# SEGUIMIENTO DE CONCESION DE LA MENCIÓN DE CALIDAD A LOS ESTUDIOS DE DOCTORADO DE LAS UNIVERSIDADES ESPAÑOLAS – CONVOCATORIA 2007. DOCUMENTACIÓN ESPECÍFICA DEL PROGRAMA

DENOMINACIÓN DE LOS ESTUDIOS DE DOCTORADO:

### LÁSERES Y ESPECTROSCOPÍA AVANZADA EN QUÍMICA (QUIMILASER)

Mención de Calidad con referencia MCD2006-00031

UNIVERSIDAD RESPONSABLE/COORDINADORA:

UNIVERSIDAD PABLO DE OLAVIDE, DE SEVILLA

### Programa Interuniversitario de Doctorado en Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química (QUIMILÁSER)

El campo de los láseres y la espectroscopía y su aplicación a los problemas de la Química juegan un papel privilegiado en el desarrollo de la Química moderna. El láser es considerado como uno de los descubrimientos tecnológicos más importantes de la segunda mitad del siglo XX y así fue reconocido inmediatamente después de su descubrimiento con el galardón del Premio Nobel de Física en 1961 a C. H. Townes, N. Basov y A. Prokhorov por sus trabajos sobre los principios de funcionamiento del láser y, más tarde, con el Premio Nobel en 1981 a A. Schawlow, N. Bloemberger y K. M. Siegbahn por el desarrollo de la espectroscopía láser. Los láseres se encuentran implicados en prácticamente todos los campos de la ciencia, de la tecnología, de la medicina, de la industria, y de nuestra vida cotidiana.

En la actualidad existe en España un número creciente de grupos de investigación de excelencia cuya actividad se centra en las aplicaciones de los láseres y la espectroscopía en diferentes campos de la Química. Estos grupos de investigación tienen en común la utilización de técnicas experimentales de vanguardia que incluyen diversas técnicas láser y espectroscópicas de muy alta resolución, técnicas de haces moleculares y espectrometría de masas. La aplicación de estas metodologías permite el estudio a escala microscópica de la estructura de las moléculas, iones, agregados moleculares y otras especies inestables, así como las interacciones intermoleculares y la dinámica de las reacciones químicas. Son igualmente importantes las aplicaciones tecnológicas como el análisis químico, teledetección y el diagnóstico y tratamiento de materiales.

La investigación en Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química (de ahora en adelante, QUIMILÁSER) requiere una importante formación en fundamentos físicos del láser y espectroscopía, en mecánica cuántica atómica y molecular, interacción radiación-materia y en técnicas espectroscópicas e instrumentación, así como en las diversas aplicaciones de los láseres y la espectroscopía a toda una serie de áreas dentro de la Química. La adquisición de conocimientos tan especializados no es posible a través de un programa de doctorado de propósito general. Por otra parte, a pesar del número sustancial de investigadores en este campo en España, ninguna universidad puede agrupar un número de estudiantes suficiente para garantizar la viabilidad de un programa de doctorado local específico en esta materia ni puede disponer de tal variedad de profesores con competencia en todos los ámbitos de QUIMILÁSER. Por esta razón, tras la publicación del real decreto 778/98 que regula el tercer ciclo de las enseñanzas universitarias y con ocasión de la reciente celebración de un *Workshop* sobre "El láser en la Química" en la Universidad de Valladolid, los asistentes al mismo, representantes de los distintos grupos españoles que investigan en este campo, acordaron proponer la realización de un programa de doctorado interuniversitario en este área de investigación científica.

Después de elaborar la propuesta, los Departamentos implicados de las distintas universidades han promovido la firma de un convenio de colaboración interuniversitario que permita la realización conjunta del Programa de Doctorado QUIMILÁSER, sumando los esfuerzos formativos de los grupos de cada universidad. Dicho convenio, cuya copia se adjunta, ha sido firmado por las siguientes universidades:

Universidad de Burgos (UB)

Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM)

Universidad Complutense de Madrid (UCM)

Universidad de A Coruña (UDA)

Universidad de Jaén (UJA)

Universidad de Málaga (UMA)

Universidad de Murcia (UMU)

Universidad Pablo de Olavide, de Sevilla (UPO)

Universidad del País Vasco (UPV-EHU)

Universidad de La Rioja (UR)

Universidad Ramón Llull (URL)

Universidad de Valladolid (UVA).

Además, se han adherido al programa de doctorado los Institutos de Estructura de la Materia y de Química Física "Rocasolano" y de Óptica "Daza de Valdés" del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), existiendo el correspondiente convenio de colaboración entre el CSIC y la Universidad Complutense de Madrid. En total son 12 universidades p'ublicas españolas y 3 institutos del CSIC los que participan activamente en este programa de doctorado interuniversitario. Por otra parte, es importante señalar que las universidades e institutos del CSIC citados han constituido recientemente la Red Española de Excelencia en Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química (QUIMILASER), financiada por el Ministerio de Educación y Ciencia dentro de la convocatoria de ayudas para Acciones Complementarias. La Red QUIMILASER ha celebrado reuniones plenarias en Valladolid, Sevilla y Madrid en 2006 y 2007.

El convenio interuniversitario suscrito, firmado por los Rectores de las 12 universidades participantes con fecha 17 de marzo de 2005, se ciñe a la normativa legal del Real Decreto 778/1998 de 30 de abril que regula el Tercer Ciclo de estudios universitarios y a la de los respectivos Estatutos de las Universidades participantes. El convenio contempla el nombramiento de un coordinador por cada departamento universitario. El conjunto de coordinadores constituyen una Comisión coordinadora del programa que establece la programación y los aspectos académicos del mismo. Esta comisión se reúne al menos una vez al año para evaluar el funcionamiento del programa y proponer si fuera necesario los cambios en los contenidos y programas de las asignaturas del curso intensivo previsto cada curso académico o de la organización del mismo. En el convenio se establece que el programa está compuesto por un periodo de docencia y otro de investigación que se desarrollarán durante, al menos, dos años académicos. El periodo de docencia comprende un mínimo de 22 créditos. Los cursos y seminarios correspondientes al periodo docente se le exponen a los alumnos en un curso intentisivo a celebrar cada año, por turno rotativo, en una de las universidades participantes. Los alumnos realizan en sus universidades de origen unas prácticas adicionales, bajo la supervisión de un tutor local del programa de doctorado QUIMILÁSER. La evaluación de cada curso es común y simultánea en todas las universidades participantes y para todos los alumnos. La titulación exigida para la inscripción en el Programa de doctorado es la de Licenciado en Ciencias o Ingeniero. El convenio tiene una validez inicial de 5 años, prorrogable tácitamente por periodos iguales. Una copia del citado convenio se adjunta con el resto de documentación.

### **Objetivos generales**

- i) Promover la formación de nuevos investigadores en el campo de QUIMILÁSER, con el fin de potenciar la calidad de la investigación de los grupos que trabajan en este campo y la especialización de los futuros investigadores.
- ii) Promover mediante la movilidad interuniversitaria el intercambio y el conocimiento mutuo de los grupos de investigación, tanto a nivel de profesores como de estudiantes de doctorado. De esta forma se intenta que la formación de los futuros investigadores esté a cargo de profesores de reconocido prestigio en cada uno de los campos de la especialidad, aprovechando mejor sus capacidades formativas.
- iii) Fomentar las relaciones personales entre profesores y estudiantes y, sobre todo, entre los mismos estudiantes, con el fin de asegurar que los integrantes futuros de los grupos de investigación en QUIMILÁSER mantengan el impulso de la colaboración y la potenciación mutua.
- iv) Fomentar y favorecer las colaboraciones científicas y las relaciones humanas de alumnos y profesores de distintas universidades y comunidades autónomas.

### Antecedentes y Estructura del curso 2006/07

Como se ha indicado, la sede en la que se imparten intensivamente los cursos del primer año del bienio en que se estructura el programa es rotatoria entre las 12 universidades involucradas. Dicha sede es designada con más de un año de antelación en una de las reuniones que periódicamente se realizan entre los coordinadores de las distintas universidades. Las sedes designadas hasta la fecha han sido:

Quimilaser, 1ª edición (curso académico 2005-2006): Universidad de Castilla-La Mancha, campus de Ciudad Real.

Quimilaser, 2ª edición (curso académico 2006-2007): Universidad del País Vasco, campus de Lejona.

Quimilaser, 3ª edición (curso académico 2007-2008): Universidad Pablo de Olavide, de Sevilla

El número de estudiantes matriculados en el Programa de doctorado ha sido:

Quimilaser, 1ª edición: 15 alumnos matriculados. Prevista la defensa de 13 DEAs en junio/julio 2007.

