

Curso teórico y virtual práctico de XPS

Dr. Israel Pérez

Cátedra CONACYT asignado a la Universidad Autónoma de Ciudad Juárez

israel.perez@uacj.mx

Dr. Guillermo Herrera-Pérez

Cátedra CONACYT asignado al CIMAV Chihuahua,

guillermo.herrera@cimav.edu.mx

Día 1: Dr. Israel Pérez

Teoría básica de XPS

- 12:00-12:20 Principio de operación y aplicaciones de XPS
- 12:20-12:40 Instrumentación de XPS
- 12:40-13:00 Señales y análisis cuantitativo
- 13:00-13:10 Preguntas
- Break 13:10-13:15

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

- 13:15-13:25 Cálculos de primeros principios del espectro XPS de la banda de valencia de Al
- 13:25-13:50 Graficado
- 13:50-14:00 Preguntas

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 $2p_{1/2}$ y Ti $2p_{3/2}$ considerando 1 estado de oxidación
- Componentes Ti $2p_{1/2}$ y Ti $2p_{3/2}$ considerando 2 estados 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 de trabajo para implementar el modelo de aproximación de ion libre. Parámetros, estado de oxidación, simetría esférica O.
- Ventana de trabajo para considerar los efectos del campo cristalino. Parámetros, energía del campo cristalino, simetría octaédrica O_h y tetragonal D_{4h}

- Ventana de trabajo para considerar los 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 ion libre para la región del Ti $2p$

Día 4: Dr. Guillermo Herrera

Teoría multiplete⁶

- 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
- 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 Sitio url para descargar el programa CASAXPS <http://www.casaxps.com/>

² Sitio url para descarga el 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 Sitio url para consultar la 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 Sitio url para descargar el programa CTM4XAS version 5.5 (versión gratuita) <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

⁷ Descarga del programa QUASES-XS-REELS (versión gratuita) <http://www.quases.com/products/quases-xs-reels/>

⁸ Descarga del libro X-ray Data Booklet https://henke.lbl.gov/optical_constants

⁹ Descarga el software XPS Peak41. Solo existe para Windows. <https://xpspeak.software.informer.com/4.1/>