

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Asignatura	CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL ESTÁTICA Y DINÁMICA DE MATERIALES: DIFRACTOMETRÍA Y ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL		
Materia	Experimentación en difracción de rayos-X, espectroscopias Infrarroja y Raman		
Módulo	Módulo de especialización: Física de Materiales		
Titulación	MASTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA		
Plan	617	Código	54404
Periodo de impartición	Primer Cuatrimestre	Tipo/Carácter	Optativa (OP)
Nivel/Ciclo	Posgrado (Master Universitario)	Curso	Primero
Créditos ECTS	3 ECTS		
Lengua en que se imparte	Español		
Profesor/es responsable/s	A. Carmelo Prieto Colorado, Jesús Medina García, Javier Pinto Sanz		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	angelcarmelo.prieto@uva.es ; 983423193 medina@fmc.uva.es ; 983423190 jpinto@fmc.uva.es ; 983186314		
Departamento	032 - Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía		

1. Situación / Sentido de la Asignatura**1.1 Contextualización**

Esta asignatura forma parte de la materia optativa del módulo de especialización en Física de Materiales. Esta dedicada al aprendizaje y manejo de las técnicas instrumentales usadas experimentalmente para la caracterización estructural estática y dinámica. Se aborda el análisis y estudio de propiedades de materiales de distinta naturaleza, fundamentalmente aquellos que presentan un alto grado de interés tecnológico.

1.2 Relación con otras materias

Constituye un complemento de las demás materias desarrolladas en el módulo de especialización de Física de Materiales del Master en Física. Se complementa con la asignatura de "Técnicas experimentales de caracterización de semiconductores y aislantes". Por otra parte, proporciona parte de las competencias necesarias para la realización del Trabajo Fin de Máster en la Unidad de Investigación Consolidada de Castilla y León, GdS-optronlab del Departamento de Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía.

1.3 Prerrequisitos

Idénticos a los requeridos para al Master Universitario en Física.



2. Competencias

2.1 Generales

G1 - Capacidad de aplicación de conocimientos adquiridos: Capacidad para aplicar los conocimientos adquiridos y resolver problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos amplios y multidisciplinares relacionados con la Física.

G2 - Capacidad crítica, de análisis y síntesis: Capacidad de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad, de formular juicios a partir de una información incompleta o limitada.

G3 - Capacidad de Comunicación: Capacidad para comunicar conclusiones y conocimientos a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

G4 - Capacidad de aprendizaje autónomo: Capacidad para continuar la formación de un modo autónomo, seleccionando de manera crítica las fuentes de información más pertinentes.

G5 - Capacidad de trabajo en equipo: Capacidad para el desarrollo de una actividad dentro de un equipo, bajo supervisión o de forma autónoma, pero al servicio de un proyecto común.

2.2 Específicas

C2 - Capacidad de diseño e integración de sistemas de instrumentación en el ámbito científico y tecnológico. Capacidad para implementar y modificar sistemas de medida formados por múltiples instrumentos, tanto desde el punto de vista de hardware como de software, para adecuarlos a nuevas situaciones. Asimismo deberá ser capaz de combinar instrumentos individuales para formar sistemas más complicados o específicos para una aplicación concreta.

C3 - Capacidad para establecer órdenes de magnitud y para elegir el sistema de medida más adecuado en cada caso. Capacidad para poder estimar los valores previstos de las magnitudes a estudiar y/o medir, de las que intervienen internamente en el proceso de medida y de las perturbaciones que el instrumento causa en el sistema con el fin de elegir la configuración más adecuada del equipo de medida. Al terminar los estudios, el alumno será capaz de descartar estrategias ineficaces y de proponer procedimientos alternativos en los casos en los que la magnitud a medir quede fuera de los intervalos de confianza de los equipos.

C7 - Capacidad de adaptación a nuevas situaciones. Capacidad para conocer el "estado del arte" de los sistemas de instrumentación y las vías de actualización que le capaciten para mantenerse informado en el futuro.

