









Las características fundamentales de los metales

Laura Simonelli CLÆSS beamline responsible









X-ray Absorption Spectroscopy (XAS):

Espectroscopía de absorción de rayos X:

una técnica versátil



Available online at www.sciencedirect.com

SCIENCE DIRECT.

Journal of Nuclear Materials 352 (2006) 107-115

journal o nuclear materials

www.elsevier.com/locate/jnu

Corrosion Science 78 (2014) 293-303

Contents lists available at ScienceDirect

Corrosion Science

journal homepage: www.elsevier.com/locate/corsci



Study of carbon steel corrosion layer by X-ray diffraction and absorption methods

V. Malinovschi ^{a,*}, C. Ducu ^a, N. Aldea ^b, M. Fulger ^c

Radiochim. Acta 100, 243-253 (2012) / DOI 10.1524/ract.2012.1912 © by Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München

XAS and XRD *in situ* characterisation of reduction and reoxidation processes of iron corrosion products involved in atmospheric corrosion



Judith Monnier ^{a,b}, Solenn Réguer ^c, Eddy Foy ^b, Denis Testemale ^{d,e}, François Mirambet ^f, Mandana Saheb ^b, Philippe Dillmann ^{b,*}, Ivan Guillot ^a

Incorporation of pertechnetate and perrhenate into corroded steel surfaces studied by X-ray absorption fine structure spectroscopy

By S. M. Heald^{1,*}, K. M. Krupka^{2,†} and C. F. Brown²

Advanced Photon Source, Argonne National Laboratory, 9700 South Cass Avenue, Argonne, IL 60439, USA
Pacific Northwest National Laboratory, P.O. Box 999, Richland, WA 99352, USA

(Received October 20, 2010; accepted in revised form September 5, 2011) (Published online February 27, 2012) ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Nuclear Materials 504 (2018) 8-22

Journal of Nuclear Materials

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jnucmat



The role of yttrium and titanium during the development of ODS ferritic steels obtained through the STARS route: TEM and XAS study



Nerea Ordás ^{a, b, *}, Emma Gil ^{a, b, 1}, Arturs Cintins ^c, Vanessa de Castro ^d, Teresa Leguey ^d, Inigo Iturriza ^{a, b}, Juris Purans ^c, Andris Anspoks ^c, Alexei Kuzmin ^c, Alexandr Kalinko ^c







X-ray Absorption Spectroscopy (XAS):

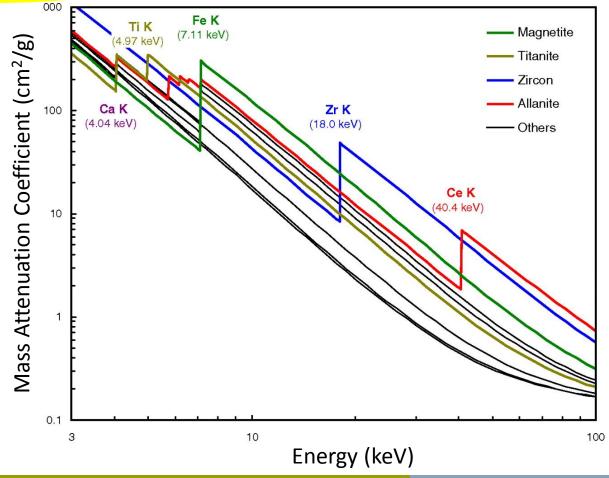


La radiación sincrotrón interacciona con los electrones más internos del átomo.



