

## **Materiales Luminiscentes**

© Roberto Acevedo, Gustavo Navarro, 2001  
lindsey@cec.uchile.cl

### **RESUMEN**

En este artículo se intentará revisar en forma simple pero rigurosa los aspectos de la síntesis, caracterización estructural y caracterización espectroscópica de sistemas de interés en Ciencia de los Materiales. El énfasis de esta ponencia se hace con relación a cristales cúbicos del tipo elpasolitas, los cuales exhiben propiedades físicas y químicas que hacen su estudio atractivo, tanto desde el punto de vista teórico, como práctico. Se enfatiza las propiedades de luminiscencia de estos materiales y en las diversas manifestaciones experimentales asociadas.

### **ABSTRACT**

This article is devoted to a simple but rigorous review of some mechanistic aspects of the synthesis, and structural as well as spectroscopic characterization of systems of interest in Material Science. This article focuses on cubic crystals of the elpasolite type, which show physical and chemical properties attractive from both theoretical and practical reasons. This study emphasises the luminescent properties of these materials and their experimental manifestations.

### **Palabras Introductorias**

La Química es una de las tantas manifestaciones macroscópicas de fenómenos a escala microscópica, siendo uno de los temas centrales de ésta, el estudio del comportamiento de los electrones en diversos **campos de potencial** (Acevedo, 1996).

En problemas de interés -tanto básicos como aplicados-, las situaciones a resolver son de envergadura y requieren de desarrollos tecnológicos mayores, formulación de complejos modelos físicos y de las herramientas matemáticas necesarias para avanzar hacia la comprensión del origen y naturaleza de los datos experimentales obtenidos. Estos observables físicos han aumentado en volumen y en complejidad, razón suficiente para comprometer tanto esfuerzo económico e intelectual tendiente a avanzar en la comprensión de los efectos y sus manifestaciones, lo que ha sido posible hasta cierto punto gracias a recientes avances tecnológicos (Acevedo & Poblete, 1999a, Acevedo & Poblete, 1999b; Acevedo, 2000).

En el presente artículo, intentaremos presentar al lector algunos de estos avances en una de las áreas de las Ciencias de los Materiales (DiBartolo, 1980; Kaumann, 1957; Acevedo, 2000)

Focalizaremos nuestra atención en el **problema de muchos cuerpos**, con aplicaciones a cristales de alta simetría, para los cuales disponemos de resultados noveles, obtenidos y procesados con cierto éxito en nuestro laboratorio. Los resultados que describiremos, son una consecuencia del "observar" un objeto utilizando la radiación electromagnética (luz).

Como veremos, el resultado de esta interacción conduce a un sistema perturbado que genera **espectros**, los cuales son únicos y característicos del sistema en estudio. El análisis de los espectros asociados a un sistema de interés, no es trivial y requiere esencialmente de herramientas matemáticas, físicas y químicas. En particular, surge con vigor una rama que se conoce como **espectroscopía**, la cual tiene como papel principal la interpretación de los fenómenos resultantes de esta interacción. Dedicaremos este trabajo al estudio de aquellos procesos en los cuales participan **fotones**, los que pueden ser tanto absorbidos como emitidos por un material dado.

Estos fotones se propagan a la velocidad de la luz, y están caracterizados por una longitud de onda ( $\lambda$ ), frecuencia de oscilación ( $\nu$ ) y energía  $E=h\nu$  ( $h$  es la constante de Planck y  $\nu=c/\lambda$ ). Este escrito estará dedicado esencialmente a ciertos procesos de absorción y de emisión de radiación electromagnética. En estos últimos, participan fotones de energías  $E=h\nu$ , y se habla de **procesos radiativos**. Existen otros procesos complementarios a los radiativos, en los cuales no participan fotones, y el sistema excitado decae a estados permitidos de menor energía, con emisión de calor **no radiativo** al cristal.

El experimento es el instrumento que nos permite discernir cuáles de los procesos mecanísticos ideados y propuestos por el hombre, resultan ser más probables y convincentes para la comprensión de los fenómenos físicos observados. En física del estado sólido, el estudio de los procesos radiativos y no radiativos, corresponde a un tema emergente de interés, esencialmente por el advenimiento de técnicas instrumentales modernas de alta sofisticación y el desarrollo incipiente de formalismos de cálculo novedosos y complejos. Es central, en una primera aproximación, considerar en forma prioritaria la síntesis, caracterización estructural y espectroscópica de sistemas cristalinos con ciertas propiedades luminiscentes interesantes (tanto desde un punto de vista básico como aplicado). Estos sistemas son esencialmente cúbicos o ligeramente distorsionados, y los mecanismos más probables para explicar la información obtenida nos permite sugerir y en muchos casos proponer cascadas de decaimiento radiativo y no radiativo capaces de explicar razonablemente los datos experimentales.

A la fecha, hemos logrado con éxito la síntesis, caracterización estructural y espectroscópica de sistemas puros y dopados del tipo elpasolitas, que responden a las fórmulas estructurales,  $Cs_2NaLnZ_6$  y  $Cs_2NaLnZ_6 : Ln'Z_6^{3-}$  donde  $Ln^{3+}$  y  $Ln'^{3+}$  y, corresponden a iones lantánidos trivalentes positivos y  $Z^{1-}$  es un ion halogenuro, del tipo Fluoruro ( $F^{1-}$ ), Cloruro ( $Cl^{1-}$ ) y Bromuro ( $Br^{1-}$ ). De particular importancia, son los sistemas fluorados, los cuales son altamente higroscópicos y en consecuencia de síntesis compleja.

El conocimiento y la experiencia acumulada nos permite adelantar avances de importancia en diversas áreas, tales como: (a) Diseño y análisis de diversas rutas de síntesis optimizadas y la caracterización estructural para elpasolitas estequiométricas y no estequiométricas ( $Cs_2NaLn_xLn'_{1-x}Z_6$ ; donde  $0 < x < 1$ ), con ligandos monoatómicos. (b) Diseño y rutas de síntesis de sistemas con un ion metálico central del tipo lantánido y con ligandos organometálicos y fosforados. (c) Determinación de estructuras por difracción de rayos X y de neutrones. (d) Estudios espectroscópicos utilizando técnicas de la física lineal y no lineal y (e) Desarrollo de esquemas de cálculo generalizados en las aproximaciones iónicas y moleculares. Ilustraremos lo mencionado anteriormente, con referencia a un tipo de sistemas de alta simetría (ver Fig.1) del tipo elpasolitas estequiométricas ( $Cs_2NaLnCl_6$ ), cuya estructura es bien conocida y, en consecuencia, su análisis resulta ser, en principio, de mayor simplicidad.