Quimilaser, 2ª edición: 12 alumnos matriculados

Desde un punto de vista organizativo, un coordinador vela por la coherencia de todo el proceso, mientras que el responsable del programa en la universidad que acoge el curso garantiza la buena marcha de su organización. El Profesor Luis Bañares Morcillo, de la Universidad Complutense de Madrid, ha sido el primer coordinador del programa para los cursos 2005-2006 y 2006-2007. Para el curso 2007-2008 se ha designado al profesor Bruno Martínez Haya de la Universidad Pablo de Olavide coordinador del Programa de Doctorado. La intención es mantener esta estrategia en lo sucesivo: la coordinación del Programa de doctorado corresponderá a la universidad que actúe de sede del curso intensivo cada año.

### Estructura del curso

Las actividades de formación se dividen en las correspondientes al periodo de docencia y al periodo de investigación.

En lo que se refiere al <u>periodo de docencia</u>, el programa incluye un curso teórico intensivo, que se concentra durante cuatro semanas entre el primer y el segundo semestre académico de cada curso (enero-febrero), período que las diferentes universidades reservan para la realización de los exámenes finales de las materias del primer semestre de las correspondientes licenciaturas, y un curso práctico (experimentación), de dos semanas de duración y que se realiza dos meses después del curso teórico intensivo en un laboratorio de una de las universidades participantes distinta de la universidad de origen del alumno.

La docencia correspondiente al **curso teórico intensivo** se lleva a cabo mediante un sistema mixto que incluye i) lecciones magistrales, sobre un material didáctico previamente distribuido a los alumnos, y ii) ejercicios y trabajos prácticos, así como seminarios especializados relacionados con las materias impartidas. Esta parte intensiva es la que, de modo rotatorio, se desarrolla en una de las universidades participantes y que se coordina por el responsable local del programa. En este curso intensivo se le proponen al alumno una serie de ejercicios destinados a afianzar conceptos y a poner en práctica los conocimientos adquiridos. Una vez de vuelta a su universidad de origen, el alumno terminará de resolver los ejercicios y de realizar los trabajos prácticos propuestos bajo la supervisión del tutor de su universidad. Éste no sólo comprobará que el alumno realiza los ejercicios y trabajos sino que estará disponible para la resolución de cualquier duda que el alumno pueda plantear. A este fin dispondrá de instrucciones por parte de los profesores que imparten el curso sobre el nivel de exigencia en cada uno de los trabajos propuestos, y también sobre el nivel de dificultad que entrañan.

Los cursos intensivos de la 1ª y 2ª ediciones del Programa de Doctorado se celebraron en Ciudad Real, entre el 16 de enero y el 11 de febrero de 2006, y en Bilbao, entre el 15 de enero al 10 de febrero de 2007, respectivamente. El **curso teórico intensivo 2006-2007 se celebrará en la Universidad de Pablo de Olavide**, d**e Sevilla**.

Las asignaturas propuestas para el curso teórico intensivo son las mismas ya impartidas en lo cursos intensivos 2005-2006 y 2006-2007. Los correspondientes descriptores, objetivos pedagógicos y bibliografía relevante actualizada se presentan más abajo.

En lo que se refiere al <u>periodo de investigación</u>, cada una de las universidades del Programa ofrece toda una serie de trabajos de investigación dirigidos por los profesores participantes a los que los alumnos que hayan superado el periodo de docencia durante el curso 2006-2007 podrán acogerse. La relación de proyectos se detalla más abajo.

El periodo de docencia del Programa del Curso de Doctorado para el curso 2006-2007, que se mantendrá para el próximo curso 2007-2008, consta de las siguientes asignaturas:

Asignaturas Fundamentales (Obligatorias)

Fundamentos del Láser (3 créditos)

Materia y Radiación (3 créditos)

Espectroscopías Láser (3 créditos)

Experimentación Avanzada con Láser (4 créditos)

Asignaturas Optativas (todas de 3 créditos)

Técnicas Espectroscópicas e Instrumentación Láseres y Reacciones Químicas: Cinética y Dinámica Diagnóstico de la Materia con Láser Láseres Ultrarrápidos y Femtoquímica Procesado de Materiales con Láser

De estas asignaturas, cada alumno tiene que cursar los 13 créditos fundamentales y otros 9 créditos más de optativas (3 asignaturas de las 5 ofertadas).

Los descriptores, objetivos y bibliografía recomendada de las asignaturas se presentan a continuación:

### **FUNDAMENTOS DEL LÁSER (3 créditos)**

Principios físicos del láser. Inversión de población. Cavidad y modos característicos. Cinética de la radiación láser. Propiedades y características de la emisión láser. Divergencia y direccionalidad. Intensidad. Coherencia y monocromaticidad. Resolución temporal: vaciado de cavidad, conmutación rápida del factor Q (Q-switching) y acoplamiento de modos. Tipos de láseres. Láseres de gas. Láseres de estado sólido. Láseres de semidonductor. Láseres de colorante.

Objetivos pedagógicos: El curso pretende introducir al alumno en los principios físicos del funcionamiento del láser. Se inicia sentando los principios físicos: teoría de cuerpo negro e interacción radiación materia, que aunque al alumno se le dará una visión más amplia de estos temas en otras asignaturas, son fundamentales para el correcto entendimiento del resto del temario. Se presentan las ecuaciones cinéticas que describen el funcionamiento del láser, y que permiten calcular la potencia de bombeo, los distintos rendimientos (del bombeo, emisión ... etc) que rigen el funcionamiento del láser. Por último se describen los distintos tipos de cavidades y elementos ópticos que se emplean en los diferentes tipos de láseres.

#### **Bibliografía**

- [1] Y. R. Shen: The principles of nonlinear optics. Ed. Wiley Interscience, NY (1984).
- [2] M. O. Scully and M. S. Zubairy: Quantum optics. Ed. Cambridge University Press, Cambridge (2002).
- [3] C. C. Davis: Laser and electro-optics. Fundamentals and engineering. Ed. Cambridge University Press, Cambridge (1996).
- [4] A. Yarin: Quantum electro-optics. 2ª edición. Ed. Wiley & Sons Inc. NY (1975).
- [5] O. Svelto: Principles of lasers. 4ª edición. Plenum Press, NY (1998).

#### MATERIA Y RADIACIÓN (3 créditos)

Espectro electromagnético. Cuantización de la energía, estados discretos y espectroscopía. Tratamiento semiclásico de la interacción radiación-materia. Momentos multipolares. Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Tratamiento perturbativo de transiciones multifotónicas. Velocidades de transición: absorción y emisión estimulada, emisión espontánea. Aproximación de dipolo eléctrico. Reglas de selección. Coeficientes de Einstein. Tiempo de vida. Intensidades de línea y fuerza del oscilador. Anchura de las líneas espectrales. Propiedades de coherencia de la radiación. Funciones de autocorrelación e información espectroscópica. Origen de la respuesta no lineal. Catálogo de efectos ópticos no lineales. Generación de armónicos. Birrefringencia en cristales. Ajuste de fase. Doblado de frecuencias. Mezcla de frecuencias. Osciladores y amplificadores paramétricos. Conjugación de fase. Efecto Kerr. Auto focalización, auto guiado, auto modulación de fase. Trino de frecuencias. Solitones ópticos. Otras aplicaciones.

Objetivos pedagógicos: Se prentende que los alumnos aprendan los fundamentos básicos de los mecanismos de interacción de la radiación con la materia necesarios para la comprensión y el desarrollo de las aplicaciones del láser a la Química. El objetivo general de la asignatura es también dar una visión general de la Optica no Lineal. Este es un campo que ha experimentado avances importantes en los últimos años y que ha demostrado un considerable potencial en el desarrollo de aplicaciones tecnológicas incluyendo los progresos en la generación de láseres de pulso ultracortos (atosegundos). En el curso se abordarán los conceptos básicos, generación de armónicos y mezcla de frecuencias, conjugación de fase, autoenfocado y autoguiado de pulso láser, solitones ópticos y trino de frecuencias, junto con algunas aplicaciones avanzadas de la Óptica no Lineal como generación de armónicos en superficies, microscopías ópticas no lineales, técnicas de fluorescencia multifotonicas, frequency comb, etc.

#### Bibliografía

- [1] Nonlinear Optics, Robert W. Boyd, Academic Press, 2002.
- [2] Physics of Nonlinear Optics, Guang S He, Song H Liu, World Scientific 1999.
- [3] P. Meystre and M. Sargent III, Elements of quantum optics (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [4] Espectroscopía. A. Requena y J. Zúñiga, Pearson Education, Prentice Hall, Madrid 2004.
- [5] Fundamentals of Molecular Spectroscopy, W. S. Struve, Wiley, Nueva York, 1989.
- [6] Molecules and Radiation, J. I. Steinfeld, The MIT Press, Cambridge, 1989.
- [7] Molecular Spectroscopy, J. L. McHale, Prentice Hall, New Jersey, 1999.
- [8] Light. Vol 1, Waves, Photon, Atoms, H. Haken, North-Holland, Elsevier, Amsterdam, 1986.
- [9] Light. Vol 2, Laser Light Dynamics, H. Haken, North-Holland, Elsevier, Amsterdam, 1986.
- [10] The Quantum Theory of Light, R. Loudon, Oxford University Press, Oxford. 1983.
- [11] Elements of Quantum Optics, P. Meystre y M. Sargen III, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [12] Dynamics during Spectroscopy Transitions, E. Lippert y J. D. Macomber, Springer-Verlag, Berlín, 1995.
- [13] Quantum Mechanics in Chemistry, G. C. Schatz y M. A. Ratner, Dover, Nueva York, 2002.

