



Máster en Ciencia y Tecnología Químicas
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Complutense de Madrid

Guía docente

QUÍMICA LÁSER

Código: 605217

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2023-2024

Química Láser (*Laser Chemistry*)

Química Láser
Laser Chemistry

Duración

Primer semestre

Créditos ECTS /Carácter

6,0 créditos / Obligatoria en materia 2.4
6,0 créditos / Optativa en materia 2.3

Contenidos básicos (*Subject knowledge*)

Fundamentos de los láseres. Propiedades y tipos de láseres. Fundamentos de pulsos láser. Instrumentación y seguridad láser. Técnicas láser en espectroscopia. Aplicaciones de los láseres en química. Técnicas analíticas con láser. Aplicaciones en medioambiente. Aplicaciones en ciencia de materiales.

Foundations of lasers. Laser radiation properties and type of lasers. Fundamentals of laser pulses. Laser instrumentation and laser security. Laser techniques in spectroscopy. Laser applications in chemistry. Laser analytical techniques. Laser applications in environmental chemistry and material science.

Profesores y ubicación

Los profesores de la asignatura pertenecen a los grupos de investigación del Departamento que disponen de los equipos y técnicas mencionadas en el programa de la asignatura.

Profesores	Luis Bañares Morcillo
Grupo/Despacho	Dinámica Molecular de las Reacciones Químicas y Femtoquímica Departamento de Química Física / QA281
Correo electrónico	lbanares@ucm.es

Objetivos y competencias (*Abilities and Skills*)

OBJETIVOS

Se comparten los objetivos generales del Máster: 1-6.

- 1.- Proporcionar una base sólida y equilibrada de conocimientos que no se han adquirido en el Grado en Química. Si los estudiantes proceden de otros estudios de grado el máster les permitirá desarrollar las destrezas y habilidades necesarias para proseguir su formación científica e investigadora.
- 2.- Desarrollar capacidades para aplicar los conocimientos, tanto teóricos como prácticos, a la resolución de problemas en entornos nuevos o dentro de contextos poco conocidos tanto químicos como multidisciplinares.
- 3.- Generar en el estudiante, mediante la educación en ciencia y tecnología químicas, la sensibilidad necesaria para formular juicios, a partir de una información incompleta o limitada, que incluyan reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos.
- 4.- Desarrollar capacidades que le permitan comunicar sus conclusiones, conocimientos y razonamientos tanto a audiencias especializadas como no especializadas de una forma clara y sin ambigüedades.
- 5.- Desarrollar herramientas de aprendizaje, mediante la educación en ciencia y tecnología químicas, que permitan a los estudiantes continuar su formación de un modo autodirigido o autónomo.
- 6.- Generar en el estudiante el gusto por la investigación científica.

Además, se tendrán presentes los siguientes objetivos propios:

1. Se pretende que esta asignatura sirva de introducción y presentación a los alumnos del máster de esta materia, dada la posible diferencia en conocimientos de los alumnos que puedan ingresar en esta titulación.
2. Proporcionar una base sólida de los fundamentos y funcionamiento de los láseres.
3. Conocer y familiarizarse con las diferentes técnicas avanzadas y las aplicaciones de los láseres en ciencia y tecnología y en especial en los campos relacionados con la química.

ABILITIES

General abilities 1 to 6 of the Master are shared.

- 1.- *To give the proper basis of knowledge to study interdisciplinary aspects of Laser Chemistry.*
- 2.- *To develop theoretical and practical abilities to solve relevant scientific problems in Laser Chemistry.*
- 3.- *To promote in students, through science and technology education, sensitivity for giving opinions, having an incomplete or limited information, including thoughts on social and ethic liabilities related to the knowledge acquired.*
- 4.- *To develop abilities for communicating their knowledge and conclusions on the Laser Chemistry.*
- 5.- *To develop learning tools to allow the students an independent formation.*
- 6.- *To encourage the enjoyment of the research in the student.*

Also, following own abilities will be taken into account.

1.This course is intended to serve as an introduction and presentation of this matter to the students of the Masters, due to the possible difference in knowledge of students who can join this course.

2.Providing a solid foundation of fundamentals and operation of lasers.

3.Know and became familiar with advanced techniques and applications of lasers in science and technology especially in fields related to chemistry.

COMPETENCIAS GENERALES

CG1.- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de problemas químicos.