Radiación dispersada

Radiación absorbida

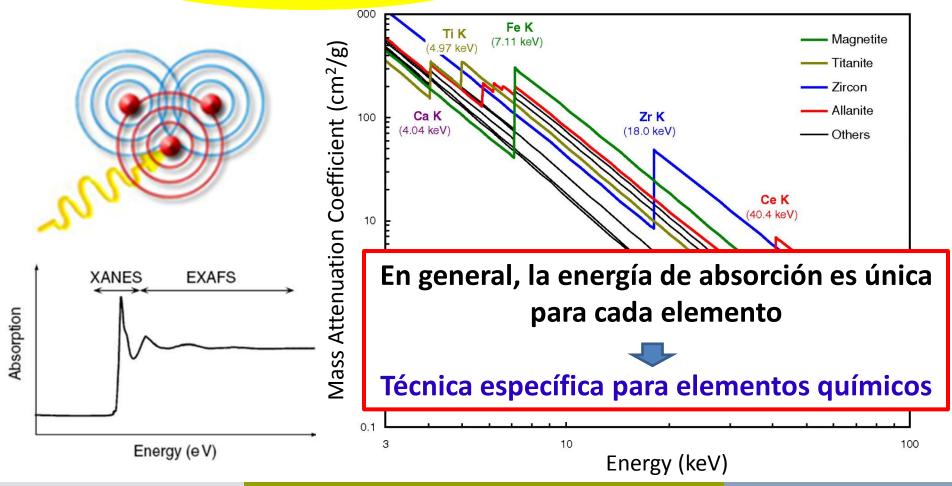








X-ray Absorption Spectroscopy (XAS):













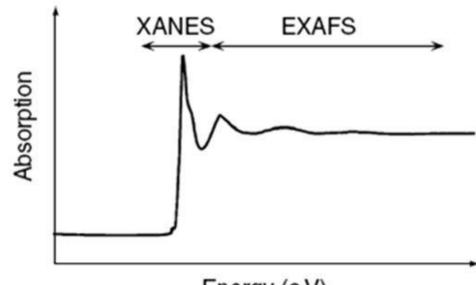
XAS: información complementaria

XANES

- Estados de oxidación
- Estados electrónicos desocupados
 - Estado del spin
 - Estructura local
- Información directa sobre los ángulos de enlace.

EXAFS

- Distancias de enlace
- Número de coordinación
- Desorden estático y dinámico



Energy (eV)











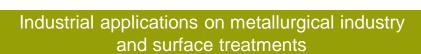
Qué tipo de materiales se pueden investigar mediante la técnica XAS?



XAS és una técnica sensible a la estructura local de los materiales que se puede aplicar a todo tipo de materiales:

materiales cristalinos, vidrios,

líquidos, etc...





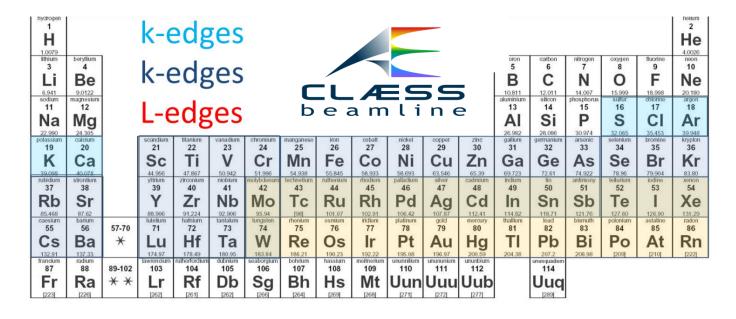








CLÆSS: rango de energías: 2.4 – 62.3 keV



*Lanthanide series

* * Actinide series

. [lanthanum 57	cerium 58	praseodymium 59	neodymium 60	promethium 61	samarium 62	europium 63	gadolinium 64	terbium 65	dysprosium 66	holmium 67	erbium 68	thulium 69	ytterbium 70
1	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Но	Er	Tm	Yb
1	138.91	140.12	140.91	144.24	[145]	150.36	151.96	157.25	158.93	162.50	164.93	167.26	168.93	173.04
- [actinium	thorium	protactinium	uranium	neptunium	plutonium	americium	curium	berkelium	californium	einsteinium	fermium	mendelevium	nobelium
-1	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102
-1	Ac	Th	Pa	11	Np	Dii	Λm	Cm	RL	Cf	Fe	Em	Md	No
-1	AC	111	Га	U	IAb	ru	AIII	CIII	DK	CI	LS	1 1111	INIC	IAO
Ŀ	[227]	232.04	231.04	238.03	[237]	[244]	[243]	[247]	[247]	[251]	[252]	[257]	[258]	[259]

