**FORMULARIO PARA LA PRESENTACIÓN DE PROGRAMAS DE ASIGNATURAS en el CONTEXTO DE PANDEMIA por Covid-19[[1]](#footnote-1)**

**Año Lectivo: 2020**

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE RÍO CUARTO**

**FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICO-QUÍMICAS Y NATURALES**

**DEPARTAMENTO DE QUIMICA**

**CARRERA/S:** Licenciatura en Química

**PLAN DE ESTUDIOS:** 2010

**ASIGNATURA:** Fisicoquímica III **CÓDIGO:** 2017

**MODALIDAD DE CURSADO:** a distancia

**DOCENTE RESPONSABLE:** Carlos A. Chesta. Dr. en Química. Profesor Titular (DE)

**EQUIPO DOCENTE:**

María A. Molina

Kevin Riberi (becario)

Mena Leandro (becario)

**RÉGIMEN DE LA ASIGNATURA:** cuatrimestral

**UBICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIO:** 5to año

**RÉGIMEN DE CORRELATIVIDADES:**

Asignaturas aprobadas: Química Orgánica II

Asignaturas regulares: Fisicoquímica III (2017)

**CARÁCTER DE LA ASIGNATURA:** Optativa

**CARGA HORARIA TOTAL:** horas (según el plan de estudio vigente)

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Teóricas:** | **-** | **Prácticas:** | **-** | **Teóricas -Prácticas:** | **56 hs** | **Laboratorio:** | **56 hs** |

**CARGA HORARIA SEMANAL:** horas (según el plan de estudio vigente)

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Teóricas:** | **-** | **Prácticas:** | **-** | **Teóricas -Prácticas:** | **4 hs** | **Laboratorio:** | **4 hs** |

1. **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, temática que se aborda 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.).

1. **OBJETIVOS PROPUESTOS**

1- estudiar la interacción de la radiación con la materia en 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.

1. **EJES TEMÁTICOS ESTRUCTURANTES DE LA ASIGNATURA Y ESPECIFICACIÓN DE CONTENIDOS**

**C.1. Contenidos mínimos (según plan de estudio vigente)**

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.

**C.2. Ejes temáticos o unidades**

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. Fotoquímica de compuestos de interés farmacológico. Fotodegradación de medicamentos. Enfermedades neoplásicas. Terapia fotodinámica. Aplicaciones terapéuticas. Estudios *in vitro* sobre cultivos 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.

1. **ACTIVIDADES A DESARROLLAR**

**D.1. Actividades en modalidad virtual** (modalidades alternativas a la presencialidad).

**CLASES TEÓRICAS PRÁCTICAS:** 4 hs semanales usando plataformas virtuales (Meet, Zoom, etc.). En estas clases se combinará la exposición teórica del docente y la resolución de problemas. Se intentará promover la discusión e intervención activa de los alumnos de los diferentes los aspectos de la teoría sobre la base de problemas concretos.

**CLASES DE TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO:** ninguna

**OTRAS:** ninguna

**D.2. Actividades en la presencialidad**

**CLASES TEÓRICAS:** ninguna

**CLASES PRÁCTICAS:** ninguna

**CLASES DE TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO:** 4 hs semanales, prácticos de laboratorio. Se realizarán 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.

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 oxígeno 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.

**OTRAS:** ninguna

1. **PROGRAMAS Y/O PROYECTOS PEDAGÓGICOS INNOVADORES E INCLUSIVOS**

Ninguno

1. **CRONOGRAMA TENTATIVO DE CLASES E INSTANCIAS EVALUATIVAS a realizar en la virtualidad y en la presencialidad**

**INCORPORE AQUÍ EL TEXTO**

Que muestre coherencia y consistencia con el logro de los objetivos y las competencias definidas. Las fechas de parciales deberán ser consensuadas con los responsables de las demás asignaturas del cuatrimestre correspondiente, en acuerdo con la Res. C.S. 120/17).