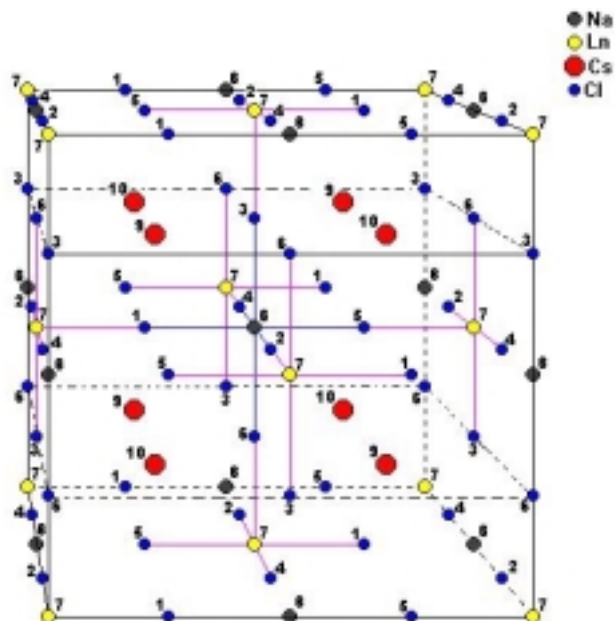


Fig. 1. Estructura del tipo Elpasolita

Estas estructuras cristalinas son esencialmente cúbicas y en lenguaje técnico pertenecen al **grupo espacial Fm3m**. Diversos son los estudios relacionados con las propiedades ópticas de estos cristales. Como producto de la interacción radiación-materia, éstos dan origen a espectros de luminiscencia, infrarrojos y vibracionales de alta complejidad, caracterizados por cientos de “picos de absorción o de emisión” que presentan áreas bajo cada una de estas curvas (intensidades espectrales) características de los sistemas en estudio. Para este tipo de sistemas cristalinos, existen objetivos generales y específicos que hacen que la ingeniería y diseño de estos materiales sea de interés permanente. Así, nuestro objetivo general consistirá en dilucidar y determinar las rutas (cascadas) más probables de decaimiento radiativo (procesos con emisión de fotones), con el propósito de explicar sobre una base cuantitativa rigurosa aspectos mecanísticos formales de la espectroscopía del estado sólido. Entre los objetivos específicos, se indagará en las diversas aproximaciones y metodologías de cálculo, ión de forma tal, de identificar los mecanismos asociados a los procesos radiativos de mayor probabilidad y permitir racionalizaciones y extrapolaciones al caso de transiciones no radiativas. En transiciones no radiativas el sistema decae a estados de menor energía con emisión de calor al cristal.

En la última década, hemos concentrado nuestra atención en sistemas cúbicos, del tipo elpasolitas estequiométricas (Fig.1). Como se aprecia, se presenta la estructura cristalográfica (obtenida por difracción de rayos X) de cristales del tipo:  $Cs_2NaLnZ_6$ , donde  $Ln^{3+}$  representa un catión lantánido trivalente positivo ( $Ce^{3+}$ ,  $Pr^{3+}$ , ...,  $Yb^{3+}$ ) y  $Z^{I-}$  es un anión del tipo halogenuro ( $F^{I-}$ ,  $Cl^{I-}$ ,  $Br^{I-}$ ). La situación con Fluoruro como ligando es de gran complejidad, y requiere de sofisticaciones especiales en los métodos de síntesis, lo cual se explica como una consecuencia de alta higroscopicidad de estos sistemas fluorados.

Colaboraciones con el Instituto de Investigación de Estructuras a Bajas Temperaturas de la Academia de Ciencias de Polonia en Wroclaw y del laboratorio de Química Analítica y de Espectroscopia Láser del Departamento de Ciencias Biológicas y Químicas del Birkbeck College de la Universidad de Londres, nos han posibilitado acceder a información espectroscópica de alta precisión y resolución para sistemas fluorados del tipo  $Cs_2NaTmF_6$ . Estos sistemas son muy atractivos desde un punto de vista teórico, por cuanto se observa un acoplamiento intenso entre las vibraciones internas de igual simetría del ion complejo  $TmF_6^{3-}$  y las correspondientes a los contra-iones, en este caso  $Cs^{I+}$  y  $Na^{I+}$ .

En general, los sistemas cristalinos como el representado en la Figura 1 están constituidos por núcleos y densidades de cargas electrónicas, con centroides de cargas separados por distancias características e inherentes al cristal, conocidos como radios iónicos. Estas ordenaciones son tridimensionales, y presentan periodicidades evidentes, a partir de las cuales podemos introducir el concepto básico de celda unitaria.

Estas unidades básicas están constituidas por un conjunto de átomos (núcleos y densidades de cargas electrónicas asociadas) que, por medio de simples operaciones de simetría (rotaciones, reflexiones, planos de deslizamiento, ejes helicoidales y combinaciones de éstas), permiten generar el cristal completo. En principio, para cristales perfectos, se puede decir que el cristal corresponde a una ordenación periódica tridimensional de dimensión infinita. Situaciones de mayor complejidad ocurren en el caso de cristales no estequiométricos y dopados, en los cuales los iones del dopaje presentan radios iónicos distintos a los correspondientes iones huéspedes. Rigurosamente, el efecto a ser observado debería ser la ruptura de la simetría translacional, originando una serie de situaciones de diversas complejidades. Existen técnicas, tales como la **difracción de rayos X (DRX)**, la **difracción**

de neutrones y la difracción de rayos X en polvos, que nos permiten encontrar, a una temperatura dada, las regiones del espacio físico en las cuales existe mayor concentración de densidades de cargas. De esta forma es posible dibujar y modelar estructuras tridimensionales como las que se indican en la Figura 1, para cristales estequiométricos del tipo  $Cs_2NaLnZ_6$ . En esta representación se ha dibujado un cubo de con lados de longitud  $a_0$  y volumen  $a_0^3$ . Éste es subdividido en ocho cubitos iguales. Esta celda unitaria es la unidad básica a partir de la cual, utilizando operaciones de simetría simples, es posible generar todo el cristal. Como se puede apreciar de la Figura 1, para este tipo de cristales existen cuatro fórmulas por celda unitaria y las **coordenadas atómicas** obtenidas experimentalmente son las siguientes:

$$4Ln^{3+}(0,0,0), 8Cs^{1+}(1/4,1/4,1/4), 4Na^{1+}(1/2,1/2,1/2), 24Z^{1-}(1/X,0,0) \quad [1]$$