Prácticamente se pueden estudiar todos los elementos de la tabla periódica







X-ray Absorption Spectroscopy (XAS): una técnica versátil

Journal of Nuclear Materials 504 (2018) 8-22



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Nuclear Materials

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jnucmat



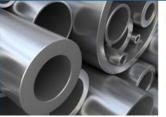
The role of yttrium and titanium during the development of ODS ferritic steels obtained through the STARS route: TEM and XAS study



Nerea Ordás ^{a, b, *}, Emma Gil ^{a, b, 1}, Arturs Cintins ^c, Vanessa de Castro ^d, Teresa Leguey ^d, Inigo Iturriza ^{a, b}, Juris Purans ^c, Andris Anspoks ^c, Alexei Kuzmin ^c, Alexandr Kalinko ^c

XAS permite estudiar elementos minoritarios, dando información única y directa del estado químico y físico de especies diluidas en aleaciones ODS (dispersiones reforzadas de óxido)

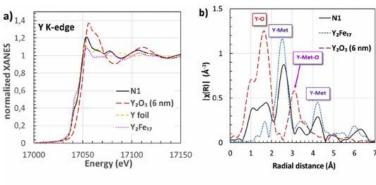


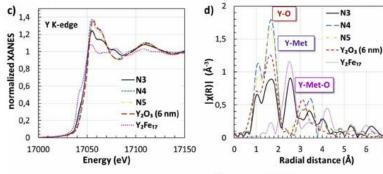


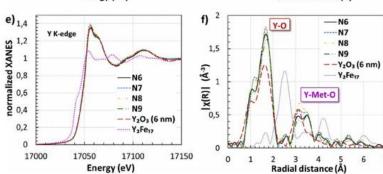












Oxide Dispersion Strengthened Ferritic Steels (ODS FS) (Aceros ferríticos con dispersiones reforzadas de óxido) son materiales propuestos como componentes estructurales en futuros reactores de fusión.

Estos materiales son muy robustos, tienen resistencia a la fluencia a temperaturas elevadas y buena resistencia al daño por radiación de neutrones. Esto es debido a que tienen microestructuras extremadamente finas que contienen una alta densidad de precipitados nanométricos, generalmente óxidos de itrio y titanio.

La caracterización mediante TEM y EXAFS de Fe-14Cr-2W-0.3Ti-0.24Y ODS FS obtenida mediante la ruta STARS (Surface Treatment of gas Atomized powder followed by Reactive Synthesis – Tratamiento superficial de polvo atomizado de gas seguido de síntesis reactiva), para obtener aleaciones ODS que eviten la aleación mecánica para introducir partículas

N. Ordas et al. / Journal of Nuclear Materials 504 (2018) 8-22

de Y_2O_3 .

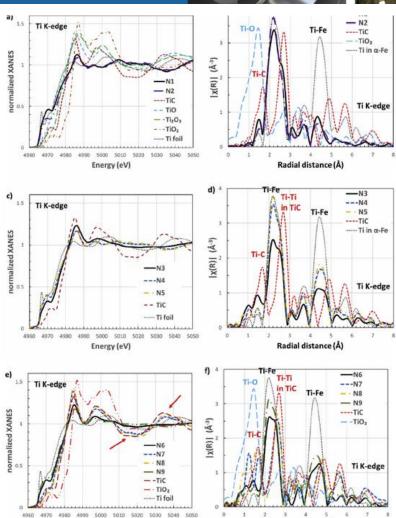












Los análisis mediante EXAFS y XANES demostraron ser herramientas apropiadas para seguir la evolución de la naturaleza de los distintos óxidos presentes en el material durante todo el proceso de síntesis y seleccionar el prensado isostático en caliente apropiado y los parámetros de prensado isostático post-calor para fomentar precipitados nanométricos Y-Ti-O profusos y finos.

N. Ordas et al. / Journal of Nuclear Materials 504 (2018) 8-22

Radial distance (Å)







X-ray Absorption Spectroscopy (XAS): una técnica versátil

Corrosion Science 78 (2014) 293-303



Contents lists available at ScienceDirect

Corrosion Science

journal homepage: www.elsevier.com/locate/corsci



XAS and XRD in situ characterisation of reduction and reoxidation processes of iron corrosion products involved in atmospheric corrosion



Judith Monnier a,b, Solenn Réguer c, Eddy Foy b, Denis Testemale d,e, François Mirambet f, Mandana Saheb b, Philippe Dillmann b,*, Ivan Guillot a

El conocimiento profundo de las propiedades superficiales y la composición de la superficie es obligatorio para investigar la corrosión de aceros al carbono.