CG2.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés científico y social en el contexto de la Química.

CG3.- Interpretar y analizar datos complejos en el entorno de la química y la tecnología química.

CG4.- Reconocer y evaluar la calidad de los resultados teóricos y prácticos utilizando las herramientas adecuadas.

CG5.- Utilizar y reconocer la tecnología de los materiales para poder resolver problemas en el entorno de estos.

CG8.- Aplicar las técnicas de caracterización adecuadas al sistema objeto de estudio.

GENERAL SKILLS

GS1.- Integrate knowledge and handle complexity of chemical problems.

GS2.- Develop theoretical and practical skills to solve scientific and social interest problems in the context of chemistry.

GS3.- Analyze and interpret complex data in the chemistry and chemical technology fields.

GS4.- Recognize and evaluate the quality of the theoretical and practical results using the right tools.

GS5.- Use and acknowledge the materials technology to solve problems in their own environment.

GS8.- Apply appropriate characterization techniques to the system under study.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE1.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas en técnicas instrumentales.

CE2.- Planificar la experimentación de acuerdo con modelos teóricos o experimentales establecidos.

CE3.- Utilizar programas informáticos que permitan plantear y resolver problemas químicos.

CE4.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para la caracterización y análisis de diferentes sustancias químicas y materiales.

CE6.- Aplicar conocimientos tanto teóricos como prácticos, a la resolución de problemas químicos en entornos poco conocidos.

- CE7.- Formular juicios a partir de información química en desarrollo, que incluya reflexión sobre responsabilidades sociales, reciclado y sostenibilidad.
- CE11.- Identificar las diferentes tecnologías de procesado y discernir la más adecuada en cada caso.

SPECIFIC SKILLS

- SS1.- Develop theoretical and practical skills in instrumental techniques.*
- SS2.- Planning experiments according to established theoretical or experimental models.*
- SS3.- Use computer programs that allow set up and solve chemical problems.*
- SS4.- Develop theoretical and practical skills for the characterization and analysis of different chemical substances and materials.*
- SS6.- Apply theoretical and practical backgrounds to solve chemical problems in unfamiliar environments.*
- SS7.- Making judgments based on chemical information in development, including thinking about social responsibility, recycling and sustainability.*
- SS11.- Identify the different processing technologies and discern the most appropriate in each case.*

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT1.- Elaborar, escribir y defender informes de carácter científico y técnico.
- CT2.- Trabajar en equipo.
- CT3.- Valorar la importancia de la sostenibilidad y el respeto al medio ambiente.
- CT4.- Demostrar capacidad de autoaprendizaje.
- CT5.- Demostrar compromiso ético.
- CT6.- Comunicar resultados de forma oral/escrita.
- CT7.- Trabajar con seguridad en laboratorios de investigación.
- CT8.- Demostrar motivación por la investigación científica.

CROSS-DISCIPLINARY SKILLS

- CDS1.- Develop, write, and defend scientific and technical reports.*
- CDS2.- Teamwork skills.*
- CDS3.- Assess the importance of sustainability and environmental friendliness.*
- CDS4.- Demonstrate ability to self-learning.*
- CDS5.- Demonstrate ethical commitment.*
- CDS6.- Communicate findings in oral or written ways.*
- CDS7.- Working safely in research laboratories.*
- CDS8.- Show motivation for scientific research.*

Contextualización en el Máster

Esta asignatura se oferta dentro del módulo de especialización (módulo 2) y forma parte de dos de los cuatro itinerarios (materias 2.3 y 2.4) que constituyen el máster.

En esta asignatura se presentan los principios físicos básicos del funcionamiento del láser y de sus características, describiendo posteriormente, una serie de

técnicas y de aplicaciones utilizadas en diversas ramas de la ciencia y de la tecnología.

Dado su marcado carácter interdisciplinario se trata una asignatura de una gran importancia para la formación de un químico, o en general de un científico, que pretenda adquirir una idea general de utilidad de los láseres en la Ciencia actual, siendo muy interesante para los diferentes módulos de especialización del Máster.

