

EXAFS

Damián Gulich*

Enrique Neyra**

Betiana Pianciola***

Martín Falabella****

Experimentos Cuánticos II (2008), Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata

Resumen

En este informe se analizan espectros de EXAFS de una muestra de platino en función de la temperatura en el rango 23-400 °K

1. Introducción

La absorción extendida de estructura fina de rayos X (EXAFS) se refiere a los detalles de cómo los rayos X son absorbidos por un electrón de las capas más internas del átomo. Para que dicha absorción pueda darse, la energía de ligadura de ese nivel debe ser igual o menor que la del rayo X incidente. Si su energía es mayor, ese nivel es indiferente al rayo X.

Al incidir radiación electromagnética sobre un átomo, existen diferentes probabilidades de transición entre dos estados. Estas probabilidades dependerán en general del tipo de perturbación a la que se somete el sistema. Particularmente, si la energía de la radiación es mayor que la energía de enlace del electrón al átomo existirá una probabilidad no nula de que éste se desprenda (pasando a un estado continuo). Este estado estará caracterizado por una onda esférica, como:

$$Y = \frac{Y_0}{r} e^{ikr}$$

Cuando estos electrones desprendidos de un átomo A, inciden sobre otro átomo vecino B que se

*d_gulich@yahoo.com

**quique_neyra@hotmail.com

***betianapianciola@gmail.com

****martinfalabella@yahoo.com.ar

encuentra a una distancia R del primero, puede ser retrodispersado, de manera que cuando regrese al átomo A la función de onda sea:

$$Y = Y_0 \frac{F}{R^2} e^{ik \cdot \mathbf{R} + f} \cdot e^{ik \cdot \mathbf{R} + a}$$

La amplitud total de la onda en el átomo será:

$$\varphi_0 \left(1 + \frac{f e^{2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} + \phi + \alpha}}{R^2} \right)$$

Luego, desarrollando en serie el término exponencial y calculando intensidad de la función de onda ($I = \|\varphi_0\|^2$), obtenemos:

$$I = \varphi_0 \varphi_0^* \left(1 + \frac{2f \sin(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} + \delta)}{R^2} + \dots \right)$$

donde hemos despreciado términos de orden superior y llamamos δ al desfase total. Suponiendo una interferencia entre dos ondas esféricas, podemos entender a esta función de onda oscilante, como variaciones de estados φ_0^{nlm} , que absorberán energía dependiendo del valor de la energía incidente y de la distancia a primeros vecinos (R) como puede observarse en la siguiente expresión:

$$I \propto I_0 + I_0 \sin(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} + \delta) + \dots$$

Aquí encontramos información sobre la estructura, debido a la dependencia de la intensidad con la distancia R y con el número de vecinos

La amplitud de dispersión depende de Z . La fase depende de la distancia y del elemento.

La estructura fina de la absorción de rayos X (EXAFS) se refiere a como los rayos X son absorbidos por un átomo a

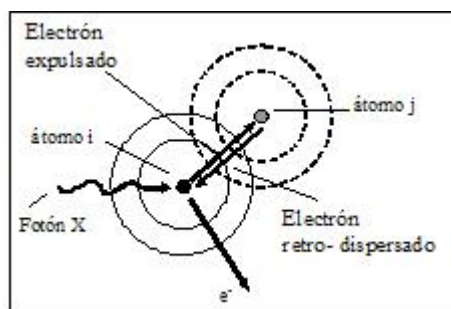


Fig. 1: Figura

$$\chi(k) = \sum_i \frac{N_i}{kR_i^2} S_0^2 F_i(k) e^{-k^2 \sigma_i^2} e^{-2R_i/\lambda} \times \dots \times \sin(2kR_i - \phi_i(k)) \quad (1)$$

2. Arreglo experimental

Se analizó datos provenientes de una muestra de platino estudiada en el laboratorio de luz de sincrotrón de Brasil en la región energética de su capa K. Vease figura 2. Los datos fueron tomados en modo de transmisión con cámaras de ionización. Los espectros de EXAFS fueron capturados para temperaturas de 23, 65, 110, 155, 200, 245, 290, 345 y 400 grados Kelvin.

3. Resultados y análisis

Los espectros obtenidos se muestran en la figura 3. Se analizaron los datos con el programa "Artemis". Los gráficos de los ajustes de los diversos parámetros se muestran en la figura 4 en la página 5. En el caso (a), se ajustó cada temperatura independientemente del resto, mientras que en el caso (b) se ajustaron simultáneamente todas las temperaturas. Para el análisis global (caso (b)) se obtuvo una amplitud $A = 0,823 \pm 0,01$ y un valor de enot de $7,2 \pm 0,2$.

4. Conclusiones

Para el primer ajuste se puede concluir que:

1. La amplitud no debería cambiar.

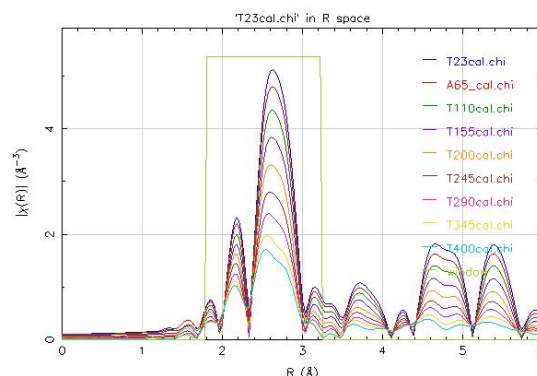


Fig. 3: Espectros.

2. En el gráfico de delr, el comportamiento debería ser de aumento. Hay que proponer un ajuste con un término asimétrico en el potencial.
3. Los niveles de Fermi deberían ser constantes. Esto se podría corregir haciendo un ajuste simultáneo de todas las temperaturas.

