

Curso
2026/2027

Guía Docente:

TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS DE CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

1. IDENTIFICACIÓN

Titulación	Máster en Química de Materiales para el Futuro	Código	610591
Asignatura	Técnicas espectroscópicas de caracterización de materiales	ECTS	6
Materia	Técnicas de Caracterización de Materiales		
Módulo	Caracterización de Materiales		
Carácter	Obligatoria	Semestre	Primero
Departamentos responsables	Química Analítica (QA) Química Física (QF) Química Orgánica (QO)		

Profesores responsables

Actividad	Profesor	Email	Despacho	Departamento
Teoría Seminarios Prácticas	Beatriz Gómez Gómez	beatrgom@ucm.es	QA-402	QA
Teoría Seminarios Prácticas	Luis Bañares Morcillo	lbanares@ucm.es	QA-281	QF
Teoría Seminarios Prácticas	Agustín Molina Ontoria	amolinao@ucm.es	QB-348A	QO

2. OBJETIVOS

1. Analizar los diferentes tipos de espectroscopías y espectrometrías existentes y nuevos desarrollos tecnológicos para la caracterización de materiales.
2. Evaluar la importancia de la caracterización de materiales por medio de una amplia gama de técnicas espectroscópicas y espectrométricas disponibles comercialmente y de uso extendido en cualquier laboratorio de síntesis y caracterización de materiales, así como en grandes instalaciones científicas.
3. Justificar los desarrollos instrumentales, aplicaciones y casos prácticos de las distintas espectroscopías y espectrometrías y su complementariedad en el ámbito de la caracterización de muy diversos materiales identificando las ventajas y limitaciones de cada aplicación.
4. Evaluar críticamente los aspectos regulatorios y de control relacionados con el uso de técnicas espectroscópicas y espectrométricas para la caracterización de materiales.
5. Seleccionar estrategias innovadoras para la elección y uso de técnicas espectroscópicas y espectrométricas específicas en aplicaciones para materiales en diferentes laboratorios de investigación e industrias considerando los principios del desarrollo sostenible.
6. Investigar y explorar nuevas fronteras en el desarrollo de técnicas espectroscópicas y espectrométricas para aplicaciones en caracterización de materiales.

3. CONTEXTUALIZACIÓN EN EL MÁSTER

La asignatura se oferta como obligatoria dentro del conjunto de asignaturas que constituyen el módulo Caracterización de Materiales, formando parte de la materia titulada Técnicas de Caracterización de Materiales.

En esta asignatura se contemplan aspectos básicos de las técnicas espectroscópicas y espectrométricas existentes y desarrollos instrumentales futuros para la caracterización de materiales que permitirán una comprensión global del papel de las mismas en una serie de aplicaciones en materiales que son de uso común en laboratorios de investigación y en la industria. El curso cubrirá aspectos de las espectroscopias y espectrometrías de uso habitual en ciencia y tecnología de materiales, incluyendo sus propiedades, caracterización y aplicaciones. En este curso, los estudiantes obtendrán conocimientos sobre la instrumentación espectroscópica y espectrométrica de uso cotidiano en la caracterización de materiales muy diversos, lo que les permitirá tomar decisiones informadas con respecto a la selección y uso de estas.

4. CONTENIDOS

Conocimientos básicos

Fundamentos de Espectroscopia. Espectroscopias Ópticas: Infrarroja, Raman y Ultravioleta-Visible. Espectroscopias Foelectrónica y de Rayos X. Espectroscopia de Fotoluminiscencia. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear. Espectroscopia de Resonancia Paramagnética Electrónica. Espectroscopias Láser. Espectroscopia Resuelta en Tiempo. Espectrometrías de Masas.

Contenidos generales

1. Tipos de técnicas espectroscópicas y de espectrometría de masas en aplicaciones de caracterización de materiales de consumo y de la vida diaria, como polímeros, cerámicos, metálicos, coloidales y materiales compuestos.
2. Estructura y propiedades de la instrumentación en espectroscopia y espectrometría.
3. Regulación y control del uso de técnicas espectroscópicas y espectrométricas en aplicaciones para materiales.
4. Aplicaciones y futuros desarrollos de técnicas instrumentales en espectroscopia y espectrometría para materiales.

Programa

BLOQUE 1. FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA

Tema 1.1 Interacción materia-radiación.

Absorción y emisión estimulada. Aproximación de dipolo eléctrico. Emisión espontánea: coeficientes de Einstein. Tiempo de vida. Reglas de selección. Intensidades de línea y fuerza del oscilador. Forma y anchura de las líneas espectrales.

BLOQUE 2. ESPECTROSCOPIAS ÓPTICAS.