El valor frecuentemente aceptado para  $x$  es 4. Sin embargo, este tipo de estructuras es análoga a las de la clase de las **anti-fluoritas**, y presentan **vacancias** capaces de acomodar una cantidad significativa de **defectos** sin colapsar. Lo anterior explica el carácter higroscópico de estos cristales. Para eliminar al máximo la **higroscopicidad**, es costumbre trabajar en condiciones experimentales especiales, tales como una atmósfera inerte y/o al vacío, llevando a cabo una reacción en estado sólido. La técnica de síntesis de este tipo de cristales se efectúa siguiendo las siguientes etapas: Se pesan cantidades estequiométricas de cada uno de los reactivos y se procede a disolverlos en ácido clorhídrico (HCl) concentrado, en un rango de temperaturas de 30 a 60 grados Celcius, hasta lograr la disolución de los reactivos. Esto se constata al observar una solución transparente, de acuerdo a reacciones generales del tipo:



La solución es sometida a ebullición y se evapora hasta obtener un producto espeso, no seco, de modo de evitar la formación de hidróxidos. Después, el producto anterior (de textura barrosa), se seca en vacío con corriente de Nitrógeno y se obtiene el compuesto amorfo (no cristalizado) y completamente seco. Finalmente, se lleva a cabo una reacción de estado sólido, donde el compuesto amorfo se dispone en un tubo de cuarzo con vacío y sellado. Posteriormente, se somete a tratamiento térmico por 2 hrs. a la temperatura de cristalización (observada en el Análisis Térmico Diferencial; ATD). Las técnicas de **fluorescencia de rayos X** y **espectrometría gamma rápida** son utilizadas para llevar a cabo la caracterización elemental del

producto (presencia de impurezas y estequiometría). Con toda esta información se procede a la determinación de la estructura por **difracción de rayos X** y análisis espectroscópico.

Una situación extrema, investigada en nuestro laboratorio, corresponde a la elpasolita,  $Cs_2NaCeCl_6$ , la cual es excepcionalmente higroscópica con un valor (medido por DRX de polvos) para  $x = 0.2577 \text{ \AA}$  (ver eq 1). Para estos cristales, disponemos de información experimental de gran precisión y resolución. Estas bases de datos son frecuentemente utilizadas para avanzar en la comprensión de las propiedades que exhiben estos materiales, cuyas aplicaciones incluyen: dispositivos electroluminiscentes, aplicaciones a la industria de láser y en general, en el diseño y construcción de materiales luminiscentes. Una cantidad importante de materiales luminiscentes son conocidos por sus aplicaciones. Una propiedad de éstos reside en la llamada **eficiencia cuántica** de la luminiscencia, la cual debe ser tan alta como sea posible. Se conoce un amplio campo de aplicaciones para estos materiales, como por ejemplo, las lámparas fluorescentes y los tubos de rayos catódicos. Una de las mayores exigencias para estos materiales, es que tengan un valor alto de salida de luz del material. De esta forma, toda la energía absorbida por el material, y no emitida como radiación (luminiscencia) se disipa al cristal por medio de procesos no radiativos (relajación con emisión de calor al cristal). Es importante señalar que los procesos radiativos (en los cuales participan fotones de energías  $E=h\nu$ ) son complementarios con los no radiativos y compiten entre sí. La **eficiencia radiante** (eficiencia de la radiación emitida por el material), se define como el cociente entre la potencia luminiscente emitida y la potencia del haz de electrones que inciden en el material. Resulta evidente que esta eficiencia está lejos de alcanzar un valor del 100%.

Materiales puros con eficiencias superiores a un 20% son escasos. De igual forma, podemos introducir el concepto de **eficiencia cuántica** de algunos materiales foto-luminiscentes. Esta corresponde al cociente entre el número de quanta emitidos y el número de quanta absorbidos (ver Tablas 1 y 2, en las cuales se reportan valores para la eficiencia radiante y cuántica de algunos materiales de interés).

| Número | Muestra                                   | Eficiencia radiante (%) |
|--------|-------------------------------------------|-------------------------|
| 1020   | <b>ZnS - Ag</b>                           | 21                      |
| 1021   | <i>Zn<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> - Mn</i> | 8                       |
| 1022   | <b>ZnS - Cu</b>                           | 11                      |
| 1023   | <i>(Zn,Cd)S - Ag</i>                      | 19                      |
| 1024   | <i>CaWO<sub>4</sub> - Pb</i>              | 3                       |

Tabla 1. Eficiencia Radiante de algunos materiales luminiscentes estándares (fósforos) bajo condiciones de excitación catódica. Datos determinados a temperatura ambiente (National Bureau Standard; NBS).

| Muestra                                                           | Eficiencia Cuántica (%) |
|-------------------------------------------------------------------|-------------------------|
| <i>CaWO<sub>4</sub> - Pb</i>                                      | 75                      |
| <i>Zn<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> - Mn</i>                         | 68                      |
| <i>Ca<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> - Tl</i>            | 56                      |
| <i>Ca<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>(F,Cl) - Sb,Mn</i>   | 71                      |
| <i>Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - Eu<sup>3+</sup></i>              | 52                      |
| <i>YVO<sub>4</sub> - Eu<sup>3+</sup></i>                          | 70                      |
| <i>Sr<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub> - Eu<sup>2+</sup></i> | 65                      |

Tabla 2. Eficiencia Cuántica de algunos Materiales bajo excitación ultravioleta. Datos determinados a temperatura ambiente (National Bureau Standard; NBS).

Las eficiencias de los materiales comerciales aumentan difícilmente al disminuir la temperatura. No obstante, la intuición indica que la reducción térmica de la temperatura de luminiscencia es también una propiedad importante en relación con la eficiencia cuántica. Tratamientos más concluyentes pueden ser encontrados en la literatura especializada (Acevedo, 2000).

## Modelos Físicos, Desarrollos Teóricos y Manifestaciones Experimentales

Durante las últimas tres décadas, la investigación relacionada con las **propiedades espectroscópicas** de los iones lantánidos en diversos entornos ha sido el objetivo de numerosas investigaciones, fundamentalmente por las implicancias académicas y tecnológicas. Así por ejemplo, compuestos lantánidos fosforados representan los nuevos dispositivos de luminosidad. El



número de aplicaciones ha ido aumentando con el avance de la investigación (fabricación de dispositivos electroluminiscentes, industria del láser y otras aplicaciones variadas).

Hacia el año 1937 (Bersuker & Polinger, 1989), se comenzó a discutir el origen y naturaleza de **transiciones del tipo  $f \rightarrow f$** , con el propósito de explicar las observaciones experimentales para estos sistemas. Intentaremos llegar al lector utilizandoun lenguaje simple, pero sin que esto signifique sacrificar la rigurosidad conceptual.

La situación más “simple posible” es la del átomo de Hidrógeno. Para este sistema, caracterizado por un valor de número atómico  $Z = 1$  (1 protón y 1 electrón), sus **contornos de probabilidad** están asociados a **orbitales atómicos** del tipo  $s(l=0)$ ,  $p(l=1)$ ,  $d(l=2)$ ,  $f(l=3)$ , ... , etc. En esta situación particular, el sistema aislado es tal, que el electrón presenta una altísima probabilidad de presencia en el estado de menor energía, en esta situación, el nivel ( $1s$ ). De esta forma, la inclusión de orbitales atómicos con valores superiores a  $l=0$ , resulta ser relevante cuando el sistema Hidrógeno es excitado por medio de un agente externo (por ejemplo, por incidencia de luz).