3. Objetivos

Caracterización estructural estática y dinámica de materiales mediante difracción y espectroscopía vibracional que pretende dotar al alumno del Master en Física de los conocimientos necesarios para abordar con éxito su presencia en el eje profesional relacionado con el diseño, análisis y caracterización de nuevos materiales. La correlación entre la estructura estática, la estructura dinámica y las propiedades estructurales de los materiales -objetivo fundamental de la Ciencia de Materiales-, es parte importante del eje conductor del programa propuesto en esta asignatura. Se pretende situar a los alumnos en un espacio propio, entre la química, la física y la ingeniería.

Los objetivos concretos son comprender y dominar los conceptos básicos relacionados con la estructura de la materia (estructura estática y estructura dinámica) y de modo práctico manejar diferentes métodos experimentales de determinación estructural. En particular se trata de dotar a los alumnos de las herramientas necesarias para la correcta utilización de métodos instrumentales derivados de la difracción y de la espectroscopía vibracional.



4. Contenidos y/o bloques temáticos

Bloque 1: "Nombre del Bloque"

- Bases teóricas de la difracción de rayos-X, espectroscopía Raman e infrarroja.
- Modos de operación en las técnicas instrumentales de difracción y espectroscopía vibracional.
- Instrumentación: difractómetros de polvo de campo y automáticos
- Instrumentación: espectrómetros de infrarrojos por transformada de Fourier con resonancia total atenuada (FTIT-ATR)
- Instrumentación: espectrómetros Raman
- Estudio estructural de materiales avanzados: cristales, semiconductores, polímeros y muestras biológicas.
- Estudio de materiales relacionados con el medio ambiente, patrimonio histórico y arqueológico y de ámbito forense.

Carga de trabajo en créditos ECTS:

a. Contextualización y justificación

Este bloque temático se inicia a partir del estudio de la interacción de la radiación con la materia que permite catalogar las técnicas instrumentales de determinación estructural, en técnicas de difracción o espectroscópicas. Es decir, técnicas que atienden a la estructura estática promedio y técnicas de caracterización de la estructura dinámica vibracional. Esta separación viene condicionada de una parte por la energía de la radiación incidente, su longitud de onda y por otro por el tipo de materiales involucradas, en la interacción.

El bloque recoge las bases teóricas de la Difracción de rayos-X (DRX), la espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier con reflectancia total atenuada (FTIR-ATR) y espectroscopia Raman, en modo macroscópico, para análisis in-situ y trabajos de campo junto al modo microscópico de alta resolución espectral y espacial, que posibilita el análisis estructural a escalas macro, micro y nanométricas, con posibilidades de cartografía superficial.

Dado el carácter eminentemente práctico de la signatura, el bloque se desarrolla fundamentalmente mediante trabajos de laboratorio y/o supuestos prácticos, donde el alumno observa, afronta e interviene en una serie de experiencias que previamente se han descrito, familiarizándose con el fundamento y manejo de la técnica instrumental aplicada sobre casos reales.

b. Objetivos de aprendizaje

- Comprender y dominar los conceptos de la estructura de la materia (estructura estática y estructura dinámica).
- Comprender los diferentes métodos de determinación estructural.
- Dominar los métodos derivados de la difracción y de la espectroscopia vibracional.
- Manejar tres técnicas instrumentales de determinación estructural.
- Aplicar estas técnicas de determinación estructural a casos concretos.

c. Contenidos

- Bases teóricas de la difracción de rayos-X, espectroscopía infrarroja y Raman.
- Ejemplos prácticos de utilización de las técnicas instrumentales de difracción y espectroscopia vibracional.
- Difracción (DRX): supuestos prácticos de determinación estructural
- Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier con reflectancia total atenuada (FTIR-ATR): supuestos prácticos de determinación y análisis vibracional
- Espectroscopía Raman en modo macroscópico (RS): supuestos prácticos de análisis vibracional
- Espectroscopía Raman en modo microscópico (m-RS): supuestos prácticos de análisis vibracional en materiales avanzados a escala micro y nanoscópica con cartografía superficial.

d. Métodos docentes

Actividades presenciales

Clases de teoría y practicas de aula

Supuestos prácticos de laboratorio.

Actividades semipresenciales



Tutorías presenciales: grupos de trabajo e individuales.