Programa de la asignatura

Bloque 1. Fundamentos del Láser y Operación de Sistemas Láser

- 1.1. Resultados del tratamiento semiclásico de la interacción materia-radiación. Probabilidad de transición y sección eficaz de absorción. Densidad espectral e irradiancia. Emisión espontánea y estimulada. Tiempos de vida. Intensidades de línea y fuerza del oscilador. Forma y anchura de línea. Ensanchamiento Doppler. Coherencia espacial y temporal.
- 1.2. Principios fundamentales de la operación láser. Inversión de población. Amplificación y saturación. Resonador óptico. Modos de oscilación longitudinales. Láseres monomodo y multimodo. Factor de calidad Q del resonador. Anchura de línea. Modos transversales. Propiedades y características de la emisión láser.
- 1.3. Esquemas de bombeo: láseres de tres y cuatro niveles. Tipos de láseres. Láser de rubí. Láseres de gas molecular en la región infrarroja. Láseres de gas atómico en la región visible. Láseres de gas molecular en la región ultravioleta. Láseres de estado sólido. Láseres de colorante. Láseres químicos. Láseres de diodo.
- 1.4. Generación de pulsos láser ultracortos. Anclaje de modos. Relación entre la anchura de línea de la emisión estimulada y la duración del pulso. Anclaje de modos activo y pasivo. Conmutación del factor de calidad Q del resonador. Vacío de cavidad.
- 1.5. Óptica no lineal. Fenómenos no lineales de segundo orden. Métodos de ajuste de fase. Osciladores paramétricos. Procesos no lineales de tercer orden. Fenómenos de dispersión no lineal que afectan a los pulsos láser ultracortos. Dispersión de la velocidad de grupo y automodulación de fase.
- 1.6. Amplificación de pulsos láser ultracortos. Aspectos de diseño de amplificadores. Amplificadores regenerativos. Amplificación de pulsos láser con trino CPA (*Chirped Pulse Amplification*).
- 1.7. Medida de pulsos láser ultracortos. Técnicas de autocorrelación. Técnicas FROG (*Frequency-Resolved Optical Gating*).

Sesión de laboratorio I: Instrumentación láser. Seguridad láser.

Bloque 2. Técnicas Láser en Espectroscopia

- 2.1. Espectroscopia láser de absorción. Absorción multipaso. Absorción intracavidad CRDS (*Cavity Ring Down*). Fluorescencia inducida por láser. Espectroscopias de ionización, saturación y polarización.
- 2.2. Espectroscopia de ionización. Detección de fotoiones. Detección de fotoelectrones. Técnica ZEKE (*Zero Kinetic Energy Electrons*). Espectroscopia multifotónica. Espectroscopia de doble resonancia. Espectroscopia resuelta en tiempo.
- 2.3. Espectroscopia Raman láser. Raman espontáneo. Raman estimulado. Raman inverso. Raman coherente. CARS (*Coherent Anti-Stokes Raman Scattering*).

Bloque 3. Aplicaciones de los Láseres en Química

- 3.1. Química inducida por láser. Fotodisociación y fotoionización molecular. Técnicas de tomografía de velocidades con imágenes de iones y fotoelectrones. Reacciones químicas fotoiniciadas. Aplicaciones en dinámica molecular: haces moleculares cruzados y láseres. Preparación de estados cuánticos de reactivos y detección de estados cuánticos de productos con láser. Estereodinámica de la reacción química. Medida de secciones eficaces reactivas estado a estado.

Sesión de laboratorio II: Experimento de fotodisociación molecular con pulsos láser de nano/femtosegundos y técnicas de imágenes de iones.

- 3.2. Femtoquímica: Química resuelta en tiempo con pulsos láser ultracortos. Dinámica de paquetes de onda. Cronometraje de la reacción química. Espectroscopia del estado de transición. Vibración y rotación molecular en tiempo real. Femtoquímica de reacciones bimoleculares. Fotoisomerización. Transferencia de hidrógeno y de protón intramoleculares. Reacciones de química orgánica. Femtoquímica en fases condensadas.

Tutoría dirigida I: Control láser de reacciones químicas.

Tutoría dirigida II: Femtobiología. Aplicación de técnicas láser ultrarrápidas al estudio de procesos iniciales en biología: fotosíntesis y visión.

- 3.3. Aplicaciones del láser en Química Analítica. Espectrometría de masas por tiempo de vuelo. Desorción/ionización láser. MALDI (*Matrix Assisted Laser Desorption Ionization*). LIBS (*Laser-Induced Breakdown Spectroscopy*).
- 3.4. Aplicaciones en Química Medioambiental. Monitorización láser de gases y contaminantes atmosféricos. Química troposférica y estratosférica con LIDAR (*Light Detection And Ranging*). Análisis por espectroscopia láser en procesos de combustión.

