

# Contenido

<b>Perfil académico de los autores</b> .....	13
<b>Prólogo</b> .....	25
<b>Capítulo 1. Introducción (Miguel A. Peña, María Retuerto)</b> .....	27
1. Objetivos .....	27
2. Definición de términos .....	28
3. Métodos clásicos y métodos instrumentales .....	29
4. Componentes de los instrumentos analíticos .....	31
5. Clasificación de las técnicas instrumentales .....	32
6. Características de los instrumentos analíticos .....	47
7. Calibrado de las técnicas instrumentales .....	51
8. Manipulación de muestras .....	56
9. Bibliografía .....	61
<b>Capítulo 2. Espectroscopía Ultravioleta-Visible (UV-Vis)</b> <b>(María del Mar Alonso López)</b> .....	63
1. Introducción .....	63
2. Teoría de la espectroscopía UV-Vis .....	65
3. Leyes de la espectrofotometría .....	76
4. Refracción y reflexión .....	81
5. Instrumentación .....	82
6. Tipos de instrumentos .....	98
7. Accesorios para UV-Vis .....	101
8. Preparación de muestras .....	107
9. Manejo de equipos .....	107
10. Aplicaciones de la técnica .....	110
11. Espectroscopía fotoacústica .....	119
12. Cálculo de triestímulos .....	120
13. Bibliografía .....	121
<b>Capítulo 3. Espectroscopía de luminiscencia:</b> <b>fluorescencia y fosforescencia (Cristina Otero Hernández)</b> .....	123
1. Introducción .....	123
2. Fundamentos de la técnica .....	123
3. Instrumentación .....	136
4. Preparación de muestras .....	141
5. Metodología .....	143
6. Aplicaciones de la técnica .....	145
7. Bibliografía .....	153

<b>Capítulo 4. Espectroscopía infrarroja (IR)</b>	
<b>(Carlos Márquez Álvarez, Antonio López de Lacey)</b> . . . . .	155
1. Introducción . . . . .	155
2. Fundamentos de la técnica . . . . .	156
3. Instrumentación . . . . .	164
4. Preparación de muestras. . . . .	175
5. Aplicaciones de la técnica . . . . .	177
6. Métodos especiales . . . . .	183
7. Casas comerciales. . . . .	187
8. Bibliografía . . . . .	189
 <b>Capítulo 5. Espectroscopía Raman (Miguel Ángel Bañares González,</b>	
<b>Vanesa Calvino Casilda, Ana Serrano-Lotina)</b> . . . . .	191
1. Introducción . . . . .	191
2. Fundamentos de la técnica . . . . .	193
3. Instrumentación . . . . .	201
4. Aplicaciones de la espectroscopía Raman . . . . .	211
5. Bibliografía . . . . .	219
 <b>Capítulo 6. Espectroscopía de absorción y emisión atómica:</b>	
<b>análisis de la composición química elemental</b>	
<b>(Marisol Faraldos Izquierdo)</b> . . . . .	221
1. Introducción . . . . .	221
2. Fundamentos de la técnica . . . . .	222
3. Instrumentación . . . . .	226
4. Aplicaciones de la técnica . . . . .	268
5. Comparación de las distintas técnicas de espectroscopía atómica . . . .	269
6. Preparación de muestras. . . . .	274
7. Análisis elemental. . . . .	287
8. Bibliografía . . . . .	289
Agradecimientos . . . . .	290
 <b>Capítulo 7. Espectrometría de masas</b>	
<b>(Manuel Ojeda, Manuel López Granados)</b> . . . . .	291
1. Principios básicos de la espectrometría de masas. . . . .	291
2. Espectrometría de masas para el análisis de gases . . . . .	293
3. Espectrometría de masas aplicada a líquidos. . . . .	316
4. Espectrometría de masas tandem (GC-MS <sup>n</sup> y HPLC-MS <sup>n</sup> ). . . . .	329
5. Espectrometría de masas aplicada a sólidos . . . . .	333
6. Aplicaciones de la espectrometría de masas . . . . .	336
7. Bibliografía . . . . .	342
 <b>Capítulo 8. Espectroscopía de resonancia paramagnética electrónica</b>	
<b>(EPR) (Arturo Martínez Arias)</b> . . . . .	343
1. Introducción . . . . .	343

