

Programa del Curso: Espectroscopia Computacional – Atómica y Molecular Métodos Cuánticos en Espectroscopia

Martina Kieninger y Oscar N. Ventura

20.4.2025 – 30.7.2025

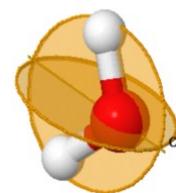
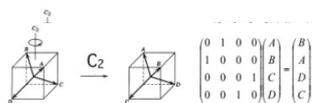
Lugar:

Teoría:

Biblioteca CCBG, Anexo, 4º Piso
miercoles (9:00 -10:00 Teoría)

Practica:

Sala de Computación CCBG, Anexo, 4º Piso
viernes (15:00 – 18:00 Practico)



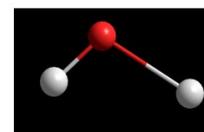
Representation Γ_N

Characters of reducible representation

E	C_2 (z)	σ_v (xz)	σ_d (yz)
3	1	3	1

Direct sum of irreducible representation

A_1	A_2	B_1	B_2
2	0	1	0



Allowed / forbidden vibrational transitions

Operator	A_1	A_2	B_1	B_2	Total
Linear (IR)	2	0	1	0	3 / 0
Quadratic (Raman)	2	0	1	0	3 / 0
IR + Raman	2	---	1	0	3 / 0

¿Qué aprenderás?

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

Lugar y Acceso:

- **Práctico en la Sala de Computación CCBG, Anexo, 4º Piso.**
- Equipos y software (ORCA, Gaussian, herramientas de visualización) disponibles en sala.

Requisitos:

- Curiosidad por la química computacional.

¡El acceso al software está garantizado en el curso!

Práctica (15 Unidades) – ORCA y Gaussian
con Métodos Adicionales

Unidad 1: Primeros Pasos

- Optimiza el difluoruro de oxígeno (OF_2), un compuesto intrigante.
- Descubre las bases de la simulación moderna.
- *Ref.: Ventura et al., J. Phys. Chem. A (2002)*

Unidad 2: Energías y Orbitales

- Analiza orbitales del nitrometano (CH_3NO_2), explosivo y versátil.
- Explora propiedades electrónicas clave.
- Ref.: Kieninger et al., *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* (2001)

Unidad 3: Simetría Molecular

- Estudia la simetría del hexafluoruro de azufre (SF_6), un desafío geométrico.
- Aplica a sistemas hipervalentes modernos.
- Ref.: Boudon et al., *J. Mol. Spectrosc.* (2006)

Unidad 4: Espectros Vibracionales I – IR

- Simula el espectro IR del ácido fórmico (HCOOH), modelo de dímeros.
- Asigna modos como en estudios recientes.
- Ref.: Marushkevich et al., *J. Phys. Chem. A* (2007)

Unidad 5: Espectros Vibracionales II – Detalles Avanzados

- Modela anarmonicidad en el metil peroxinitrato (CH_3OONO_2), un contaminante atmosférico.
- Compara con datos experimentales actuales.
- Ref.: Faccio, Kieninger, Ventura et al., *J. Phys. Chem. A* (2009)

Unidad 6: Espectros Electrónicos I – UV-Vis

- Predice transiciones del perileno, un cromóforo brillante.
- Analiza espectros de última generación.
- Ref.: Grage et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2003)

Unidad 7: Espectros Electrónicos II – Efectos Ambientales

- Simula el retinal en solvente, esencial en biofotónica.
- Explora cambios como en la visión humana.
- Ref.: Nielsen et al., *J. Phys. Chem. A* (2006)

Unidad 8: Espectros Rotacionales

- Calcula constantes del fluoruro de hidrógeno (HF), un clásico moderno.
- Aplica a moléculas estudiadas en astroquímica.
- Ref.: Ventura et al., *J. Chem. Phys.* (2005)

Unidad 9: Espectros Rovibrónicos

- Modela el dióxido de nitrógeno (NO_2) con detalle fino.
- Conecta rotación y vibración como en química ambiental.
- Ref.: Stanton et al., *J. Chem. Phys.* (2004)

Unidad 10: Espectros Atómicos y Complejos

- Analiza el cloruro de cobre (CuCl_2), un complejo de transición.
- Estudia efectos de ligandos exóticos.
- Ref.: Bridgeman et al., *J. Phys. Chem. A* (2001)

Unidad 11: Caso Práctico – Aromáticos

- Simula espectros del coroneno, estrella de la nanoquímica.
- Compara con experimentos actuales.
- Ref.: Weisman et al., *J. Phys. Chem. A* (2005)

