

Guía docente de la asignatura

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 15/07/2022

**Espectrometrías de Rayos X  
(M43/56/2/33)****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, acoplamientos.
- 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, acoplamientos. 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.

