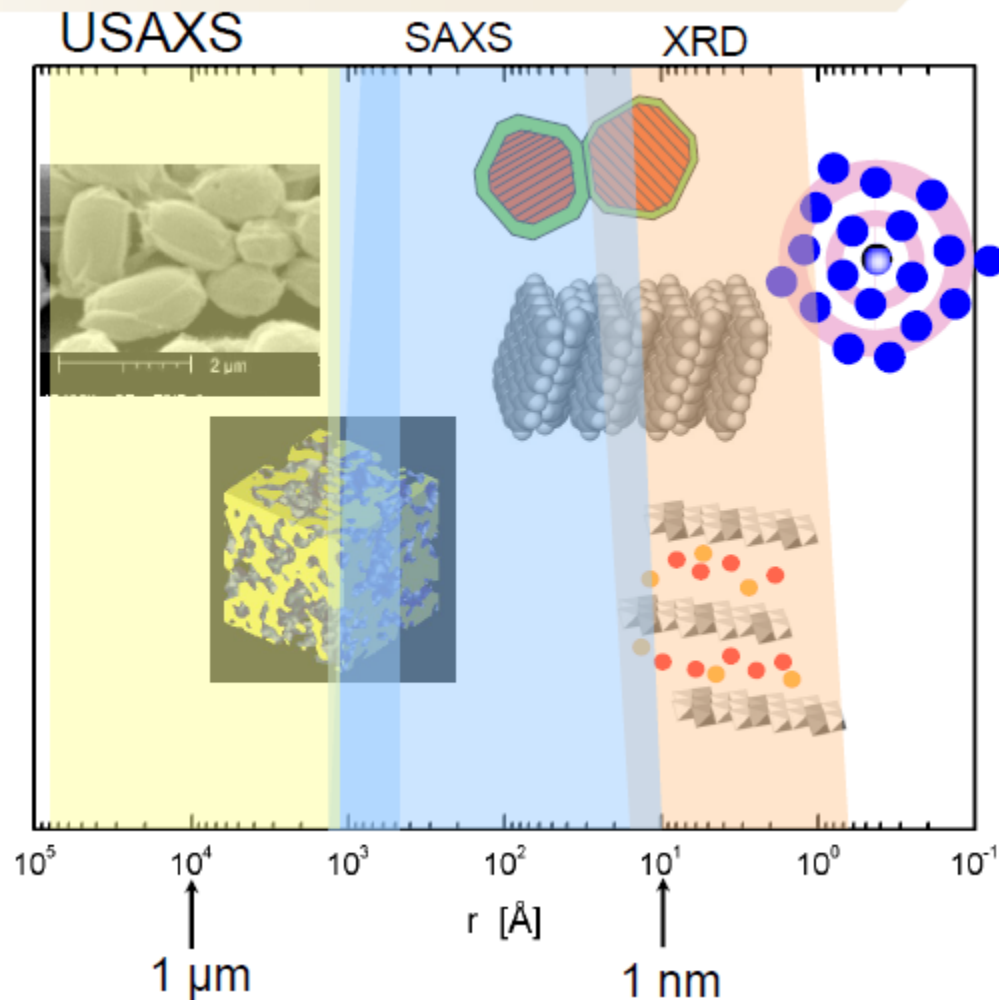


TEMA 7. Aplicación de técnicas de dispersión al estudio y caracterización de materiales sólidos y líquidos. Técnicas reflectométricas: reflectividad de rayos X. Herramientas informáticas de adquisición y procesado de datos de difracción, dispersión y reflectividad de rayos X.

TEMA 7. Aplicación de técnicas de dispersión al estudio y caracterización de materiales sólidos y líquidos. Técnicas reflectométricas: reflectividad de rayos X. Herramientas informáticas de adquisición y procesado de datos de difracción, dispersión y reflectividad de rayos X.