Por ello, se realizó un segundo ajuste de todas las temperaturas simultáneamente. En su gráfico de Corr, el orden de magnitud es razonable ya que en el rango de temperaturas estudiado no se espera una fuerte importancia de la componente cúbica del potencial.

La temperatura de Debye para el platino es de 240 °K, y corresponde (dentro de ese modelo) a la temperatura del modo más alto de vibración de un cristal, es decir, la temperatura más alta que se puede lograr debida a un solo modo de vibración. En la primera y última figura del caso (b) se observa un salto justamente alrededor de esta temperatura.

Referencias

- [1] Dynamic properties and Debye temperatures of bulk Au and Au clusters studied using extended x-ray-absorption fine-structure spectroscopy. A. Balerna and S. Mobilio. Phys. Rev. B 34, 2293 - 2298 (1986).
- [2] Extended x-ray absorption fine structure Debye-Waller factors. I. Monato-

- mic crystals. E. Sevillano, H. Meuth, J. J. Rehr. Phys. Rev. B 20, 4908 - 4911 (1979).
- [3] Fundamentals of XAFS. Matthew Newville. 2004. http://cars9.uchicago.edu/xafs/xas_fun/xas_fundamentals.pdf
- [4] Thermal variation of the mean-square relative displacement for the Pt-Pt pair in the Ni10Pt90 random solid-solution alloy. M. Choi, J. I. Budnick, D. M. Pease, and G. H. Hayes, S. M. Heald. Phys. Rev. B 44, 9319 - 9324 (1991).

© Damián Gulich
www.damiangulich.com.ar



Fig. 2: Fotografia del sincrotrón

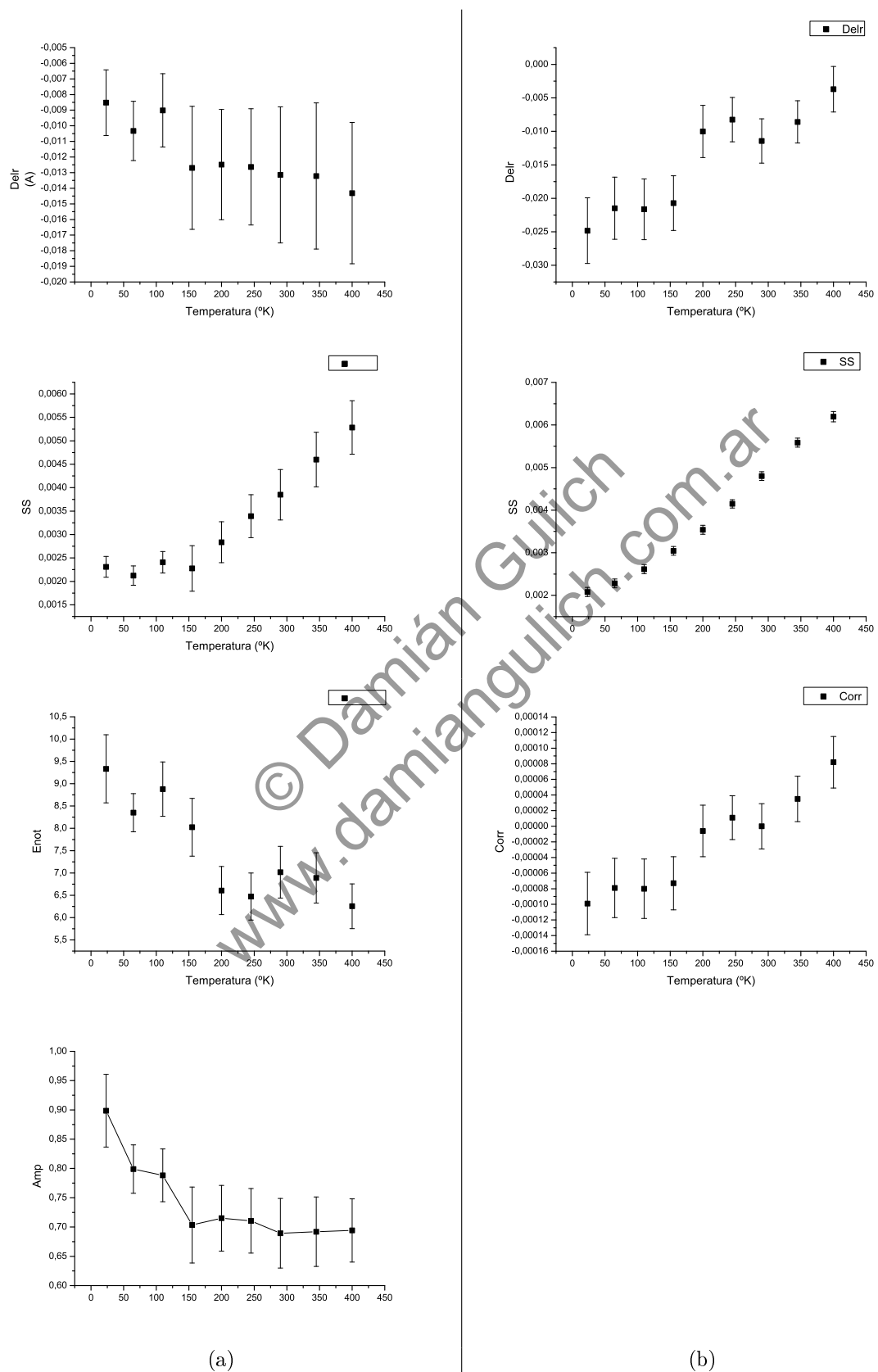


Fig. 4: Resultados de los ajustes. (a) Ajustando cada temperatura individualmente. (b) Ajustando todas las temperaturas juntas.