



Q.I. 2005

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES



Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

Buenos Aires, 25 de julio de 2005

Señor Secretario/a Académico/a
de la Facultad de Ciencias
Exactas y Naturales
S/D

Tengo el agrado de dirigirme al señor Secretario Académico a efectos de comunicarle el desarrollo del curso de post-grado y/o doctorado que se dictará en este Departamento durante el ...2do.... cuatrimestre de 2004.

1- Denominación del Curso: **Fotoquímica y Espectroscopía**

1a- Carácter del Curso:

(para Doctorado: ampliar conocimientos, actualización, extensión profesional)

2- Fecha de iniciación: 16/08/05

3- A dictarse en: **Depto. de Qca. Inorgánica, Analítica y Qca. Física**

4- Responsable (s): Dr. E. San Román, Dr. P. Aramendía, Dra. L. Dixelio y Dra. R. Erra Basells.

(si no revistan en la Facultad, adjuntar nota solicitando la autorización pertinente, la que comprenderá el dictado del Curso y la firma de las Actas de Examen pertinentes).

(Además agregar curriculum vitae resumido, debidamente firmado por el Director de Departamento o por el interesado).

5- Cantidad de horas semanales: 8 hs.

5a- Nro. de horas semanales de clases teóricas: 4 hs.

5b- Nro. de horas semanales de clases de problemas: ----

5c- Nro. de horas semanales de trabajos prácticos: 4 hs.

6- Condiciones de ingreso: Lic. en Química, Física, Biología y carreras afines.

7- Nro. de alumnos (mínimo y máximo): 5

8- Forma de evaluación: examen parcial, seminarios y examen final.

8a- Certificado de aprobación: SI-NO (tachar lo que no corresponda)

9- Puntaje propuesto de acuerdo con el carácter del curso: 5 (cinco)

10- Nro. de código: 5085

11- Se acompaña despacho de la Sub-Comisión Departamental con Vº.Bº. del Director de Departamento.

12- Se propone un arancel de ...20....módulos, teniendo en cuenta como base el valor de \$(el que rija en ese momento).

D. MARTIN NEGRI
DIRECTOR ADJUNTO
D. Q. I. A. Q. F. / FCEN



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES



Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

CUATRIMESTRE: Segundo

AÑO: 2005

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: Fotoquímica y Espectroscopía

CODIGO: 5085

PUNTAJE: 5 (cinco) propuesto

PLAN DE ESTUDIO: -----

CARÁCTER DE LA MATERIA: -----

DURACIÓN: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- Teóricas: 4hs.
- Prácticas: 4hs.

TOTAL: 8 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 128 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Lic. en Química, Física, Biología y carreras afines.

FORMA DE EVALUACIÓN: un examen parcial, seminarios y un examen final.

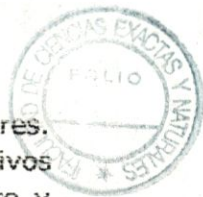
PROGRAMA ANALÍTICO:

Módulo 1. Fundamentos

Estados y transiciones electrónicas. Orbitales moleculares. Superficies de energía potencial. Orbitales de frontera. Diagramas de correlación. Momento angular. Espín electrónico. Nomenclatura espectroscópica. Principio de Franck Condon. Reglas de selección. Fuerza del oscilador. Análisis de espectros típicos de absorción: compuestos carbonílicos, alquenos y polienos, compuestos aromáticos. Transiciones en complejos metálicos. Bandas de transferencia de carga. Excímeros y exciplejos. Movimientos en superficies de energía potencial.

Cinética de reacciones fotoquímicas. Producción y desactivación de estados excitados. Diagramas de Jablonski. Tiempos de vida y eficiencias cuánticas. Desactivación dinámica y estática de la fluorescencia. Relaciones de Stern-Volmer. Formación y decaimiento de estados triplete y oxígeno singlete.

Dr. MARTIN NEGRI
DIRECTOR ADJUNTO
D. Q. I. A. Q. F. / ECEN



Técnicas fotoquímicas. Fuentes de luz. Filtros y monocromadores. Fotodetectores. Radiometría y actinometría. Actinómetros químicos y contadores de fotones. Dispositivos experimentales. Fotólisis flash: del ms al fs. Fotólisis modulada. Efectos fototérmico y fotoacústico. Lente térmica y espectroscopía optoacústica estacionarias y resueltas en el tiempo. Single-photon counting.

Transiciones radiativas y no radiativas. Coeficientes de Einstein. Perturbaciones dependientes del tiempo. Coeficientes de absorción y sección eficaz. Regla de oro de Fermi. Láseres. Quimiluminiscencia. Interacción entre superficies de energía potencial. Elementos de matriz. Acoplamiento vibrónico. Acoplamiento espín-órbita. Efectos de átomo pesado y de sustancias paramagnéticas.