Trabajos en equipo para determinación estructural y análisis vibracional de materiales de interés tecnológico y del patrimonio histórico, arqueológico y cultural.

Actividades autónomas

Estudio personal.

Búsqueda de documentación

Lecturas y comentarios de texto, materiales,...

Actividades prácticas y propuestas didácticas en grupo.

Realización de presentaciones públicas orales de los supuestos prácticos

e. Plan de trabajo

- Exposición y desarrollo de los fundamentos teóricos
- Exposición de casos prácticos relevantes de determinación estructural y análisis vibracional
- Experiencias de difracción de rayos-X, DRX.
- Experiencias de espectroscopía infrarroja, FTIR-ATR
- Experiencias Raman en modo macroscópico
- Experiencias Raman en modo microscópico
- Determinación de parámetros difractométricos y espectroscópicos y tratamiento de señal.
- Trabajo practico en equipo: Caso de estudio sobre un material avanzado

f. Evaluación

Combinación ponderada de:

- Evaluación continua.
- Valoración del trabajo de laboratorio.
- Informes de los supuestos prácticos.
- Presentación publica de resultados.
- Prueba práctica final.

g. Bibliografía básica

- Putnis, A., "Introduction to mineral sciences", Cambridge University Press, 1992.
- Rull, F. "Espectroscopia IR y Raman de Cristales y Minerales", Universidad de Valladolid, 1993.
- Clegg, W., "Crystal Structure Determination", Oxford University Press, 1998.

h. Bibliografía complementaria

Técnicas de Difracción

- Bermúdez, J. "Métodos de difracción de Rayos X: principios y aplicaciones", Ed. Pirámide, Madrid 1981.
- Hammond, C., "The basics of crystallography and diffraction", Oxford University Press, 2000.
- Kittel, C., "Introducción a la Física del estado sólido". Reverté, Barcelona, 1984.
- Rodríguez Gallego, M. "La difracción de los Rayos X", Alhambra, Madrid 1982.
- Saja, J.A. de, "Difracción por muestras policristalinas. Método de Debye Scherrer". I.C.E., Valladolid, 1978.
- Warren, B.E., "X-ray diffraction", Dover Public. Inc. New-York, 1990.

Técnicas espectroscópicas

- Aroca, R., "Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopy", Wiley online library, 2006.
- Bristoti, A., Nicola, J.H., "Aplicações da teoria de grupos na espectroscopia de Raman e do infravermelho", Secretaria-Geral da Organização dos Estados Americanos. Washington, 1980.
- Chang, R., "Principios básicos de espectroscopía", AC, Madrid, 1977.
- Farmer V.C. "The infrared spectra of minerals", Mineralogical Society, London 1974.
- Ferraro, J.R., Nakamoto, K., "Introductory Raman Spectroscopy", Academia Press, 1999.
- Jiménez, J., de Wolf, I., Landesman, J.P., "MicroRaman spectroscopy: Fundamentals and applications" in Microprobe characterization of semiconductors. Serie Optoelectronic properties of semiconductors and superlattices, Vol. 17-2, Taylor and Francis, New York, 2002.
- Jiménez, J., Tomm, J.M., "Spectroscopic Analysis of Optoelectronic Semiconductors", Springer Series in Optical Sciences. Vol. 202, Springer, 2016.
- Long, D.A., "Raman Spectroscopy". McGraw Hill, New-York, 1977.



- Nakamoto, K., "Infrared and Raman Spectra of inorganic and coordination compounds", Part A, John Wiley & Sons, 1997.
- Poulet, H., Mathieu, J.P., "Spectres de vibration et symetrie des cristaux". Gordon and Breach, New York, 1970.
- Rull F. "Espectroscopia IR y Raman de Cristales y Minerales", Universidad de Valladolid, 1993.
- Rull F. "The Raman Effect and the vibrational dynamics of molecules and crystalline solids" in EMU Notes in Mineralogy - volume 12. "Applications of Raman spectroscopy to Earth sciences and cultural heritage (J. Dubessy, MC. Caumon and F. Rull, editors), ISBN: 978-0-903056-31-1, 2012.
- Sócrates, G., "Infrared and Raman characteristic group frequencies", John Wiley & Sons, 2001.
- Turrel G., Corset, J. "Raman microscopy: Development and applications", Academic Press, London, 1996.

