PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO: Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais

DISCIPLINA: Tópicos Especiais - Introdução a Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios-X	**SIGLA**: TE2-XPS

CARGA HORÁRIA TOTAL: 60 ha	**TEORIA: 60**	**PRÁTICA: 00**

CURSO: Doutorado e Mestrado em Ciência e Engenharia de Materiais

PRÉ-REQUISITOS: Nenhum.

PROFESSOR RESPONSÁVEL: Abel André C Recco

E M E N T A
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.

Pág. 01 de 03 - Documento assinado digitalmente. Para conferência, acesse o site https://portal.sgpe.sea.sc.gov.br/portal-externo e informe o processo UDESC 00044843/2021 e o código 7UG18G6B.

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

Pág. 02 de 03 - Documento assinado digitalmente. Para conferência, acesse o site https://portal.sgpe.sea.sc.gov.br/portal-externo e informe o processo UDESC 00044843/2021 e o código 7UG18G6B.

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.

Pág. 03 de 03 - Documento assinado digitalmente. Para conferência, acesse o site https://portal.sgpe.sea.sc.gov.br/portal-externo e informe o processo UDESC 00044843/2021 e o código 7UG18G6B.

Assinaturas do documento

Código para verificação: **7UG18G6B**

Este documento foi assinado digitalmente pelos seguintes signatários nas datas indicadas:

ABEL ANDRE CANDIDO RECCO em 04/11/2021 às 07:07:44
Emitido por: "SGP-e", emitido em 30/03/2018 - 12:35:41 e válido até 30/03/2118 - 12:35:41.
(Assinatura do sistema)

Para verificar a autenticidade desta cópia, acesse o link https://portal.sgpe.sea.sc.gov.br/portal-externo/conferencia-documento/VURFU0NfMTIwMjJfMDAwNDQ4NDNfNDQ5MzhfMjAyMV83VUcxOEc2Qg== ou o site https://portal.sgpe.sea.sc.gov.br/portal-externo e informe o processo **UDESC 00044843/2021** e o código **7UG18G6B** ou aponte a câmera para o QR Code presente nesta página para realizar a conferência.