Desde el punto de vista de la física, los electrones tienden a concentrarse en regiones del espacio permitidas, llamadas orbitales atómicos, en particular los de menor energía. Para perturbar este “orden natural” del sistema se puede utilizar luz. Al hacer incidir luz sobre el sistema Hidrógeno, una fracción de los átomos de Hidrógeno, bajo determinadas condiciones, puede pasar a **estados excitados permitidos**.

En la teoría aparecen así una serie de situaciones que no es posible ignorar, simplemente porque la información experimental es concluyente y ésta nos indica que se producen transiciones electrónicas desde el estado basal (fundamental) a estados excitados, lo cual está gobernado por la **condición de resonancia**:  $\Delta E_{1 \rightarrow 2} = h\nu$ , donde  $h$  es la **constante de Plank** y  $\nu$  es la **frecuencia de la radiación** (ciclos/seg). Cuando se satisface la condición de resonancia entre los estados terminales permitidos 1 y 2, entonces una fracción de la muestra es excitada del estado inicial “1” al estado final “2” (transición electrónica). El sistema tenderá en forma natural y espontánea a regresar al estado de menor energía y más estable, en nuestro caso el estado basal “1”. Surgen así los conceptos de emisión espontánea y emisión inducida de luz (**fotones**). La espontaneidad se produce porque el estado de menor energía es físicamente más estable y la emisión inducida es una consecuencia

de la alteración que experimentó el objeto por efecto del agente externo, en este caso, luz.

En el caso de los iones lantánidos, las transiciones que nos interesa estudiar involucran electrones  $f$ , caracterizados por un valor del **número cuántico** azimutal  $l=3$ .

El número de orbitales atómicos de este tipo es  $(2*3 + 1) = 7$ , y para el caso particular de un electrón de tipo  $f$  el número de estados permitidos con igual energía es 14 (este número se explica en términos del experimento de Stern-Gerlach).

En esta experiencia, un haz de electrones atraviesa un campo magnético no homogéneo, el cual aumenta en intensidad de un polo a otro. La experiencia empírica nos indica que, en ausencia de campo externo, el haz de electrones debe desplazarse en forma rectilínea (**experimento de Mulliken**). Sin embargo, al atravesar el campo magnético no homogéneo, el **haz se dispersa en dos haces**, uno de estos asociados con espín  $\alpha$  y  $\beta$ .

De esta forma y en estricto cumplimiento con el **Principio de Exclusión de Pauling**, podemos localizar este electrón en todos y cada uno de los 7 orbitales de tipo " $f$ ", y en cada uno de los casos podemos asignarles espín  $\alpha$  o  $\beta$ . De modo que, en una primera aproximación, para el ion lantánido aislado (en este caso  $Ce^{3+}$ ), existirán para el ion aislado un total de 14 estados con igual energía. Éste es un típico ejemplo de la llamada **degeneración accidental**.

De esta forma, para configuraciones de la capa más externa (capa de valencia), y en el caso del ion Cerio(III), al existir sólo un electrón del tipo " $f$ ", adquiere relevancia el considerar los términos de acoplamiento entre el momentum angular orbital y el momentum angular de espín electrónico. Para estos efectos resulta interesante recordar que, en el caso de electrones, el momento magnético total puede ser escrito como una suma de dos contribuciones, una derivada del momento magnético orbital  $(-\beta \hat{l})$  y la otra del momentum angular de espín electrónico  $(-\beta [g_s \hat{s}])$ . En estas expresiones  $\beta = \left(\frac{e}{2m}\right)$ , " $e$ " la carga elemental de electricidad, " $m$ " la masa del electrón,  $\hat{l}$  es el momentum angular orbital y  $\hat{s}$  representa el momentum angular de espín electrónico. Se debe observar, sí, que a nivel del ion aislado "electrón  $f$ ",

existe un término de gran relevancia y que tiene relación con el llamado **acoplamiento espín electrónico-momentum angular orbital**. Este es un término que aparece en forma natural cuando se considera que la velocidad estimada para el electrón en el nivel de más baja energía en el átomo de Hidrógeno es del orden de  $10^8$  cm/seg, es decir, un valor sustantivamente menor que la velocidad de la luz en el vacío ( $c=3.10^{10}$  cm/seg), aunque distinto de cero y no despreciable.

A estas alturas de la discusión, hemos introducido los términos asociados a la **capa de valencia** para una configuración del tipo  $f^l$ . No obstante, debemos recordar que el ion  $Ce^{3+}$  presenta en el cristal otras interacciones, algunas débiles y otras marcadamente más débiles (pero, distintas de cero). Así, la Figura 1 nos indica que este ion está **directamente coordinado** a seis iones Cloruro (IC=6, donde IC es el **índice de coordinación**). Estos seis iones Cloruro se distribuyen (de acuerdo a nuestros datos experimentales), en un entorno perfectamente octaédrico con respecto al ion  $Ce^{3+}$ . Una primera aproximación nos conduce a suponer a estos iones Cloruro como **densidades efectivas de cargas** ( $-Ze$  : donde Z es un parámetro a ser estimado de los datos experimentales y “e” es la carga elemental de electricidad.  $e = 4,8.10^{-10}$  ues). En esta conceptualización, podemos entender que los seis Cloruros producen un campo eléctrico que perturba la densidad de cargas del ion central  $Ce^{3+}$ . Como resultado de esta perturbación los 14 estados originales asociados al ion aislado sufren una **ruptura de la degeneración** y se separan en dos conjuntos de sub-niveles, uno de ellos con 8 estados de igual energía y el otro con seis estados de igual energía. Debemos recordar que esta ruptura de la degeneración accidental debe satisfacer el **Principio de Conservación de la Energía**. La Figura.2 ilustra la ruptura de la degeneración que experimentan los estados permitidos del ion metálico central por efecto de las interacciones con los seis iones Cloruros, dispuestos en torno del ion  $Ce^{3+}$  en disposición octaédrica. Las contribuciones provenientes de segundos, terceros y otros vecinos serán de magnitudes mucho menores (distintas de cero). Situaciones de complejidades crecientes pueden encontrarse en el estudio de sistemas cristalinos puros del tipo  $Cs_2NaLnZ_6$ , **sistemas cristalinos dopados** del tipo  $Cs_2NaLnZ_6 : Ln'Z_6^{3-}$  ( $Ln$  y  $Ln'$  son dos iones lantánidos trivalentes positivos) y otros de estructuras más diversas y complejas con ligandos poliatómicos de origen tanto inorgánico como orgánico.

