**UNIVERSIDAD NACIONAL DE RÍO CUARTO**

**FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FISICOQUÍMICAS Y NATURALES**

**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

**CARRERA:** LICENCIATURA EN QUÍMICA

**PLAN DE ESTUDIOS** 2010

**ASIGNATURA:** Introducción a la Espectroscopía y Fotoquímica

**CÓDIGO:** 3826

**DOCENTE ENCARGADO:** Dra. Susana Criado

**CUERPO DOCENTE:**

**Responsable-Profesor**

Dra. Susana Criado

**Profesores**

Dra. Alicia Biasutti

Dra. Marcela Altamirano

Dr. Maximiliano Arbeloa

Dr. Rodrigo Palacios

Dr. Walter Massad

Dr. José Natera

Dra. M. Lorena Gomez

Dra. Gabriela Porcal

Dr. Luis Otero

Dr. Miguel Gervaldo

Dra. Lorena Macor

**AÑO ACADÉMICO:** 2018

**RÉGIMEN:** Cuatrimestral

**RÉGIMEN DE CORRELATIVIDADES:**

|  |  |
| --- | --- |
| *Aprobada* | *Regular* |
| QUIMICA ORGANICA II | FISICOQUÍMICA  III |
|  |  |
|  |  |

Las asignaturas correlativas aseguran en forma directa, o a través de sus correlativas, los conocimientos básicos necesarios para la asignatura.

**CARGA HORARIA TOTAL:** 8 hs

TEÓRICO-PRÁCTICAS: 4 hs

LABORATORIO: 4 hs

**CARÁCTER DE LA ASIGNATURA**: Optativa

**A) CONTEXTUALIZACIÓN DE LA ASIGNATURA**

La interacción de la radiación con la materia, en particular, en lo que respecta a la producción de estados excitados moleculares, sus procesos de decaimiento y reactividad, se abordan en forma muy breve en las materias obligatorias de la Licenciatura en Química. Sin embargo, esta temática posee importancia en lo que hace a la comprensión de numerosos procesos tales como síntesis, decontaminación ambiental, química atmosférica, procesos biológicos y en el desarrollo de muchos procesos tecnológicos (curado de polímeros, sensores especificos, fotolito- y estereolitográfía, conversión de energía, en aplicaciones terapéuticas, etc.).

Se propone a continuación los contenidos de una nueva asignatura que engloba temas que ya están siendo abordados parcialmente en las siguientes asignaturas: Físicoquímica II, Fisicoquimica III y Organica III. Cabe acotar que los conceptos básicos de espectroscopía y fotoquímica no se eliminarían de las asignaturas obligatorias, sino que se los retomarían y profundizarían en esta materia optativa, por lo que no se requerirá reforma en los programas analíticos de Físicoquímica II, Fisicoquimica III y Organica III.

**B) OBJETIVOS PROPUESTOS**

1- estudiar la interacción de la radiación con la materia. En particular,el proceso de la absorción de radicación involucrada en distintos tipos de espectroscopías.

2- estudiar la generación, decaimiento y reactividad de estados excitados, y la cinética y mecanismos de los procesos en los cuales participan.

3- estudiar la naturaleza de los procesos fotoinducidos involucrados en el desarrollo de nuevas tecnologías, sensores con aplicaciones analíticas y en tratamientos terapéuticos.

**C) CONTENIDOS BÁSICOS DEL PROGRAMA A DESARROLLAR**

Interacción de la radiación con la materia. Teoría de las perturbaciones dependiente del tiempo. Transición entre estados. Momento de transición. Reglas de selección. El principio de Frank-Condon. Espectros rotacionales, rotacional-vibracionales y electrónicos de compuestos orgánicos e inorgánicos. Espectroscopía Raman. Cinética de estados excitados. Rendimientos cuánticos. Tiempo de vida de estados excitados. Inhibición de estados excitados (quenching). Mecanismos de quenching. Transferencia de energía y transferencia de electrones. Fotoquímica de grupos funcionales. Fundamentos de la tecnología láser. Química atmosférica. Fotopolimerizaciones. Mecanismos y aplicaciones. Conversión de energía. Fotosíntesis, celdas solares y electro-quimioluminiscencia. Fotomedicina.

**D) FUNDAMENTACIÓN DE LOS CONTENIDOS**

Los contenidos permiten introducir los conceptos básicos necesarios para comprender la cinética de formación y desactivación de los estados excitados de la materia y sus principales aplicaciones en tecnologías.

**E) ACTIVIDADES A DESARROLLAR**

CLASES TEÓRICAS:

Clases teórico- prácticas, de 4 horas semanales, donde se combina la exposición teórica del profesor y resolución de problemas. Se intenta promover la discusión e intervención activa de los alumnos de los diferentes los aspectos de la teoría sobre la base de problemas concretos.

