UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA – PPGQ

DEPARTAMENTO: QUÍMICA

DISCIPLINA: Tópicos Especiais em Química IV – Introdução à Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios-X	**SIGLA:** XPS (TOE-IV)

CARGA HORÁRIA TOTAL: 60 horas	**TEORIA:** 60 horas	**PRÁTICA:**

CURSO: Mestrado 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