- 3.5. Aplicaciones de los láseres en la transformación y caracterización de materiales. Ablación láser. Modificación y micromecanizado de materiales. Síntesis de nanomateriales por láser.

Sesión de laboratorio III: Experimento de deposición de materiales nanoestructurados por láser pulsado de femtosegundos.

Resultados del Aprendizaje

Una vez superada esta asignatura, el alumno debe ser capaz de:

Bloque 1

1. Aplicar los conocimientos de la interacción materia-radiación a los fenómenos de absorción y emisión de radiación electromagnética por parte de la materia.
2. Explicar los fundamentos de construcción de una cavidad resonante y el funcionamiento de un láser.
3. Describir los modos de una cavidad láser y explicar las características fundamentales de la radiación láser.
4. Explicar los distintos tipos de láseres.
5. Describir las propiedades y características de los pulsos láser.
6. Explicar los fenómenos de óptica no lineal relevantes en la generación de láseres pulsados y los efectos no lineales que afectan a los pulsos láser.
7. Describir los principales tipos de amplificadores de pulsos láser.
8. Aplicar los conocimientos sobre óptica no lineal a la construcción de dispositivos para la medida de anchura temporal y características espectrales de pulsos láser.
9. Describir las principales instrumentaciones láser y sus accesorios y aplicar los conocimientos sobre medidas de seguridad al manipular rayos láser.

Bloque 2

10. Describir las principales técnicas de espectroscopia láser de absorción.
11. Explicar las espectroscopias láser de ionización y multifotónica y sus aplicaciones.
12. Aplicar los conocimientos sobre efectos no lineales para explicar la espectroscopia Raman láser.

Bloque 3

13. Explicar los fundamentos de los procesos de fotodisociación molecular y las técnicas láser empleadas en su estudio.
14. Describir los conceptos básicos en cinética y dinámica de reacciones químicas.
15. Explicar los procesos químicos reactivos fotoinducidos.
16. Describir las principales técnicas láser para la detección de productos de reacciones químicas.
17. Aplicar los conocimientos adquiridos sobre fotodisociación molecular en el estudio práctico de un proceso de fotodisociación molecular en el laboratorio.
18. Describir los fundamentos de la femtoquímica y la espectroscopia del estado de transición de las reacciones químicas.
19. Explicar las principales aplicaciones de los pulsos láser ultrarrápidos al estudio

- resuelto en tiempo de procesos químicos.
20. Explicar las principales técnicas láser para el control de las reacciones químicas.
 21. Describir las principales aplicaciones de los pulsos láser ultrarrápidos en el estudio de procesos biológicos.
 22. Describir las principales aplicaciones de los láseres en análisis químico.
 23. Explicar los distintos métodos láser para resolver problemas de química medioambiental.
 24. Explicar los efectos de la interacción láser-material y sus aplicaciones en micromecanizado y modificación de materiales.
 25. Explicar las técnicas láser de deposición de materiales para la síntesis de materiales nanoestructurados.
 26. Aplicar los conocimientos adquiridos sobre la técnica de deposición de materiales por ablación láser a un caso práctico realizado en el laboratorio.

Metodología y programación docente

La práctica docente se desarrollará a través de clases teóricas (3,8 créditos ECTS) (CG1, CG3, CG5, CG8, CE1, CE2, CE3, CE6, CT3, CT5) y clases de seminarios (0,5 créditos ECTS) (CG1, CG2, CG3, CG4, CG5, CG8, CE2, CE3, CT2, CT4, CT6), tutorías dirigidas (0,2 créditos ECTS) (CG1, CG2, CG3, CG4, CE1, CE3, CT2, CT4, CT6, CT7, CT8) y prácticas de laboratorio realizadas en grupos pequeños de alumnos (0,60 créditos ECTS) (CG1, CG2, CG3, CG4, CG8, CE1, CE2, CE3, CE4, CE6, CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT6, CT7, CT8). Además, los alumnos elaborarán trabajos individuales o en grupo y asistirán a conferencias recomendadas por la Comisión de Coordinación del Máster. Estas actividades, junto con los exámenes supondrán 0,90 créditos ECTS (CG1, CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT6, CT8).

