



Maestría en Tecnología Avanzada / CICATA-IPN Unidad Legaria

Objetivo:

Proporcionar a los estudiantes los fundamentos de las técnicas estructurales y espectroscópicas de más amplia aplicación en la Caracterización de Materiales.

Temas:

1: Introducción a la Cristalografía.

Estructura de sólidos. Relación entre estructuras cristalina y electrónica. Número de coordinación y orbitales atómicos. Celda unitaria. Redes de Bravais. Operaciones de Simetría. Grupos puntuales y grupos espaciales. Cristales ideales y cristales reales. Monocristales y policristales. Bases de Datos.

2: Difracción de rayos X.

Propiedades de rayos X y de cristales. Difracción de rayos X por cristales. Ley de Bragg. Métodos de Difracción: Laue y patrones de polvo. Intensidad del haz difractado. Análisis de fases. Resolución y refinamiento de estructuras cristalinas a partir de datos de difracción en policristales y monocristales.

3: El Espectro Electromagnético

Naturaleza de la radiación para las diferentes regiones del espectro. Conceptos de interacción resonante y de espectroscopia. Espectroscopias que usan radiación electromagnética.

4: Espectroscopias Nucleares.

El núcleo atómico. Estados nucleares y niveles de energía. Fundamentos de espectroscopia Mössbauer. Interacciones hiperfinas. Aplicaciones. Fundamentos de RMN. Aplicaciones de RMN a sólidos. Resonancia cuadrupolar nuclear y sus aplicaciones.

5: Espectroscopias de rayos X

Absorción de rayos X por átomos. Diferentes regiones del espectro y su naturaleza. EXAFS y XANES. Requerimientos experimentales y evaluación de los espectros. Aplicaciones de EXAFS y XANES. Fundamentos de XPS. Aspectos experimentales. Aplicaciones de XPS. Otras espectroscopias de rayos X.

6: Espectroscopia de Rayos Ultravioletas Duros.

Fundamentos de la espectroscopia de rayos ultravioletas duros. Requerimientos experimentales. Parámetros del espectro. Aplicaciones a Ciencia de Materiales.

7: Espectroscopia UV-Vis.

Fundamentos de la espectroscopia UV-Vis. Diferentes configuraciones experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia UV-Vis. Fundamentos y aplicaciones de la espectroscopia foto-acústica.

8: Espectroscopias Vibracionales

Fundamentos de espectroscopias IR y Raman. Modos normales de vibración. Grupos puntuales. Reglas de selección. Cálculo de espectros vibracionales. Carácter complementario de los espectros IR y Raman. Aplicaciones de las Espectroscopias IR y Raman.

Evaluación:

Dos evaluaciones escritas, después del Tópico 3 y al final del Curso. Una presentación oral al final del Curso sobre aplicaciones de las Técnicas de Estructurales y Espectroscópicas a su Proyecto de Tesis.

Bibliografía:

1. Gary J. Long and Fernande Grandjean, *Mössbauer spectroscopy applied to magnetism and Materials Science* (Vols. 1 & 2), Plenum 1996.
2. *Physical Methods for Chemists*. R. S. Drago, Academic Press, 2004
3. *Introduction to XAFS: A Practical Guide to X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy*, Grant Bunker, VCH, 2010
4. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Theory and Applications in Inorganic Chemistry*, K. Nakamoto, Academic Press, 2006