

FICHA DE ACTIVIDADES CURRICULARES

Datos generales de la actividad curricular (asignatura)

Métodos ópticos II

Licenciatura en Química, Orientación Química Analítica.

Programa analítico

I. Espectrometría de absorción ultravioleta y visible.

Estados vibrónicos. Población. Bandas calientes. Coeficientes de absorción y de extinción. Coeficientes de Einstein. Probabilidad de absorción. Absorción integral. Fuerza del dipolo. Fuerza del oscilador. Aislamiento de bandas, integración. Ancho medio de banda. Principio de Franck Condon aplicado a absorción. Orbitales moleculares. Configuraciones electrónicas y estados excitados. Transiciones $\pi \rightarrow \pi^*$ y $n \rightarrow \pi^*$. Sistemas electrónicos π conjugados. Bandas $\sigma \rightarrow \sigma^*$ y $n \rightarrow \sigma^*$.

II. Espectrometría luminiscente.

Procesos fotofísicos unimoleculares. Fluorescencia. Principios. Espectros. Intensidad de la emisión. Eficiencia. Principio de Franck-Condon. Energía de las transiciones 0-0. Efecto del solvente. Instrumentación. Geometría. Distorsión de los espectros. Fuentes. Monocromadores. Calibración. Espectros de excitación corregidos. Espectros de emisión corregidos: métodos de soluciones estandar, de lámpara estandar, del contador cuántico y dispersor. Geometría del porta muestras. Corrección por efecto de filtro interno. Probabilidad de la transición. Tiempo de vida natural y radiativo. Parámetros de la fluorescencia. Procesos competitivos bimoleculares. Cinética de quenching. Ecuación de Stern-Volmer. Quenching dinámico. Quenching estático. Simultaneidad de quenching dinámico y estático. Transiciones no radiativas. Conversión interna. Cruce intersistema. Quenching interno. Dispersión de la radiación: Rayleigh, Tyndall, Raman. Estado triplete. Rendimiento cuántico de triplete. Eficiencia cuántica de fosforescencia. Rendimiento cuántico de fosforescencia. Tiempo de vida. Espectros. Instrumentación. Transferencia de energía. Fosforescencia sensibilizada. Fluorescencia retardada activada térmicamente tipo E y tipo P. Excímeros. Exciplejos. Quenching por átomos pesados y por oxígeno. Equilibrio químico en el estado excitado. Espectros y constantes de equilibrio. Ciclo de Förster. Intensidades de fluorescencia y pH. Luminiscencia y estructura molecular. Determinación de eficiencias. Luminiscencia sincrónica. Angostamiento de las bandas espectrales. Espectros. Aplicación a fosforimetría. Principios de quimioluminiscencia.

III. Espectrometría infrarroja.

Principios. Instrumentación. Fuentes. Monocromadores. Detectores. Diseño instrumental. Compensación óptica. Preparación de muestras. Determinación del espesor de celda. Análisis cuali y cuantitativo. Espectrometría de infrarrojo cercano. Instrumentación. Aplicaciones. Espectrometría de infrarrojo lejano. Principios de interferometría de Fourier.

Programa de trabajos prácticos

1. Equilibrio químico. Determinación de las constantes de formación de complejos moleculares: benceno-tetracianoetileno y tolueno-tetracianoetileno. Cálculo de los potenciales de ionización.
2. Equilibrio químico. Determinación de la constante de formación del complejo Fe(III)-SCN^- .
3. Determinación espectrofotométrica de benceno en hexano.
4. Luminiscencia. Emisión de fluorescencia. Espectrofluorómetro Aminco-Bowman SPF 100. Calibración de los monocromadores. Espectros de excitación y de emisión: influencia de la dispersión. Curvas de calibración. Determinación de quinina en agua tónica.

5. Espectrofluorómetro Perkin Elmer LS50 B. Espectros de excitación y de emisión: influencia de la dispersión. Validación del instrumento.
 6. Determinación fluorescimétrica de Fe(II). Determinación fluorescimétrica de hierro en un suplemento vitamínico
 7. Determinación espectrofluorimétrica de peróxido de hidrógeno en agua de lluvia.
 8. Equilibrio químico en el estado excitado. Determinación del pK^* del 2-naftol. Cálculo mediante el método de las curvas de valoración espectrofluorimétricas y del Ciclo de Förster.
- Según lo expuesto en la metodología pedagógica se implementa la utilización del método de resolución de problemas en todos los módulos temáticos.

