

DEPARTAMENTO: QUÍMICA

DISCIPLINA: Introdução à Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios-X

SIGLA: XPS

CARGA HORÁRIA TOTAL: 60 horas

TEORIA: 60 horas

PRÁTICA:

CURSO: Doutorado Acadêmico em Química Aplicada

PRÉ-REQUISITOS:

PROFESSOR RESPONSÁVEL: Julio César Sagás

EMENTA

Estrutura eletrônica de átomos, moléculas e sólidos. Interação de raios-X com a matéria. Princípio de funcionamento da espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (XPS). Instrumentação para XPS. Referência de energia e compensação de carga. Interpretação do espectro: análise qualitativa e quantitativa.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1 – Estrutura eletrônica de átomos, moléculas e sólidos

- 1.1. Átomos multieletrônicos e números quânticos;
- 1.2. Efeito spin-órbita;
- 1.3. Moléculas e ligações químicas;
- 1.4. Sólidos: estrutura eletrônica, bandas e nível de Fermi;
- 1.5. Superfícies.

2 – Interação de raios-X com a matéria

- 2.1. Difração de raios-X;
- 2.2. Efeito fotoelétrico;
- 2.3. Fluorescência de raios-X;
- 2.4. Efeito Auger.

3 – Princípio de funcionamento da espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (XPS)

- 3.1. Relação entre energia de ligação dos elétrons e ligações químicas;
- 3.2. Profundidade de medida;
- 3.3. Seções de choque.

4 – Instrumentação para XPS

- 4.1. Sistema de vácuo;
- 4.2. Fontes de raios-X;
- 4.3. Monocromador;
- 4.4. Espectrômetro;
- 4.5. Instrumentos adicionais.

5 – Referência de energia e compensação de cargas

- 5.1. Referência de energia para condutores;
- 5.2. Referência de energia para isolantes;
- 5.3. Métodos para compensação de carga.

6 – Interpretação do espectro: análise qualitativa e quantitativa

- 6.1. Forma do espectro;
- 6.2. Fotopicos;
- 6.3. *Background*;
- 6.4. Perdas de energia;
- 6.5. Picos Auger;
- 6.6. Efeitos de estado inicial e efeitos de estado final;
- 6.7. Determinação da composição química;
- 6.8. Ajuste de curvas: determinação do estado químico;
 - 6.8.1. Forma das curvas;
 - 6.8.2. Dubletos;
 - 6.8.3. Vínculos;
 - 6.8.4. Parâmetros de ajuste.
- 6.9. Análise de componente principal;
- 6.10. Estudos de caso.

BIBLIOGRAFIA

BÁSICA:

1. VAN DER HEIDE, PAUL. *X-ray photoelectron spectroscopy: an introduction to principles and practices*. Hoboken: J. Wiley & Sons, c2012. xvii, 241 p. ISBN 9781118062531 (broch.).
2. FRED A. STEVIE and CARRIE L. DONLEY. *Introduction to x-ray photoelectron spectroscopy*. *Journal of Vacuum Science & Technology A* 38, 063204 (2020); <https://doi.org/10.1116/6.0000412>.
3. D.R. BAER, K. ARTYUSHKOVA, H. COHEN, C.D. EASTON, M. ENGELHARD, T.R. GENGENBACH, G. GRECZYNSKI, P. MACK, D.J. MORGAN, A. ROBERTS. *XPS guide: Charge neutralization and binding energy referencing for insulating samples*, *J. Vac. Sci. Technol. A* 38 (2020) 031204. doi:10.1116/6.0000057.
4. G. GRECZYNSKI, L. HULTMAN. *X-ray photoelectron spectroscopy: Towards reliable binding energy referencing*, *Prog. Mater. Sci.* 107 (2020) 100591. doi:10.1016/j.pmatsci. 2019. 100591.

COMPLEMENTAR:

1. TIPLER, P. A.; LLEWELLYN, R. A. Física Moderna. 3ª. Edição. Rio de Janeiro: LTC, 2001. 515 p.
2. EISBERG, R.; RESNICK, R. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. Rio de Janeiro: Campus, 1979. 928 p.
3. BEISER, A. Conceitos de Física Moderna. São Paulo: Polígono, 1969. 458 p.
4. REZENDE, S. M. Materiais e Dispositivos Eletrônicos. 4ª. Edição. Livraria da Física, 2015.
5. G. GRECZYNSKI, L. HULTMAN. *The same chemical state of carbon gives rise to two peaks in X-ray photoelectron spectroscopy*, Sci. Rep. 11 (2021) 1-5. doi:10.1038/s41598-021-90780-9.

Centro de Ciências Tecnológicas – CCT
Rua: Paulo Malschitzki, 200 – Campus Universitário Prof. Avelino Marcante
Zona Industrial Norte – CEP: 89219-710
Fone: (47) 3481-7900
Joinville – Santa Catarina – Brasil