

IQU-848 Espectroscopia EXAFS (60 horas)

Ementa:

Aspectos macroscópicos do fenômeno de absorção de raios-X; radiação síncrotron e dispositivo experimental para aquisição de espectros. Lei de Lambert-Beer, tabelas de McMaster, aplicação ao preparo de amostras. Aspectos microscópicos: origem das oscilações EXAFS e do espectro XANES. Princípios teóricos: função EXAFS e parâmetros estruturais. Técnicas de tratamento de dados experimentais: extração da linha de fundo e transformação de Fourier das oscilações; simulação de espectros EXAFS usando métodos ab initio (programa FEFF); difusão múltipla. Determinação de densidades de estados projetadas; simulação e interpretação do espectro XANES. Análise de casos: metais, complexos de coordenação e óxidos.

Bibliografia:

1. Jens Als-Nielsen, Des McMorrow, Elements of Modern X-ray Analysis, Wiley, NY, 2001.
2. D.C. Koningsberger, R.Prins (eds.), X-ray Absorption: Principles, Applications, Techniques of EXAFS, SEXAFS, and XANES, Chemical Analysis, v. 92, Wiley, NY, 1988.
3. B.-K. Teo, EXAFS: basic principles and data analysis, Springer, NY, 1986.
4. J.J. Rehr, R.C. Albers, Theoretical approaches to X-ray absorption fine structure, Reviews of Modern Physics, v. 72, p. 621-654, 2000.
5. A. Filipponi, A. Di Cicco, C.R. Natoli, X-ray absorption spectroscopy and n-body distribution functions in condensed matter, Physical Review B, v. 52, n. 21, p. 15122-15148, 1995.
6. F. de Groot, High-resolution X-ray emission and X-ray absorption spectroscopy, Chemical Reviews, v. 101, p. 1779-1808, 2001.
7. F.W. Lytle, The EXAFS family tree: a personal history of the development of extended X-ray absorption fine structure, Journal of Synchrotron Radiation, v. 6, p. 123-134, 1999.
8. Dale E. Sayers, Edward A. Stern, Farrel W. Lytle, New Technique for Investigating Noncrystalline Structures: Fourier Analysis of the Extended X-Ray-Absorption Fine Structure, Phys. Rev. Lett., v. 27, p. 1204-1207, 1971.