

## **Disciplina Introdução a Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios-X - CH 4**

**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.

- 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 Sistemade 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 Determinaçãoda 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. StevieandCarrie L. Donley, Introduction to x-ray photoelectron spectroscopy, Journal of Vacuum Science & Technology A38, 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.