CLASES PRÁCTICAS:

Incluidas en clases teórico-practicas

CLASES DE TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

Se realizaran trabajos prácticos de laboratorio, en grupos compuestos por no más de dos estudiantes. En la semana posterior a la realización del trabajo práctico se deberá presentar un informe que será examinado por los responsables de laboratorio.

**F) NÓMINA DE TRABAJOS PRÁCTICOS**

1. Fluorescencia: Espectro de emisión, excitación y tiempo de vida de la fluorescencia de antraceno.
2. Quenching: Inhibición del estado excitado singlete de antraceno por una amina aromática.
3. Sensores Fotoquímicos: Cuantificación de la formación de oxigeno singlete usando derivados de antraceno
4. Fotodegradacion: Decontaminación de aguas mediante procesos de fotooxidación avanzados.
5. Fotopolimerizaciones: Reacciones de fotopolimerización empleando sistemas de 2 componentes.
6. Conversión de energía: Fabricación de Celdas Solares.Celda de Grätzel
7. Electroluminiscencia: Electroquimioluminiscencia de rutenio bipiridilo
8. Fotodegradacion: Degradación de un fármaco mediada por especies reactivas de oxígeno.

**G) HORARIOS DE CLASES**

A determinar

HORARIO DE CLASES DE CONSULTAS,

Lunes de 14 a 18 hs

**H) MODALIDAD DE EVALUACIÓN:**

DURANTE EL CUATRIMESTRE

La evaluación es individual a través de exámenes parciales escritos. Por otra parte, para la aprobación de trabajos prácticos, además del trabajo experimental se evalúan conocimientos específicos en cada clase.

1. **CONDICIONES DE REGULARIDAD:**

**Asistencia:**

Es obligatoria la asistencia a las clases de problemas y trabajos prácticos.

Para regularizar se requiere un mínimo de asistencia del 85% a clases de problemas.

Los trabajos prácticos deben ser aprobados en un 100%. En casos de inasistencia justificada se tendrá derecho a recuperar un 25% de los mismos.

**Evaluaciones parciales**

Durante el curso del cuatrimestre se tomarán dos parciales que incluyen temas de teoría, problemas y trabajos prácticos desarrollados en el período previo al parcial. Se requiere la aprobación de los dos parciales en primera instancia o en instancia de recuperación.

**Recuperaciones**

El alumno puede recuperar una vez todos los parciales, y tendrá derecho a recuperar dos veces uno de ellos.

CONDICIONES DE PROMOCIÓN:

Asignatura promocionable dentro del marco vigente establecido por la Facultad.

**J) EVALUACIÓN FINAL:**

Se evaluara en forma oral, individualizada, el manejo de contenidos y técnicas discutidas en la asignatura.

**K) PROGRAMA ANALÍTICO**

**A) CONTENIDOS:**

1- Repaso conceptos básicos. La ecuación de Schröedinger dependiente del tiempo**.** Teoría de las perturbaciones dependiente del tiempo. Interacción de la radiación electromagnética con la materia. Momento de transición. Ley de Lambert-Beer**.** Transición entre estados.Reglas de transición. El espectro rotacional. El espectro vibracional-rotacional. Espectroscopía Raman. Configuración, estados y sistemas electrónicos. El diagrama de Jablonski. El Principio de Frank-Condon. El espectro electrónico. Reglas de selección en transiciones electrónicas. Momento de transición electrónico. El factor de Frank-Condon. El factor de spin electrónico. Transiciones radiativas y no-radiativas en compuestos orgánicos e inorgánicos.

2- Cinética fotoquímica. Definición de rendimientos cuánticos y tiempos de vida. Espectros de emisión y excitación de la fluorescencia. Determinación de rendimientos cuánticos de emisión. Actinometría. Técnicas de emisión resueltas en el tiempo. Determinación de tiempos de vida. Desactivación de estados excitados (quenching). Mecanismo de Stern-Volmer. Quenching estático y dinámico. Procesos de transferencia de energía. Procesos fotoinducidos de transferencia de electrones. Excímeros y exciplejos.

3-Repaso fotoquímica de grupos funcionales**.** Fotodisociaciones. Procesos primarios importantes. Azocompuestos.Fotoisomerización. Alquenos y azobencenos. Influencia del estado electrónico y efecto de sustituyentes.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.Fotooxidaciones. Reacciones fotosensibilizadas. Sensores fotoquímicos con aplicaciones analíticas.

4- Fundamentos de la tecnología láser. Emisión estimulada y aplificación de la luz. Propiedades de la luz láser. Láseres específicos: el láser de rubi, el láser de niodimio, laseres de colarantes orgánicos. Lásers de pulsos utlracortos.

5-Fotopolimerizaciones. Reacciones en cadena. Polimerización fotoinducida. Sistemas Fotoiniciadores: Sistemas de 1, 2 y 3 componentes. Macrofotoiniciadores. Efecto de la intensidad de luz y la temperatura en la polimerización fotoinducida. Reactores. Técnicas de medición cinéticas: Fotodilatometría, Foto-DSC, Foto-IR, Viscosimetría, etc. Reacciones de fotopolimerización vivientes. Fotocurado. Fotolitografia. Fotoestereolitografia.

