

Guía docente de la asignatura

Espectrometrías de Rayos XFecha última actualización: 26/07/2021
Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 26/07/2021**Máster**

Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia

MÓDULO

Metodología e Instrumentación

RAMA

Ciencias

CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO

Escuela Internacional de Posgrado

Semestre	Segundo	Créditos	3	Tipo	Optativa	Tipo de enseñanza	Presencial
-----------------	---------	-----------------	---	-------------	----------	--------------------------	------------

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

Se recomienda cursar esta materia conjuntamente con la materia Caracterización de la Superficie de Sólidos.

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

Espectroscopias de absorción de rayos X: Absorción de rayos X (XRF), Espectroscopia de absorción de rayos X extendida a la estructura fina (EXAFS) y cerca de la discontinuidad de absorción: (NEXAFS, XANES). Espectroscopia de fluorescencia o emisión de rayos X (XRF): Fluorescencia de rayos X de longitud de onda dispersiva y de energía dispersiva. Espectrometría fotoelectrónica de rayos X (XPS): Fundamentos. Mecanismos que afectan a la deriva química y a la energía de enlace, acoplamientos. Instrumentación: Fuentes, detectores de electrones. Técnicas de difracción de rayos X (XRD): Radiación policromática y monocristal estacionario (M. de Laue), Radiación monocromática y monocristal móvil; Radiación monocromática y polvo cristalino.

COMPETENCIAS**COMPETENCIAS BÁSICAS**

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser



originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE12 - Aplicar metodologías para la caracterización y análisis de productos químicos.
- CE13 - Utilizar de forma adecuada equipos y técnicas para la caracterización estructural de compuestos (bio)químicos y de materiales industriales.
- CE14 - Utilizar de forma adecuada equipos y técnicas para la identificación de compuestos (bio)químicos y de materiales industriales.
- CE15 - Utilizar de forma adecuada equipos y técnicas para la cuantificación de compuestos (bio)químicos y de materiales industriales.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Al cursar esta materia el estudiante :

- Conocerá el fundamento de la información obtenida a partir de la zona próxima a la discontinuidad de absorción registrada en un espectro de absorción de rayos X.
- Discriminará entre los espectros de absorción de rayos X extendida a la estructura fina (EXAFS) y los obtenidos cerca de la discontinuidad de absorción: (NEXAFS, XANES).
- Conocerá la instrumentación utilizada en este tipo de técnicas y la ventaja de utilizar la radiación sincrotrónica.
- Conocerá el fundamento y la instrumentación más habitual (de sobremesa y portátil)



- utilizada en espectroscopia de fluorescencia o emisión de rayos X (XFS).
- Conocerá los parámetros de calidad de los métodos que utilizan sistemas de detección de longitud de onda dispersiva y de energía dispersiva.
 - Conocerá los fundamentos y parámetros químicos asociados a la espectrometría fotoelectrónica de rayos X (XPS).
 - Comprenderá los mecanismos que afectan a la deriva química y a la energía de enlace, acoplamiento.
 - Conocerá las características más relevantes de las fuentes y detectores de electrones utilizados.
 - Conocerá la base matemática sobre la que se soporta la difracción basada en la ley de Bragg.
 - Aprenderá las diferencias en el uso de los distintos tipos de difractómetros de rayos X en monocristal y en polvo.
 - Será capaz de realizar el montaje de las muestras según la técnica utilizada.
 - Profundizará en la interpretación de datos y se ejercitará en la publicación de los mismos a nivel científico.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

BLOQUE I. Espectroscopias de Rayos X: Los Rayos X. Origen. Interacción de los rayos X con la materia. Espectroscopia de fluorescencia o emisión de rayos X (XFS): Fluorescencia de rayos X de longitud de onda dispersiva y de energía dispersiva. Instrumentación. Absorción de rayos X (XRAS). Espectroscopia de absorción de rayos X extendida a la estructura fina (EXAFS) y cerca de la discontinuidad de absorción: (NEXAFS, XANES). Otras espectroscopias en las que participan los Rayos X.

BLOQUE II. Técnicas de difracción de rayos X (XRD): Fundamento teórico. Radiación policromática y monocristal estacionario (M.deLaue). Radiación monocromática y monocristal móvil. Instrumentación. Radiación monocromática y polvo cristalino.

