

Nombre del Curso: Absorción de rayos X: fundamentos teóricos, simulaciones de espectros XANES y aplicaciones a sistemas de interés general.

Profesor responsable: Claudia Rodríguez Torres

Docentes participantes:

Dr Yves Joly (Neel Institute, Grenoble, Francia)

Dr. José Martín Ramallo López (FCE)

Dr. Leonardo Errico (FCE)

Dr. Leandro Andrini (FCE)

Dr. Martín Mizrahi (FCE)

Duración: 5 semanas

Carga horaria: 15 h (5 clases de 3 h)

Resumen: El curso propone introducir al estudiante en los principios básicos de la Espectroscopía de Absorción de Rayos X (XAS), y sus aplicaciones al estudio de diferentes materiales, mediante clases teóricas y trabajos prácticos.

Los objetivos del curso son brindar al estudiante conocimientos básicos sobre XAS, adquirir las herramientas básicas para poder realizar un análisis de los datos obtenidos con esta técnica, ajustar y simular espectros mediante software libre (FDMNES, métodos ab-initio, lfeffit, etc).

Evaluación: Resolución de un caso científico aplicando XANES y EXAFS y entrega del informe correspondiente.

Cupo: 40 alumnos (clases teóricas), 20 alumnos (clase de prácticas), prioridad para alumnos de posgrado. Para las prácticas se requiere llevar computadoras personales.

Día y horario: viernes de 8 a 11 h, comenzando viernes 16/6/2017, Aula Conferencias, Facultad de Ciencias Exactas

Inscripción: Comienza 20/5/2017 y se cierra el 9/6/2017. Es vía web en el link siguiente:

<https://goo.gl/forms/VUuhiru1PdG52Kzn2>.

Programa

Contenidos:

- 1- Introducción
 - 1.1- Radiación y absorción de rayos X – Interacción con la materia
 - 1.2- Las diferentes espectroscopías (XANES, EXAFS, XMCD).
 - 1.3- Instrumentación.
- 2- XANES (*X-ray absorption near edge structure*)
 - 2.1- Fundamentos.
 - 2.2- Aplicaciones.
 - 2.3- Tratamiento de datos.
- 3- XRS (*X-ray Raman Spectroscopy*), RXD (*Resonant X-ray Diffraction*) y SRXD (*Surface resonant X-ray diffraction*)
 - 4.1- Fundamentos.
 - 4.2- Aplicaciones.
- 4- Cálculo de espectros XANES: Ecuaciones generales
 - 5.1- Matrices de transición.
 - 5.2- Reglas de selección.
 - 5.3- Aplicación al cálculo de XANES.
- 5- Cálculo de estados finales
 - 6.1- Sobre el potencial.
 - 6.2- Teoría de múltiple *scattering*.
 - 6.3- Aproximación a estructura de bandas.
- 6- Aplicaciones usando programa FDMNES
- 7- Aplicaciones usando métodos ab-initio.
- 8- EXAFS (*Extended X-ray Absorption Fine Structure*)
 - 9.1- Fundamentos.
 - 9.2- Aplicaciones.
 - 9.3- Tratamiento de datos.
 - 9.4- Ajustes con lfeffit.