

- 1) Vá em <https://bruceravel.github.io/demeter/>, faça o download e instale o pacote “Demeter” para processamento e análise de dados de Espectroscopia de Absorção de Raios-X, contendo os programas “Athena” (visualização e processamento dos dados), “Artemis” (ajuste de dados de EXAFS) e “Hephaestus” (ferramentas gerais).
- 2) Abra o programa “Hephaestus” e verifique o valor esperado para a borda K do elemento arsênio. Para energias em torno desta borda, qual a percentagem de absorção do feixe por uma câmara de ionização de 30 cm com 100 % de N₂ ? Vc acha este valor razoável, ou seria necessário alterar a mistura de gases na câmara ?
- 3) Abra o programa “Athena”, após dar uma passada pela documentação pertinente em <http://bruceravel.github.io/demeter/documents/Athena/>.
- 4) Iremos fazer uma análise de uma medida na borda K do As no supercondutor a base de ferro BaFe₂As₂. para entender o contexto destas medidas, olhe os slides fornecidos no material suplementar do curso (https://sites.ifi.unicamp.br/egranado/files/2018/06/Granado_Escola_Rafael.pdf).
- 5) Abra o arquivo disponibilizado em https://www.dropbox.com/s/kcoad78rlz4fpfq/athena_AsK_BaFe2As2.prj?dl=0 com dados tomados na linha XAFS2 do LNLS.
- 6) Grafique $\mu(E)$, junto com a “pre-edge line” e “post-edge line”, escolhendo diferentes intervalos para “pre-edge range” e “Normalization range”. Você consegue estabelecer um critério para definir estes intervalos ?
- 7) Grafique $\chi(k)$ multiplicado por k, definindo o intervalo em k de 2 a 15 Å⁻¹. Dá para perceber que o “pico” em torno de 13.2 Å⁻¹ é um sinal espúrio ? Por quê ? Reduza então o intervalo em k para 2 a 13 Å⁻¹. E grafique as partes real, imaginária e magnitude da transformada de Fourier de $\chi(k)$, i.e., $\chi(R)$. O que representa o máximo desta curva ?
- 8) Limite a janela em R para 1 a 3 Å, fazendo então a transformada inversa para obter $\chi(q)$. Qual o significado físico desta transformada inversa e em que ela difere de $\chi(k)$?
- 9) Abra o programa Artemis e importe os dados visualizados no Athena. Verifique a estrutura deste composto no link fornecido no item 4 acima, e verifique que o As tem 4 primeiros vizinhos As-Fe. Faça um fitting de primeiros vizinhos com estes dados e obtenha a distância As-Fe. Compare com os valores obtidos e publicados (link no item 4).