Aplicación de técnicas de dispersión al estudio y caracterización de materiales sólidos y líquidos



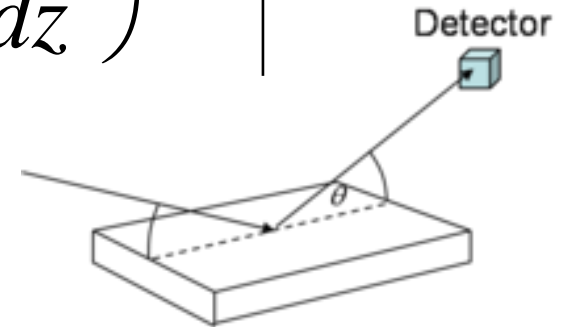
Christopher J. Tassone, Introduction to Synchrotron Scattering Techniques, Stanford Synchrotron Radiation Laboratory, Materials Science Division. http://www-ssrl.slac.stanford.edu/conferences/workshops/sxst2014/documents/tassone_christopher_introduction_06032014

Técnicas reflectométricas: reflectividad de rayos X

Inglés: https://en.wikipedia.org/wiki/X-ray_reflectivity

Portugués: https://pt.wikipedia.org/wiki/Refletividade_de_raios_X

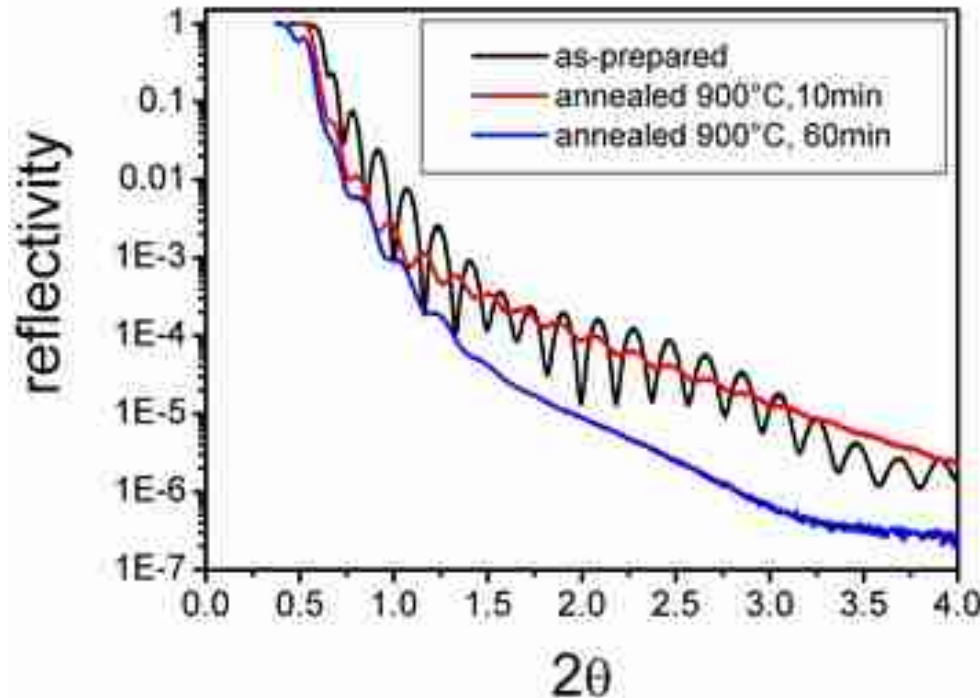
$$R(Q)/R_F(Q) = \left| \frac{1}{\rho_\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iQz} \left(\frac{d\rho_e}{dz} \right) dz \right|^2$$



$R(Q)$ es la reflectividad, $R_F(Q)$ es la reflectividad Fresnel (teórica, a base de las "condiciones de Fresnel"), $Q = 4\pi \sin(\theta)/\lambda$, λ es la longitud de onda, ρ_e es la densidad electrónica, ρ_∞ es la densidad profunda y θ es el ángulo de incidencia del haz. Esta fórmula normalmente se usa para comparar la densidad calculada a partir de un modelo parametrizado, con la densidad medida, variando los parámetros del modelo para conseguir un ajuste adecuado.

