

Curso
2025/2026

Guía Docente:

TÉCNICAS DIFRACTOMÉTRICAS Y DE MICROSCOPIA



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

1. IDENTIFICACIÓN

Titulación	Máster en Química de Materiales para el Futuro	Código	610590
Asignatura	Técnicas Difractométricas y de Microscopía	ECTS	6
Materia	Técnicas de Caracterización de Materiales		
Módulo	Caracterización de Materiales		
Carácter	Obligatoria	Semestre	Primero
Departamento responsable	Química Física (QF) Química Inorgánica (QI)		

Profesores responsables

Actividad	Profesor	Email	Despacho	Departamento
Teoría Seminarios	Francisco Ortega Gómez	fortega@ucm.es	QB-212B	QF
Teoría Seminarios	Eduardo Guzmán Solís	eguzmans@ucm.es	QB-212C	QF
Teoría Seminarios Prácticas	Ester García González	esterg@ucm.es	QA-106	QI
Teoría Seminarios Prácticas	David Ávila Brande	davilabr@ucm.es	QA-118	QI
Teoría Seminarios Prácticas	M. Luisa Ruiz González	luisarg@ucm.es	QA-133	QI
Teoría Seminarios Prácticas	Miguel Cortijo Montes	miguelcortijomontes@ucm.es	QA-216	QI
Teoría Seminarios Prácticas	Khalid Boulahya	khalid@ucm.es	QA-138B	QI

2. OBJETIVOS

1. Adquirir una base sólida y equilibrada de conocimientos sobre las técnicas de difracción, dispersión y de microscopía para la caracterización de materiales.
2. Interpretar y analizar los datos que suministran las distintas técnicas.
3. Evaluar la calidad de los resultados obtenidos y discernir entre datos válidos y cuestionables/no válidos.
4. Integrar los conocimientos adquiridos para enfrentarse a la complejidad de los problemas planteados en la caracterización de materiales.
5. Desarrollar herramientas/habilidades para comunicar las conclusiones, los razonamientos y los resultados obtenidos en la caracterización.

3. CONTEXTUALIZACIÓN EN EL MÁSTER

La asignatura se oferta como obligatoria dentro del conjunto de asignaturas que constituyen la materia obligatoria Técnicas de Caracterización de Materiales perteneciente al módulo Caracterización de Materiales.

En esta asignatura se contemplan los aspectos teóricos básicos necesarios para entender las diferentes técnicas difractométricas y de dispersión, así como las técnicas de microscopía en la caracterización de materiales. Simultáneamente, se muestra el estado del arte de cada método, seleccionando para ello los resultados/aplicaciones más recientes recogidos en la literatura científico-técnica. Esto permite que, a partir de contenidos teóricos fundamentales, los estudiantes se familiaricen con técnicas avanzadas y adquieran conocimientos imprescindibles para su desarrollo profesional.

La asignatura mantiene una estrecha relación con el resto de las asignaturas del módulo, también de carácter obligatorio, lo que posibilita la adquisición de una amplia visión global del significado del término caracterización, entendido como la vía más adecuada para comprender las propiedades de un material.

4. CONTENIDOS

Conocimientos básicos

Difracción y dispersión de la radiación. Difracción de rayos X, de neutrones y de electrones. Dispersión de luz. Dispersión de rayos X y de neutrones. Microscopía electrónica de barrido, transmisión y transmisión en modo barrido. Técnicas espectroscópicas asociadas: XEDS, WDS, EELS. Tomografía electrónica. Microscopía óptica: confocal, campo oscuro y contraste de fases. Microscopía de fluorescencia. Nanoscopía.

Contenidos generales

1. Fundamentos de difracción y dispersión de la radiación.
2. Técnicas difractométricas: rayos X, neutrones y electrones.
3. Técnicas de dispersión: luz visible, rayos X y neutrones.
4. Microscopía electrónica y microscopía óptica avanzada.
5. Diseño experimental, interpretación y comunicación de resultados en difracción y microscopía

Programa

BLOQUE 1. DIFRACCIÓN Y DISPERSIÓN

Tema 1: Fundamentos de la difracción

Difracción y dispersión. Naturaleza de la interacción radiación-materia. Tipos y fuentes de radiación: convencionales y grandes instalaciones. Geometría de la difracción: ecuaciones de Laue e interpretación de Bragg. La red recíproca. El modelo geométrico de difracción de Ewald. Intensidad de la difracción. Dispersión por un electrón. Dispersión por un átomo. Difracción por un cristal. Factor de estructura. Simetría de la difracción y simetría cristalina. Extinciones sistemáticas, ley de Friedel, problema de las fases.