2. Principios básicos de la técnica EPR . . . . .	345
3. Instrumentación . . . . .	363
4. Aplicaciones. Características generales de los espectros EPR de sistemas mono y policristalinos. particularidades de sistemas en fase líquida. . . . .	367
5. Algunos ejemplos de aplicaciones en sistemas policristalinos . . . . .	376
6. Bibliografía. . . . .	385
<b>Capítulo 9. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN)</b>	
(Isabel Sobrados, Jesús Sanz) . . . . .	387
1. Introducción. . . . .	387
2. Principios básicos de RMN . . . . .	387
3. Detección experimental del fenómeno de RMN . . . . .	390
4. Interacción núcleo-entorno estructural. . . . .	395
5. Métodos de alta resolución. . . . .	396
6. Aplicaciones de la RMN al estudio de materiales . . . . .	398
7. Conclusiones . . . . .	409
8. Bibliografía. . . . .	409
<b>Capítulo 10. Espectroscopías de absorción de rayos X</b>	
(XES y XAFS: EXAFS y XANES) (Marcos Fernández-García, Ana Iglesias-Juez, Anna Kubacka) . . . . .	411
1. Introducción. . . . .	411
2. Fundamentos de la técnica . . . . .	413
3. Instrumentación . . . . .	419
4. XANES . . . . .	422
5. EXAFS. . . . .	432
6. Técnicas de emisión de rayos X. . . . .	441
7. Técnicas relacionadas con la absorción de rayos X . . . . .	445
8. Sumario y perspectivas futuras . . . . .	445
9. Bibliografía. . . . .	446
<b>Capítulo 11. Espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS)</b>	
(José Miguel Campos Martín) . . . . .	449
1. Introducción. . . . .	449
2. Fundamentos de la técnica . . . . .	451
3. Instrumentación . . . . .	467
4. Preparación de muestras. . . . .	471
5. Adquisición del espectros . . . . .	473
6. Tratamiento de los espectros . . . . .	474
7. Aplicaciones de la técnica. . . . .	487
8. Bibliografía. . . . .	488
<b>Capítulo 12. Difracción de rayos X</b>	
(Marisol Faraldos Izquierdo, Susana Pérez Ferreras) . . . . .	489
1. Introducción. . . . .	489

2. Estructura de la materia condensada . . . . .	491
3. La naturaleza de los rayos X, qué son y cómo se generan . . . . .	506
4. Efecto de los rayos X en la materia. El fenómeno de la difracción. . . . .	512
5. El patrón de difracción de muestras policristalinas. . . . .	524
6. Difracción y sustancias amorfas . . . . .	527
7. Instrumentación . . . . .	527
8. Accesorios . . . . .	540
9. Aplicaciones . . . . .	541
10. Bibliografía . . . . .	560

### **Capítulo 13. Microscopía electrónica de materiales**

<b>(Isabel Díaz, Laura Pascual)</b> . . . . .	563
1. Introducción . . . . .	563
2. Nociones de óptica . . . . .	565
3. Microscopía electrónica de barrido (SEM). . . . .	567
3. Microscopía electrónica de transmisión (TEM) . . . . .	569
3. Microscopía electrónica de transmisión con barrido (STEM) . . . . .	577
4. Preparación de muestras. . . . .	581
5. Análisis por dispersión de energía de rayos X (EDX); Espectroscopía de pérdida de energía de los electrones (EELS) . . . . .	583
6. Microscopios de aberración corregida (Cs-corrector). . . . .	587
7. TEM ambiental ( <i>In situ</i> ) . . . . .	589
8. Diseño previo del experimento (¿Qué microscopio necesito y por qué?) . . . . .	591
9. Bibliografía . . . . .	591

### **Capítulo 14. Microscopía de fuerza (AFM) y de efecto túnel (STM)**

<b>(Marisela Vélez)</b> . . . . .	595
1. Introducción . . . . .	595
2. Fundamentos físicos . . . . .	597
3. Instrumentación básica y posibles accesorios . . . . .	602
4. Manejo de equipos y procedimientos de medida . . . . .	612
5. Aplicaciones . . . . .	627
6. Bibliografía . . . . .	632