Objetivos

Los procesos didácticos en esta asignatura tienen como guía el lineamiento de los objetivos generales que se enumeran a continuación. Estos son de carácter cognoscitivo, actitudinal o de habilidades, según el aspecto de la personalidad involucrado en el proceso de aprendizaje:

- Conocer el funcionamiento básico del instrumental óptico.
- Comprender el fundamento teórico que sustenta las espectrometrías de absorción UV, luminiscente e infrarroja.
- Diagnosticar las principales limitaciones y potenciales aplicaciones de cada uno de los métodos anteriores.
- Seleccionar la técnica adecuada para resolver un problema analítico particular.
- Adquirir un razonamiento metódico para la resolución de situaciones problemáticas relacionadas con el análisis de muestras reales de diversa índole (biológicas, farmacéuticas, etc.).
- Alcanzar el pensamiento comprensivo y crítico a través de la lectura de bibliografía actualizada.
- Ejercitar el manejo de distintos instrumentales ópticos.
- Aplicar la técnica adecuada para resolver un problema analítico particular.
- Reconocer el impacto social de los métodos ópticos de análisis en el control del medio ambiente y en el control de calidad de productos.
- Reflexionar sobre el contenido de artículos de actualización investigativa en el marco de metodologías de Seminario.

Contenidos mínimos de la asignatura

Los contenidos que estructuran la asignatura Métodos Ópticos II están seleccionados para brindar al futuro profesional el nivel de especialización adecuado a las demandas actuales respecto del uso de este conjunto particular de métodos analíticos y de su relación interdisciplinaria con otros campos científicos. Dichos contenidos se organizan en los siguientes módulos temáticos:

- I. Espectrometría de absorción ultravioleta y visible.
- II. Espectrometría luminiscente.
- III. Espectrometría infrarroja.

Carga horaria de la actividad curricular

Carga horaria semanal total: 7 horas

Carga horaria semanal destinada a la formación práctica: 4 horas

Descripción de la actividad curricular

El curso es eminentemente teórico-práctico, donde el profesor realiza exposiciones teóricas, se ejecutan tareas experimentales y se resuelven problemas de aplicación.

En líneas generales, las clases prácticas comienzan con una introducción teórica del tema, y luego los alumnos realizan el trabajo experimental y/o trabajan sobre los ejercicios programadas para el día. El Profesor también dirige discusiones de tópicos en conjunto y brinda explicaciones generales cuando sea apropiado y necesario.

Bibliografía recomendada

Parker, C.A., Photoluminescence of Solutions, Elsevier, 1968.

Olsen, E.D., Modern Optical Methods of Analysis, McGraw-Hill, 1975.

Guilbault, G., Practical Fluorescence, Dekker, 1998.

George, W.O., McIntyre, P.S., Infrared Spectroscopy, John Wiley, 1991.

Metodología pedagógica

Dado el carácter teórico-práctico del curso la metodología didáctica llevada a cabo sigue los principios de la educación activo-participativa propia de un curso dirigido a un grupo reducido de alumnos:

- trabajo a partir de las necesidades expresadas por los alumnos con relación a los prerrequisitos conceptuales y herramientas aprendidas anteriormente
- utilización del método de resolución de problemas para la aplicación de los contenidos teóricos al complejo campo de la realidad
- énfasis en la recapitulación frecuente, en el repaso de clases anteriores y en una permanente integración de conceptos
- inclusión de resolución de problemas en todos los módulos temáticos
- comprensión y significatividad de contenidos durante todo el proceso de estructuración técnica y disciplinaria
- discusión previa, a cargo del jefe de Trabajos Prácticos de la asignatura, de los conceptos necesarios para la ejecución de las tareas experimentales que no hayan sido tratados en la exposición teórica y de los protocolos correspondientes.

Evaluación

Se efectúa una evaluación de proceso (no eliminatorio) de modo semi-estructurado en la resolución de situaciones problemáticas, en la ejecución de los trabajos prácticos y por la presentación del informe correspondiente.

La acreditación de la asignatura se realiza mediante la instrumentación de dos evaluaciones escritas parciales de carácter semi-estructurado.