

# Curso práctico de XPS

Dr. Israel Pérez

Cátedra CONACYT asignado a la Universidad Autónoma de Ciudad Juárez

[israel.perez@uacj.mx](mailto:israel.perez@uacj.mx)

Dr. Guillermo Herrera-Pérez

Cátedra CONACYT asignado al CIMAV Chihuahua,

[Guillermo.herrera@cimav.edu.mx](mailto:Guillermo.herrera@cimav.edu.mx)

## Día 1: Dr. Israel Pérez

Teoría básica de XPS6

- 12:00-12:40 Principio de operación
- 12:40-13:00 Instrumentación de XPS

### Cálculos ab-initio de espectro de XPS de la banda de valencia

- 13:00-14:00 Cálculos de primeros principios del espectro XPS de la banda de valencia

## Día 2: Dr. Guillermo Herrera

Uso del programa CASAXPS1. Consulta del handbook del XPS2. Base de datos de La Trobe3.

- Convertir archivos de formato txt a formato VAMAS, uso de la librería Scofield
- Análisis de una región de Ti 2p por componentes. Forma de línea, fondo tipo Tougaard, tipo Shirley. Uso del residual.
- Componentes Ti 2p  $\frac{1}{2}$  y Ti 2p $\frac{3}{2}$  considerando 1 estado de oxidación
- Componentes Ti 2p  $\frac{1}{2}$  y Ti 2p $\frac{3}{2}$  considerando 2 estado de oxidación
- Cuantificación del % atómico
- preguntas y graficado en Origin Pro4
- sesión de preguntas
- salvar datos de salida, exportar a Origin Pro.
- Presentación de las curvas en Origin Pro.

## Día 3: Dr. Guillermo Herrera

Uso del programa CTM4XAS5

- presentación de ventanas de trabajo. Método de Hartree-Fock.
- Ventana aproximación de ion libre. Parámetros Estado de oxidación
- Ventana efectos del campo cristalino. Parámetros, energía del campo cristalino, simetría
- Ventana efectos transferencia de carga. Parámetros, energía de la transferencia de carga, repulsión Coulombiana y parámetro de hibridación.
- Generación de un espectro de XPS en aproximación de ión libre para la región del Ti 2p

## Día 4: Dr. Guillermo Herrera

Teoría multiplete

- Generación de un espectro de XPS en aproximación usando la teoría del campo cristalino para la región del Ti 2p.
- Generación de un espectro de XPS usando los efectos de la transferencia de carga para la región del Ti 2p
- Presentación de las curvas teórica y experimental en Origin Pro.
- Resumen y uso del programa Quases- REELS7
- Espectro REELS, análisis elemental usando x-ray databooklet8. Contribución elástica, contribución inelástica. Determinación de la brecha prohibida. Identificación de plasmones
- Modelado de la contribución inelástica: región del plasmon de superficie y plasmon de bulk usando Quases- REELS
- sesión de preguntas
- modelado de la contribución inelástica usando Quases- REELS

## Referencias

- 1 Descarga del programa CASAXPS <http://www.casaxps.com/>
- 2 Descarga del Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy: A Reference Book of Standard Spectra for Identification and Interpretation of XPS Data John F. Moulder Physical Electronics Division, Perkin-Elmer Corporation, 1992 - 261 páginas  
<https://www.cnyn.unam.mx/~wencel/XPS/MANXPS.pdf>
- 3 Base de datos XPSSurfA Universidad de La Trobe (darse de alta, previamente)  
<https://cmsshub.latrobe.edu.au/xpsdatabase>
- 4 Origin Pro <https://www.originlab.com/origin>
- 5 Descarga del programa CTM4XAS version 5.5  
<https://anorg.chem.uu.nl/CTM4XAS/software.html>
- 6 F. M. F. De Groot, A. Kotani Core level spectroscopy of solids. CRC Press, Boca Raton 2008 Descarga del libro vía  
[https://www.researchgate.net/publication/46709950\\_Core\\_level\\_spectroscopy\\_of\\_solids\\_CRC\\_Press\\_Boca\\_Raton](https://www.researchgate.net/publication/46709950_Core_level_spectroscopy_of_solids_CRC_Press_Boca_Raton)
- 7 Descarga del programa QUASES-XS-REELS  
<http://www.quases.com/products/quases-xs-reels/>
- 8 Descarga del libro X-ray Data Booklet [https://henke.lbl.gov/optical\\_constants](https://henke.lbl.gov/optical_constants)
- 9 Descarga el software XPS Peak41. Solo existe para Windows.  
<https://xpspeak.software.informer.com/4.1/>