

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 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 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.