



810 2011
6

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES



Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas / Posgrado

CUATRIMESTRE: Segundo

AÑO: 2011

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: Fotoquímica y Espectroscopía

CODIGO: 5085

PUNTAJE: 5 (cinco)

PLAN DE ESTUDIO: -----

CARÁCTER DE LA MATERIA: -----

DURACIÓN: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- Teóricas: 4hs.
- Problemas: 4hs.

TOTAL: 8 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 128 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Ciencias Químicas, 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.

FyE- 1/3



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 estilbeno. 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 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.

LUIS M. BARALOTO VICTORIA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA, ANALÍTICA Y QUÍMICA FÍSICA



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, V. Ramamurthy, J. C. Scaiano. Principles of Molecular Photochemistry: An Introduction. University Science Books. 2009
- 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.
- B. Valeur. Molecular fluorescence. Wiley. VCH. Weinheim. 2003.
- N. V. Tkachenko. Optical Spectroscopy. Methods and Instrumentation. Elsevier. Amsterdam. 2006.
- Ch. Zander, J. Enderlein, R. A. Keller. Single Molecule Detection in Solution. Wiley. VCH. Weinheim. 2002.
- 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.Bartlop, 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.
- A.W.Adamson, P.Fleischauer. Concepts of Inorganic Photochemistry. Wiley. 1975.
- M.A.Fox, M.Channon (Eds.) Photoinduced electron transfer. Elsevier. 1988.
- J.C.Scaiano (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. Dixelio

Dra. R. Erra Balsells

Dr. LUIS AL BARALDO VIGNONIA
DIRECTOR
DEPTO. QUÍMICA INORGÁNICA
ANALÍTICA Y QUÍMICA FÍSICA



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 483.760/05

Buenos Aires, 6 MAY 2013

VISTO:

la nota presentada por el Dr. Luis M. Baraldo Victorica, Director del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información y el programa del Curso de posgrado **Fotoquímica y espectroscopía**, que fue dictado en el segundo cuatrimestre de 2011 por el Dr. Enrique San Román, el Dr. Pedro Aramendía, la Dra. Lelia Dixelio y la Dra. Rosa Erra Balsels.

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado el 05/03/2013
lo actuado por la Comisión de Enseñanza, Programas, Planes de Estudio y Posgrado,
lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
RESUELVE:

Artículo 1°: Dar validez al dictado del curso de posgrado de **Fotoquímica y espectroscopía**, de 128 hs. de duración, en el segundo cuatrimestre de 2011.

Artículo 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Fotoquímica y espectroscopía** obrante a fs 16, 17 y 18 del expediente de la referencia.

Artículo 3°: Aprobar un puntaje de cinco (5) puntos para las carrera de Doctorado.

Artículo 4°: Aprobar un arancel de 20 Módulos. Disponer que los montos recaudados serán utilizados conforme a lo dispuesto por Resolución CD N° 072/03.

Artículo 5°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Subsecretaría de Postgrado (con fotocopia del programa incluida). Cumplido, archívese.

Resolución CD N°

735

SP ga 23/04/2013

Dr. JAMES ROY...
SECRETARÍA DE POSTGRADO

Dr. JORGE ALIAGA
DECANO