Tema 2.1 Espectroscopia Infrarroja

Fundamentos de espectroscopia vibracional. Espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR). Métodos de transmisión y de reflectancia total atenuada. Microespectroscopia FTIR y FTIR de imagen. Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

Tema 2.2 Espectroscopia Raman

Fundamentos de dispersión Raman. Espectroscopia Raman vibracional. Vibración en cristales. Dispersión Raman en cristales. Dispersión Raman aumentada en superficies (SERS). Microscopia Raman. Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

Tema 2.3 Espectroscopia Ultravioleta-Visible

Fundamentos de espectroscopia electrónica. Espectroscopia ultravioleta-visible (UV-VIS) de imagen. Instrumentación. Aplicaciones y casos prácticos. Complejos metálicos y semiconductores. Nanopartículas metálicas. Resonancia de plasmón superficial.

BLOQUE 3. ESPECTROSCOPIAS FOTOELECTRÓNICAS Y DE RAYOS X

Tema 3.1 Espectroscopia Fotoelectrónica

Teorema de Koopmans. Espectroscopia fotoelectrónica ultravioleta (UPS). Espectroscopia fotoelectrónica resuelta en ángulo (ARPES). Espectroscopia fotoelectrónica de Rayos X (XPS). Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

Tema 3.2 Espectroscopías de Rayos X

Espectroscopia de electrón Auger (AES). Espectroscopia de Fluorescencia de Rayos X. Espectroscopias de Absorción de Rayos X (XAS): EXAFS (Extended X-Ray Absorption Fine Structure) y XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure). Espectroscopia de Dispersión Raman de Rayos X. Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

BLOQUE 4. ESPECTROSCOPIAS DE FOTOLUMINISCENCIA

Tema 4.1 Espectroscopia de Fotoluminiscencia.

Fluorescencia y fosforescencia. Rendimiento cuántico y tiempo de vida. Anisotropía. Desactivación colisional (Quenching). Transferencia de energía resonante (FRET). Sensibilización. Imágenes de tiempos de vida de fluorescencia (FLIM). Termoluminiscencia. Luminiscencia circularmente polarizada (CPL) y dicroísmo circular (CD). Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

BLOQUE 5. ESPECTROSCOPIAS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR Y DE RESONANCIA PARAMAGNÉTICA ELECTRÓNICA.

Tema 5.1 Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN)

RMN 1D (^1H , ^{13}C , ^{19}F). RMN 2D (homonucleares y heteronucleares). Caracterización de interacciones intermoleculares. RMN 3D. Experimentos DOSY (Diffusion Ordered Spectroscopy). RMN en estado sólido. Introducción al procesado e interpretación de espectros con MestReNova y/o Topspin. Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

Tema 5.2 Espectroscopia de Resonancia Paramagnética Electrónica (EPR)

Fundamentos de EPR. Espectroscopia EPR de alta resolución. Espectroscopia de campo pulsado. Efectos de campo hiperfino y superhiperfino. Espectroscopia de EPR de baja resolución: espectroscopia de banda X. Espectroscopia de relajación y modos de línea. Análisis e interpretación de espectros de EPR: parámetros espectrales (g-factor y ancho de línea). Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

BLOQUE 6. ESPECTROSCOPIAS LÁSER.

Tema 6.1 Espectroscopias Láser I.

Espectroscopias láser de absorción y de excitación de fluorescencia. Espectroscopia de fluorescencia inducida por láser. Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

Tema 6.2 Espectroscopias Láser II

Espectroscopías Raman láser. Hyper-Raman. Raman estimulado. Raman coherente. CARS (Coherent Anti-Stokes Raman Scattering). Espectroscopia multifotónica. Espectroscopia confocal multifotón. LIBS (Laser-Induced Breakdown Spectroscopy). Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

Tema 6.3 Espectroscopia Láser Resuelta en Tiempo.

Pulsos láser. Óptica no lineal. Generación de armónicos y suma y diferencia de frecuencias. Amplificación óptica paramétrica. Generación de supercontinuo. Espectroscopia de absorción transitoria (TAS - Transient Absorption Spectroscopy). Espectroscopia de fluorescencia por suma de frecuencias (FUCS - Fluorescence Up-Conversion Spectroscopy). Espectroscopia de Terahercios (THz). Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

BLOQUE 7. ESPECTROMETRÍAS DE MASAS.

Tema 7.1

Principios básicos. Aspectos prácticos. Composición química y especiación de materiales. Análisis superficial mediante Ablación láser-Espectrometría de masas (LA-ICP-MS), Desorción-ionización láser-Espectrometría de masas (LDI-MS), Desorción-ionización láser asistida por matriz-Espectrometría de masas (MALDI-MS) e Ionización por electrospray-Espectrometría de masas (ESI-MS). Caracterización del tamaño de nanopartículas mediante AF4-ICPMS, sp-ICPMS y IMS. Identificación y monitorización de intermedios de reacción y productos de síntesis. Monitorización de la estabilidad y transformación de materiales. Instrumentación, aplicaciones y casos prácticos.