### ESPECTROSCOPÍAS LÁSER (3 créditos)

Espectroscopía de absorción y de emisión. Absorción intracavidad y *cavity ring-down*. Espectroscopía de fluorescencia inducida por láser. Espectroscopía optogalvánica. Espectroscopía en haces moleculares. Espectroscopía de saturación. Espectroscopía de polarización. Espectroscopía multifotónica. Técnicas de doble resonancia. Espectroscopías Raman láser, lineal y no lineal. Espectroscopía Raman aumentada en superficies. Microscopía Raman. Espectroscopía de ionización multifotónica resonante (REMPI). Espectroscopía resuelta en el tiempo. Enfriamiento atómico con láser (condensación Bose-Einstein). Detección de moléculas individuales.

### Objetivos pedagógicos:

Esta asignatura está orientada a la adquisición por parte del alumno de los conceptos e ideas generales de las diferentes técnicas básicas que pueden aplicarse en el estudio de procesos químico-físicos mediante la utilización de la espectroscopia láser. La gran variedad de técnicas (absorción, emisión espectroscopia lineal o no lineal) se describen a lo largo del curso, indicando cuales son las principales ventajas e inconvenientes de estas técnicas, así como las principales aplicaciones de cada una de ellas en situaciones o experimentos específicos.

### En este curso se pretende

- Resaltar el paper del láser en la espectroscopía
- Desarrollar competencia en nuevas ideas y técnicas basadas en el láser
- Resaltar los avances actuales en instrumentación y técnicas láser en la espectroscopía.
- Identificar procedimientos experimentales adecuados y métodos de espectroscopía láser con aplicaciones específicas.

### Superado el curso el alumno debería:

- Comprender los principios físicos y químicos del láser.
- Conocer los diferentes tipos de láseres y sus principales características.
- Conocer toda una serie de técnicas basadas en instrumentación láser para estudiar sistemas de interés químico.
- Conocer los principios de la óptica no lineal y su aplicación a la espectroscopías Raman y multifotónica.

Identificar métodos láser con resolución temporal y espacial que permitan aplicaciones como la fabricación de condensados de Bose-Einstein y espectroscopía de moléculas individuales.

#### Bibliografía

- [1] Laser Spectroscopy, Basic Concepts and Instrumentation W. Demtröder, 3<sup>rd</sup> Edition, Springer, Berlin 2003
- [2] High resolution Spectroscopy, J.M. Hollas, 2<sup>nd</sup> Edition, John Wiley & Sons, NY 1998
- [3] Lasers in Chemistry, 3<sup>rd</sup> Edition, D.L. Andrews, Springer-Verlag, Berlin 1997.
- [4] *Molecules and Radiation,* J.I. Steinfeld, 2<sup>nd</sup> Edition, Plenum Press, NY 1985 [5] *Molecular Spectroscopy*, J. L. McHale, Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 1999.
- [6] Fundamentals of Molecular Spectroscopy, W. S. Struve, John Wiley & Sons, 1989.
- [7] Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules, J. Brown and A. Carrington, Cambridge U. P., 2003
- [8] An Introduction to Laser Spectroscopy, Andrews, D. L. and A. A. Demidov (editors), Springer Verlag, 2002.

### EXPERIMENTACIÓN AVANZADA CON LÁSER (4 créditos)

Realización de una estancia de dos semanas de duración, a razón de 4 horas diarias de lunes a viernes, en un laboratorio de una de las universidades participantes distinta de la universidad de origen del alumno. Aprendizaje de técnicas experimentales y realización de un proyecto experimental corto. Los alumnos eligen entre las distintas ofertas realizadas por las distintas Universidades o el CSIC con un tema de trabajo concreto y bajo la dirección del tutor en la universidad donde se realiza el curso. La asignatura se impartirá dos meses después de finalizar el curso teórico intensivo.

### Objetivos pedagógicos:

Esta asignatura está orientada al aprendizaje práctico de técnicas láser y de espectroscopía avanzada distintas a las disponibles en su entorno de investigación. Dada la amplia variedad de grupos y técnicas experimentales de las universidades e institutos del CSIC participantes en el Programa, esta experiencia puede ser única para los alumnos, que adquirirían de primera mano conocimientos experimentales sobre distintas aplicaciones del láser a diversos problemas de la Química. Consideramos que el que una parte de la formación del alumno en este Programa sea puramente práctica (experimentación) redunda claramente en la calidad del Programa de doctorado.

La bibliografía será proporcionada con suficiente antelación por el coordinador de la universidad receptora y consistirá primordialmente en artículos de investigación de reciente publicación relacionados con el proyecto experimental a abordar por el estudiante.

### TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS E INSTRUMENTACIÓN (3 créditos)

Espectrógrafos y monocromadores. Interferómetros. Técnicas para la medida de la longitud de onda. Detectores de luz. Fotodiodos y fotomultiplicadores. Conteo de fotones. Detectores de iones y electrones. Técnicas de imagen de iones y electrones. Intensificadores de imagen. Sistemas electrónicos de detección. Amplificadores lock-in. Integradores Boxcar. Adquisición y control digital de datos. Instrumentación óptica: polarizadores, retardadores, cristales no lineales. Espectroscopía de Microondas. Espectroscopía Infrarroja por transformada de Fourier. Generación de chorros supersónicos y haces moleculares. Generación de plasmas luminiscentes.

### Objetivos pedagógicos:

Esta asignatura está orientada a la adquisición por parte del alumno de los conceptos e ideas generales sobre las diferentes técnicas básicas e instrumentación empleadas en espectroscopía y, en particular, en las técnicas de alta resolución como las espectroscopías láser, de microondas, y FTIR. Se hace un repaso pormenorizado por todo el conjunto de técnicas e instrumentación utilizada y desarrollada para hacer espectroscopía con sus diversas aplicaciones en Química. Entre las técnicas estudiadas se incluyen la generación de chorros supersónicos, haces moleculares y plasmas luminiscentes. Una vez finalizado el curso el alumno debería haber alcanzado un buen grado de conocimiento de las técnicas e instrumentación útiles para el diseño y puesta en funcionamiento de sus propios experimentos en espectroscopía.

#### Bibliografía

- [1] Laser Spectroscopy: Basic Concepts and Instrumentation. W. Demtroder. Springer-Verlag, Berlin 2002.
- [2] Molecular Physics: Theoretical Principles and Experimental Methods. W. Demtroder. Wiley-VCH, N.Y. 2006.
- [3] A Guide to Lasers in Chemistry, G. R. v. Hecke, K.K. Karukstis, Jones and Bartlett, London.1998.
- [4] Applied Laser Spectroscopy: Techniques, Instrumentation, and Applications. D. L. Andrews, Wiley, N. Y.1992.
- [5] Optical Spectroscopy: Methods and Instrumentations. N. V. Tkachenko, Elsevier, Amsterdam, 2006.
- [6] Fourier Transform in Spectroscopy, J. Kauppinen, J. Partanen, Wiley, N. Y., 2001
- [7] Modern Aspects of Microwave Spectroscopy, G. W. Chantry, ed., Academic Press, London 1979.
- [8] Jet Spectroscopy and Molecular Dynamics, editado por J. M. Hollas y D. Phillips, Blackie, Edinburgh,1995
- [9] Atomic and Molecular Beam Methods, vol I, editado por G. Scoles, Oxford University Press, Oxford 1988.
- [10] Atomic and Molecular Beam Methods, vol II, editado por G. Scoles, Oxford University Press, New York 1992.
- [11] Artículos de investigación específicos, extraídos de revistas especializadas, donde se describen en detalle las distintas técnicas estudiadas en el curso.

### LÁSERES Y REACCIONES QUÍMICAS: CINÉTICA Y DINÁMICA (3 créditos)

Química inducida por láser. Detección de productos de una reacción con métodos láser: espectroscopía de absorción, fluorescencia inducida por láser, ionización multifotónica resonante. Método de bombeo y sonda. Aplicación a la cinética de reacciones químicas. Fotólisis de destello por láser. Fotodisociación. Métodos de espectroscopía láser aplicados al estudio de la dinámica de reacciones. Haces moleculares. Colisiones moleculares. Agregación molecular. Cinética de plasmas. Métodos láser de preparación de estados cuánticos moleculares. Determinación de poblaciones de estados nacientes. Determinación de secciones eficaces diferenciales. Método de cartografía de velocidades por imagen de iones.

