

Máster Interuniversitario en Química Aplicada

DATOS DE LA ASIGNATURA

Fundamental

Especialidad

Denominación: Estudio de materiales por difracción de rayos X y XPS

Código:

Plan de Estudios: Master Interuniversitario en Química Aplicada

Créditos ECTS: 4

Cuatrimestre: 1^o

Horas de trabajo presencial:

Horas de trabajo no presencial:

Idioma en que se imparte:

Plataforma virtual:

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los resultados de aprendizaje de la asignatura son dobles. En primer lugar, el alumno adquirirá las herramientas básicas (y habilidades) para extraer la información, de manera práctica, presente en el difractograma de polvo de rayos-X de un material. El alumno realizará ejemplos de indexación, determinación del grupo espacial, afinamiento estructural y de cuantificación de fases cristalinas aplicando el método de Rietveld. Por tanto, se abordan los principios de la difracción y, en especial, del método de Rietveld, para la correcta determinación/optimización de una estructura cristalina. De igual manera se describirán las diferentes bases de datos usadas en cristalografía y se hará hincapié en los parámetros a considerar para la correcta toma de datos. Además, se explicarán otros usos avanzados de la difracción de rayos-X incluyendo el seguimiento de la evolución de las estructuras cristalinas en condiciones no ambientales (temperatura, presión y humedad) así como el uso de radiaciones especiales como los rayos-X sincrotrón y neutrones. En segundo lugar, el alumno adquirirá los conocimientos básicos y avanzados que le permitan el análisis de espectros de XPS-Auger desde un punto de vista práctico, mediante el uso del programa Multipak. Asimismo podrá interpretar la información espectral que le permita realizar un análisis cuantitativo de cualquier tipo de superficie y el conocimiento del estado químico de cada elemento (estado de oxidación y en algunos casos tipo de coordinación) en dicha superficie. Tendrá acceso al uso de técnicas avanzadas como ARXPS (XPS de ángulo resuelto), estudios de perfiles de profundidad mediante plasma y "Mapping" mediante análisis de imagen.

CONTENIDOS

- Estudio de estructuras cristalinas por difracción de rayos-X: toma de datos y bases cristalográficas.
- Métodos de indexación. Determinación del grupo espacial y metodologías para la resolución de las estructuras cristalinas a partir de datos de difracción de polvo.
- Principios y aplicaciones del Método de Rietveld: afinamiento estructural, cuantificación y análisis microestructural.
- Técnicas de difracción de polvo sincrotrón y de neutrones. Estudio del orden local.
- Análisis de superficies: Definición de superficie, Técnicas de análisis de superficie, Espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS). Espectroscopía Auger.

- Hardware y software de XPS y Auger: Sistemas de ultra alto vacío. Fuentes de Rayos X. Sistemas de analizadores. Sistemas con monocromador. Programas de análisis espectral.
- Interpretación espectral: Distinción de señales de fotoemisión y Auger. Identificación de señales. Ajustes de curvas espectrales y deconvolución.
- Estudio práctico de espectros de XPS/Auger: Análisis de muestras de interés. Interpretación de resultados. Análisis diferencial.

OBSERVACIONES

Las competencias específicas de esta materia son:

CEM1: Planificar y desarrollar proyectos y experimentos así como relacionar entre sí distintas especialidades científicas (carácter interdisciplinar).

CEM2: Desarrollar la capacidad de transportar conceptos específicos de un área a otros ámbitos científicos-tecnológicos.

COMPETENCIAS

Competencias Básicas y Generales:

Código	Competencia
CG1	Que los estudiantes sean capaces de participar en equipos multidisciplinares encargados del diseño y desarrollo de proyectos científicos y/o profesionales.
CG2	Que los estudiantes desarrollen su capacidad para alcanzar la excelencia en el trabajo que realicen.
CG3	Que los estudiantes sean capaces de adoptar decisiones de forma eficaz en el desarrollo de su labor profesional y/o investigadora.
CG5	Que los estudiantes sepan interpretar los resultados experimentales a la luz de las teorías aceptadas y emitir hipótesis conforme al método científico y defenderlas de forma argumentada

Competencias Transversales:

Código	Competencia
CT1	Que el estudiante conozca la necesidad de completar su formación científica en idiomas e informática mediante la realización de actividades complementarias
CT2	Que el estudiante sepa utilizar herramientas de información y comunicación que permitan plantear y resolver problemas nuevos dentro de contextos relacionados con su área de estudio.

Competencias Específicas:

Código	Competencia
CE1	Analizar las necesidades de información que se plantean en el entorno de la aplicación de diferentes metodologías avanzadas en Química
CE4	Capacidad de aplicar y adaptar los modelos teóricos y las técnicas específicas, tanto a problemas abiertos en su línea de especialización como a problemas provenientes de otros ámbitos, ya sean científicos o técnicos
CE5	Adquirir los fundamentos de la teoría de grupos y aplicarla en la interpretación y resolución de problemas de interés químico
CE9	Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas, así como exponer y defender públicamente el desarrollo, resultados y conclusiones de su trabajo
CE14	Capacidad de correlacionar la estructura química con las propiedades de los

compuestos químicos

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Clases teóricas	12	100
Clases prácticas	16	100
Seminarios	2	100
Trabajo no presencial	70	0

METODOLOGÍAS DOCENTES

Actividades presenciales (dirigidas y/o supervisadas)
Actividades no presenciales

SISTEMAS DE EVALUACIÓN

Sistema de Evaluación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
Evaluación continua	40	40
Examen final	60	60

BIBLIOGRAFÍA

El método de Rietveld. Editor: Esteve, V. (ed). Publicacions de la Universitat Jaume I. Castellón. (2014).

The Rietveld Method. Young, R. A. (ed). Oxford University Press. Oxford. (1993).

Characterisation methods in Inorganic Chemistry, M.T. Weller, N.A. Young, Oxford University Press (2017)

Powder Diffraction: Theory and Practice. R.E. Dinnebier and S.J.L. Billinge. RSC Publishing (2008).

Structural and chemical analysis of materials. X-rays, Electron and neutron diffraction. X-ray, electron and ion spectrometry, Electron microscopy. JP Eberhart. John Wiley & Sons, Inc. (1991).

Synchrotron Radiation and biophysics. (ed.) SS Hasnain. Ellis Horwood (1991).

Introduction to X-ray Powder Diffractometry. R Jenkins & RL Snyder. John Wiley (1996).

Characterization of Nanophase Materials. (ed.) Zhong Lin Wang . John Wiley (1999).

Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials. VK Pecharsky & PY Zavalij. Kluwer Academic Publishers (2003).

“Rietveld refinement guidelines”. L. B. McCusker, R. B. Von Dreele, D. E. Cox, D. Louër and P. Scardi. J. Appl. Cryst. (1999) 32, 36-50.



Wagner CD, Riggs WM, Davis LE, Moulder JF. Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy. G Muilenberg (ed), Perkin-Elmer: MN, **(1979)**.

Moulder JF, Stickle WF, Sobol PE, Bomben KD. Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy. (2nd edition), J. Chastain (ed), Perkin-Elmer: MN, **(1992)**.

Practical Surface Analysis by Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy. vol. 1, (2nd edition) Briggs D, Seah MP (eds). John Wiley & Sons: Chichester **(1990)**

LaSurface Web Site, (<http://www.lasurface.com>) in conjunction with Thermo Fisher Scientific, France Crist BV. XPS International Web Site. XPS International LLC: <http://www.xpsdata.com>). USA, **(1997-2007)**