilizador VIRTIS
- Material fungible de vidrio Duran-schott
- Refrigerador -20°C Bosch Bosch
- Molino de martillo para material vegetal Condux-werk
- Computador Celeron
- Columnas de separación cromatográficas

Universidad Técnica Federico Santa María

Departamento de Química

LABORATORIO 10

Nombre Laboratorio: **Química de Productos Naturales**

Encargado (a):

Dr. Luis Espinoza

Ubicación:

Departamento de Química, UTFSM.

Superficie App.

EQUIPAMIENTO

- 1 Refrigeradores y 1 freezer (- 20 °C).
- Evaporadores rotatorios en serie con reciclaje de agua.
- Campanas de extracción simple.
- 2 Estufas de secado de material.
- 4 Evaporadores rotatorios.
- 1 espectrofotómetro lector de microplacas, tipo Elisa ,Thermo.
- 1 balanza analítica.
- 1 balanza granataria digital.
- 1 equipo de punto de fusión digital.
- 1 pHmetro.
- Bomba de hidrovacío.
- 3 computadores con conexión a internet, 2 impresoras.

Toda la infraestructura, reactivos y material fungible para el correcto funcionamiento: material de vidrio, cámaras de acero inoxidable para extracciones, equipos de destilación, escritorios, estanterías, mesones de trabajo, red telefónica, internet, etc.

LABORATORIO 11

Nombre Laboratorio: **Síntesis Orgánica**

Encargado (a):

Dr. Luis Espinoza

Ubicación:

Superficie App.

Departamento de Química, UTFSM.

EQUIPAMIENTO

- 9 Evaporadores rotatorios.
- Campanas de extracción simple.
- 1 vórtex.
- 4 Refrigerador.
- 1 balanza analítica.
- 8 agitadores magnéticos.
- 5 computadores con conexión a internet. 2 impresoras.
- 1 campana de revelado de placas cromatográficas.
- 1 baño de ultrasonido
- 2 bomba de vacío
- Equipo de punto de fusión

Toda la infraestructura, reactivos y material fungible para el correcto funcionamiento: material de vidrio cámaras de acero inoxidable para extracciones, equipos de destilación, escritorios, estanterías, mesones de trabajo, red telefónica, internet, etc.

LABORATORIO 12

Nombre Laboratorio: **Resonancia Magnética Nuclear**

Encargado (a):

Dr. Luis Espinoza

Ubicación:

Superficie App.

Departamento de Química, UTFSM.

EQUIPAMIENTO

- Equipo de RMN de alta resolución 400 MHz (Serie Advance NMR 400) con cabezal multinuclear con detección inversa y gradientes de campo magnético en Z.
- 2 computadores con conexión a internet y software de análisis (Software TOPSPIN 2.1)

LABORATORIO 13

Nombre Laboratorio: **Pruebas Biológicas**

Encargado (a):

Dr. Luis Espinoza

Ubicación:

Superficie App.
Departamento de Química, UTFSM.

EQUIPAMIENTO

- 1 Campana de flujo laminar Labconco.
- 1 estufa de cultivo Memmert.
- 1 equipo de autoclave.
- 1 baño de agua termoregulado.
- 1 shaker para cultivo
- 1 vórtex.
- 1 refrigerador.
- 1 microondas.
- 1 microscopio Zeiss.
- 1 lupa estereoscópica.
- Set de micropipetas.
- 1 Cámara de microscopio con puerto USB.
- 1 Cámara digital.
- 1 rotavapor Buchi
- 1 bomba de vacío
- 1 ultrasonido
- 1 Centrifuga tubos 15-50 ml
- Material fungible de laboratorio.

LABORATORIO 14

Nombre Laboratorio: **Biotransformaciones**

Encargado (a):

Dr. Luis Espinoza

Ubicación:

Superficie App.
Departamento de Química, UTFSM.

EQUIPAMIENTO

- 2 espectrofotómetro visible.
- 1 Refrigerador
- 1 vórtex.
- 1 balanza analítica Shimadzu.
- 1 agitadores magnéticos.

