

ANEXO

PROGRAMA

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.

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 la fluorescencia.

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.

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 de fotosistema II. Coeficientes de quenching.

Conversión de energía. Celdas fotovoltaicas para generación de electricidad. Producción fotobiológica de hidrógeno por ruptura fotosintética del agua. Algas y bacterias fotosintetizadoras. Tecnologías avanzadas de oxidación reducción usando luz solar. Producción de hidrógeno por fotocatálisis. Celdas solares de TiO₂ sensibilizadas por colorante.

Visión. Fotoquímica de la visión. El ojo humano. Retina. Estructura de los fotopigmentos. Fotoquímica de las moléculas de pigmento. Fototransducción. Fotorreceptores en distintas especies: monocromatos y policromatos. Visión color. Intensidad del estímulo (quantum catches).

Fotofísica y fotoquímica en solución vs. medio biológico (proteína). Cromóforos utilizados por los organismos vivos en antenas y unidades fotosintéticas, como sensores de radiación y objetos o para reparar daños motivados por radiación de alta energía: tetrapirroles de cadena abierta, retinal, ácido p-cumárico, flavinas.

Bibliografía

Photochemistry of Organic Compounds _ From Concepts to Practice

P. Klán, J. Wirz, Wiley Blackwell, 2009

Principles and Applications of Photochemistry

B. Wardle, John Wiley & Sons, 2010

Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules

N. J. Turro, J. C. Scaiano, V. Ramamurthy, University Science, 2010

Molecular Fluorescence. Principles and Applications

B. Valeur. Wiley VCH, 2002

Principles of Fluorescence Spectroscopy, 3rd. edition
J. R. Lakowicz. Springer, 2006

Excited states and photochemistry of organic molecules
M. Klessinger, J. Michl. VCH, 1995

Introduction to organic photochemistry
J. D. Coyle. John Wiley, 1986

Optical Spectroscopy: Methods and Instrumentations
N. V. Tkachenko, Elsevier, 2006

Femtochemistry
F. C. DeShryver, S. DeFeiter, G. Schweitzer, Wiley, 2001

Principles and applications of photochemistry R.P.Wayne, Oxford, 1988

Principles of photochemistry J.A.Barltop, J.D.Coyle. Wiley. 1978 Photochemistry and spectroscopy
J. P. Simons. Wiley-Interscience, 1971 Electronic aspects of organic photochemistry

J. Michl. V.Bonacic-Koutecky, Wiley, 1990 Handbook of Photochemistry

M. Montalti, A. Credi, L. Prodi, M. T. Gandolfi, CRC_Taylor & Francis, 2006
Photoinduced electron transfer

M. A. Fox, M. Channon, Elsevier, 1988

Handbook of Organic Photochemistry and Photobiology, second edition
W. Horspool, F. Lenci, CRC Press, 2004 Handbook of Photochemistry

S. L. Muroy, I. Carmichael, G. L. Hug, M. Dekker, 1993 Handbook of organic Photochemistry, Volumes 1 and 2

J. C. Scaiano, CRC Press, 1987 Technologie Photochimique

A.M.Braun, M.T.Maurette, E.Oliveros, Presses Polytechniques Romandes, 1986

Förster resonance energy transfer – A spectroscopic nanoruler: Principle and applications

H. Sahoo. *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.* 12 (2011) 20

Photosensitization by Reversible Electron Transfer: Theories, Exptl. Evidence, and Examples

C. J. Kavarnos, N. J. Turro, *Chem. Rev.* 86 (1986) 401

Kinetics and mechanisms of charge transfer processes in photocatalytic systems: A review

L. Zhang, H. H. Mohamed, R. Dillert, D. Bahnemann. *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.* 13 (2012), 263

Photocatalytic water splitting using semiconductor particles: History and recent developments

K. Maeda. *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.* 12 (2011) 237

Fighting global warming: The potential of photocatalysis against CO₂, CH₄, N₂O, CFCs, tropospheric O₃, BC and other major contributors to climate change

R. de_Richter, S. Caillol. *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.* 12 (2011) 1
Biology, 10th. edition (Ch. 8, Photosynthesis)

P. Raven, G. B. Johnson, K. A. Mason, J. B. Losos, S. S. Singer. McGraw Hill, 2014

Chlorophyll a Fluorescence: A Signature of Photosynthesis (Advances in Photosynthesis and Respiration, Vol. 19). G.C. Papageorgiou, Govindjee (Eds.). Springer, 2005

The science of color, 2nd. edition (Ch. 2, Light, the Retinal Image, and Photoreceptors)

S. K. Shevell, Elsevier, 2003

Microbial and Animal Rhodopsins: Structures, Functions, and Molecular Mechanisms

O. P. Ernst, D. T. Lodowski, M. Elstner, P. Hegemann, L. S. Brown, H. Kandori. *Chem. Rev.* 114 (2014) 126

Photoreceptor proteins, "star actors of modern times": a review of the functional dynamics in the structure of representative members of six different photoreceptor families.

M. A. van der Horst, K. J. Hellingwerf. *Acc. Chem. Res.* 37 (2004) 13

Natural photoreceptors as a source of fluorescent proteins, biosensors, and optogenetic tools

D. M. Shcherbakova, A. A. Shemetov, A. A. Kaberniuk, V. V. Verkhusha. *Annu. Rev. Biochem.* 84 (2015) 519.