Unidad 12: Caso Práctico – Organometálicos

- Explora vibraciones del titanoceno (Cp_2Ti), un catalizador moderno.
- Analiza interacciones metal-ligando.
- Ref.: Pavlik et al., *Organometallics* (2005)

Unidad 13: Caso Práctico – Biomoléculas

- Modela el espectro UV-Vis de la bacterioclorofila, motor fotosintético.
- Optimiza sistemas biológicos complejos.
- Ref.: Rätsep et al., *J. Phys. Chem. B* (2008)

Unidad 14: Errores y Optimización

- Evalúa simulaciones del [70]fullereno (C_{70}), un nanomaterial avanzado.
- Mejora precisión como en estudios recientes.
- Ref.: Slanina et al., *J. Comput. Chem.* (2004)

Unidad 15: Proyecto Final

- Diseña espectros del BODIPY, un fluoróforo revolucionario.
- Presenta tu análisis original.
- Ref.: Ziessel et al., *Chem. Rev.* (2007)

Teoría (15 Unidades)

Unidad 1: Introducción a la Espectroscopia Computacional

- Objetivos y relevancia de la espectroscopia computacional
- Resumen de espectros atómicos y moleculares
- Conexión entre mecánica cuántica y espectroscopia

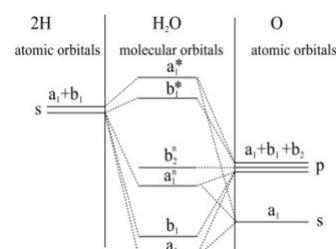
Unidad 2: Principios Cuánticos I – un repaso

- Ecuación de Schrödinger (dependiente e independiente del tiempo)
- Funciones de onda, observables y operadores
- Introducción a la aproximación de Born-Oppenheimer

Unidad 3: Principios Cuánticos II

- Oscilador armónico y su relevancia
- Sistemas multielectrónicos y métodos aproximados
- Fundamentos de métodos quimicuánticos (Hartree-Fock, DFT)

Unidad 4: Simetría en Moléculas



- Elementos y operaciones de simetría
- Grupos puntuales y su clasificación
- Importancia de la simetría en espectroscopia

Unidad 5: Teoría de Grupos y Tablas de Caracteres I

- Fundamentos de la teoría de grupos
- Representaciones e representaciones irreducibles
- Estructura de las tablas de caracteres

Unidad 6: Teoría de Grupos y Tablas de Caracteres II

- Simetría de orbitales moleculares
- Aplicación a vibraciones y transiciones electrónicas
- Reglas de selección y su derivación

Unidad 7: Espectros Electrónicos – Teoría

- Transiciones electrónicas y niveles de energía
- Principio de Franck-Condon y probabilidades de transición
- Teoría de perturbación dependiente del tiempo

Unidad 8: Espectros Vibracionales – Teoría I

- Osciladores armónicos y anarmónicos
- Vibraciones normales y coordenadas
- Espectroscopia IR y Raman: reglas de selección

Unidad 9: Espectros Vibracionales – Teoría II

- Efectos de acoplamiento y anarmonicidad
- Efectos isotópicos en espectroscopia
- Fundamentos teóricos del cálculo de intensidades

Unidad 10: Espectros Rotacionales – Teoría

- Niveles de energía rotacional (rotor rígido y no rígido)
- Constantes rotacionales y su importancia
- Espectroscopia de microondas

Unidad 11: Espectros Rovibrónicos

- Acoplamiento de rotación y vibración
- Estructura fina en espectros
- Descripción teórica de transiciones combinadas

Unidad 12: Espectros Atómicos – Teoría

- Átomo de hidrógeno: niveles de energía y transiciones
- Átomos multielectrónicos: estructura fina e hiperestructura fina
- Reglas de selección para espectros atómicos

Unidad 13: Métodos Numéricos en Espectroscopia

- Resumen de métodos de cálculo (HF, DFT, Post-HF)
- Rol de los conjuntos de bases
- Límites y supuestos de los modelos

Unidad 14: Aspectos Prácticos del Cálculo de Espectros

- Influencia del entorno (ej. solventes)
- Comparación entre teoría y experimento

- Fuentes de error y su minimización

Unidad 15: Futuro de la Espectroscopia Computacional

- Desarrollos modernos (ej. aprendizaje automático)
- Desafíos en la espectroscopia
- Resumen de conceptos clave