i. Recursos necesarios

- Aula equipada con cañón de proyección y conexión a internet.
- Microscopio estereoscópico y petrográfico.
- Equipo automático de difracción de rayos-X.
- Equipo de espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier con reflectancia total atenuada.
- Equipo portable de espectroscopia Raman
- Espectroscopia Raman de alta resolución
- Paquetes informáticos para la determinación de parámetros difractométricos, espectroscópicos y de tratamiento de señal.

j. Temporalización

BLOQUE TEMÁTICO	CARGA HORAS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
<ul style="list-style-type: none"> • Bases teóricas de la difracción de rayos-X, espectroscopia Raman e infrarroja • Modos de operación en las técnicas instrumentales de difracción y espectroscopia vibracional. 	6	25/09/2019 (19:00-20:00) 26/09/2019 (16:00-18:00) 01/10/2019 (18:00-20:00) 07/10/2019 (16:00-17:00)
<ul style="list-style-type: none"> • Equipos instrumentales • Materiales 	2	09/10/2019 (18:00-20:00)
<ul style="list-style-type: none"> • Experiencias de espectroscopia infrarroja, FTIR-ATR • Experiencias de espectroscopia Raman en modo microscópico • Experiencias de Difracción de rayos X 	24	15/10/2019 (16:00-20:00) 16/10/2019 (16:00-20:00) 21/10/2019 (16:00-20:00) 23/10/2019 (16:00-20:00) 28/10/2019 (16:00-20:00) 29/10/2019 (16:00-20:00)
<ul style="list-style-type: none"> • Análisis, estudio y tratamiento de datos 	4	30/10/2019 (16:00-20:00)

5. Métodos docentes y principios metodológicos

Actividades presenciales

- Clases de teoría y practicas de aula
- Supuestos prácticos de laboratorio.

Actividades semipresenciales

- Tutorías presenciales: grupos de trabajo e individuales.
- Trabajos en equipo para determinación estructural y análisis vibracional de materiales de interés tecnológico y del patrimonio histórico, arqueológico y cultural.

Actividades autónomas

- Estudio personal.
- Búsqueda de documentación
- Lecturas y comentarios de texto, materiales,...



Actividades prácticas y propuestas didácticas en grupo.
Realización de presentaciones públicas orales de los supuestos prácticos.

6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases de teoría en aula	6	Estudio y trabajo autónomo y resolución de supuestos prácticos de modo individual	20
Trabajo en laboratorio: Difracción de rayos-X	8	Estudio y trabajo autónomo de modo grupal	20
Trabajo en laboratorio: Espectroscopía Infrarroja	4	Redacción de informes de laboratorio	10
Trabajo en laboratorio: Espectroscopía Raman en modo macroscópico	6	Búsquedas bibliográficas	10
Trabajo en laboratorio: Espectroscopía Raman en modo microscópico	12		
Tutorías, seminarios y presentación de trabajos	3		
Sesiones de evaluación	1		
Total presencial	40	Total no presencial	60

7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Evaluación continua	20 %	
Valoración del trabajo de laboratorio	60 %	Carácter presencial mínimo del 80%
Informes de los supuestos prácticos		
Presentación pública de resultados	10 %	
Prueba práctica final	10 %	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:** Evaluación continua, valoración del trabajo de laboratorio y prueba final oral.
- **Convocatoria extraordinaria:** Prueba práctica con resolución de supuestos experimentales.

8. Consideraciones finales

La información existente en el presente proyecto/guía docente constituye una directriz para el profesor. Debe considerarse como un guión lo suficientemente flexible para poder adaptarse a la realidad del aula, de los alumnos y del centro en el momento de su impartición, atendiendo a las necesidades o intereses del alumnado. El sistema de calificación, la temporalización de las sesiones y la distribución de los contenidos y actividades son orientativos, pudiendo modificarse en función del desarrollo de la asignatura y de la implicación y participación del alumnado