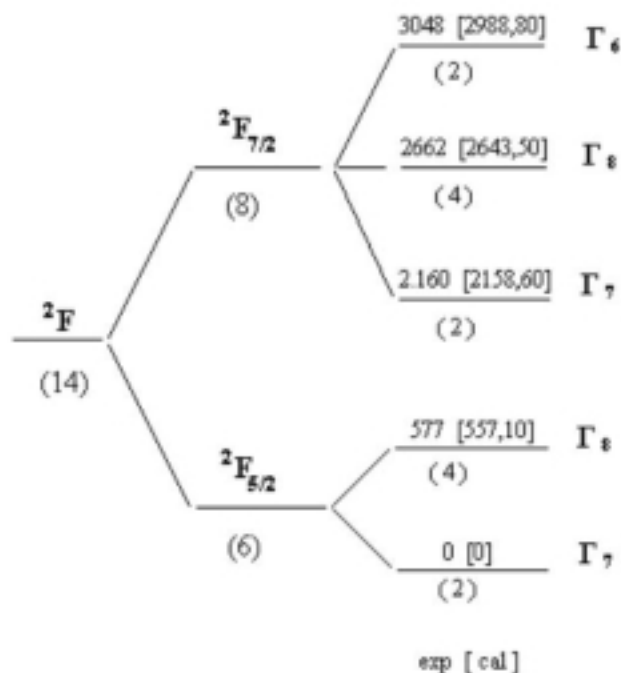


Figura 2. Niveles de Energías para el Sistema  $\text{Cs}_2\text{NaCeCl}_6$

Estas estructuras presentan alta simetría y en consecuencia se aplican en forma natural una serie de restricciones matemáticas, conocidas como “reglas de selección”. La situación más simple corresponde a la regla de selección de paridad debida a Lapporte, la cual se basa en la propiedad conocida que si el integrando es impar, e integramos sobre todo el rango de la variable, entonces el valor de la integral se anula idénticamente.

La existencia experimental de espectros (imágenes digitalizadas, producto de la interacción radiación-materia) en el caso de estos sistemas cúbicos, requiere de una explicación general que va más allá de la regla de selección estática de Lapporte, a la cual hacíamos referencia. El estudio de estas reglas de selección puede ser encontrado en referencias más específicas [3], y no será discutida en este artículo.

## Observaciones Finales

Una cantidad significativa de información experimental proveniente de la utilización de distintas técnicas instrumentales, tales como Infrarrojo,

Raman, Vibracional y Electrónico, se ha ido acumulando en las dos últimas décadas para sistemas del tipo elpasolitas. Ha sido nuestra preocupación la síntesis de estos compuestos y su caracterización estructural y espectroscópica, con el propósito de avanzar en la comprensión de los aspectos tanto básicos como posibles aplicaciones tecnológicas de estos compuestos.

De igual forma, hemos desarrollado esquemas de cálculo de complejidad creciente con el propósito de ser capaces de intentar explicar el observable físico que obtenemos de la naturaleza como consecuencia del experimento. Los modelos desarrollados son conceptualmente claros y precisos y las parametrizaciones excesivas son descartadas de plano. Nos interesa la calidad por sobre la cantidad y esto exige análisis conceptuales rigurosos y una capacidad de autocrítica importante. El camino por recorrer es largo y complejo: se trata de encontrar nuevos materiales, sintetizarlos y caracterizarlos y encontrar eventualmente sus aplicaciones tecnológicas (valor agregado de estas investigaciones).

Consideraciones técnicas, tanto generales como específicas, pueden ser encontradas en las referencias que se adjuntan a la bibliografía, esencialmente en revistas electrónicas. Invitamos al lector a revisar la bibliografía y contactarse con nosotros si desea escudriñar en este tipo de investigación, la cual es dura por definición, pero rigurosa intelectualmente. Es precisamente este conjunto de ideas que nos asombra día a día al examinar lo realizado y lo que queda por hacer.

## **Agradecimientos**

Al Proyecto VRA-2049 de la Vicerrectoría Académica de la Universidad Diego Portales por financiamiento parcial.

## **Referencias**

- Acevedo, R (1996). Átomos y Moléculas. Civitas Comunicaciones. Inscripción N° 96493. Primera Edición. Santiago. Chile.
- Acevedo, R. (2000). Elementos Introductorios en Espectroscopia Atómica y Molecular. Aplicaciones a Sistemas de Interés Espectroscópico. Red Internacional del Libro. Inscripción 116361. ISBN: 956-284-146-4. Santiago. Chile.

- Acevedo. R. & V. Poblete (1999a). Síntesis, Caracterización Estructural y Espectroscópica de Materiales Luminiscentes. Ciencia Abierta, 5, Mayo, <http://www.ciencia.cl/~cabierta>.
- Acevedo.R & Poblete.V. (1999b). Métodos de cálculo de fuerzas del oscilador en Física Atómica y Molecular. I.- Aplicaciones a sistemas cúbicos del tipo  $xy_4$ . Ciencia Abierta, 8, Noviembre. <http://www.ciencia.cl/~cabierta>.
- Bersuker. I.B & Polinger. V.Z (1989). Vibronic Interactions in Molecules and Crystals. Springer Series in Chemical Physics, 49. Springer-Verlag. Berlin-Heidelberg- New York- London- Paris- Tokyo & Hong Kong.
- DiBartolo, B. (Ed) (1980). Radiationless Proceses. ADVANCED STUDY INSTITUTE, 62, Plenum Press.
- Kauzmann, W (1957). Quantum Chemistry. Academic Press, New York, pág. 671

## Glosario

### **Acoplamiento de Espín Electrónico – Momentum Angular Orbital.**

Sabemos que los electrones presentan un momento magnético de origen angular y otro del tipo relativista, asociado al espín electrónico. De esta forma, hablamos de un momento magnético total, el cual se expresa como una suma vectorial simple de la forma:  $\mu = -\beta(\vec{l} + 2\vec{s})$ , de tal suerte que el cuadrado del momento magnético es:  $\mu^2 = \beta^2 [\hat{l}^2 + 4\hat{s}^2 + 4(\vec{l} \cdot \vec{s})]$ , donde el acoplamiento se refleja en el producto escalar:  $(\vec{l} \cdot \vec{s})$ .

**Anti-fluoritas.** Cristales de simetría cúbica, en los cuales los cationes poseen índice de coordinación igual a cuatro y los aniones, con un índice de coordinación ocho.

**Campo de potencial.** En los problemas que nos interesa abordar, se refiere a interacciones de largo alcance (Coulómbicas), las cuales corresponden a una suma de las interacciones de repulsión entre pares de electrones. Estas se expresan como productos de cargas de los pares dividido por la distancia que las separa.

