Lista 7 de Exercícios /Guia de Estudos – FI089
Absorção de raios-X - técnicas

Vide: Mobilio, Caps. 6 e 7; Hippert, Cap. 3

1) Defina função de EXAFS $\chi(k)$ em função de $\mu(k)$ e $\mu_0(k)$ e encontre uma expressão para $\chi(k)$ em função de integrais envolvendo o estado inicial e final do fotoelétron.

2) Considerando que $\chi(k)$ seja proporcional à função de onda do fotoelétron na origem do centro espalhador [vide expressão obtida em (1)], faça uma derivação Eurística da função de EXAFS em termos das distâncias entre o átomo absorvedor e de seus vizinhos. Comente sobre os efeitos da desordem térmica e discuta sobre a comparação entre os fatores de desordem obtidos por EXAFS e por difração.

3) Discuta sobre as diferentes possíveis geometrias / montagens experimentais em um experimento de absorção de raios-X: transmissão, fluorescência, TEY, XAS dispersivo. Comente sobre a região de energia dos fótons em que cada montagem pode ser aproveitada, situações em que cada caso é mais conveniente e sobre a sensibilidade ao volume/superfície de cada uma.

4) Faça o exercício de análise de dados de EXAFS utilizando os softwares ATHENA/ARTEMIS.

5) Como é possível inferir sobre o estado de oxidação de um elemento e sobre a geometria local dos átomos vizinhos (tetraedros, octaedros, etc) a partir de dados de absorção de raios-X próximo à borda ?

6) Comente sobre o método de análise de combinação linear para análise de dados de XANES.

7) Considere um modelo de dois passos para o XMCD. Assumindo que no primeiro passo os fotoelétrons tenham uma polarização de spin diferente para helicidades esquerda e direita do fóton incidente, mostre que o sinal de XMCD será dado por: $XMCD(\hbar\omega)=\frac{1}{1}P_e P_c \frac{\Delta\rho}{\rho}(E_i+\hbar\omega)$, onde P_e e P_c são os fatores de polarização dos elétrons e fótons, respectivamente, e $\Delta\rho$ é a diferença entre as densidades de elétrons com spin para cima e para baixo em cada energia acima do nível de Fermi.

8) Calcule o fator de polarização dos elétrons P_e para as bordas L_{II} e L_{III}.

9) Quais são as regras de soma para XMCD e qual a utilidade delas ? Discuta sobre as aproximações envolvidas.