Técnicas reflectométricas: reflectividad de rayos X

lamina delgada



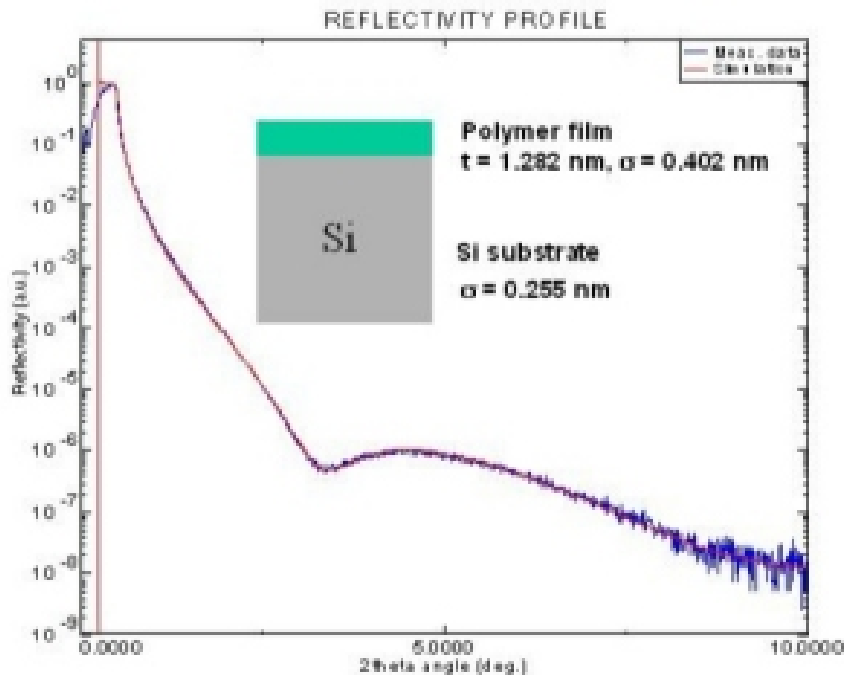
“Reflectivity of a 50nm thick sputtered Ge layer on a Si (100) wafer. A concentration profile at the Ge-Si interface after annealing at 900°C causes a damping of the oscillations.”

"Diffusion processes and reactions in thin multilayers play an important role in technological applications. By X-ray reflectometry concentration profiles on a nanometer scale can be determined. Current research activities involve the evaluation of measured data by fitting with simulation routines."

<http://www.is.mpg.de/146467/02> Research activities

Técnicas reflectométricas: reflectividad de rayos X

capas depositadas sobre superficies



“Se puede caracterizar el grosor, la densidad y la rugosidad de capas sencillas o multicapas sobre obleas semiconductores.

El análisis de reflectividad de rayos X se puede realizar con materiales tanto cristalinos como amorfos.”

“Used to determine thickness, density and roughness for single and multilayer stacks on semiconductor wafers, XRR analysis can be performed on both crystalline and amorphous materials.”

http://www.rigaku.com/en/applications/xray_reflectometry

Técnicas reflectométricas: reflectividad de rayos X

revisiones recientes (no exhaustiva)

Structural Investigations of Self-Assembled Monolayers for Organic Electronics: Results from X-ray Reflectivity, By Khassanov, Artoem; Steinrueck, Hans-Georg; Schmaltz, Thomas; Magerl, Andreas; Halik, Marcus
From Accounts of Chemical Research (2015), 48(7), 1901-1908.
DOI:10.1021/acs.accounts.5b00022

Reflectivity at liquid interfaces, By Murphy, Bridget M.
Edited By: Seeck, Oliver H.; Murphy, Bridget M
From X-Ray Diffraction (2015), 229-253.
DOI:10.1201/b15674-10

Multilayering of Surfactant Systems at the Air-Dilute Aqueous Solution Interface, By Thomas, Robert K.; Penfold, Jeffrey
From Langmuir (2015), 31(27), 7440-7456.
DOI:10.1021/la504952k

Hydration layer structure at solid-water interfaces, By Fenter, Paul; Lee, Sang Soo
From MRS Bulletin (2014), 39(12), 1056-1061.
DOI:10.1557/mrs.2014.252

Técnicas reflectométricas: reflectividad de rayos X

revisiones recientes (no exhaustiva)

Structure-property correlations of inorganic nanomaterials by different X-ray related techniques, By Biswas, Kanishka
From Spectroscopic Properties of Inorganic and Organometallic Compounds (2014), 45, 117-140. DOI:10.1039/9781782621485-00117

SLDMOL: A tool for the structural characterization of thermally disordered membrane proteins, By Curtis, Joseph E.; Zhang, Hailiang; Nanda, Hirsh
From Computer Physics Communications (2014), 185(11), 3010-3015.
DOI:10.1016/j.cpc.2014.07.006