Objetivos pedagógicos: Profundizar y extender los conocimientos adquiridos en la licenciatura en los campos de la Cinética Química, la Dinámica de Reacciones Químicas, y campos afines. Describir y analizar las técnicas experimentales modernas utilizadas para la dilucidación de mecanismos de reacción y la determinación de constantes de cinéticas. Describir y analizar las técnicas experimentales empleadas en los estudios experimentales de dinámicas y estereodinámica de procesos de fotodisociación y reacciones bimoleculares en fase gas. Estudiar la aplicación de estas técnicas a reacciones de interés en Química Atmosférica, Química de la Combustión, Astroquímica o Fotoquímica. Tras completar este modulo el alumno:

- Identificará las técnicas experimentales más adecuadas para un estudio cinético atendiendo a factores como la velocidad de la reacción, la naturaleza de los reactivos y productos, y otros factores.
- Evaluará la adecuación de distintas las técnicas experimentales utilizadas para la generación o preparación de reactivos en estudios de cinética química y dinámica de reacciones.
- Evaluará críticamente la adecuación de distintas técnicas experimentales utilizadas para la detección de productos en estudios de cinética.
- Evaluará la idoneidad y limitaciones de las técnicas experimentales utilizadas para la caracterización de las propiedades de productos en estudios de dinámica y estereodinámica de reacciones químicas.
- Utilizará técnicas de análisis y simulación básicas para el análisis de resultados experimentales en un estudio cinético y dinámico.

#### **Bibliografía**

- [1] J. Ī. Steinfeld, J. S. Francisco, W. L. Hase, *Chemical Kinetics and Dynamics 2nd ed.*, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 1999.
- [2] Paul L. Houston, Chemical Kinetics and Reaction Dynamics, Boston, McGraw-Hill, 2001
- [3] R. D. Levine and R. B. Bernstein, *Molecular Reaction Dynamics and Chemical Reactivity*, Oxford, Oxford University Press, 1987.
- [4] R. D. Levine, Molecular Reaction Dynamics, Cambridge, Cambridge University Press, 2005
- [5] A. González Ureña, Cinética Química, Síntesis, Madrid, 2001
- [6] Finlayson-Pitts, B. J. y Pitts, J. N. Jr., Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere: Theory, Experiments and Aplications, Academic Press, 2000.
- [7] Jacob, D. J., Introduction to atmospheric chemistry, Princeton University Press, New Jersey, 1999.
- [8] B. J. Whitaker, *Imaging in Molecular Dynamics. Technology and Applications*, Cambridge, Cambridge University Press, 2003.
- [9] A. J. Alexander and R. N. Zare, *Anatomy of Elementary Chemical Reactions*, Journal of Chemical Education, 75, 1105 –1118, 1998.
- [10] P. L. Houston, Correlated Photochemistry: The Legacy of Johann Christian Doppler, Acc. Chem. Res., 1989,22, 309-314.
- [11] A. J. Alexander, M. Brouard, K. S. Kalogerakis and J. P. Simons, *Chemistry with a sense of direction—the stereodynamics of bimolecular reactions*, Chemical Society Reviews, 1998, 27, 405-415
- [12] H. Sato, Photodissociation of Simple Molecules in the Gas Phase, Chem. Rev., 2001, 101, 2687-2725
- [13] M. Brouard, P. O'Keeffe, C. Wallance, *Product State Resolved of Elementary Reactions*, J. Phys. Chem. A, 2002, 106, 3629 -3641
- [14] M. D. Wheeler, S. M. Newman, A. J. Orr-Ewing, *Cavity Ring Down Spectroscopy*, J. Chem. Soc. Faraday Trans., 1988, 94, 337-351.
- [15] M. N. R. Ashfold et al., Imaging the dynamics of gas phase reactions, Phys. Chem. Chem. Phys., 2006, 8, 26–53.

### LÁSERES ULTRARRÁPIDOS Y FEMTOQUÍMICA (3 créditos)

Pulsos de luz: características generales. Propagación de pulsos de luz en medios transparentes. Óptica no lineal. Generación de segundo armónico. Interacciones paramétricas. Índice de refracción no líneal. Efecto lente de Kerr. Automodulación de fase. Absorbentes saturables. Métodos para la generación de pulsos láser ultracortos: acoplamiento de modos. Amplificación de pulsos láser ultracortos. Caracterización y diagnóstico de los pulsos. Compresión y modelado de pulsos láser ultracortos. Técnicas básicas con pulsos ultracortos: bombeo y sonda, fluorescencia inducida por láser, ionización multifotónica. Espectroscopía de absorción de transitorios. Espectroscopía de fluorescencia convertida. Aplicaciones generales de la Femtoquímica: espectroscopía del estado de transición. Reacciones de transferencia electrónica y protónica en fase gas y en disolución. Femtobiología: dinámica de los procesos primarios en fotosíntesis y en la visión. Control cuántico de las reacciones químicas.

### Objetivos pedagógicos:

- Proporcionar conocimientos básicos de los fenómenos basados en la interacción de pulsos láser ultrarrápidos con átomos y moléculas.
- Destacar los avances más actuales en técnicas de pulsos láser.
- Desarrollar competencia en los métodos teóricos desarrollados para predecir y controlar los movimientos moleculares con pulsos láser.

Una vez finalizado el curso el alumno debería:

- Comprender los principios básicos de la interacción de pulsos láser con átomos y moléculas.
- Conocer las técnicas con aplicaciones en Química, basadas en pulsos láser.
- Aplicar los métodos basados en pulsos láser y las técnicas de control de procesos químicos.

#### Bibliografía

- [1] Jean-Claude Diels y Wolfgang Rudolph, *Ultrashort laser pulse phenomena. Fundamentals, techniques, and applications on a femtosecond time scale.* Academic Press, Nueva York, 1996.
- [2] Femtosecond laser pulses, C. Rulliere (Ed), Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [3] P.M.W. French, The generation of ultrashort laser pulses, Rep. Prog. Phys., 58, 169 (1995).
- [4] A. H. Zewail, La formación de las moléculas, Investigación y Ciencia, Febrero 1991.
- [5] A. H. Zewail, Laser Femtochemistry, Science, 242, 1645 (1988).
- [6] M. Gruebele and A.H. Zewail, Ultrafast Reaction Dynamics, Physics Today, May 1990, p.24-33.
- [7] A.H. Zewail and R. B. Bernstein, *Real-time Laser Femtochemistry*, Chemical and Engineering News, November 7, 1988, p. 24-43.
- [8] M.J. Rosker, M. Dantus and A. H. Zewail, *Femtosecond real-time probing of reactions. I. The technique*, J. Chem. Phys., 89, 6113 (1988).
- [9] M. Dantus, M.J. Rosker and A.H. Zewail, Femtosecond real-time probing of reactions. II. The dissociation reaction of ICN, J. Chem. Phys., 89, 6113 (1988).
- [10] A.H. Zewail, Femtochemistry: atomic-scale dynamics of the chemical bond using ultrafast lasers (Nobel Lecture), Angew. Chem. Int. Ed., 39, 2587 (2000).
- [11] Femtochemistry and Femtobiology: ultrafast reaction dynamics at atomic-scale resolution. Villy Sundström Ed., Imperial College Press, 1997.
- [12] Introduction to Quantum mechanics: A time dependent perspective, D. Tannor, University Sci. Books, Sausalito CA 2005.
- [13] Nobel Symposyum in Femtochemistry, V. Sundström (ed.) . Imperial College Press, London 1996
- [14] Principles of Quantum Control of Molecular Processes, M. Shapiro and P. Brumer, Wiley, NY 2003.
- [15] Optimal Control of Molecular Dynamics, S.A. Rice and M Zhao, Wiley, NY 2000.

### **DIAGNÓSTICO DE LA MATERIA POR LÁSER (3 créditos)**

Microanálisis de materiales por ablación/desorción láser. Régimen de interacción de elevada fluencia: LIBS/LIPS y LA ICP. Régimen de interacción de desorción/ablación. Régimen de interacción de baja fluencia: MALDI. Régimen de interacción de alta intensidad (pulsos ultracortos). Procesos en la pluma de ablación. Composición de la pluma. Dinámica de la pluma. Diagnóstico de chorros supersónicos. Fotoquímica láser de polímeros dopados: aplicación a microanálisis y procesado. Microanálisis de materiales por técnicas espectroscópicas y técnicas láser no ablativas. Técnicas para el estudio de efectos láser sobre tejidos biológicos. Espectroscopía de procesos de combustión. Determinación de velocidades de flujo en gases y líquidos.

#### Objetivos pedagógicos:

- Conocer las aplicaciones y uso de las técnicas láser para el análisis de materiales, superficies e interfases.
- Ubicar las técnicas descritas en el contexto del panorama actual de la instrumentación para análisis de materiales, superficies e interfases.
- Desarrollar un sentido crítico sobre el papel de las técnicas láser: descripción de ventajas y desventajas.
- Sistematizar las técnicas láser en base al régimen energético en el que se operen: técnicas de baja (desorción), media (desorción/ionización) y alta fluencia (ablación).
- Describir los fenómenos de interacción láser-materia haciendo uso de de la tecnología de láseres de pulsos ultracortos y su aplicación en análisis de materiales.