**Capa de valencia.** Se refiere a los electrones ubicados en el nivel energético más externo, es decir con mayor valor de  $n$ , correspondiente al número cuántico principal.

**Condición de resonancia.** En el caso de transiciones electrónicas radiativas, en las cuales participan fotones, la condición de resonancia se establece por medio de la relación:  $\Delta E_{1 \rightarrow 2} = h\nu_{1 \rightarrow 2}$ , donde  $\nu_{1 \rightarrow 2}$  es la frecuencia de la

radiación que se precisa para satisfacer la diferencia de energías  $\Delta E_{1 \rightarrow 2}$ , entre los estados terminales “1” y “2”, respectivamente.

**Constante de Planck.** Su valor en el Sistema CGS de unidades es:  
 $h = 6,62 \cdot 10^{-27} \text{ erg.seg}$

**Contornos de probabilidad.** El problema a nivel atómico, y en la formulación de la mecánica cuántica nos indica que para el caso de sistemas hidrogenoides las soluciones (estados permitidos) dependen de los números cuánticos  $n, l, m_l, m_s, s, m_s$  y de las variables  $r, \theta, \phi$ , éstas últimas corresponden a las coordenadas polares esféricas ( $x_2 - x_1 = r \sin \theta \cos \phi$ ,  $y_2 - y_1 = r \sin \theta \sin \phi$ ,  $z_2 - z_1 = r \cos \theta$ , donde  $0 < r < \infty$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ ). Vemos que las coordenadas polares esféricas son utilizadas para representar el movimiento relativo del electrón con respecto del núcleo. De igual forma, los números cuánticos a nivel hidrogenoides toman los valores que se indican:

$$n = 1, 2, \dots, \infty$$

$$l = 0, 1, \dots, (n-1)$$

$$m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

$$s = 1/2$$

$$m_s = \pm 1/2$$

correspondientes a números cuánticos: principal ( $n$ ), secundario ( $l$ ), magnético ( $m_l$ ), espín ( $s = 1/2$ ) y ( $m_s$ ) componente del espín a lo largo del eje Z, correspondientemente. De esta forma, es costumbre escribir los estados permitidos de la forma:  $\Psi_{n,l,m_l,1/2,m_s}$ , y de esta forma introducir los contornos de probabilidad (caso estacionario) como los productos del tipo:  $\Psi_{n,l,m_l,1/2,m_s}^* \Psi_{n,l,m_l,1/2,m_s} dv$ , los cuales para un tiempo dado ( $t = t_0$ ), se interpretan como la probabilidad de encontrar, en este caso el electrón del átomo de Hidrógeno en el elemento de volumen, representado por  $dv$ . De esta forma, si sumamos sobre todo el espacio físico, los productos señalamos el valor será la unidad. Todo lo anterior, se traduce en que, no obstante la imposibilidad de conocer la posición y el momentum lineal del electrón ( $p = mv$ ), en forma simultánea, en cualquier instante dado de tiempo, el electrón debe encontrarse en algún punto volumen del espacio físico. De esta

forma, surgen los contornos de probabilidad como aquellos productos de estados permitidos, los cuales al ser multiplicados por elementos de volumen tienen asociadas probabilidades de ocurrencia distintas de cero.

**Defectos.** La presencia de éstos se traduce en una pérdida de la periodicidad de la estructura cristalina, en el caso ideal la estructura cristalina es perfecta, es decir, cada átomo tiene una única posición cristalina. En el caso real pueden existir aleatoriamente posiciones no ocupadas, o algunas posiciones ocupadas por más de un tipo de átomo. A este hecho se le denomina defecto cristalino.

**Degeneración accidental.** En el caso del átomo de Hidrógeno, al despreciar los términos de origen y naturaleza relativista se encuentra que las energías de

los estados permitidos se expresan de la forma que se indica:  $E_n = -\frac{Z^2 E_H}{n^2}$ ,

donde el número cuántico principal toma los valores que se indican:  $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ . De igual forma, sabemos que el número de funciones permitidas sigue la regla,

del cuadrado de “n”. De esta forma, para  $n=2$ , tendremos un total de 4 funciones con igual energía y así sucesivamente para valores mayores de n. Esta degeneración energética es simplemente accidental, por cuanto al introducir correcciones relativistas se produce una ruptura de esta degeneración.

**Densidades Efectivas de Cargas.** Es costumbre en la literatura, introducir los conceptos de estado de oxidación, carga iónica parcial y carga formal. Así, el estado de oxidación se estima suponiendo que la polarización de la densidad de cargas entre los núcleos enlazados es de un 100 %. En el otro extremo, se encuentra el concepto de carga formal en el cual se supone que los núcleos enlazados comparten la carga electrónica equitativamente. La aproximación más razonable a la carga efectiva sobre cada uno de los núcleos constituyentes del sistema corresponde a la carga iónica parcial (éste es estimado a partir del grado de polarización efectivo de la densidad de cargas electrónico).

**Difracción de neutrones.** Al incidir un haz de neutrones en un blanco, ocurren tres fenómenos competitivos; dispersión, transmisión y absorción de neutrones (partículas de masa 1,0089300 uma y sin carga). Como resultado del alto poder de penetración de estas partículas, éstos interactúan con la totalidad de la muestra. De esta forma, resulta posible, separar los fenómenos



de transmisión y absorción de los procesos de dispersión. Finalmente, al incidir los neutrones sobre la muestra, la sección eficaz de choque se define como el número de interacciones por segundo sobre el flujo de los neutrones incidentes.

**Difracción de rayos X.** La difracción es la modificación que experimentan todas las ondas en movimiento al pasar por los bordes de cuerpos opacos, al atravesar estrechas hendiduras o agujeros o al ser reflejadas desde superficies rayadas. Las partes del frente de ondas que atraviesan el agujero, por ejemplo, se extienden y forman en efecto un nuevo frente de onda que emerge del agujero. El fenómeno de difracción de energía radiante, tiene particular importancia en análisis de muestras, en conjunción con monocromadores de rejilla para la separación de la radiación policromática en sus diversos componentes de longitud de onda. Adicionalmente, la difracción de rayos X tiene aplicaciones analíticas directas y de gran importancia. Una fuente de estos rayos consiste de un tubo de vacío de dos electrodos con los accesorios necesarios para el suministro de energía eléctrica. Un cátodo calentado eléctricamente y cargado con carga negativa emite electrones, los cuales y después de experimentar una considerable aceleración, inciden sobre un electrodo cargado positivamente. En este electrodo (ánodo), gran parte de la energía cinética de los electrones incidentes se convierte en calor, sin valor práctico. No obstante, una parte de la energía cinética perdida por los electrones que son detenidos por el ánodo da como resultado excitación electrónica de los átomos que constituyen el ánodo. Cuando estos átomos excitados regresan espontáneamente a estados no excitados, o menos excitados, se emite radiación electromagnética. Si el potencial de aceleración en el interior del tubo y la composición química del ánodo han sido escogidos apropiadamente, gran parte de esta radiación emitida está en la región de los rayos X del espectro electromagnético. Algunos tubos de rayos X están llenos de gas, en vez de evacuados y fragmentos de ionización de las moléculas del gas contribuyen al flujo de corriente del tubo. En cualquiera de los tipos de tubos de rayos X, lleno de gas o evacuado, la intensidad (número de fotones por unidad de tiempo) está determinada por la magnitud de la corriente eléctrica que incide en el ánodo. El espectro de emisión consiste de algo de radiación policromática, al igual que de radiación bastante intensa a longitudes de ondas correspondientes a las diferencias de niveles de energías electrónicos dentro de los átomos de que está compuesto el ánodo. Es importante, observar que el potencial de aceleración de electrones en el interior del tubo de rayos X ha de ser suficiente para producir las transiciones

electrónicas apropiadas dentro de los átomos del ánodo, de otro modo no ocurre radiación X.