The problem and the improvement on X-ray reflectivity analysis
By Fujii, Yoshikazu, From X-sen Bunseki no Shinpo (2012), 43, 103-126. Language: Japanese, Database: CAPLUS

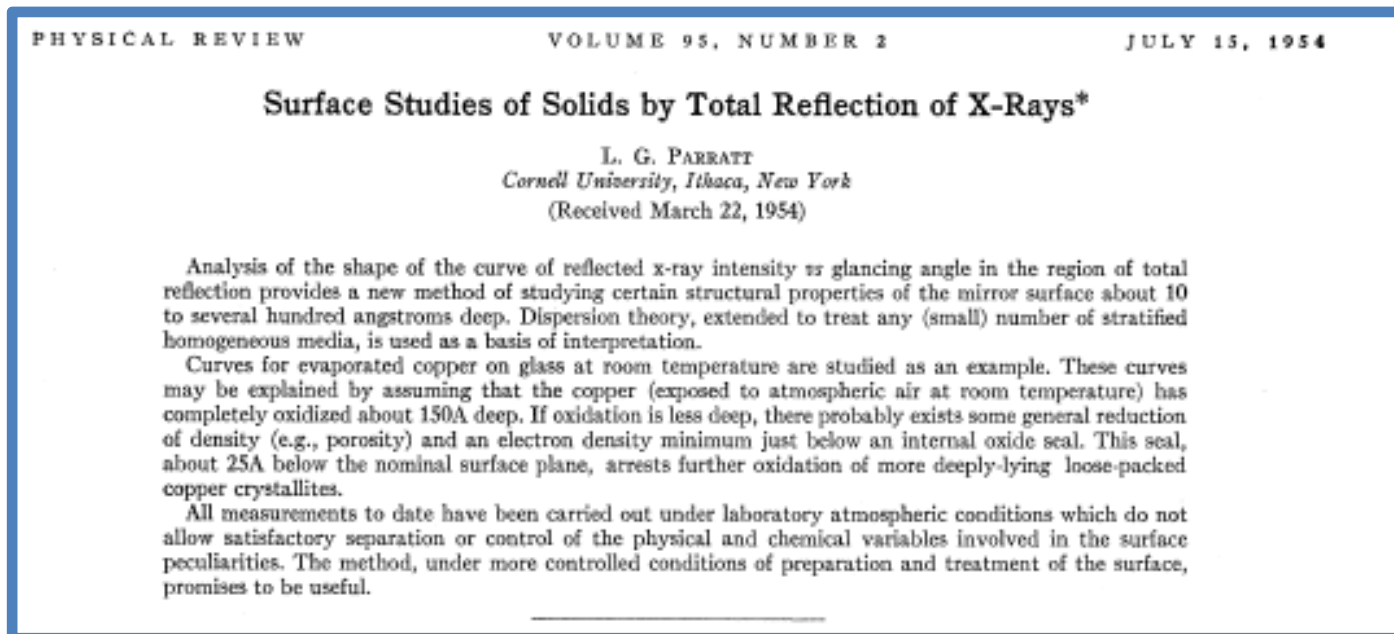
Configuration of membrane-bound proteins by x-ray reflectivity
By Chen, Chiu-Hao; Malkova, Sarka; Cho, Wonhwa; Schlossman, Mark L.
From Journal of Applied Physics (2011), 110(10), 102215/1-102215/4.
DOI:10.1063/1.3661985

Técnicas reflectométricas: reflectividad de rayos X

revisiones recientes (no exhaustiva)

From interfacial water to macroscopic observables: a review, By Striolo, Alberto
From Adsorption Science & Technology (2011), 29(3), 211-258. Language: English,
Database: CAPLUS, DOI:10.1260/0263-6174.29.3.211

No reciente: Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays, L. G. Parratt, Phys. Rev. (1954), 95, 359-369.



Herramientas informáticas de adquisición y procesamiento de datos de difracción, dispersión y reflectividad de rayos X.

Existe un amplio número de programas para procesar datos de difracción de rayos X, tanto en monocristal como en polvo.