### Bibliografía básica

- [1] D.M. Lubman, Lasers and Mass Spectrometry, 1991, Oxford University Press.
- [2] G.R. Van Hecke and K.K. Karukstis, A guide to lasers in chemistry, 1998, Jones and Bartlett.
- [3] W. Demtroder, Laser spectroscopy: basic concepts and instrumentation, 2002, Springer.
- [4] Artículos de investigación específicos de las técnicas detalladas durante el curso extraídas de Applied Physics A/B; Journal of the American Chemical Society; Journal of Analytical Atomic Spetrometry; Journal of the American Society for Mass Spectrmetry; Analytical Chemistry; Journal of Physical Chemstry B.

### PROCESADO DE MATERIALES CON LÁSER (3 créditos)

Fenómenos de interacción. Tratamientos superficiales. Clasificación de materiales. Mecanismos de ablación. Parámetros de procesado. Consideraciones tecnológicas. Tipos de sistemas. Manipulación del haz láser. Técnicas ópticas. Aplicaciones industriales (Corte, Marcado, Perforado, Soldadura, Temple, Recubrimientos superficiales). Otras aplicaciones (Holografía, Metrología, Telecomunicaciones, Fusión inercial). Técnicas de monitorización y control. Modelado. Comparación con tecnologías alternativas. Aspectos de seguridad. Aspectos económicos.

Objetivos pedagógicos: El objetivo de esta asignatura es efectuar un barrido de las diferentes aplicaciones en las que se utilizan los láseres. Para ello, se hace una descripción de los distintos fenómenos físicos que se producen cuando un haz láser incide sobre un material. En un gran número de aplicaciones donde se utilizan los láseres de potencia, la finalidad es obtener un procesado adecuado del material mediante un control de todos los parámetros que influyen. Es por tanto necesario aportar una serie de consideraciones sobre las propiedades de los materiales, de la instrumentación que se emplea en un sistema de irradiación, de las distintas técnicas ópticas, de las tecnologías alternativas y de otros aspectos como los de seguridad.

#### <u>Bibliografía</u>

- [1] Laser-Beam Interactions with Materials, 2nd Ed., M. Von Allmen, Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [2] Laser Processing of Thin Films and Microstructures, I.W. Boyd, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [3] Laser Processing and Chemistry, D. Bäuerle, Springer-Verlag, Berlin, 2001.

- [4] Laser Physics and Applications, Landolt-Börnstein series on advanced materials and technologies vol. VIII/1C (Laser Applications), Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- [5] A. M. Prokhorov, V. I. Konov, I. Ursu, I.N. Mihailescu, Laser Heating of Metals, Hilger (1990).
- [6] S. M. Metev, V. P. Veiko, Laser-Assisted Microtechnology 2nd Edition, Springer (1998).
- [7] D. Schuöker, Handbook of the Eurolaser Academy, Chapman & Hall (1998).
- [8] J. F. Ready, Industrial Applications of Lasers 2nd Edition, Academic Press, San Diego (1997).
- [9] W. Duley, Laser Welding, Wiley Interscience (1999).
- [10] J. Powell, CO<sub>2</sub> Laser Cutting 2nd Edition, Springer (1998).
- [11] J. Perriere, Recent Advances in Laser Processing of Materials, EMRS Books Series, Elsevier (2006).

### Programación Docente del curso intensivo

A continuación se incluye la **programación docente del curso intensivo del curso 2006-2007**, donde se especifica el horario de impartición de las distintas asignaturas. Las mañanas se dedicaron a lecciones magistrales y las tardes a plantear y resolver ejercicios y trabajos prácticos y presentación de seminarios especializados. De cada asignatura del curso teórico intensivo se imparten 18 horas. El resto de horas hasta completar los 3 créditos, descontando las horas correspondientes a los seminarios especializados del curso intensivo, corresponden a trabajo personal del alumno una vez que regresa a su lugar de origen relacionado con la resolución de los ejercicios y la elaboración de los trabajos propuestos. **La programación prevista para el curso 2007-2008 seguirá un esquema similar**.

### Doctorado Interuniversitario en Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química Horarios Curso 2006-2007

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco, Campus de Lejona (Bilbao)

#### Primera semana (15-1-2007 a 20-1-2007)

Horario	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábado
	15/01/07	16/01/07	17/01/07	18/01/07	19/01/07	20/01/07
9:00 a 10:00	Fundamentos del Láser		Fundamentos del Láser	Fundamentos del Láser	Fundamentos del Láser	Fundamentos del Láser
10:00 a 11:00	Materia y Radiación	,	Materia y Radiación	Materia y Radiación	Materia y Radiación	Materia y Radiación
11:00 a 11:15	Descanso	descanso	Descanso	descanso	descanso	descanso
11:15 a 12:15	Espectroscopía Láser	•	Espectroscopía Láser	Espectroscopía Láser	Espectroscopía Láser	Espectroscopía Láser
12:15 a 13:15			Técnicas e Ins- trumentación	Técnicas e Instrumentación		Técnicas e Ins- trumentación
13:15 a 14:30	comida	comida	comida	comida	comida	
14:30 a 15:30	Fundamentos del Láser (seminario)		Fundamentos del Láser (seminario)	Fundamentos del Láser (seminario)	Seminario especializado	
15:30 a 16:30	Materia y Radiación (seminario)		Materia y Radiación (seminario)	Espectroscopía Seminario Láser especializado (seminario)		
16:30 a 16:45	descanso	descanso	descanso	descanso	descanso	
16:45 a 17:45	trumentación		Técnicas e Ins- trumentación (seminario)	Técnicas e Ins- trumentación (seminario)		

### Segunda semana (22-1-2007 a 27-1-2007)

Horario	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábado
	22/01/07	23/01/07	24/01/07	25/01/07	26/01/07	27/01/07
9:00 a 10:00	Fundamentos del Láser		Fundamentos del Láser		Fundamentos del Láser	Fundamentos del Láser
10:00 a 11:00	Radiación	,	Materia y Radiación	,	,	Materia y Radiación
11:00 a 11:15	descanso	descanso	Descanso	descanso	descanso	descanso
11:15 a 12:15	Espectroscopía Láser	Espectroscopía Láser	Espectroscopía Láser	I	Espectroscopía Láser	Espectroscopía Láser
	Técnicas e Ins- trumentación		Técnicas e Ins- trumentación			Técnicas e Ins- trumentación

13:15 a 14:30	comida	comida	comida	comida	comida	
14:30 a 15:30	Fundamentos del Láser (seminario)	Espectroscopía Láser (seminario)			Seminario especializado	
15:30 a 16:30	Materia y Radiación (seminario)	Espectroscopía Láser (seminario)	Materia y Radiación (seminario)	Espectroscopía Láser (seminario)	Seminario especializado	
16:30 a 16:45	descanso	descanso	descanso	descanso	descanso	
16:45 a 17:45	Técnicas e Ins- trumentación (seminario)	Materia y Radiación (seminario)		Técnicas e Ins- trumentación (seminario)		

Tercera semana (29-1-2007 a 3-2-2007)

Horario	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábado	
	29/01/07	30/01/07	31/01/07	1/02/07	2/02/07	3/02/07	
9:00 a 10:00	Láseres y Reacciones	Láseres y Reacciones	Láseres y Reacciones	Láseres y Láseres y Reacciones Reacciones		Láseres y Reacciones	
10:00 a 11:00	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	
11:00 a 11:15	descanso	descanso	Descanso	descanso	descanso	descanso	
11:15 a 12:15	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	
12:15 a 13:15	Procesado de Materiales	Procesado de Materiales	Procesado de Materiales	Procesado de Materiales			
13:15 a 14:30	comida	comida	comida	comida	comida		
14:30 a 15:30	Láseres y Reacciones (seminario)	Láseres Ultrarrápidos (seminario)	Láseres y Reacciones (seminario)	Láseres y Reacciones (seminario)	Seminario especializado		
15:30 a 16:30	Diagnóstico con Láser (seminario)	Láseres Ultrarrápidos (seminario)	Diagnóstico con Láser (seminario)	Láseres Ultrarrápidos (seminario)	Láseres Seminario Ultrarrápidos especializado		
16:30 a 16:45	descanso	descanso	descanso	descanso	descanso		
16:45 a 17:45	Procesado de Materiales (seminario)	Diagnóstico con Láser (seminario)	Procesado de Materiales (seminario)	Procesado de Materiales (seminario)			

Cuarta semana (5-2-2007 a 10-2-2007)