**Difracción de rayos X en polvos.** Un cristal plano reflejará un haz de rayos X, cuando se satisface la relación:  $n\lambda = 2d_{h,k,l} \sin\theta$ , donde el entero  $n$  se conoce como el orden de reflexión y  $\lambda$  es la longitud de ondas de la radiación. Acá  $\theta$  es el ángulo de reflexión desde el plano (h,k,l), no obstante que en la mayoría de los experimentos se mide el ángulo  $2\theta$ .

**Directamente coordinado e índice de coordinación.** Corresponde al número de átomos vecinos más cercanos, directamente enlazados al átomo en referencia.

**Dispersión del haz de electrones.** Esta se produce por efecto de un campo externo, como es el caso del experimento de Stern-Gerlach.

**Eficiencia Cuántica.** Corresponde al cociente del número de quantum emitidos al número de quantum absorbido.

**Eficiencia Radiante.** Se define como el cociente de la potencia luminiscente emitida a la potencia del haz de electrones sobre el fósforo.

**Espectrometría Gamma Rápida.** Técnica experimental asociada a los reactores nucleares, y se basa en la medición de la radiación gamma emitida durante la formación del núcleo compuesto, en la primera etapa de la reacción nuclear de captura neutrónica. Esta emisión gamma es característica de cada átomo.

**Espectros.** El prefijo espectro se refiere a un espectro como el que se forma por dispersión de un haz policromático de energía radiante en las longitudes de ondas que lo componen, con la ayuda de un prisma o una rejilla. Por ejemplo, un colorímetro es un instrumento utilizado para la medición del color o longitud de onda de la energía radiante y un fotómetro se usa para medir la intensidad de la radiación. Observe que “intensidad de la radiación” se refiere esencialmente al número de fotones por unidad de tiempo, y no así a la cantidad de energía por fotón.

**Espectroscopía.** Corresponde a un conjunto de técnicas que se utilizan para la caracterización, identificación y análisis de materiales. En este sentido un

espectrómetro es un dispositivo cuyo rol es dispersar la energía radiante en un espectro y que permite la medición de las longitudes de onda de esa radiación. Este dispositivo, también permite medir intensidades, en este último caso puede ser denominado espectrofotómetro. El término espectrógrafo se refiere en general a un espectrómetro o a un espectrofotómetro en el cual los datos son registrados fotográficamente, aunque a menudo los términos espectrómetro y espectrógrafo se usan como sinónimos. De igual forma, se emplea bastante otra palabra que se coloca a continuación de la designación del instrumento para indicar la región del espectro electromagnético a que corresponden las mediciones, por ejemplo: espectrómetro infrarrojo, fotómetro visible y espectrómetro de rayos X.

**Estados excitados permitidos.** Son todos aquellos estados del tipo  $\Psi_{n,l,m_l,1/2,m_s}(r,\theta,\phi)$ , caracterizados por  $n = 2,3,\dots,\infty$ .

**Experimento de Mulliken.** En esta experiencia, se dispone de un haz de electrones y se demuestra que en ausencia de campo externo, el haz de electrones se desplaza en forma rectilínea.

**Fluorescencia de Rayos-X.** Los rayos-X interactúan con los electrones constitutivos de un átomo, emitiendo fotoelectrones y rayos-X característicos. De esta forma se puede saber que tipos de elementos constituyen una muestra (técnica de caracterización instrumental), mediante la medición de la energía de estos rayos-X.

**Fotones.** La energía de la radiación electromagnética consiste de pequeños paquetes, llamados fotones o cuantos. La expresión  $E = h\nu$ , nos indica que E es la energía por fotón, h es la constante de Planck y  $\nu$  es la frecuencia de la radiación.

**Frecuencia de radiación.** La velocidad de la luz en el vacío es  $c = 3,00 \cdot 10^{10} \text{ cm/seg}$ , y ésta se relaciona con la frecuencia  $\nu$  de la radiación por medio de la relación:  $c = \lambda\nu$ , donde  $\lambda$  es la longitud de ondas de la radiación. De esta forma, la energía es:  $E = h\nu = h\left(\frac{c}{\lambda}\right) = (hc)\bar{\nu}$ , donde  $\bar{\nu}$  se conoce como el número de ondas de la radiación.

**Grupo Espacial Fm3m.** Existen 232 grupos espaciales cristalográficos espaciales, el correspondiente al Fm3m es el listado con el número 225 en las

Tablas Cristalográficas. Se trata de una estructura cúbica, centrada en las caras, con los generadores de simetría :  $\bar{3}$  eje de rotación de orden 3 y además es punto de inversión,  $4/m$  eje de rotación de orden 4 perpendicular a un plano de reflexión  $m$ ,  $2/m$  eje de rotación de orden 2 perpendicular a un plano de reflexión.

**Higroscopicidad.** Absorbe agua de la atmósfera con la consecuente licuefacción. Sistemas inestables en contacto con la atmósfera.

**Índice de Coordinación.** Se refiere al número de sub-sistemas (ligandos) directamente enlazados al átomo central. Así por ejemplo, en el sistema  $Cr(CN)_6^{3-}$ , existen seis ligandos cianuros ( $CN^{1-}$ ) directamente coordinados al ion Cromo (+3).

**Número cuántico.** Los números cuánticos aparecen en forma natural, cuando se describen fenómenos a escala microscópica. Señalamos que en el caso del átomo de Hidrógeno, y en el modelo del físico Schrödinger, los estados permitidos son de la forma :  $\Psi_{n,l,m_l,1/2,m_s}(r,\theta,\phi)$ , donde vemos que éstos están determinados por determinados valores de los números cuánticos, tanto orbitales  $(n,l,m_l)$  como los de espín electrónico  $(s=1/2, m_s = \pm 1/2)$ .