### **Capítulo 15. Área superficial, textura y distribución porosa**

<b>(Malcolm Yates, Susana Pérez-Ferreras)</b> . . . . .	635
1. Isotermas de adsorción. . . . .	635
2. Porosimetría de intrusión de mercurio . . . . .	657
3. Bibliografía . . . . .	666

### **Capítulo 16. Análisis térmico (Enrique Sastre de Andrés)** . . . . .

1. Introducción . . . . .	669
2. Análisis Termogravimétrico (ATG) . . . . .	672

3. Métodos térmicos y calorimétricos de análisis: análisis térmico diferencial (DTA) y calorimetría diferencial de barrido (DSC) . . . . .	686
4. Análisis y detección de los gases desprendidos en los análisis térmicos (EGA/EGD) . . . . .	702
5. Bibliografía . . . . .	713
 <b>Capítulo 17. Métodos electroanalíticos</b>	
<b>(Marcos Pita Martínez, Antonio López de Lacey) . . . . .</b>	<b>715</b>
1. Fundamentos de la técnica . . . . .	715
2. Instrumentación . . . . .	720
3. Preparación de medidas electroquímicas . . . . .	729
4. Técnicas electroanalíticas . . . . .	734
5. Aplicaciones de los métodos electroanalíticos . . . . .	745
6. Bibliografía . . . . .	750
 <b>Capítulo 18. Cromatografía de gases</b>	
<b>(Jose Miguel Campos Martín, Silvia Morales de la Rosa) . . . . .</b>	<b>751</b>
1. Introducción . . . . .	751
2. Fundamentos de la técnica . . . . .	752
3. Instrumentación . . . . .	761
4. Preparación de muestras . . . . .	795
5. Bibliografía . . . . .	806
 <b>Capítulo 19. Cromatografía líquida de alta resolución (HPLC): escalas analítica y preparativa (Francisco J. Plou Gasca, Pamela Torres Salas) . . .</b>	
<b>1. Introducción . . . . .</b>	<b>807</b>
2. Componentes de un equipo de HPLC . . . . .	808
3. Parámetros cromatográficos . . . . .	828
4. Tipos de cromatografía HPLC . . . . .	828
5. Escalas de aplicación de cromatografía HPLC . . . . .	843
6. Cromatografía ultra-rápida (UPLC) . . . . .	846
7. Bibliografía . . . . .	847
 <b>Capítulo 20. Caracterización de materiales mediante estudios de actividad catalítica (Ana M<sup>a</sup> Bahamonde Santos, Ana Rey Barroso, Álvaro Tolosana Moranchel) . . . . .</b>	
<b>1. Introducción . . . . .</b>	<b>849</b>
2. Cinética química de las reacciones catalíticas . . . . .	853
3. Catálisis homogénea . . . . .	866
4. Catálisis heterogénea . . . . .	869
5. Reacciones catalíticas enzimáticas . . . . .	875
6. Reactores catalíticos . . . . .	879
7. Procesos catalíticos heterogéneos: Casos históricos y ejemplos . . . . .	903
8. Bibliografía . . . . .	916

<b>Capítulo 21. Adquisición de datos, supervisión y control de equipos de laboratorio por ordenador (Consuelo Goberna Selma)</b>	917
1. Introducción	917
2. Etapas y elementos necesarios para adquisición de datos, supervisión y control	919
3. Señales analógicas y digitales	928
4. El ordenador	937
5. Interfases hardware de comunicaciones: Puertos, interfases o tarjetas	938
6. Señal y ruido	972
7. Interfases software de comunicaciones: Programas o aplicaciones	977
8. Conclusiones	983
9. Bibliografía	986
Anexos	987
 <b>Capítulo 22. Calidad en el laboratorio (Isabel Pacheco Pérez)</b>	 1007
1. Introducción	1007
2. Motivación por la calidad	1008
3. Sistemas de gestión de la calidad en laboratorios. Modelos aplicables	1010
4. Implantación de un sistema de gestión de calidad en un laboratorio	1018
5. Calidad de las medidas	1023
6. Control de equipos	1033
7. Aseguramiento de la calidad	1036
8. Bibliografía	1044
Agradecimientos	1046
 <b>Índice temático</b>	 1047