

Fotólisis de Destello Láser: Fundamentos y Aplicaciones

Fecha: del 1 al 5 de Octubre de 2018.

Carga horaria: 40 horas

Docentes:

-Dra. **Virginie Lhiaubet** (Científico Titular del Consejo Superior de Investigaciones Científicas, CSIC, España)

-Dra. **M Luisa Marin** (Profesor Titular de la Universitat Politècnica de València, España)

-Dr. **Andrés H. Thomas** (Investigador Principal de CONICET-Profesor Adjunto de la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP)

-Dra. **María Laura Dántola** (Investigador Adjunto de CONICET, Jefe de Trabajos Prácticos de la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP)

-Dra. **Carolina Lorente** (Investigador Independiente de CONICET)

- Dra. **Mariana Paula Serrano** (Investigador Asistente de CONICET)

Justificación:

El curso “Fotólisis de Destello Láser: Fundamentos y Aplicaciones” está estructurado en ocho unidades teóricas y tres trabajos prácticos. La parte teórica comienza con una introducción a la técnica de fotólisis de destello láser (LFP, por las siglas en inglés de *Laser Flash Photolysis*) seguida de una revisión de conceptos claves, cinéticos y termodinámicos, para entender los resultados obtenidos a partir de esta técnica. Se describirán las propiedades y la reactividad de los estados excitados y, más concretamente, en el estado excitado triplete, sin olvidar otros intermedios como radicales o radicales-iones. Seguidamente se describen con detalle ejemplos reales en los que la técnica de LFP ha sido clave para elucidar los mecanismos de reacción. Esta serie de ejemplos se ha dividido en dos partes intentando ofrecer un abanico lo más completo posible y a su vez empezar con ejemplos sencillos e ir aumentando su complejidad. Por último, se hace una introducción a la técnica de LFP en escala de femtosegundos señalando las principales diferencias debidas a la escala de tiempo y se ilustra con algunos ejemplos recientes. En la parte práctica se enseñará la técnica de LFP, y mediante ella se determinarán especies excitadas tripletes y radicales orgánicos.

Objetivo general:

Este curso tiene como objetivo principal demostrar el potencial de la técnica de fotólisis de destello láser para investigar diferentes mecanismos de reacción, tanto fotofísicos como fotoquímicos.

Objetivos específicos:

Tras finalizar el curso los estudiantes serán capaces de:

- Entender los experimentos basados en la técnica de fotólisis de destello láser.
- Discutir los mecanismos basados en experimentos de fotólisis de destello láser descritos en la literatura.
- Emplear la técnica de fotólisis de destello láser en su propia investigación (Máster, Tesis Doctoral, etc) para investigar mecanismos de reacción.

Contenidos

Parte teórica: estará a cargo de los Drs. Andrés Thomas, Virginie Lhiaubet y M. Luisa Marín.

1. Introducción a la técnica de Fotólisis de Destello Láser (Laser Flash Photolysis, LFP) (2 horas, Dra. Marín)

2. Revisión de conceptos cinéticos y termodinámicos de procesos rápidos (3 horas, Dra. Lhiaubet)

2.1. Aspectos cinéticos

2.2. Aspectos termodinámicos: transferencia electrónica

2.3. Aspectos termodinámicos: transferencia de energía

3. Caracterización de estados excitados: el estado triplete (3 horas, Dra. Lhiaubet y Dr. Thomas)

4. Caracterización de otros intermedios de reacción (3 horas, Dra. Lhiaubet)

4.1. Radical catión

4.2. Radical anión

4.3. Radical neutro

4.4. Intermedios de ciclación

5. Generación y detección indirecta de intermedios de reacción (2 horas, Dra. Marín)

5.1. Radical hidroxilo

5.2. Oxígeno singlete

5.3. Población de estados excitados tripletes superiores mediante irradiación bifotónica

5.4. Otros ejemplos

6. Ejemplos reales de diferentes tipos de procesos investigados en base a experimentos de LFP. Primera parte (5 horas, Dra. Marín, Dra. Lhiaubet y Dr. Thomas)

6.1. Abstracción de hidrógeno

6.2. Transferencia de energía triplete-triplete

6.3. Peroxidación lipídica tipo I *versus* tipo II

6.4. Radicales en sistemas biológicos

7. Ejemplos reales complejos de diferentes tipos de procesos investigados en base a experimentos de LFP. Segunda parte (5 horas, Dra. Marín y Dra. Lhiaubet)