**F.1. Cronograma tentativo de clases e instancias evaluativas a realizar en la virtualidad.**

Dado que esta asignatura es dictada por docentes responsables de otras asignaturas, los día y horarios de clases son acordadas entre estudiantes y docentes durante el período de cursado.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Semana | Día/Horas | Actividad: tipo y descripción\* |
| 1 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 2 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 3 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 4 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 5 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 6 | A establecer | Teórico-prácticos- Primer examen parcial |
| 7 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 8 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 9 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 10 | A establecer | Teórico-prácticos |
| 11 | A establecer | Teórico-prácticos-Segundo examen parcial |
| 12 | A establecer | Recuperatorios  |

\*Teóricos, teóricos-prácticos, trabajos de laboratorios, seminarios, talleres, coloquios, instancias evaluativas, consultas grupales y/o individuales, otras.

**F.2. Cronograma tentativo de clases e instancias evaluativas a realizar en la presencialidad.**

Dado que esta asignatura es dictada por docentes responsables de otras asignaturas, los día y horarios de clases son acordadas entre estudiantes y docentes durante el período de cursado.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Semana | Día/Horas | Actividad: tipo y descripción\* |
| 1 | A establecer | - |
| 2 | A establecer | - |
| 3 | A establecer | Laboratorio 1 |
| 4 | A establecer | - |
| 5 | A establecer | Laboratorio 2 |
| 6 | A establecer | Teórico-prácticos- Primer examen parcial |
| 7 | A establecer | Laboratorio 3 |
| 8 | A establecer | Laboratorio 4 |
| 9 | A establecer | Laboratorio 5 |
| 10 | A establecer | Laboratorio 6 |
| 11 | A establecer | Laboratorio 7 -Segundo examen parcial |
| 12 | A establecer | Recuperatorios  |

\*Teóricos, teóricos-prácticos, trabajos de laboratorios, seminarios, talleres, coloquios, instancias evaluativas, consultas grupales y/o individuales, otras.

1. **BIBLIOGRAFÍA**

**G.1. Bibliografía obligatoria y de consulta** (por lo menos algún material bibliográfico debe ser de edición 2012 o posterior).

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. Petr Klán and Jakob Wirz. 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. Electrogenerated Chemiluminescence. Protocols and Applications, 2013.
11. Allen J Bard. Electrogenerated Chemiluminescence. Marcel Dekker, Inc., 2004.
12. A. Almeida. An insight on bacterial cellular targets of photodynamic inactivation. Future Medicine, 2014, 145.

**G.2. Plataformas/herramientas virtuales; materiales audiovisuales, otros.**

1. **DÍA Y HORARIOS DE CLASES VIRTUALES y PRESENCIALES**

A definir

Dado que esta asignatura es dictada por docentes responsables de otras asignaturas, los día y horarios de clases son acordadas entre estudiantes y docentes durante el período de cursado.

1. **DÍA Y HORARIO DE CLASES DE CONSULTAS VIRTUALES y PRESENCIALES**

A definir.

Dado que esta asignatura es dictada por docentes responsables de otras asignaturas, los día y horarios de clases son acordadas entre estudiantes y docentes durante el período de cursado.

1. **REQUISITOS PARA OBTENER LA REGULARIDAD Y LA PROMOCIÓN**

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

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

Asignatura será promocionable dentro del marco vigente establecido por la Facultad.

1. **CARACTERÍSTICAS, MODALIDAD Y CRITERIOS DE LAS INSTANCIAS EVALUATIVAS**

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. Los parciales serán tomados en forma virtual usando planillas de Google.

El examen final se llevará a cabo según lo establecido por la resolución 052/2020 de la Facultad.

 ****

 Carlos A. Chesta

**Firma Profesor/a Responsable Firma Secretario/a Académico/a**

1. Res. CS 120/2017 y Res. CD 049/2020 [↑](#footnote-ref-1)