Horas de trabajo/créditos de las principales actividades

Actividad	Presencial (h)	Trabajo autónomo (h)	Créditos ECTS
Clases teóricas/Theory classes	38	57	3,8
Seminarios/Seminars	5	7,5	0,5
Tutorías/ Tutorials	2	3	0,2
Laboratorio/ Lab	9	7	0,6
Preparación de trabajos, memorias de laboratorio y exámenes/ Work Group preparation, lab report and examinations	8	13,5	0,9
Total	62	88	6

Evaluación del aprendizaje

Las calificaciones estarán basadas en la puntuación absoluta sobre 10 puntos y de acuerdo con la escala establecida en el RD 1125/2003.

Para ser evaluado el estudiante deberá haber participado, al menos, en el 70% de las actividades presenciales.

El rendimiento académico del estudiante se computará atendiendo a la calificación del examen final y la evaluación del trabajo personal en los siguientes porcentajes, en su caso:

- **Examen oral o escrito: 40 %** Se evaluarán las siguientes competencias: CG1, CG3, CG5, CG8, CE4, CE5, CE9, CE20, CE21, CT3, CT4, CT6
- **Trabajo personal y prácticas de laboratorio: 40 %** Se evaluarán las siguientes competencias: CG1, CG2, CG3, CG4, CG8, CE1, CE2, CE4, CE7, CE20, CE21, CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT6, CT7, CT8.
- **Participación en tutorías presentación de trabajos y asistencia a conferencias: 20 %.** Se evaluarán las siguientes competencias: CG1, CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT6, CT8.

Idioma o idiomas en que se imparte

Español.

Bibliografía y recursos complementarios

Básica

- O. Svelto, *Principles of Lasers*, 4th edition, Springer, New York, 1998.
- J. M. Hollas, *Modern Spectroscopy*, 4th Edition, Wiley, Chichester, 2004
- H. Abramczyk, *Introduction to Laser Spectroscopy*. Elsevier. 2005.
- D. L. Andrews, *Applied Laser Spectroscopy*. VCH-Wiley, Weinheim. 1992.
- W. Demtröder, *Laser Spectroscopy. Volume 1. Basic Principles*. 4th Edition, Springer-Verlag, Berlin, 2008.
- W. Demtröder, *Laser Spectroscopy. Volume 2. Technology*. 4th Edition, Springer-Verlag, Berlin, 2008.
- H. H. Telle, A. González Ureña, R. J. Donovan, *Laser Chemistry: Spectroscopy, Dynamics and Applications*. Willey and Sons, N. Y. 2007.
- *Tutorials in Molecular Reaction Dynamics*, M. Brouard, C. Vallance Eds., Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2012.
- J. Bertrán Rusca, J. Núñez Delgado, (coord.): *Química Física*, Volúmenes I y II, Ariel Ciencia, Barcelona, 2002.
- D. M. Lubman, *Lasers and Mass Spectrometry*, Oxford University Press, Oxford, 1990.

Complementaria

- C. C. Davis, *Lasers, and Electro-Optics. Fundamentals and Engineering*, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.
- J.-C. Diels, W. Rudolph, *Ultrashort Laser Pulse Phenomena*, Academic Press, San Diego, 1996.
- C. Rullière (Ed.), *Femtosecond Laser Pulses. Principles and Experiments*, Springer, Berlin, 1998.
- R. D. Levine, *Molecular Reaction Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- D. Bäuerle, *Laser Processing Chemistry*, Springer Verlag, Berlin. 2000.
- G. Berden, and R. Engeln (Ed.), *Cavity Ring-Down Spectroscopy. Techniques and applications*. Willey. 2009.

- J. R. Ferraro, K. Nakamoto, C. W. Brown, *Introductory Raman spectroscopy*, Academic Press. 2003.
- R. J. Cotter, *Time-of-Flight Mass Spectrometry. Instrumentation and Applications in Biological Research*, ACS Professional Reference Books, Washington D.C., 1997.
- E. Smith and G. Dent, *Modern Raman spectroscopy*. Wiley. 2005.
- *Ultrafast Lasers. Technology and Applications*. M. E. Fermann, A. Galvanauskas, G. Sucha, Eds., Marcel Dekker, New York, 2003.