

Introdução à Espectroscopia de Estrutura Fina de Absorção de Raios-X

Gustavo Azevedo
Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón
Campinas, S. P., Brasil

Neste seminário, será apresentada uma introdução à Espectroscopia de estrutura fina de absorção de raios-X - XAFS (X-ray Absorption Fine Structure). Esta técnica explora a dependência do coeficiente de absorção de raios-x de um material quando a energia dos fótons é suficiente para remover um elétron de um nível interno de caroço de um átomo presente no material. XAFS é sensível ao estado químico e à estrutura local em torno do átomo ionizado (absorvedor). Em particular, XAFS é sensível às distâncias interatômicas, números de coordenação e identidade química dos átomos nas vizinhanças do absorvedor. Além disso, permite sondar a estrutura eletrônica do sistema (densidade local de estados desocupados).

Abordaremos inicialmente a região de EXAFS (“Extended X-ray Absorption Fine Structure”), que é a estrutura fina do espectro que se manifesta na forma de oscilações do coeficiente de absorção entre 50 e 2000 eV acima da borda. Discutiremos os processos físicos que originam as oscilações de EXAFS e como a análise da frequência e amplitude das oscilações permite obter informação sobre a ordem de curto alcance em torno do átomo absorvedor. A seguir, abordaremos a região de XANES (“X-ray Absorption Near Edge Structure”), que corresponde à estrutura fina do espectro de absorção nos 200 eV em torno da borda de absorção. Como veremos, esta região contém informação a respeito da estrutura eletrônica e da simetria de coordenação em torno do átomo absorvedor. Discutiremos brevemente alguns desenvolvimentos teóricos recentes que permitem a modelagem ab-initio do espectro de XANES. Finalmente, algumas aplicações, potencialidades e limitações da técnica XAS serão discutidas.