Tema 2. Técnicas Difractométricas.

Difracción de rayos X: El difractómetro de monocristal. Métodos de resolución de estructuras. Método de Patterson y métodos directos. Refinamiento isotrópico y anisotrópico. El difractómetro de polvo policristalino. Aplicaciones de la difracción de rayos X a materiales policristalinos: análisis cualitativo y cuantitativo de fases, grado de

cristalinidad, cálculo de parámetros reticulares, tamaño cristalino, textura, tensiones, análisis estructural. El método de Rietveld.

Difracción de neutrones: Difracción de muestras policristalinas: complementariedad con difracción de rayos X. Difracción nuclear (estructura cristalina). Difracción magnética (estructura magnética). Difracción de monocristal. Método de tiempo de vuelo. Método de perfiles de Rietveld. Parámetros de perfil y parámetros estructurales. Microestructura, efectos de tamaño, textura y tensiones. Instrumentación.

Difracción de electrones: Difracción dinámica. Difracción de electrones de área seleccionada (SAED). Difracción de electrones de haz convergente (CBED). Microdifracción. Difracción por volúmenes pequeños.

Tema 3. Técnicas de dispersión

Dispersión de Luz. Teoría de la dispersión de luz, Dispersión Rayleigh. Dispersión de Luz Estática (SLS, Static Light Scattering). Factor de Forma y Factor de Estructura. Espectroscopía de Mezcla Óptica y Correlación fotónica. Dispersión de luz dinámica (Dynamic Light Scattering, DLS). Partículas grandes y/o anisotrópicas, Teoría de Mie. Técnicas complementarias (Nanoparticle Tracking Analysis, NTA, Diffusive Wave Spectroscopy, DWS). Dispersión de rayos X: bajo y alto ángulo. Dispersión de neutrones. Dispersión de luz por superficies. Instrumentación y casos prácticos.

BLOQUE 2. TÉCNICAS DE MICROSCOPIA

Tema 4. Microscopía electrónica

Microscopía y el concepto de resolución. Señales generadas tras la interacción del haz electrónico. Volumen de interacción. El microscopio electrónico de barrido: modos de imagen e interpretación. El microscopio electrónico de transmisión: transmisión convencional y transmisión en modo barrido. Contraste de fase. Contraste de amplitud. Aberraciones ópticas. Corrección de Aberración. Tomografía electrónica para la reconstrucción 3D. Técnicas espectroscópicas asociadas: espectroscopía de rayos X por dispersión de energías (XEDS), espectroscopía de rayos X por dispersión de longitudes de onda (WDS). Espectros XEDS e imagen. Espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS). El espectro EELS. Espectros EELS e imagen.

Tema 5. Microscopía óptica avanzada

Fundamentos de microscopía óptica. Microscopía Confocal. Microscopía de Campo Oscuro. Tipos de microscopios de campo oscuro. Microscopía de Contraste de Fases.

Fundamentos de microscopía de fluorescencia. Microscopía de fluorescencia multifotón. Microscopía de fluorescencia en ciencia de materiales y en biología.

Nanoscopía. Límite de resolución en microscopía óptica. Fundamentos de la nanoscopía. Nanomateriales y compuestos luminiscentes usados en nanoscopía. Nanoscopía de iluminación estructurada. Nanoscopía de emisión estimulada (Stimulated Emission Depletion, STED). Nanoscopías de localización. Uso de técnicas de machine learning en nanoscopía. Nanoscopías en biomedicina y ciencia de materiales.

PRÁCTICAS:

Práctica I:

Se diseñará una práctica (ámbito Tema 2) a partir de datos de difracción de los tres tipos de radiación (rayos X, neutrones y electrones), para resolver un problema complejo. La práctica pretende ilustrar las diferencias y los aspectos complementarios de los tres métodos de caracterización.

Práctica II:

Se realizarán tres actividades en el ámbito del Tema 4:

1. Operación del microscopio de barrido. Espectroscopia XEDS frente a Espectroscopia WDS.
2. Interpretación de espectros EELS.
3. Procesado de imágenes

5. RESULTADOS DE APRENDIZAJE**Conocimientos y contenidos**

RA1	Valorar y comprender el impacto de diferentes características en la eficacia y aplicabilidad de materiales en diversos ámbitos científicos, tecnológicos e industriales, en base a sus propiedades químico-físicas.
RA2	Conocer las ventajas y desventajas de diferentes materiales utilizados en distintos ámbitos científicos, tecnológicos y/o industriales.