**Orbitales atómicos.** Corresponden a estados permitidos del tipo:  $\Psi_{n,l,m_l,1/2,m_s}(r,\theta,\phi)$ , soluciones de las ecuaciones de movimiento para estados estacionarios del átomo de Hidrógeno. Así, tenemos algunos ejemplos tales como:

$n=0, l=0, m_l=0, s=1/2, m_s = \pm 1/2 \rightarrow (1,0,0,1/2,+1/2)$  y  $(1,0,0,1/2,-1/2)$  correspondientes a los estados  $1s(\alpha)$  y  $1s(\beta)$ , respectivamente, y así sucesivamente para estados de mayor energía. El ejemplo anterior nos indica que el estado de menor energía para el átomo de Hidrógeno podemos representarlo por funciones del tipo  $1s$ , ya sea con espín electrónico  $\alpha$  o  $\beta$ , ambos estados con igual probabilidad de ocurrencia.

**Principio de Conservación de la Energía.** De acuerdo al primer Principio de la Termodinámica, la energía de un sistema aislado debe ser una constante. Es corriente, en la literatura, escribir este Principio de acuerdo a la relación:

$dE = dq - dw_{\text{int}}$ . En esta expresión  $dq$  es la variación infinitesimal de calor y  $dw_{\text{int}}$  es el trabajo realizado por el sistema (trabajo interno).

**Principio de Exclusión de Pauling.** Es un caso particular del Principio de Antisimetría, el cual establece que la función de ondas total en el caso de fermiones es anti-simétrica al intercambio de las coordenadas de pares de electrones cualesquiera. En la práctica, el Principio de Exclusión se traduce en la aseveración que nos señala que, en un átomo, ión o molécula no pueden existir dos o más electrones, caracterizados por poseer valores idénticos para los cuatro números cuánticos principales. .

**Problema de muchos cuerpos.** Se refiere a sistemas en los cuales existen núcleos y electrones.

**Procesos radiativos.** Tanto en absorción como en emisión de radiación electromagnética participan fotones, los cuales son absorbidos o emitidos. Estos quantum de energía  $E = h\nu$ , dan origen a este tipo de procesos.

**Procesos no radiativos.** En estos procesos se produce una liberación de calor al cristal, como producto del decaimiento desde estados de alta energía a otros de menor energía.

**Propiedades Espectroscópicas.** En general se refieren a variables dinámicas que son extraíbles a partir de los espectros de las muestras. Estas propiedades son esencialmente eléctricas, ópticas y magnéticas.

**Ruptura de la degeneración.** A nivel Hidrogenoide, existe un momentum angular total el cual puede ser escrito como una suma de dos contribuciones; la de momentum angular orbital y la correspondiente al momentum angular de espín electrónico. Todo lo anterior, lo podemos escribir como una suma de dos operadores cuánticos, tal como se indica:  $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ . De esta forma, vemos que el cuadrado de este momentum es:  $\hat{j}^2 = \hat{l}^2 + \hat{s}^2 + 2(\hat{l} \cdot \hat{s})$ . Esto indica la existencia de un acoplamiento entre el momentum angular orbital ( $\hat{l}$ ) y el momentum angular de espín electrónico ( $\hat{s}$ ), lo cual se refleja en el producto de operadores:  $(\hat{l} \cdot \hat{s})$ . Este último término corresponde al llamado acoplamiento espín-órbita, el cual es un término que permite explicar el desdoblamiento de los niveles de energías permitidos para el átomo de Hidrógeno. Una regla hidrogenoide simple, nos indica que: “Los niveles de

energías se llenan de acuerdo a valores crecientes de la suma de “ $n + l$ ”. Si dos o más niveles presentan igual valor para esta suma, entonces se debe llenar primero el nivel que presente el menor valor del número cuántico principal  $n$ ”

**Sistemas Cristalinos Dopados.** Dopar un cristal es una herramienta poderosa en la caracterización estructural y espectroscópica de sistemas. En términos generales, lo que se hace es remplazar en forma aleatoria un ión del cristal por otro (teniendo presente que los radios iónicos son muy cercanos en valor). Esto permite, en un primer orden de aproximación suponer que en zonas del cristal con mayor densidad del ion de dopaje, se “preserve la simetría translacional”. Este es, ciertamente una aproximación grusa, sin embargo importante desde un punto de vista práctico. El dopaje, desde un punto de vista espectroscópico produce corrimientos (desplazamientos) de las líneas espectrales y en otra áreas, el dopaje puede ser utilizado para enfatizar o inhibir alguna propiedad, de interés.

**Transiciones del tipo  $f \rightarrow f$ .** Son excitaciones electrónicas entre estados de igual valor del número cuántico secundario (azimutal), corrientemente designado por  $l = 3$ , de modo que se satisface la relación:  $\Delta l = 0$ .

**Unidad Electroestática de carga. UES- Sistema CGS.** Existen dos sistemas de unidades: MKS (metro-kilógramo-segundo) y CGS (centímetro-gramos-segundos). En lo que dice relación a la carga eléctrica, en el primer de estos sistemas la unidad es el Coulomb (C) y en el segundo es el ues (unidad electrostática de cargas). La conversión es:  $1C = 2,998 \cdot 10^9 \text{ ues}$ .

**Vacancias.** Ausencia de algunos átomos en el sitio o los sitios, en los cuales deberían estar por consideraciones de simetría.

**Roberto Acevedo** es Profesor Titular de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile. En 1974, recibe el grado académico de Licenciado en Filosofía, mención en Química de la Universidad de Chile y en Agosto de 1981 el de Doctor of Philosophy de la Universidad de Londres. Ha realizado estudios de postdoctorado en las Universidades de Londres (UK) y en la Universidad de Virginia (USA). Su interés principal es el ejercicio de la docencia y de la investigación, habiendo publicado los libros “Átomos y Moléculas” (Editorial Cyvitas Comunicaciones, 1996) y “Elementos Introdutorios en Espectroscopía Atómica y Molecular. Aplicaciones a Sistemas de Interés Espectroscópico” (Editorial Red Internacional del Libro, 2000). Ha dirigido, en el postgrado cinco tesis de Magíster y cinco de Doctorado. Posee una serie de membresías en el Reino Unido y en Estados Unidos de América, es miembro del Comité Editorial del Asian Journal of Molecular Spectroscopy y Editor de la Revista Electrónica Ciencia Abierta. Ha publicado más de 180 trabajos en revistas prestigiosas nacionales e internacionales.

**Gustavo Navarro** Licenciado en Física de la Universidad Católica de Valparaíso (1992), y se encuentra culminando sus estudios conducentes al grado académico de Doctor en Ciencias de la Ingeniería con mención en Ciencias de los Materiales en la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile. Trabaja en el Grupo de Reactores del Centro Nuclear La Reina de la Comisión Chilena de Energía Nuclear.