- 1 computadores
- 2 espectrofotómetro
- 1 Estufa convección forzada Xtrem
- shaker (agitadores orbitales).
- material fungible para el correcto funcionamiento estanterías, mesones de trabajo

LABORATORIO 15

Nombre Laboratorio: **ORGANOMETÁLICO B-367**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dr. Patricio Reveco	Departamento Química, UTFSM.	de 49 mtr ²

FACILIDADES

- Se puede controlar condiciones extremas de presión, temperatura, luminosidad, atmósferas inertes u otras si así se requiere de manera tal de asegurar que no se produzcan resultados aleatorios o influencias extrañas (a las conocidas o previstas) que alteren el resultado del experimento o medición.
- Se garantiza que el experimento o medición es repetible, es decir, cualquier otro laboratorio podría repetir el proceso y obtener el mismo resultado, proceso de normalización
- Está dotado de variados materiales usuales, específicos para cada tipo de operación, de distintas capacidades, texturas, resistencias y formas.

EQUIPAMIENTO

- El laboratorio está equipado con instrumentos de medida o equipos con los que se realizan experimentos, investigaciones o prácticas diversas tales como:
- Campanas de extracción, estufa, vaporizador de átomos metálicos, computador conectado a internet, balanza, línea de vacío, bombas de vacío, equipos de secado de solventes químicos, dewars criogénicos, microscopio, y otros.

BIBLIOTECA

El laboratorio posee diversos libros de consulta en área de síntesis inorgánicas u orgánicas.

LABORATORIO 16

Nombre Laboratorio **Fisicoquímica Inorgánica B-377**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dr. Patricio Reveco	Departamento Química, UTFSM.	de 52 mtr ²

FACILIDADES

Se pueden controlar presiones desde el alto vacío hasta presión atmosférica, un amplio rango de temperaturas, atmosferas inertes, y todas las condiciones que sean necesarias para asegurar mediciones exactas y reproducibles.

EQUIPAMIENTO

Se cuenta con los instrumentos y equipos necesarios para realizar las investigaciones en el área de fisicoquímica inorgánica tales como:

- Línea de vacío (bomba de alto vacío, difusora, línea de vidrio, manómetro de vidrio en U)
- Equipo de medición de equilibrio líquido-vapor dinámico.
- Equipo para medir equilibrio líquido vapor por diferencia de concentración.
- Equipo para preparar soluciones de gas en líquido.
- Elementos necesarios para montar equipo de medición de equilibrio líquido-vapor estático.
- Medidores de presión y temperatura digital.
- Detector de fugas de vacío.
- Crióstato.
- Dos bombas de vacío de diferente capacidad.
- Estufa común
- Estufa de vacío.
- Dos baños termostáticos.
- Equipo para medir índice de refracción
- Balanzas analíticas de 3 y 4 cifras.
- Agitadores magnéticos.
- Prensa sodio
- Campanas
- Material de vidrio habitual y específico.

LABORATORIO 17

Nombre Laboratorio: **Biomonitoreo y Evaluación Toxicológica**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dr. Francisco Cereceda	Departamento Química, UTFSM	

EQUIPAMIENTO:

- Domo Invernadero bioclimático para cultivo los biomonitores 70 M2
- Cámara cultivo para biomonitores, termostatzada y con fotoperiodo 6 m2
- Cámara almacenamiento para biomonitores, termostatzada 0.5m2
- Microscopio Olympus
- Lupa estereoscópica, Olympus
- Cámara Micrometrics con conexión USB para microscopía
- Contador células
- Material e instrumental para análisis y manipulación material biológico
- Purificador aire, refrigeradores y congeladores
- BioToxMonitor: equipo para análisis y realización curvas dosis respuestas utilizando biomonitores vegetales y tubos ATD (para análisis COVs, desarrollo propio, patente en trámite)
- Lector de Barra
- Microondas

- Campanas Extracción Gases Sobremesa
- Campana Extracción Gases
- Cámara Web Vigilancia
- Compresor Schultz
- Generador Aire cero
- Campana Extracción
- Monitor Compuestos Orgánicos Volátiles
- Aire acondicionado Invernadero

LABORATORIO 18

Nombre Laboratorio: **Química Analítica Ambiental**

Encargado (a):

Dr. Francisco Cereceda

Ubicación:

Superficie App.