6-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.

7-Fotomedicina. Producción de especies reactivas de oxígeno. Reacciones fotoquímicas. Efectos fotodinámicos en sustratos de origen biológico. Procesos fotooxidativos en medios biomiméticos. Efecto de antioxidantes. Fotoquímicos de compuestos de interés farmacológico. Fotodegradación de medicamentos. Enfermedades neoplásicas. Terapia fotodinámica. Aplicaciones terapéuticas. Estudios *in vitro* sobre celulares. Incorporación intracelular del fotosensibilizador. Inactivación de células.

8-Conversión de energía. Fotosíntesis. Fotosistemas. Centro de reacción y complejo colector de luz. Cadena de transporte electrónico. Diagrama Z. Fotosíntesis en plantas superiores y bacterias. Foto-respiración. Fluorescencia de clorofila y fotosíntesis. Rendimiento cuántico del fotosistema II. Coeficientes de quenching.Celdas fotovoltaicas para generación de electricidad. Características Básicas y Caracterización de Celdas Solares. Generación de Fotocorrientes y Fotovoltajes. Generación y recombinación de estados de separación de cargas fotoinducidos. Celdas solares basadas en nanoestructuras compuestas orgánicas-inorgánicas. Producción de hidrógeno por fotocatálisis. Electroluminiscencia. LEDs y OLEDs.

**Programa Trabajos Prácticos:**

1. Fluorescencia: Espectro de emisión, excitación y tiempo de vida de la fluorescencia de antraceno.

2. Quenching: Inhibición del estado excitado singlete de antraceno por una amina aromática.

3. Sensores Fotoquímicos: Cuantificación de la formación de oxigeno singlete usando derivados de antraceno.

4. Fotopolimerizaciones: Reacciones de fotopolimerización empleando sistemas de 2 componentes.

5. Fotodegradación: Decontaminación de aguas mediante procesos de fotooxidación avanzados.

6. Fotodegradación: Degradación de un fármaco mediada por especies reactivas de oxígeno.

7. Conversión de energía: Fabricación de Celdas Solares. Celda de Grätzel.

8. Electroluminiscencia: Electroquimioluminiscencia de rutenio bipiridilo.

**L) CRONOGRAMA TENTATIVO**

|  |  |
| --- | --- |
| SEMANA |  |
|  |  |
| 1 | (22-26)/08 Tema 1 |
| 2 | 29 /08-2/09 Tema 1- Tema 2 |
| 3 | (5-9)/09 Tema 2- Práctico 1 |
| 4 | (12-16)/09 Tema 3 – Práctico 2 |
| 5 | (19-23)/09 Tema 3 – Práctico 3 |
| 6 | (26-30)/09 Tema 4 – Tema 5 |
| 7 | (3-7)/10 Tema 5 – Práctico 4 |
| 8 | (10-14)/10 **Primer Parcial** -Tema 6 |
| 9 | (17-21)/10 Tema 6 - Práctico 5 |
| 10 | (24-28)/10– Tema 7 |
| 12 | 31/10-4/11 Práctico 6 – Tema 8 |
| 13 | (7-11)/11 Práctico 7 –Tema 8 |
| 14 | (14-18)/11 Práctico 7 - **Segundo parcial** |
| 15 | (21-25)/11 Recuperatorios |

M) BIBLIOGRAFÍA

1. Ira N. Levine, Espectroscopía molecular, Editorial AC, Madrid, España, McGraw-Hill, Inc. 1980
2. Barrow, G. - Introduction to Molecular Spectroscopy - McGraw Hill, NY 1962.
3. Nicholas J. Turro, Juan C. Scaiano, and V. Ramamurth. Principles of Molecular Photochemistry. 2008
4. Coyle, Hill y Roberts. Light, chemical change and life: a source book in photochemistry,1982
5. J. Kagan. Organic Photochemistry: Principles and Applications,1994
6. PetrKlán and JakobWirz. Photochemistry of Organic Compounds: From Concepts to Practice, 2009
7. R. P. Wayne - Photochemistry, principles and Applications, Oxford, 1984.
8. R. P. Wayne - Photochemistry, 2002.
9. Richard P. Wayne. Chemistry of Atmospheres. An Introduction to the Chemistry of the Atmospheres of Earth, the Planets, and their Satellites. Third Edition. ISBN: 9780198503750. Oxford University Press, 2000.
10. Parveen, S., Aslam, M.S., Hu, L., Xu. ElectrogeneratedChemiluminescence. Protocols and Applications, 2013.
11. Allen J Bard. ElectrogeneratedChemiluminescence. Marcel Dekker, Inc., 2004.
12. A. Almeida. An insight on bacterial cellular targets of photodynamic inactivation. Future Medicine, 2014, 145.