BLOQUE III. Espectrometría fotoelectrónica de rayos X (XPS): Historia de la técnica de XPS. Fundamentos. Mecanismos que afectan a la deriva química y a la energía de enlace, acoplamiento. Notación Profundidad de análisis. Emisiones Auger y la AES: Comparación entre XPS y AES. Instrumentación. Sistema de vacío. Muestras. Fuente. Compensador de carga. Lentes de transferencia. Analizador de electrones Detectores. Sistemas de imagen y mapping con XPS. ARXPS (Angle Resolved XPS).

PRÁCTICO

Resolución de casos prácticos relacionados con la caracterización de la superficie de sólidos mediante DRX y XPS. Manejo del software específico.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Ríos Castro, A.; Cruz Moreno Bondi, M.; Simonet Suau, B.M. (coords.). Técnicas



espectroscópicas en química analítica. Volumen II. Editorial Síntesis, Madrid, 2012. (ISBN 978-84-995893-2-9)

- Briggs, D.; Grant, J.T.; (Eds.); Surface Analysis by Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy; IM Publications and Surface Spectra Limited, Chichester, UK, 2003.(ISBN 1901019047)

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Artículos científicos de relevancia seleccionados por el equipo docente.

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD02 Clases de resolución de problemas. El equipo docente podrá utilizar algunos de los siguientes métodos para su desarrollo: Aprendizaje basado en problemas; ejemplificación y estudio de casos.
- MD03 Clases prácticas. El equipo docente podrá recurrir a métodos como estudio de casos, análisis diagnósticos, prácticas de laboratorio, aula de informática, visitas, búsqueda de datos, etc.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos
- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
- MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

El artículo 17 de la Normativa de Evaluación y Calificación de Estudiantes de la Universidad de Granada establece que la convocatoria ordinaria estará basada preferentemente en la **evaluación continua del estudiante**, excepto para quienes se les haya reconocido el derecho a la evaluación única final.

- **Instrumentos de evaluación:**

- **Pruebas escritas.** Exámenes o pruebas breves a realizar a lo largo del curso basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas propuestos con anterioridad por el profesor. Su formato (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.



- **Evaluación de asistencia y participación activa.** Se basa en la valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planificados, en las prácticas de aula o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo.

- **Resolución de ejercicios o proyectos.** Proyecto o ejercicio complejo que, el alumno o grupo de alumnos, deberá ir resolviendo por etapas a lo largo del curso. Cada etapa o hito alcanzado será evaluado y el alumno recibirá retroalimentación sobre su éxito o fracaso.

- **Criterio de evaluación y porcentajes sobre la evaluación final**

- Conocimientos teóricos adquiridos (60%)

- Valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planificados (5%)

- Desempeño en el manejo de software, análisis e interpretación de datos experimentales y elaboración de registros e informes de resultados (10%)

- Resolución de ejercicios o proyectos (25%)

Cuando el estudiante haya realizado actividades y pruebas del proceso de evaluación continua contempladas en la presente guía docente que constituyan más del 50% del total de la ponderación de la calificación final de la asignatura, su calificación final en el acta figurará con la calificación correspondiente. Si es inferior al 50% la calificación del estudiante en el acta aparecerá como "NO PRESENTADO".

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

El artículo 19 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua. De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba y/o trabajo.

- **Instrumentos de evaluación:**

- **Prueba escrita.** Exámenes basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas. Su formato (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.

- **Criterio de evaluación y porcentajes sobre la evaluación final**

- Conocimientos teórico/prácticos adquiridos (100%)

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

El artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final aquellos estudiantes que por



causas justificadas no puedan cumplir con el método de evaluación continua.

Para acogerse a esta modalidad de evaluación, el estudiante DEBERÁ SOLICITARLA a la Coordinación del Máster a través del procedimiento electrónico. El periodo de solicitud deberá estar incluido en cualquiera de los periodos o circunstancias que se indican a continuación:

- en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura,
- en las dos semanas siguientes a su matriculación (si esta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases)
- por causas sobrevenidas.

Una vez recibida la solicitud, la Coordinación del Máster dará traslado de la misma al profesorado correspondiente, indicando y acreditando las razones que asisten al estudiante para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

Los instrumentos, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final son los mismos que los establecidos para la evaluación extraordinaria.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Siguiendo las recomendaciones de la CRUE y del Secretariado de Inclusión y Diversidad de la UGR, los sistemas de adquisición y de evaluación de competencias recogidos en esta Guía Docente se aplicarán conforme al principio de diseño para todas las personas, facilitando el aprendizaje y la demostración de conocimientos de acuerdo a las necesidades y la diversidad funcional del alumnado.