Horario	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábado
	5/02/07	6/02/07	7/02/07	8/02/07	9/02/07	10/02/07
9:00 a 10:00	Láseres y Reacciones	Láseres y Reacciones	Láseres y Reacciones	Láseres y Reacciones Reacciones		Láseres y Reacciones
10:00 a 11:00	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser	Diagnóstico con Láser
11:00 a 11:15	descanso	descanso	Descanso	descanso	descanso	descanso
11:15 a 12:15	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos	Láseres Ultrarrápidos
12:15 a 13:15	Procesado de Materiales	Procesado de Materiales	Procesado de Materiales	Procesado de Materiales	Procesado de Materiales	Procesado de Materiales
13:15 a 14:30	comida	comida	comida	comida	comida	
14:30 a 15:30	Láseres y Reacciones (seminario)	Láseres Ultrarrápidos (seminario)	Láseres y Reacciones (seminario)	Láseres y Reacciones (seminario)	Seminario especializado	
15:30 a 16:30	Diagnóstico con Láser (seminario)	Láseres Ultrarrápidos (seminario)	Diagnóstico con Láser (seminario)	Láseres Seminario Ultrarrápidos (seminario)		
16:30 a 16:45	descanso	descanso	descanso	descanso	descanso	
16:45 a 17:45	Procesado de Materiales (seminario)	Diagnóstico con Láser (seminario)	Procesado de Materiales (seminario)	Procesado de Materiales (seminario)		

### **Profesorado**

El profesorado encargado de impartir las distintas asignaturas en el curso intensivo 2007-2008 será esencialmente el mismo que en el curso 2006-2007 en el que fue concedida la Mención de Calidad:

Asignaturas del Curso Teórico Intensivo	Créditos	Relación de profesores participantes
Asignaturas obligatorias	•	
Fundamentos del Láser	3	Dr. José Andrés Fernández González (UPV-EHU)
		Dr. Bruno Martínez Haya (UPO)
Materia y Radiación	3	Dr. José Zúñiga (UMU)
		Dr. Marta Castillejo (CSIC)
Espectroscopías Láser	3	Dr. José Luis Alonso (UVA)
		Dr. Juan Enrique Verdasco Costales (UCM)
		Dr. Fernando Castaño (UPV-EHU)
Asignaturas optativas		
Técnicas Espectroscópicas e Instrumentación	3	Dr. Juan Carlos López Alonso (UVA)
		Dr. Begoña García Ruíz (UBU)
		Dr. Fernando Marquez López (UJA)
Láseres y Reacciones Químicas: Cinética y	3	Dr. José Albaladejo Pérez (UCLM)
Dinámica		Dr. Francisco Javier Aoiz Moleres (UCM)
		Dr. Pedro Alberto Enriquez Palma (UR)
Láseres Ultrarrápidos y Femtoquímica	3	Dr. Luis Bañares Morcillo (UCM)
		Dra. Rebeca de Nalda Mínguez (CSIC)
		Dr. Asier Longarte Aldama (UPV-EHU)
Diagnóstico de la Materia por Láser	3	Dr. José Miguel Vadillo (UMA)
		Dr. Margarita Martín Muñoz (CSIC)
		Dr. Salvador Montero (CSIC)
Procesado de Materiales con Láser	3	Dr. Ginés Nicolás Costa (UDC)
		Dr. Juan Carlos Otero Rodríguez de Molina (UMA)
		Dr. José Gonzalo de los Reyes (CSIC)

#### Relación completa de Profesores involucrados en el Programa

Los profesores relacionados a continuación participan como docentes en alguna o en varias de las actividades formativas del programa: asignaturas y seminarios especializados del curso intensivo, en la asignatura "Experimentación Avanzada con Láser", o como tutores de proyectos de investigación conducentes al DEA. Estos mismos profesores constituyen los potenciales Directores de las Tesis Doctorales que se realicen en el marco del Programa de Doctorado.

### UBU

Dra. Begoña García Ruiz, Profesor Titular de Universidad Dr. José María Leal Villalba, Catedrático de Universidad

#### **UCLM**

Dr. José Albaladejo Pérez, Catedrático de Universidad

Dr. Alfonso Aranda Rubio, Profesor Titular de Universidad

Dr. Bernabé Ballesteros Ruiz, Profesor Contratado Doctor

Dra. Beatriz Cabañas Galán, Catedrática de Universidad

Dra. Yolanda Díaz de Mera Morales, Profesor Contratado Doctor

Dra. Elena Jiménez Martínez, Profesora Contratada Doctor

Dra. Pilar Martín Porrero, Profesora Titular de Universidad

Dr. Alberto Notario Molina, Profesor Titular de Universidad

Dr. Ana Ma Rodríguez Cervantes, Profesora Contratada Doctor

Dra. Diana Rodríguez Rodríguez, Profesora Contratada Doctor

Dr. Sagrario Salgado Muñoz, Profesora Titular de Universidad

#### **UCM**

Dr. Francisco Javier Aoiz Moleres, Catedrático de Universidad

Dr. Jesús Santamaría Antonio, Catedrático de Universidad

Dr. Emilio Aicart Sospedra, Catedrático de Universidad

Dr. Luis Bañares Morcillo, Profesor Titular de Universidad

Dr. Juan Enrique Verdasco Costales, Profesor Titular de Universidad

Dr. Pedro Gómez Calzada, Profesor Titular de Universidad

Dra. Marta Menéndez Carbajosa, Profesora Titular de Universidad

Dr. Ignacio Solá Reija, Profesor Contratado Doctor

Dr. Jesús Fernández Castillo, Profesor Contratado Doctor

#### **UDC**

Dr. Ginés Nicolás Costa, Profesor Titular de Universidad

Dr. Armando Yáñez Casal, Profesor Titular de Universidad

Dra. María de la Paz Mateo Orenes, Investigadora Parga Pondal

Dra. María José Tobar Vidal, Investigadora Ramón y Cajal

#### **UJA**

Dr. Juan Jesús López González, Profesor Titular de Universidad

Dr. Fernando Márquez López, Profesor Titular de Universidad

#### **UMA**

Dr. Juan Carlos Otero Fernández de Molina, Catedrático de Universidad

Dr. José Javier Laserna Vázquez, Catedrático de Universidad

Dr. José Miguel Vadillo Pérez, Profesor Contratado Doctor

#### UMU

Dr. Alberto Reguena Rodríguez, Catedrático de Universidad

Dr. José Zúñiga Román, Profesor Titular de Universidad

Dr. Adolfo Bastida Pascual, Profesor Titular de Universidad

#### LIPO

Dr. Bruno Martínez Haya, Profesor Titular de Universidad

Dr. Juan Antonio Anta Montalvo, Profesor Titular de Universidad

Dra. María del Pilar Ortiz Calderón, Profesora Asociada LOU

#### **UPV-EHU**

Dr. Fernando Castaño Almendral, Catedrático de Universidad

Dr. Francisco Basterretxea Elguezabal, Profesor Titular de Universidad

Dr. José Andrés Fernández González, Investigador Ramón y Cajal

Dr. Asier Longarte Aldama, Investigador Ramón y Cajal

#### UR

Dr. Pedro Alberto Enríquez Palma, Profesor Titular de Universidad Dra. María Pilar Puyuelo García, Profesora Titular de Universidad

#### URL

Dr. Santiago Nonell Marrugat, Catedrático de Universidad

#### UVA

Dr. José Luis Alonso Hernández, Catedrático de Universidad

Dr. Juan Carlos López Alonso, Catedrático de Universidad

Dr. Alberto Lesarri Gómez, Profesor Titular de Universidad

Dra. Susana Blanco Rodríguez, Profesora Contratada Doctor

Dra. María Eugenia Sanz González, Investigadora Ramón y Cajal

#### CSIC

### Instituto de Estructura de la Materia (Madrid)

Dr. Salvador Montero Martín, Profesor de Investigación

Dr. José María Fernández Sánchez, Científico Titular

Dr. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga, Investigador Científico

Dra. Isabel Tanarro Onrubia, Investigador Científico

Dr. José Luis Doménech Martínez, Čientífico Titular

### Instituto de Química Física Rocasolano (Madrid)

Dra. Marta Castillejo Striano, Investigador Científico

Dra. Margarita Martín Muñoz, Investigador Científico

Dra. Rebeca de Nalda Mínguez, Científico Titular

### Instituto de Óptica (Madrid)

Dr. Carmen N. Afonso Rodriguez, Profesor de Investigación

Dr. José Gonzalo de los Reyes, Investigador Científico

Dr. Rosalía Serna Galán, Investigador Científico

Dr. Jan Siege, Científico Titular

Dr. Francisco Javier Solís Céspedes, Profesor de Investigación

### Líneas de investigación establecidas para el Programa

Las líneas de investigación generales establecidas para los estudios de doctorado son las siguientes:

Espectroscopía molecular y fotoquímica Cinética y dinámica de las reacciones químicas Química de la Atmósfera Ingeniería de materiales Química Analítica Física atómica y molecular

Todos los grupos y profesores de los distintos departamentos universitarios e institutos del CSIC que participan en el Programa desarrollan líneas de investigación relacionadas con el uso de tecnologías láser y métodos espectroscópicos aplicados a diversos problemas de la Química. Se dispone de especialistas de reconocido prestigio en las diversas áreas que cubre el programa de doctorado y que imparten las distintas asignaturas del curso intensivo mismo. Así mismo, la docencia práctica está garantizada por la existencia de una red de laboratorios de investigación basados en tecnologías láser y espectroscópicas en las distintas universidades e institutos implicados en la docencia.