Transferencia de energía y de carga. Transferencia trivial de energía. Mecanismo dipolar (Förster). Mecanismo de intercambio (Dexter). Reglas de conservación del espín (Wigner-Widmer). Rol de la difusión. Ecuación de Sandross para transferencia de energía controlada por difusión. Mecanismos de transferencia de carga de esfera interna y externa. Reacciones adiabáticas y no adiabáticas. Teoría de Marcus-Hush. Relaciones de Rehm-Weller.

Módulo 2. Aplicaciones

Fotodisociación. Fotodisociaciones en fase gaseosa y líquida. Predisociación. Transferencia intramolecular de energía. Rol del solvente. Procesos primarios importantes. Hidrocarburos y compuestos carbonílicos. Azocompuestos.

Fotoisomerización. Ejemplos típicos: alquenos, azobencenos y estilbena. Influencia del estado electrónico y efecto de sustituyentes.

Reacciones electrocíclicas: Polienos conjugados. Simetría orbital y análisis de correlación de orbitales. Barreras energéticas impuestas por la simetría. Reglas de Woodward-Hoffmann. Síntesis industrial de vitamina D.

Fotooxidaciones: Reacciones fotosensibilizadas. Oxígeno singlete. Producción. Competencia entre transferencia de energía y transferencia de carga. Superóxido. Mecanismos de reacción.

Fotoquímica de compuestos carbonílicos: Fotorreducciones y fotodisociaciones. Reacciones de Norrish tipo I y II. Competencia entre transferencia de carga y abstracción de hidrógeno. Influencia de la naturaleza del estado excitado.

Fotoquímica de complejos inorgánicos: Procesos originados en estados de campo ligante y de transferencia de carga. Reacciones desde estados vibracionalmente excitados y no equilibrados. Complejos de Cr, Ru y Re. Procesos fotoquímicos en sistemas binucleares.

Fotoquímica en medios heterogéneos y microheterogéneos. Distribución de especies y cinética en medios microheterogéneos. Espectroscopía, fotofísica y fotoquímica de moléculas adsorbidas, unidas e incluidas en matrices sólidas. Problemas derivados de la dispersión de luz y la reabsorción de fluorescencia.

Dr. MARTIN NEGRI
DIRECTOR ADJUNTO
D. Q. I. A. Q. F. / FCEN



Fotoquímica del ambiente. Fotoquímica de la atmósfera. Mecanismos en la troposfera y en la estratosfera. Contaminación atmosférica. La capa de ozono. Fotoquímica en sistemas acuosos naturales. Descontaminación fotoquímica: métodos de oxidación avanzada. Fotocatálisis directa y sensibilizada.

Bibliografía

N.J.Turro. Modern Molecular Photochemistry. University Science Books. Sausalito, California. 1991.
M. Klessinger, J. Michl. Excited states and photochemistry of organic molecules. VCH. 1995.
J. D. Coyle. Introduction to organic photochemistry. John Wiley. Chichester. 1986.
J. P. Simons. Photochemistry and spectroscopy. Wiley-Interscience. Londres. 1971.
J.B.Birks. Organic Molecular Photophysics. Vols I y II. Wiley. 1975.
R.P.Wayne. Principles and applications of photochemistry. Oxford. 1988.
G.J.Ferraudi. Elements of inorganic photochemistry. Wiley. 1988.
J.A.Barltop, J.D.Coyle. Principles of photochemistry. Wiley. 1978.
A.M.Braun, M.T.Maurette, E.Oliveros. Technologie Photochimique. Presses Polytechniques Romandes. 1986.
C.J.Kavarnos, N.J.Turro. Chem. Rev. 86 (1986) 401.
Inorganic Photochemistry. State of the art. J. Chem. Educ. Vol 60 N°10. 1983.
A.W.Adamson, P.Fleischauer. Concepts of Inorganic Photochemistry. Wiley. 1975.
M.A.Fox, M.Channon (Eds.) Photoinduced electron transfer. Elsevier. 1988.
J.C.Scalano (Ed.) Handbook of organic Photochemistry. CRC Press. 1987.
J.Michl. V.Bonacic-Koutecky. Electronic aspects of organic photochemistry. Wiley. 1990.)

Dr. E. San Román

Dr. P. Aramendía

Dra. L. Dicelio

Dra. R. Erra Baisells

Dr. MARTIN NEGRI
DIRECTOR ADJUNTO
D.Q.I.A.Q.F./FCEN