El estudio de la corrosión y la predicción del comportamiento de un material a lo largo de periodos centenarios es crucial, especialmente en algunos contextos específicos como la conservación de metales del patrimonio cultural o el almacenamiento provisional de desechos nucleares vitrificados en contenedores de acero.

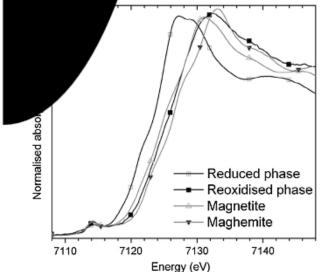
La especificidad de estos sistemas es la existencia de una capa de agua que controla los procesos de corrosión metálica durante los ciclos de humedad relativa que típicamente ocurren durante la corrosión atmosférica.

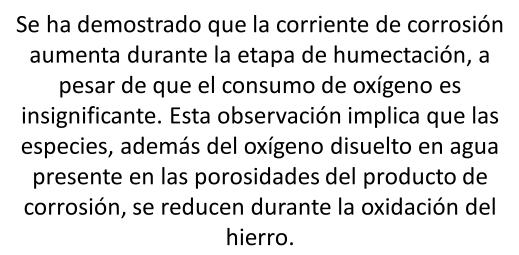


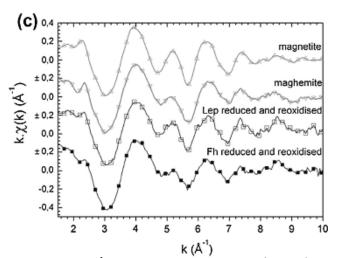












Las pruebas ex situ conducen a la probable reoxidación de las fases antes de su caracterización y no permiten una identificación precisa. Como consecuencia, solo los experimentos in situ, acoplando la reducción electroquímica con la caracterización estructural podrían permitir una identificación precisa de las fases transitorias.

J. Monnier et al./Corrosion Science 78 (2014) 293–303

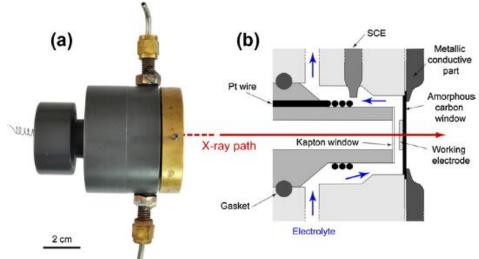












J. Monnier et al./Corrosion Science 78 (2014) 293–303

Para este estudio, se utilizó una celda electroquímica de rayos X. En la celda se redució in situ la lepidocrocita y la ferrihidrita, dos óxidos de hierro implicados en los mecanismos de corrosión atmosférica de acero con bajo contenido de carbono.

Mediante análisis XAS, las fases reducidas se han identificado in situ como magnetita e hidróxido de hierro II, dos fases que pueden desempeñar un papel clave en los mecanismos de corrosión. La reoxidación de las fases reducidas también se estudió y condujo a la formación de magnetita / maghemita y a la formación de las fases reducibles iniciales lepidocrocita y ferrihidrita.











Información química, electrónica y estructural (2.4 - 68 keV)

Funcionamiento de la línea de luz CLÆSS:

- Tamaño del haz hasta to 100 x 200 μm²
- Tiempo de medida (0.5-3 (5-10) min por scan)
- XAS en modo transmisión y fluorescencia
- XES de 6.4 a 12.4 keV (Kβ y Kα de la mayoría de los metales de transición)
- Posición estable del haz y tamaño del haz (200-500 μm) en todo el rango de energías
- Control de la temperatura desde 80 K hasta 1000 K; o desde 4 K hasta 320 K
- Celda para reacciones in-situ sólido-gas (80 K 1000 K)