Departamento de Química, UTFSM y
Casa Bari

EQUIPAMIENTO:

- Equipamiento para análisis inorgánico.
- Cromatógrafo iónico 850 professional IC Metrohm, Suiza con autosampler
- Multímetro WTW, Alemania
- Equipamiento para análisis orgánico.
- Cromatógrafo de gases Autosystem XL, Perkin Elmer, USA, con detector FID y autosampler para 50 muestras
- Cromatógrafo de gases Autosystem XL, Perkin Elmer, USA, con detectores FID y ECD, equipado con autosampler para 50 muestras
- Cromatógrafo de gases Clarus 500, Perkin Elmer, USA, con detector de Espectrometría de masas acoplado a sistema de desorción térmica automática Turbomatrix ATD Perkin Elmer, USA, (ATD-GC-MS)
- Cromatógrafo de Gases con detector de espectrometría de masa y autosampler para 50 muestras Clarus SQ8, Perkin Elmer, USA.
- Cromatógrafo líquido de alta resolución (HPLC) con detectores UV-Vis y Fluorescencia, , Perkin Elmer Flexar, USA
- Cromatógrafo líquido de alta resolución (HPLC) con detectores DAD y Fluorescencia AgilentInfinity, USA.
- Campanas de extracción especialmente diseñadas para el análisis de trazas con doble sistema de extracción (5 unidades)
- Sistema de extracción con solvente acelerado (ASE), modelo ASE 350, Dionex, USA.
- Sistema de purificación de agua de calidad HPLC (Sub-boiling)
- Sistema de purificación de agua calidad milli Q, Millipore, USA.
- Sistema purificador de aire con filtros HEPA.
- Sistema para reciclar y purificar solventes orgánicos
- Sistema de concentración de muestras que consta de rotavapor conectado a un baño de recirculación termoregulado automático y bomba de vacío de teflón (2 unidades).
- Refrigeradores (3), congeladores (4)
- Bombas de vacío de membrana libres de contaminación (7 unidades).

- Baño de ultrasonido con temperatura.
- Sala de balanzas con control automático de temperatura y humedad relativa.
- Sistemas de extracción para contaminantes inorgánicos y orgánicos
- Balanza analítica Sartorius, Alemania, 0,01 mg de incerteza con sistema de eliminación de estática
- Mantas y calefactores con agitación magnética.
- Sistema automático para rellenar y empacar tubos de ATD (desarrollo propio, patente en trámite)
- Vortex, placas agitadoras magnéticas, soportes y plataformas extensibles
- 4 Estufas Memmert, USA
- Mufla para calcinaciones hasta 1200°C

LABORATORIO 19

Nombre Laboratorio: **Monitoreo y Tratamiento de Muestras**

Encargado (a): **Ubicación:** **Superficie App.**

Dr. Francisco Cereceda

Casa Bari

EQUIPAMIENTO:

- Equipamiento para toma de muestras.
 - o 2 equipos de toma de muestras de aerosoles atmosféricos de bajo volumen , para gases y partículas, Partisol 2300, SpeciationSampler, Thermo, USA
 - o 1 equipo High VolimpactadorChemVol 3400, ToxSampler, Thermo, USA, para muestras sobre PUFs de PM10; PM2, 5; PM1, 0 y PM0, 1 para especiación química y ensayos toxicológicos.
 - o 1 equipo de toma de muestras de aerosoles atmosféricos de alto volumen, para gases y partículas, TE-1000 PUF, EnvironmentalTish, USA
 - o Equipo LowVol tipo Harvard Impactor para PM10
 - o Colectores pasivos de deposición total CPDT, deposición seca
 - o Colectores de deposición Húmeda WetOnlyCollector y colector de niebla
 - o Tubos de adsorción (ATD) acoplados a bombas de vacío personales, con controlador de flujo másico, PE, USA y usables en forma pasiva para recolección y análisis de COVs.
 - o Espectrometro laser de aerosoles, Grimm 1.109, Alemania
 - o Multímetro portátil Hannainstruments
 - o Variado material de campo para toma, transporte y almacenamiento de muestras ambientales
- Equipamiento para muestreo y análisis de isotopos radioactivos
 - o Monitor Alfa Espectroscópico de Radón en aire RTM 1688-2, frecuencias de muestreo cada 5 min. periodos de hasta 3 meses en continuo, Sarad, Alemania.
 - o Monitor continuo de Radón en suelos, frecuencias de muestreo cada 10 min. periodos de hasta 2 meses en continuo, Barasol MC2, Algade, Francia.
- Estaciones de monitoreo
 - o Estación de tráfico para monitoreo de contaminantes atmosféricos ubicada

en Av. España, Casa Central UTFSM
o Estación monitoreo de contaminantes atmosféricos ubicada en Torre (70 m.s.n.m) Casa Central UTFSM
o Pluviómetros estándar con registro gráfico.
o Estaciones meteorológicas automáticas completas marca Campbell, USA, con autonomía para trabajo de campo, gracias a panel fotovoltaico y data logger (6 meses continuos).

LABORATORIO 20

Nombre Laboratorio: **Química de Suelos**

Encargado (a):

Ubicación:

Superficie App.

Dr. Francisco Cereceda

Departamento de Química, UTFSM

EQUIPAMIENTO:

- Sistema de barreno de muestreo de suelos, Ekjelkamp, Holanda
- Centrifuga Eppendorf refrigerada
- Campana de extracción especialmente diseñada para el análisis de trazas
- Agitador vortex
- Trituradora de alimentos de acero inoxidable
- Procesador de alimentos de acero inoxidable
- Sistemas y tamices para cernir suelos
- Balanza analítica
- Material de muestreo de suelos y material biológico
- Agitador orbital
- Sistema completo para columnas de extracción en fase sólida

LABORATORIO 21

Nombre Laboratorio: **Contaminación y Combustión**

Encargado (a):

Ubicación:

Superficie App.

Francisco Cereceda

Casa Bari

EQUIPAMIENTO:

- 3 bancos de trabajo de acero inoxidable equipados con campanas de extracción para gases y conexión eléctrica
- Cámaras de combustión controlada para análisis de eficiencia térmica y análisis de emisiones contaminantes, desarrollo propio, patente en trámite
- Sistema de monitoreo para gases y partículas de combustión en filtros y denuders
- Espectrómetro laser de aerosoles, Grimm 1.109, Alemania: para medición de número de partículas de 31 tamaños diferentes entre 0,25 μm y 32 μm además de medición de concentración de PM10, PM2,5 y PM1,0.
- Equipo de medición de gases de combustión Testo 350 XL, USA: T°, O2, CO, NO, NO2, H2S, CxHy, SO2 y CO2 NDIR
- Equipo de medición de gases TELEGAN, England: O2, CO/CO2, T°

- Bombas de vacío y compresores
- Generador de aire puro Moduflex
- Variadas herramientas de trabajo
- Variado instrumental de control y medición: termocuplas, flujómetros, controladores de flujo másico, sensores de presión, manómetros, etc
- Set De Equipos Para Triturado, Molido Y Peletizado
- Varios Controladores de flujo másico Omega

LABORATORIO 22

Nombre Laboratorio: **Análisis Instrumental (6 laboratorios)**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dr. Mario Ollino	Departamento de Química, UTFSM	de 200m2

LABORATORIOS:

El equipamiento se encuentra distribuido en los laboratorios de:

1. Cromatografía de Gases
2. Espectroscopía Infrarrojo
3. Espectroscopía Ultravioleta y Visible
4. Espectrofotometría de Absorción Atómica
5. Electroanálisis
6. Cromatografía Líquida y Química Analítica.

