

# Programa del Curso: Espectroscopia Atómica y Molecular I

## Métodos Cuánticos en Espectroscopia

Martina Kieninger y Oscar N. Ventura

23.4.2025 – 30.7.2025

Lugar: Biblioteca (Teoría) y Sala de Computación CCBG, Anexo, 4º Piso (Práctica)

Horario: Miércoles 9:00-10:00 (Teoría) | Viernes 15:00-18:00 (Práctica)

### Nota:

- Si hay problemas con los días u horarios, por favor infórmanos – encontraremos una solución.

### Teoría (15 Unidades)

1. **Introducción a la Espectroscopia Computacional**
  - Relevancia, espectros atómicos/moleculares, mecánica cuántica.
2. **Principios Cuánticos I – Un Repaso**
  - Ecuación de Schrödinger, funciones de onda, Born-Oppenheimer.
3. **Principios Cuánticos II**
  - Oscilador armónico, métodos aproximados, Hartree-Fock y DFT.
4. **Simetría en Moléculas**
  - Operaciones de simetría, grupos puntuales, su rol en espectroscopia.
5. **Teoría de Grupos y Tablas de Caracteres I**
  - Fundamentos, representaciones irreducibles, tablas de caracteres.
6. **Teoría de Grupos y Tablas de Caracteres II**
  - Simetría orbital, vibraciones, reglas de selección.
7. **Espectros Electrónicos – Teoría**
  - Transiciones, Franck-Condon, perturbación temporal.
8. **Espectros Vibracionales – Teoría I**
  - Osciladores armónicos/anarmónicos, IR y Raman.
9. **Espectros Vibracionales – Teoría II**
  - Acoplamiento, anarmonicidad, efectos isotópicos.
10. **Espectros Rotacionales – Teoría**
  - Niveles rotacionales, constantes, microondas.
11. **Espectros Rovibrónicos**
  - Rotación-vibración, estructura fina, transiciones combinadas.
12. **Espectros Atómicos – Teoría**
  - Hidrógeno, multielectrónicos, reglas de selección.
13. **Métodos Numéricos en Espectroscopia**
  - HF, DFT, Post-HF, conjuntos de bases, límites.
14. **Aspectos Prácticos del Cálculo de Espectros**
  - Entorno, comparación teoría-experimento, errores.
15. **Futuro de la Espectroscopia Computacional**
  - Aprendizaje automático, desafíos, resumen clave.
  -

## Práctica (15 Unidades) – ORCA y Gaussian

### 1. Primeros Pasos

- Optimiza OF<sub>2</sub> (*Ventura et al., J. Phys. Chem. A, 2002*).

### 2. Energías y Orbitales

- Analiza CH<sub>3</sub>NO<sub>2</sub> (*Kieninger et al., J. Mol. Struct., 2001*).

### 3. Simetría Molecular

- Estudia SF<sub>6</sub> (*Boudon et al., J. Mol. Spectrosc., 2006*).

### 4. Espectros Vibracionales I – IR

- Simula HCOOH (*Marushkevich et al., J. Phys. Chem. A, 2007*).

### 5. Espectros Vibracionales II – Detalles Avanzados

- Modela CH<sub>3</sub>OONO<sub>2</sub> (*Faccio, Kieninger, Ventura et al., J. Phys. Chem. A, 2009*).

### 6. Espectros Electrónicos I – UV-Vis

- Predice perileno (*Grage et al., Phys. Chem. Chem. Phys., 2003*).

### 7. Espectros Electrónicos II – Efectos Ambientales

- Simula retinal (*Nielsen et al., J. Phys. Chem. A, 2006*).

### 8. Espectros Rotacionales

- Calcula HF (*Ventura et al., J. Chem. Phys., 2005*).

### 9. Espectros Rovibrónicos

- Modela NO<sub>2</sub> (*Stanton et al., J. Chem. Phys., 2004*).

### 10. Espectros Atómicos y Complejos

- Analiza CuCl<sub>2</sub> (*Bridgeman et al., J. Phys. Chem. A, 2001*).

### 11. Caso Práctico – Aromáticos

- Simula coroneno (*Weisman et al., J. Phys. Chem. A, 2005*).

### 12. Caso Práctico – Organometálicos

- Explora Cp<sub>2</sub>Ti (*Pavlik et al., Organometallics, 2005*).

### 13. Caso Práctico – Biomoléculas

- Modela bacterioclorofila (*Rätsep et al., J. Phys. Chem. B, 2008*).

### 14. Errores y Optimización

- Evalúa C<sub>70</sub> (*Slanina et al., J. Comput. Chem., 2004*).

### 15. Proyecto Final

- Diseña BODIPY (*Ziessel et al., Chem. Rev., 2007*).
- 

## ¿Qué aprenderás?

- Simular espectros IR, UV-Vis y rotacionales.
- Trabajar con moléculas estrella: nitrometano, perileno, BODIPY.
- Dominar ORCA y Gaussian con ejemplos actuales.
- Conectar teoría cuántica con ciencia del siglo XXI.

## Lugar y Acceso:

- **Teoría:** Biblioteca CCBG.
- **Práctica:** Sala de Computación CCBG, Anexo, 4º Piso.
- Software (ORCA, Gaussian, visualización) disponible en sala.

## Requisitos:

- Curiosidad por la química computacional. ¡Acceso garantizado a equipos y software!