PRÁCTICAS

Práctica I: Aplicación de espectroscopias ópticas (FTIR, Raman, UV-VIS) a la caracterización de materiales.

Práctica II: Aplicación de la espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN) a la caracterización de materiales.

Práctica III: Aplicación de las espectroscopias láser a la caracterización de materiales.

Práctica IV: Aplicaciones de las espectrometrías de masas a la caracterización de materiales.

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	36	67	4,12
Seminarios	5	8	0,52
Prácticas	7	9	0,64
Preparación de exámenes	3	15	0,72
Total	51	99	6

7. METODOLOGÍA

La práctica docente se desarrollará a través de clases teóricas y seminarios donde se explicarán los contenidos de la asignatura. Las clases de teoría estarán dirigidas a explicar al alumno una serie de conceptos generales que deberá profundizar con ayuda de la bibliografía adecuada. Las clases de seminarios estarán encaminadas a que el alumno pueda despejar sus dudas tanto mediante ejercicios sencillos como en la realización de problemas y/o casos prácticos. Estas servirán para conocer las capacidades del alumno en la adquisición de conocimientos y competencias de la materia. El alumno deberá realizar las sesiones de prácticas de laboratorio propuestas en el programa de la asignatura y preparar los correspondientes informes de las prácticas realizadas.

Los alumnos asistirán a conferencias y seminarios recomendados por la Comisión de Coordinación del Máster.

8. BIBLIOGRAFÍA

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

- *"Spectroscopy for Materials Characterization"*, Simonpietro Agnello (Editor), Wiley, Hoboken, New Jersey (2021).
- *"Material Characterization. Introduction to Microscopic and Spectroscopic Methods"*, Yang Leng, Wiley-VCH, Weinheim (2nd Edition, 2013).
- *"Handbook of Laser Technology and Applications. Laser Applications: Material Processing and Spectroscopy (Vol. III)"*, Chunlei Guo, Subhash Chandra Singh (Editors), CRC Press, Boca Raton (2nd Edition, 2021).

- “Reviews in Mineralogy and Geochemistry (Volume 78). Spectroscopic Methods in Mineralogy and Material Sciences”, Grant S. Henderson, Daniel R. Neuville, Robert T. Downs (Editors), De Gruyter, Chantilly (2015).
- “Experimental Approaches of NMR Spectroscopy. Methodology and Application to Life Science and Materials Science”, Akira Naito (Editor in Chief), Springer, Singapore (2018).
- “Mass Spectrometry: Principles and Applications” Edmond de Hoffmann, Vincent Stroobant, Wiley (3rd Edition, 2007).
- “Practical guide to ICP-MS and other Spectroscopy Techniques”, Robert Thomas, CRC Press (2024).

9. EVALUACIÓN

El rendimiento académico del estudiante se computará atendiendo a la calificación del examen final y el trabajo y los informes correspondientes a las prácticas de laboratorio, así como mediante la evaluación tanto de la asistencia a las actividades programadas y cuestiones teóricas como de ejercicios y/o problemas facilitados por el profesor para adquirir la formación básica en distintos ámbitos de la materia, de acuerdo con los siguientes porcentajes:

❖ **EXAMEN FINAL: 65%**

Correspondiente a los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura.

❖ **LABORATORIO: 20%**

Se evaluará el trabajo personal, la actividad práctica de laboratorio, incluyendo la elaboración de los correspondientes informes.

❖ **TRABAJO PERSONAL Y ASISTENCIA: 15%**

Se evaluará el trabajo personal en la resolución de las cuestiones, ejercicios y/o problemas propuestos por el profesor, así como la asistencia a las actividades programadas.

La calificación final resultará de la media ponderada de las actividades evaluables. No obstante, para superar la asignatura será necesario alcanzar la nota mínima de 4/10 en cada una de ellas. En caso de no cumplirse este requisito, la calificación final será la media ponderada obtenida, con un máximo de 4,5 sobre 10.

Los/las estudiantes que no alcancen la calificación mínima exigida en alguna o algunas de las actividades evaluables de la convocatoria ordinaria deberán ser evaluados, en la convocatoria extraordinaria, de aquellas partes en las que no haya cumplido los requisitos mínimos establecidos. La calificación final de la convocatoria extraordinaria se determinará conforme a los mismos criterios de evaluación aplicados en la convocatoria ordinaria