<http://www.ccp14.ac.uk>

<http://www.iucr.org/resources/other-directories/software>

(listado de software, pero mucho de lo que aparece aquí ya está anticuado)

Rietveld:

LHPM-Rietica:

ftp://ftp.ansto.gov.au/pub/physics/neutron/rietveld/Rietica_LHPM95/

GSAS: <http://www.ccp14.ac.uk/solution/gsas/>

GSAS-2: <https://subversion.xray.aps.anl.gov/trac/pyGSAS>

FullProf: <https://www.ill.eu/sites/fullprof/>

Jana2006: <http://jana.fzu.cz/>

Herramientas informáticas de adquisición y procesamiento de datos de difracción, dispersión y reflectividad de rayos X.

<http://www.ccp14.ac.uk>

<http://www.iucr.org/resources/other-directories/software>

(listado de software, pero mucho de lo que aparece aquí ya está anticuado)

Monocristal:

Shelx: <http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/>

Platon: <http://www.cryst.chem.uu.nl/spek/platon/>

Platon for Windows: <http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/platon/>

WinGX: <http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/wingx/>

Crystals: <http://www.xtl.ox.ac.uk/crystals.1.html>

Jana2006: <http://jana.fzu.cz/>

Olex2: <http://www.olexsys.org/>

Visualización: CrystalMaker <http://crystalmaker.com/singlecrystal/>

Visualización: Diamond <http://www.crystalimpact.com/diamond/>

Cambridge Crystallographic Data Centre (Mercury): <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>

Herramientas informáticas de adquisición y procesamiento de datos de difracción, dispersión y reflectividad de rayos X.

Macromolecular:

Proyecto Phenix: <http://www.phenix-online.org/>

Neutrones: <http://mnc.ornl.gov/>

Visualización: https://en.wikipedia.org/wiki/Software_for_protein_structure_visualization

(con referencias a Jmol, PyMOL, RasMol, Chimera y otros)

Visualización de densidad electrónica: Coot

<http://www2.mrc-lmb.cam.ac.uk/Personal/pemsley/coot/>

Polvo:

Jana2006: <http://jana.fzu.cz/>

GSAS: <http://www.ccp14.ac.uk/solution/gsas/>

GSAS-2: <https://subversion.xray.aps.anl.gov/trac/pyGSAS>

FullProf: <https://www.ill.eu/sites/fullprof/>

Rietica

(Indexación) TREOR, DICVOL, ITO:

<http://www.iucr.org/resources/other-directories/software/ccp14>

EXPO: <http://wwwba.ic.cnr.it/content/expo>

Herramientas informáticas de adquisición y procesamiento de datos de difracción, dispersión y reflectividad de rayos X.

Polvo:

En cuanto a la adquisición de datos y procesamiento preliminar, los fabricantes de difractómetros tienen productos que venden o suministran con su hardware.

Fabricantes:

Directorio de fabricantes: <http://www.iucr.org/resources/other-directories/suppliers>

<http://www.panalytical.com/Xray-diffractometers.htm>

<https://www.bruker.com/>

<http://www.rigaku.com/en>

<https://www.stoe.com/>

<https://www.gemeasurement.com/inspection-and-non-destructive-testing>

Reflectometría:

<http://www.reflectometry.net/reflect.htm#Analysis>

<http://www.reflectometry.net/refprog.htm>

Herramientas informáticas de adquisición y procesamiento de datos de difracción, dispersión y reflectividad de rayos X.

Bases de datos:

Cambridge Crystallographic Data Centre: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>

Crystallography Open Database: <http://www.crystallography.net/>

Protein Data Bank: <http://www.rcsb.org/>

International Centre for Diffraction Data (Powder Diffraction File, PDF):

<http://www.icdd.com/>

Inorganic Crystal Structure Database:

<https://www.fiz-karlsruhe.de/de/leistungen/kristallographie/icsd.html>

Minerales: <http://database.iem.ac.ru/mincryst/index.php>

Zeolitas: <http://www.iza-structure.org/databases/>

Herramientas informáticas de adquisición y procesamiento de datos de difracción, dispersión y reflectividad de rayos X.

Comprobación de los resultados de un análisis por métodos de difracción (validation):

CheckCIF: <http://checkcif.iucr.org/>

EnCIFer: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/Community/freeservices/encifer/>

Para estructuras macromoleculares (MolProbity y otros):

http://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=software/software_links/analysis_and_verification.html