Destrezas y habilidades

RA12	Dominar los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas para la caracterización de materiales.
------	---

Competencias

RA22	Integrar conocimientos teórico-prácticos para evaluar y caracterizar materiales en función de su estructura, propiedades y funcionalidad.
RA23	Diseñar soluciones innovadoras que optimicen la funcionalidad, eficiencia y sostenibilidad de los materiales en diversas aplicaciones.
RA24	Analizar conceptos avanzados de química relacionados con la síntesis, caracterización y aplicación de materiales.
RA25	Evaluar y gestionar eficazmente bibliografía, información científica, bases de datos y software tanto en castellano como en inglés.

6. HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo	Créditos (ECTS)
Clases teóricas	20	40	2,4
Seminarios	12	28	1,6
Prácticas	16	14	1,2
Preparación de exámenes	2	18	0,8
Total	50	100	6

7. METODOLOGÍA

La práctica docente se desarrollará a través de clases teóricas, seminarios, y prácticas. Las clases de teoría estarán dirigidas a explicar los conceptos generales fundamentales sobre las diferentes técnicas, que el alumno deberá reforzar con ayuda de los recursos que el profesor ponga a su disposición, así como de la bibliografía recomendada. Los seminarios complementarán a las clases teóricas y en ellos se plantearán ejercicios sencillos, problemas o casos prácticos para que los alumnos puedan despejar sus dudas. Además, los alumnos

deberán realizar las sesiones de laboratorio propuestas en el programa de la asignatura, que pretenden mostrar con datos reales la complementariedad de distintos grupos de técnicas de caracterización, así como el tratamiento de datos experimentales y la obtención de resultados. Estas actividades dirigidas servirán para conocer las capacidades de los alumnos en la adquisición de conocimientos y competencias de la asignatura.

8. BIBLIOGRAFÍA

Además del material que por parte del profesor se pondrá a disposición del alumno, se recomiendan los siguientes libros:

- Hammond, C.: *"The Basics of Crystallography and Diffraction"*, 2ª Ed., Oxford University Press, 2001
- Stout, G. H.; Jensen. L. H.: *"X-Ray Structure Determination"*, Wiley, 1989.
- *"International Tables for Crystallography"*, Vol. A, 5ª Ed., Kluwer Academic Publishers, 2002.
- Boothroyd, A.T.: *"Principles of Neutron Scattering from Condensed Matter"*. Oxford University Press, 2020.
- Kisi, E.H.; Howard, C.J.: *"Applications of Neutron Powder Diffraction"*. Oxford University Press, 2008
- Øgdenal, L. H.: *"Light Scattering Demystified: Theory and Practice"*. University of Copenhagen Ed., Danmark, 2017.
- Berne, B.J.; Pecora, R.: *"Dynamic Light Scattering: With Applications to - Chemistry, Biology, and Physics"*. Dover Books on Physics, 2000
- Williams, D. B.; Carter, C. B.: *"Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science"*, 2ª Ed., Springer, 2009.
- Spence, J. C. H.: *"Experimental High Resolution Electron Microscopy"*, 3ª Ed., Oxford University Press, 2004.
- Shindo, D.; Oikawa, T.: *"Analytical Electron Microscopy for Materials Science"*, Springer, 2002.
- Egerton, R. F.: *"Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscope"*, 2ª Ed., Plenum Press, 1996.
- Bradbury, S.; Bracegirdle, B.: *"Introduction to Light Microscopy"*. Bios Scientific Publishers, 1998.
- Herman, B.: *"Fluorescence Microscopy"*. Springer-Verlag New York Inc., 1997.
- Sergeev, G.B.; Klabunde, K.J.: *"Nanochemistry"*. Elsevier, 2nd Ed., Amsterdam, 2013

9. EVALUACIÓN

El rendimiento académico del estudiante se computará atendiendo a la calificación del examen final, al trabajo realizado en las prácticas de laboratorio, y a la evaluación de su desempeño en los seminarios y en las actividades programadas en ellos. La valoración se efectuará de acuerdo con los siguientes porcentajes:

❖ **EXAMEN FINAL: 60%**

Correspondiente a los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura.

**❖ LABORATORIO: 20%**

Se evaluará el trabajo personal, la actividad práctica de laboratorio, incluyendo, en su caso, la elaboración de las correspondientes memorias.

❖ TRABAJO PERSONAL: 20%

Se evaluará el trabajo personal en la resolución de las cuestiones, ejercicios y/o problemas propuestos por el profesor en los seminarios y en las clases teóricas.

Las calificaciones de cada apartado estarán basadas en la puntuación absoluta sobre 10 puntos y de acuerdo con la escala establecida en el RD 1125/2003. Además, para poder ser evaluado, el estudiante deberá haber participado, al menos, en el 70 % de las actividades programadas.