La oferta de trabajos de investigación, conducentes al DEA dentro del Programa de doctorado, y los tutores correspondientes, es la siguiente:

#### **UBU**

<u>Cinética y mecanismos de reacciones en disolución. Reacciones de complejacion. Reacciones de intercalación</u> Begoña García Ruiz

Propiedades termofísicas de fluidos. Interacción soluto-disolvente. Dinámica molecular

José María Leal Villalba

#### UCI M

Reactividad atmosférica de compuestos orgánicos volátiles con cloro atómico estudiada por fotólisis láser pulsada con fluorescencia resonante y técnicas relativas

José Albaladejo Pérez, Alberto Notario Molina, Bernabé Ballesteros

Oxidación troposférica de compuestos orgánicos volátiles iniciada por el radical OH y estudiada por fotólisis láser pulsada con fluorescencia inducida por láser

José Albaladejo Pérez, Elena Jiménez Martínez

Degradación atmosférica de compuestos orgánicos volátiles. Estudios mediante descarga en tubo de flujofluorescencia inducida por láser

Beatriz Cabañas Galán, Sagrario Salgado Muñoz

Degradación atmosférica de compuestos orgánicos volátiles utilizando técnica relativa. Determinación de productos de reacción

Beatriz Cabañas Galán, Pilar Martín Porrero

Reactividad de contaminantes orgánicos volátiles frente a los radicales troposféricos

Alfonso Aranda Rubio, Yolanda Díaz de Mera Morales

Estudios cinéticos de la degradación atmosférica de compuestos orgánicos volátiles mediante una técnica relativa (smoq-chamber)

Alfonso Aranda Rubio, Alberto Notario Molina, Diana Rodríguez Rodríguez, Ana Ma Rodríguez Cervantes

#### UCM

Dinámica de reacciones y fotodisociación molecular por espectroscopía REMPI-IMAGING

Francisco Javier Aoiz Moleres, Luis Bañares Morcillo

Relajación rotacional de moléculas pequeñas (N2, CO, NO) y sus mezclas con gases nobles en expansiones supersónicas

Francisco Javier Aoiz Moleres, Juan Enrique Verdasco Costales

Fotofragmentación y alineamiento molecular en la escala de femtosegundos con cartografía de velocidades e imágenes de iones

Luis Bañares Morcillo, Rebeca de Nalda Mínguez

Teoría y simulación de la femtodinámica de moléculas en fases gas y condensada

Jesus Santamaría Antonio, Ignacio Solá Reija

Dinámica estructural ultrarrápida en Química, Biología y Ciencia de Materiales

Jesús Santamaría Antonio, Luis Bañares Morcillo, Ignacio Solá Reija

Análisis de contaminantes atmosféricos y sustancias de interés agroalimentario por cromatografía de gases e ionización láser con espectrometría de masas por tiempo de vuelo

Luis Bañares Morcillo, Marta Menéndez Carabajosa

Aplicación de las técnicas de espectrocopía de fluorescencia, UV-VIS, RMN y LDE (Láser-Doppler-Electroforesis) a la caracterización de agregados coloidales y/o supramoleculares en disolución

Emilio Aicart Sospedra

### CSIC

Estudio de colisiones moleculares mediante espectroscopía Raman-láser

Salvador Montero, José M. Fernández

Diagnóstico de chorros supersónicos de gases mediante espectroscopía

Raman-láser

José M. Fernández, Salvador Montero

Plasmas fríos

Isabel Tanarro, Víctor Herrero

Hielos de interés atmosférico

Víctor Herrero

Ablación láser para limpieza y microanálisis de materiales

Marta Castillejo, Margarita Martín, Rebeca de Nalda

Síntesis de materiales de interés óptico mediante depósito por Láser Pulsado

Rosalia Serna

Análisis de plasmas generados por ablación láser de metales

Carmen Afonso, José Gonzalo

Caracterización y procesado de materiales mediante procesos ópticos no-lineales

Jan Siegel, Javier Solís

#### UDC

Análisis químico mediante ablación láser de obras de arte y piezas arqueológicas

María de la Paz Mateo Orenes

Aplicación de la espectroscopía de plasmas inducidos por láser al control de procesos de ablación láser

Ginés Nicolás Costa

Caracterización química y mecánica de materiales procesados con láseres de potencia en aplicaciones industriales

Armando Yáñez Casal

Simulación de microprocesado de materiales con láser pulsado: desarrollo de un modelo basado en elementos finitos

María José Tobar Vidal

### UJA

Espectroscopia vibracional de compuestos orgánicos y organosilícicos

Juan Jesús López González.

Microscopía Raman-láser confocal

Fernando Márquez López

#### **UMA**

Espectroscopia vibracional de moléculas en superficie

Juan Carlos Otero Fernández de Molina

<u>Caracterización de superficies e interfases mediante espectrometría de masas con ionización láser</u> José Miguel Vadillo Pérez

#### **UMU**

Láseres y Fotofísica Molecular

Alberto Requena Rodríguez

Vibraciones Moleculares

José Zúñiga Román

Dinámica de Moléculas en Disolución

Adolfo Bastida Pascual

#### UPO

Cationización de polímeros sintéticos y biopolímeros en procesos de desorción láser asistida por matriz (MALDI)

Bruno Martínez Haya

Preparación y caracterización mediante espectroscopía laser de ionización multifotónica

(REMPI) de moléculas orgánicas y biomoléculas en haces moleculares

Bruno Martínez Haya

### **UPV-EHU**

Caracterización de dispositivos spin-electrónicos con espectroscopía MOKE

Fernando Castaño Almendral

Nanofabricación. Ion beam sputtering, litografía, litografía interferencial y crecimiento con Al poroso

Fernando Castaño Almendral

Estudio de radicales libres mediante espectroscopía láser infrarroja de alta resolución en expansiones supersónicas pulsadas

Franciso Basterretxea Elguezabal

Caracterización espectroscópica de procesos de adsorción y reactividad química de importancia atmosférica en aerosoles y superficies salinas

Franciso Basterretxea Elguezabal

Espectroscopía ZEKE de moléculas aromáticas

José Andrés Fernández González

Estudio conformacional de neurotransmisores y sus complejos con péptidos pequeños en fase gas mediante espectroscopía electrónica con resolución de masas en jets supersónicos

José Andrés Fernández González

#### UR

Estudio de la cinética y dinámica de reacciones químicas fotoiniciadas mediante técnicas de espectroscopia láser Pilar Puyuelo García, Pedro Alberto Enríquez Palma

#### URL

Base molecular y desarrollo de fármacos para la terapia fotodinámica del cáncer

Santiago Nonell Marrugat

Fotoreactividad de moléculas y materiales

Santiago Nonell Marrugat <u>Fotoprotectores</u> Santiago Nonell Marrugat

#### **UVA**

<u>Complejos con enlace de hidrógeno y microsolvatación</u>
Juan C. López, Susana Blanco
<u>Moléculas Inestables de Interés Astrofísico: Técnicas de descargas en jets supersónicos</u>
José Luis Alonso, María E. Sanz
<u>Biomoléculas en fase gas: Técnicas de Ablación Láser</u>
José Luis Alonso, Alberto Lesarri, Juan C. López

### Criterios de evaluación de los estudiantes y autoevaluación del Programa

La evaluación de los estudiantes se realizará por parte de los profesores que imparten las asignaturas del curso teórico intensivo y el curso práctico (experimentación), de forma coordinada con los tutores de cada universidad (que deberán firmar las actas correspondientes). Una vez finalizado el curso intensivo, los alumnos han tenido que resolver una hoja de ejercicios de cada una de las asignaturas obligatorias que han entregado al correspondiente profesor/profesores de la asignatura para su corrección y evaluación. Así mismo, los alumnos han tenido que presentar un trabajo de comentario de artículos científicos representativos propuestos por los profesores de cada una de las asignaturas optativas. Todos estos trabajos se realizaron con el apoyo de tutorías mediante correo electrónico por parte de los profesores responsables de cada asignatura. La evaluación de los alumnos por parte del profesorado se ha basado en la asistencia y trabajo por parte de los alumnos durante las clases presenciales (70%) y en la evaluación de los ejercicios/trabajos propuestos realizados postreriormente de forma individual (30%).

En lo que se refiere al periodo de investigación, éste culmina con el examen de suficiencia investigadora, para el cual cada Universidad tiene nombrado un tribunal. La superación del examen facultará al doctorando para poder solicitar expedición del Certificado-Diploma de Estudios Avanzados.