EQUIPAMIENTO

- Cromatógrafos de Gases con detector de ionización de llama (FID)
- Cromatógrafo de Gases con detector de captura electrónica (ECD)
- Cromatógrafo de Gases con detector de conductividad térmica (TCD) .
- Cromatógrafos Líquidos (HPLC) con detectores de rango UV- Visible, detector de fluorescencia , detector electroquímico , detector de dispersión de luz (ELSD) , detector de conductividad iónica.
- Espectrofotómetro Ultravioleta – Visible y espectrofotómetros de rango visible.
- Espectrofotómetro de Absorción Infrarrojo (FTIR)
- Espectrofotómetro de Absorción Atómica con accesorio (FIA) para determinación de hidruros volátiles y accesorio horno de grafito.
- Equipo Analizador Elemental (C,H,O,N,S)
- Potenciostato/ Galvanostato para aplicaciones de técnicas electroquímicas variadas , polarógrafos,
- Potenciostato/Galvanostato de alta potencia, Módulo para electrodo de disco rotatorio y otros accesorios.

LABORATORIO 23

Nombre Laboratorio: **Estación de trabajo computacional**

Encargado (a):	Ubicación:	Superficie App.
Dr. Claudio Morgado	Departamento de	Lo necesario para un

Química, Campus computador
Santiago, UTFSM.

EQUIPAMIENTO

- Estación de trabajo computacional que cuenta con tres GPUs Tesla C2050

LABORATORIO 24

Nombre Laboratorio: **Microbiología Molecular y Biotecnología Ambiental (MMBA)**

Encargado (a): **Ubicación:** **Superficie App.**

Dr. Michael Seeger Dos laboratorios se encuentran en 75 m²
Departamento de Química, UTFSM
y uno en calle General Bari,
Placeres, Valparaíso.

EQUIPAMIENTO

Laboratorio de preparación de muestras

- Tres cámaras termostáticas de 25°C, 5°C y -20°C

El equipamiento general incluye:

Una balanza de precisión analítica, una balanza, dos autoclaves, refrigeradores, un congelador (-30 °C), un ultracongelador (-80 °C), una máquina de hielo, pHímetros, computadoras y acceso a Internet.

- **Para los microorganismos y el manejo de sus productos el laboratorio cuenta con:**

Tres campanas de flujo laminar vertical, un microscopio óptico, incubadoras y baños orbitales, centrífugas refrigeradas y centrífugas de sobremesa, un contador de colonias y un sonicador. Para el análisis de las proteínas, el laboratorio cuenta con dos fuentes de poder BioRad, sistemas de electroforesis bidimensional, sistemas de electroforesis monodimensional, el sistema de cuantificación de proteínas (Qubit), un sistema de secado de gel y un sistema para electrotransferencia de proteínas. Para los estudios de biología molecular, el laboratorio cuenta con dos equipos de PCR, horno de hibridación, cámaras de geles de ADN, sistema de documentación (BioRad GEL-DOC), centrífuga de vacío y el sistema de DGGE (BioRad).

- **Para el análisis químico, el laboratorio cuenta con:**

Un cromatógrafo de gases acoplado a un espectrómetro de detección de masa (GC-MS) con ionización por impacto electrónico e ionización química negativa (Perkin-Elmer), un sistema HPLC con arreglo de diodos y autosampler (Jasco) y un espectrofotómetro UV-visible. El Departamento de Química de nuestra Universidad posee NMR (400 MHz), GC-MS, HPLC y un laboratorio de vidrio.

En el laboratorio está implementado un sistema básico para la eliminación de compuestos tóxicos (PCBs, compuestos clorados, solventes, bromuro de etidio) y las medidas de seguridad y los dispositivos adecuados para trabajar con compuestos tóxicos. Las instalaciones en el laboratorio correspondiente al nivel II de seguridad

biológica. El laboratorio cuenta con personal capacitado en el manejo de microorganismos y compuestos químicos.