

Universidad de La Habana
Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales

Curso de Postgrado Técnicas Estructurales y Espectroscópicas Aplicadas al Estudio de Materiales.	Total de Horas: 192 Créditos: 4	Tipo de curso: Fundamental <input type="checkbox"/> Específico <input checked="" type="checkbox"/> Carácter: Obligatoria <input type="checkbox"/> Opcional <input checked="" type="checkbox"/>
<p>Profesor Dr. Edilso Fco. Reguera Ruiz</p> <p>OBJETIVO GENERAL: El objetivo del curso es que el estudiante se apropie de los conocimientos necesarios para aplicar las diferentes técnicas espectroscópicas disponibles al estudio de materiales. Esto incluye dominar los fundamentos físicos de cada una de ellas, que conozca acerca de la información que proporciona el espectro, el alcance y limitaciones de esas técnicas y que aprenda a aplicarlas para resolver problemas concretos de su Proyecto de Tesis y posteriormente en su práctica profesional.</p> <p>Contenidos (temas)</p> <p>Tema 1: El espectro electromagnético y su interacción con la sustancia. (4 h) 1.1. División del espectro electromagnético de acuerdo al origen y energía de la radiación. 1.2. Concepto de interacción resonante. Concepto de Espectroscopia 1.3. Interacción de las diferentes regiones del espectro electromagnético con la sustancia. 1.4. Diferentes tipos de Espectroscopias de interés para el estudio de materiales.</p> <p>Tema 2: Espectroscopias basadas en transiciones en el núcleo atómico. (40 h) 2.1. Estados nucleares. Niveles de Energía y Transiciones entre estos. 2.2. Absorción Resonante de Rayos gamma. Efecto Mössbauer. Fundamentos. 2.3. Parámetros básicos del espectro Mössbauer. Información que proporcionan. 2.4. Análisis cualitativo y cuantitativo por espectroscopia Mössbauer. Procesamiento de datos. 2.5. Aplicaciones de la espectroscopia Mössbauer al estudio de materiales. 2.6. Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Fundamentos. Isótopos en que se observa. 2.7. Parámetros del espectro de RMN. Información que proporciona. 2.8. RMN de sólidos. Particularidades de la Técnica. Aplicaciones en Materiales. 2.9. Resonancia Cuadrupolar Nuclear. Fundamentos. Aplicaciones.</p> <p>Tema 3: Espectroscopias de Rayos X (20 h) 3.1 Espectro de absorción de rayos X por los átomos. Información que contiene. 3.2. Diferentes regiones del espectro de absorción de rayos X. Información que contienen 3.3. EXAFS y XANES. Condiciones de registro. Evaluación de los espectros. 3.4. Aplicaciones de EXAFS y XANES al estudio de materiales. 3.5. XPS. Fundamentos Físicos. Condiciones para el registro de los espectros. 3.6. Parámetros del espectro XPS. Información Física que contienen. Evaluación de los espectros. 3.7. Aplicaciones de XPS al estudio de materiales. 3.8. Otras técnicas espectroscópicas basadas en rayos X.</p> <p>Tema 4: Espectroscopias basadas en la absorción de rayos ultravioletas duros. (6 h) 4.1. Espectroscopia con rayos ultravioletas duros. Fundamentos Físicos. 4.2. Condiciones registro de los espectros. Procesamiento de los datos. 4.3. Parámetros del espectro. Información que proporcionan. 4.4 Aplicaciones al estudio de materiales.</p> <p>Tema 5: Espectroscopias basadas en la absorción de radiación en la región UV-Vis. (20 h) 5.1. Espectroscopia UV-Vis. Fundamentos Físicos. 5.2. Diferentes condiciones registro de los espectros. Procesamiento de los datos. 5.3. Parámetros del espectro. Información que proporcionan. 5.4. Aplicaciones al estudio de materiales. Transiciones electrónicas en metales de transición. Materiales orgánicos. Resonancia de plasmon. Transiciones en semiconductores. 5.5. Espectroscopias Foto-acústica. Fundamentos Físicos. 5.6. Diferentes condiciones registro de los espectros. Procesamiento de los datos. 5.7. Parámetros del espectro. Información que proporcionan. 5.8. Aplicaciones al estudio de materiales. Transiciones electrónicas en complejos de metales de transición. Materiales orgánicos. Transiciones en semiconductores</p>		

Tema 6: Espectroscopias vibracionales.

(20 h) 5.1. Espectroscopia IR. Fundamentos Físicos.

5.2. Modos normales de vibración. Grupos Puntuales. Reglas de selección.

5.3. Diferentes condiciones registro de los espectros. Procesamiento de los datos.

5.4.3. Parámetros del espectro IR. Información que proporcionan.

5.4. Aplicaciones al estudio de materiales.

5.5. Espectroscopia Raman. Fundamentos Físicos. Reglas de Selección Raman.

5.6. Espectroscopia Raman reforzada (SERS)

5.7. Parámetros del espectro Raman. Información que proporcionan.

5.8. Aplicaciones al estudio de materiales.

Objetivos específicos (habilidades a adquirir por parte de los estudiantes)

- Dominar los fundamentos físicos de cada espectroscopia,
- Identificar los principios y aplicaciones comunes a todas las espectroscopias y las que resultan específicas de cada una de ellas;
- Saber cómo enfrentar la solución de problemas estructurales complejos en Ciencia de los Materiales a partir de datos espectroscópicos de varias espectroscopias;
- Adiestrar al estudiante en el empleo combinado de técnicas espectroscópicas y de difracción de rayos X para la determinación y refinamiento de estructuras cristalinas en nuevos materiales.

Bibliografía fundamental

- Espectroscopia. Requena & Zunniga, Prentice Hall, 2004.
- Gary J. Long and Fernande Grandjean, *Mössbauer spectroscopy applied to magnetism and Materials Science* (Vols. 1 & 2), Plenum 1996.
- X-ray Photoelectron Spectroscopy, Johanna M. Wagner, Thermo Scientific, Inc. 2010
- Introduction to XAFS: A Practical Guide to X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy, Grant Bunker, VCH, 2010
- Introduction to XAFS: A Practical Guide to X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy, Grant Bunker, VCH, 2010
- UV-VIS Spectroscopy and Its Applications (Springer Lab Manuals), Heinz-Helmut Perkampus, H.C. Grinter, and T.L. Threlfall, 1994
- Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Theory and Applications in Inorganic Chemistry, Kazuo Nakamoto, Academic Press, 2006
- Introductory Raman Spectroscopy, Second Edition, John R. Ferraro, Elsevier, 2002

Bibliografía complementaria

- Physical Methods for Chemists. R. S. Drago, Academic Press, 2004
- Vacuum Ultraviolet Spectroscopy I, Volume 31 (Experimental Methods in the Physical Sciences), Thomas Lucatorto (Editor), Academic Press, 2008
- Artículos científicos recientes proporcionados por el profesor para su análisis y discusión

Sistema de evaluación (el profesor debe conformar lo que mejor conviene, según particularidades de la asignatura)

- Trabajo de control en clase (6 actividades)
- Seminarios preparados e impartidos por el estudiante (5 actividades)
- Examen final (2 partes: escrito y exposición oral de un tema relativo a las aplicaciones de las espectroscopias a su proyecto de Tesis)

Formas de enseñanza

- Conferencias
- Clases Prácticas
- Seminarios

Elaborado por: Dr. Edilso Reguera
IMRE-UH
e-mail: edilso.reguera@gmail.com

Fecha: Mes 12/2017