Se viene realizando una autoevaluación del Programa de doctorado consistente en la realización de encuestas a los alumnos y a los profesores sobre la calidad y aprovechamiento del curso teórico intensivo y el curso práctico (experimentación). Así mismo, se realizan reuniones de la Comisión de coordinación antes del curso teórico intensivo y otra después del curso práctico (experimentación) a las que asisten además de los coordinadores del Programa, aquellos profesores que tengan asignada docencia durante el curso 2006-2007 con fines organizativos y de autoevaluación del Programa. El grado de satisfacción de los alumnos y profesores con la organización del curso ha sido muy alto (calificación media 8/10). Según estas encuestas queda claro que las ventajas del curso intensivo (estrecha interacción entre los alumnos y los profesores y entre los alumnos entre sí, disponibilidad de profesores expertos en los distintos temas del curso, complementariedad de los contenidos de las distintas asignaturas que se imparten con un alto grado de simultaneidad) superan con creces los posibles inconvenientes (acumulación de los temarios en cuatro semanas lectivas). No obstante, sobre la base de la autoevaluación realizada se han implementado cambios en las actividades de formación del programa. Entre dichos cambios cabe mencionar los que han afectado a la distribución del horario lectivo del curso intensivo, reforzando los seminarios especializados, y la introducción de la asignatura práctica "Experimentación Avanzada con Láser", a partir de la segunda edición del Programa de Doctorado.

Así mismo, la comisión de coordinadores realizará un seguimiento de los doctores egresados que hayan realizado su tesis doctoral en el Programa de doctorado, con el fin de conocer la situación profesional de los mismos una vez finalizada la tesis doctoral.

Encuesta realizada a los estudiantes en los cursos 2005-2006 y 2006-2007:



Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Castilla-La Mancha

Enero-Febrero de 2006

## Doctorado Interuniversitario en Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química.

Curso 2005 - 2006.

#### **ENCUESTA ALUMNOS**

Marque con una cruz la respuesta deseada.

NS	0	2	4	6	8	10
NS	0	2	4	8	8	10

### **CLAVES PARA LA RESPUESTA**

NS	0	2	4	6	8	10
No sabe/ No contesta	Muy deficiente / Total desacuerdo / Nada de acuerdo / Nada adecuado	Deficiente / En desacuerdo / Muy poco adecuado	Insuficiente	Normal/ Término medio.	Bueno / De acuerdo / Adecuado	Excelente / Total acuerdo / Muy adecuado

#### **ASPECTOS FORMALES**

	NS	0	2	4	6	8	10
Variedad de cursos ofertados en el programa de doctorado	NS	0	2	4	6	8	10
2. Orientación y facilidades durante el proceso de matriculación	NS	0	2	4	6	8	10
3. Grado de impartición total del programa	NS	0	2	4	6	8	10
4. Planificación y temporalización de los cursos	NS	0	2	4	6	8	10
5. Satisfacción con la labor desarrollada por la sede del curso intensivo	NS	0	2	4	6	8	10

### **ASPECTOS ACADÉMICOS**

	NS	0	2	4	6	8	10
6. Disponibilidad de los programas: contenidos, bibliografía, evaluación	NS	0	2	4	6	8	10
7. Grado en el que se han cubierto las expectativas previas a los cursos	NS	0	2	4	6	8	10
8. Adecuación de los trabajos propuestos en los cursos	NS	0	2	4	6	8	10
9. Motivación y sentido crítico despertado en Vd. por el programa	NS	0	2	4	6	8	10
10. La metodología empleada ha contribuido a su formación	NS	0	2	4	6	8	10
11. Los profesores han relacionando los diferentes contenidos	NS	0	2	4	6	8	10
12. La evaluación me parece adecuada y justa	NS	0	2	4	6	8	10
13. Satisfacción con la labor desempeñada por los profesores	NS	0	2	4	6	8	10
14 El material y la documentación aportada por los profesores me han parecido adecuados	NS	0	2	4	6	8	10

### VALORACIÓN GLOBAL

N	IS	0	2	4	6	8	10
---	----	---	---	---	---	---	----

20. Globalmente está satisfecho con el grado de formación obtenido	NS	0	2	4	6	8	10
31. Aconsejaría la matrícula en el programa a un familiar o amigo.	NS	0	2	4	6	8	10
Describe <b>otros aspectos</b> que consideres <b>importantes</b> sobre los reste programa de doctorado:	resultado	os y des	arrollo d	de la pri	mera ar	nualidad	de

En general LO MEJOR ha sido
En general LO PEOR ha sido
Creo que podría mejorarse este programa si se introdujeran los siguientes CAMBIOS:

### Estructura Administrativa del Programa

Coordinador para el curso 2007-2008:

Bruno Martínez Haya

Universidad Pablo de Olavide, de Sevilla

Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales

Email: bmarhay@upo.es

### Información sobre Preinscripción, matrícula y reclamaciones:

Unidad de Tercer Ciclo Telf.: 954-349370 Email: terciclo@upo.es

Web: http://www.upo.es/postgrado/

### **Universidades participantes**

UBU: Universidad de Burgos

UCLM: Universidad de Castilla-La Mancha UCM: Universidad Complutense de Madrid

UDC: Universidade da Coruña UJA: Universidad de Jaén UMA: Universidad de Málaga UMU: Universidad de Murcia

UPO: Universidad Pablo de Olavide, de Sevilla

UPV-EHU: Universidad del País Vasco

UR: Universidad de La Rioja URL: Universitat Ramón Llull UVA: Universidad de Valladolid

#### Otras Instituciones participantes

CSIC: Consejo Superior de Investigaciones Científicas

### Coordinadores de cada Universidad

UBU, Departamento de Química: Dra. Begoña García Ruiz, begar@ubu.es

UCLM, Departamento de Química Física: Dr. José Albaladejo Pérez, jalba@uclm.es

UCM, Departamento de Química Física I: Dr. Luis Bañares Morcillo, Ibanares@quim.ucm.es

UDC, Departamento de Ingeniería Industrial II: Dr. Ginés Nicolás Costa, gines@cdf.udc.es

UJA, Departamento de Química Física y Analítica: Dr. Fernando Márquez López, fmarquez@ujaen.es

UMA, Departamentos de Química Física y Química Analítica: Dr. Juan Carlos Otero Fernández de Molina, jo otero@uma.es

UMU, Departamento de Química Física: Dr. José Zuñiga Román, zuniga@um.es

UPO, Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales: Dr. Bruno Martínez Haya, bmarhay@upo.es

UPV-EHU, Departamento de Química Física: Dr. Fernando Castaño Almendral, qfpcaalf@lg.ehu.es

UR, Departamento de Química: Dr. Pedro Alberto Enríquez Palma, pedro.enriquez@dq.unirioja.es

URL, Departamento de Química Orgánica y Bioquímica: Dr. Santiago Nonell Marrugat, s.nonell@iqs.edu

UVA, Departamento de Química Física y Química Inorgánica: Dr. Juan Carlos López Alonso, iclopez@qf.uva.es

### Tutores de cada Universidad

UBU, Departamento de Química: Dr. José María Leal Villalba, jmleal@ubu.es

UCLM, Departamento de Química Física: Dr. Beatriz Cabañas Galan, beatriz.cabanas@uclm.es

UCM, Departamento de Química Física I: Dr. Francisco Javier Aoiz Moleres, aoiz@quim.ucm.es

UDC, Departamento de Ingeniería Industrial II: Dr. Armando Yáñez Casal, ayanez@udc.es

UJA, Departamento de Química Física y Analítica: Dr. Juan Jesús López González, jjlopez@ujaen.es

UMA, Departamentos de Química Física y Química Analítica: Dr. José Miguel Vadillo Pérez, jmvadillo@uma.es

UMU, Departamento de Química Física: Dr. Alberto Requena Rodríguez, rqna@um.es

UPO, Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales: Dr. Bruno Martínez Haya, bmarhay@upo.es

UPV-EHU, Departamento de Química Física: Dr. Francisco José Basterretxea Elguezabal, <a href="mailto:qfpbaelf@lg.ehu.es">qfpbaelf@lg.ehu.es</a>

UR, Departamento de Química: Dra. María Pilar Puyuelo García, pilar.puyuelo@dq.unirioja.es

URL, Departmamento de Química Orgánica y Bioquímica: Dr. Santiago Nonell Marrugat, s.nonell@iqs.edu

UVA, Departamento de Química Física y Química Inorgánica: Dr. Alberto Lesarri Gómez, lesarri@qf.uva.es

### Personas de contacto en CSIC

CSIC, Instituto de Estructura de la Materia: Dr. José María Fernández Sánchez, jmfernandez@iem.cfmac.csic.es

CSIC, Instituto de Química Física Rocasolano: Dra. Margarita Martín Muñoz, igrmf04@igfr.csic.es

CSIC, Instituto de Óptica: Dr. José Gonzalo de los Reyes, j.gonzalo@io.cfmac.csic.es