7.1. Múltiples tiempos de vida como indicadores de diferentes entornos: Carprofeno

7.2. Fotoelectrociclación

7.3. Formación de oxetanos versus formación de dímeros

7.4. Análisis multivariante de espectros obtenidos por LFP

7.5. Inhibidores selectivos de tripletes

8. Laser flash fotólisis en escala de femtosegundos (1 hora, Dra. Marín)

8.1. Introducción

8.2. Ejemplos reales

9. Evaluación (4 horas)

Parte práctica: estará a cargo de las Dras. Serrano, Lorente y Dántola

Se realizará en el laboratorio 106S del INIFTA, en el que se encuentra un láser Nd:YAG Minilite II de Continuum (7 ns FWHM, 7 mJ por pulse) acoplado a un detector de especies transitorias LP980 de Edinburgh Instruments y a un osciloscopio digital 300 Mhz Tektronik TDS 3032B.

El análisis de las señales se realizará mediante el software del detector LP980 y software estándar OriginPro 8.5 (OriginLab Corporation).

Práctica 1: Explicación de las medidas de seguridad en un laboratorio de láser.

Demostración de la técnica de Fotólisis de Destello Láser. (4 horas)

Práctica 2: Detección de estados excitados tripletes (4 horas)

Práctica 3: Detección de radicales orgánicos (4 horas)

Metodología:

-El curso se impartirá en forma de clase magistral en la que el profesor explicará los contenidos de cada una de las unidades apoyándose en material tipo *power point* que habrá puesto previamente a disposición de los alumnos. Los alumnos tomarán apuntes para completar las diapositivas enviadas.

-Durante las clases todas las intervenciones de los alumnos para solicitar aclaraciones adicionales y/o comentar los contenidos serán bienvenidas, convirtiendo así la clase en clase magistral participativa.

-Se realizarán trabajos prácticos que permitirá al alumno aplicar e integrar los conocimientos adquiridos durante el curso.

Lugar:

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA). Se utilizará el auditorio, que tiene capacidad y comodidad adecuada, y el laboratorio 106S que aloja los equipos adheridos al SINALA para los trabajos prácticos. Durante el desarrollo de los trabajos prácticos se cuidará el cumplimiento de las normas de seguridad que se detallarán a los alumnos.

Carga horaria total:

40 horas

Distribución de la carga horaria (días y semanas):

40 horas del 1 al 5 de Octubre de 2018, 8 horas por día.

Cronograma:

Día	LUNES 1 de Octubre	MARTES 2 de Octubre	MIÉRCOLES 3 de Octubre	JUEVES 4 de Octubre	VIERNES 5 de Octubre
8-12		Módulos 4, 5 (1 ^{ra} Parte)		Módulo 7 (2 ^{da} Parte), Módulo 8	TP 3: Radicales orgánicos, detección por LFP
13:30-17:30	Módulos 1, 2 y 3	TP 1: LFP técnica	Módulos 5 (2 ^{da} parte) Módulo 6, Módulo 7 (1 ^{ra} Parte)	TP 2: Estados excitados tripletes, detección por LFP	Evaluación

Evaluación:

-Tras acabar cada unidad y como parte de la evaluación, se pedirá a cada uno de los alumnos que formule una pregunta y una respuesta que considere representativa de la unidad. Los profesores corregirán esta actividad y será distribuida entre todos los alumnos.

-Acabado el curso se solicitará a los alumnos una evaluación crítica de un caso concreto (artículo científico) en la que aplicarán los conceptos aprendidos en el curso. El informe se enviará por correo electrónico a los profesores para su evaluación.

-Los profesores estarán en contacto con los alumnos por correo electrónico para resolver todas las dudas que pudieran originarse.

Bibliografía de referencia:

- 1) Turro, N. J., Ramamurthy, V., and Scaiano, J. C. (2008) Principles of Molecular Photochemistry: An Introduction, University Science Publishers, New York, N.Y.
- 2) N. J. Turro, V. Ramamurthy and J. C. Scaiano (2010) Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules; University Science Books: New York, N.Y., 2010.
- 3) Lakowicz, J. R. (1999) Principles of Fluorescence Spectroscopy, 2nd ed., Kluwer Academic Plenum Publishers, New York.
- 4) John D. Coyle (1986) Introduction to Organic Photochemistry, John Wiley and Sons.
- 5) Bibliografía especializada: El curso se basará además en artículos y reviews recientes especializados en cada uno de los temas del curso.