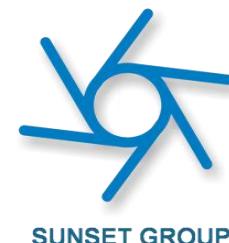


Experimentos Cuánticos II - 2021

Fundamentos y aplicaciones de absorción de rayos X EXAFS

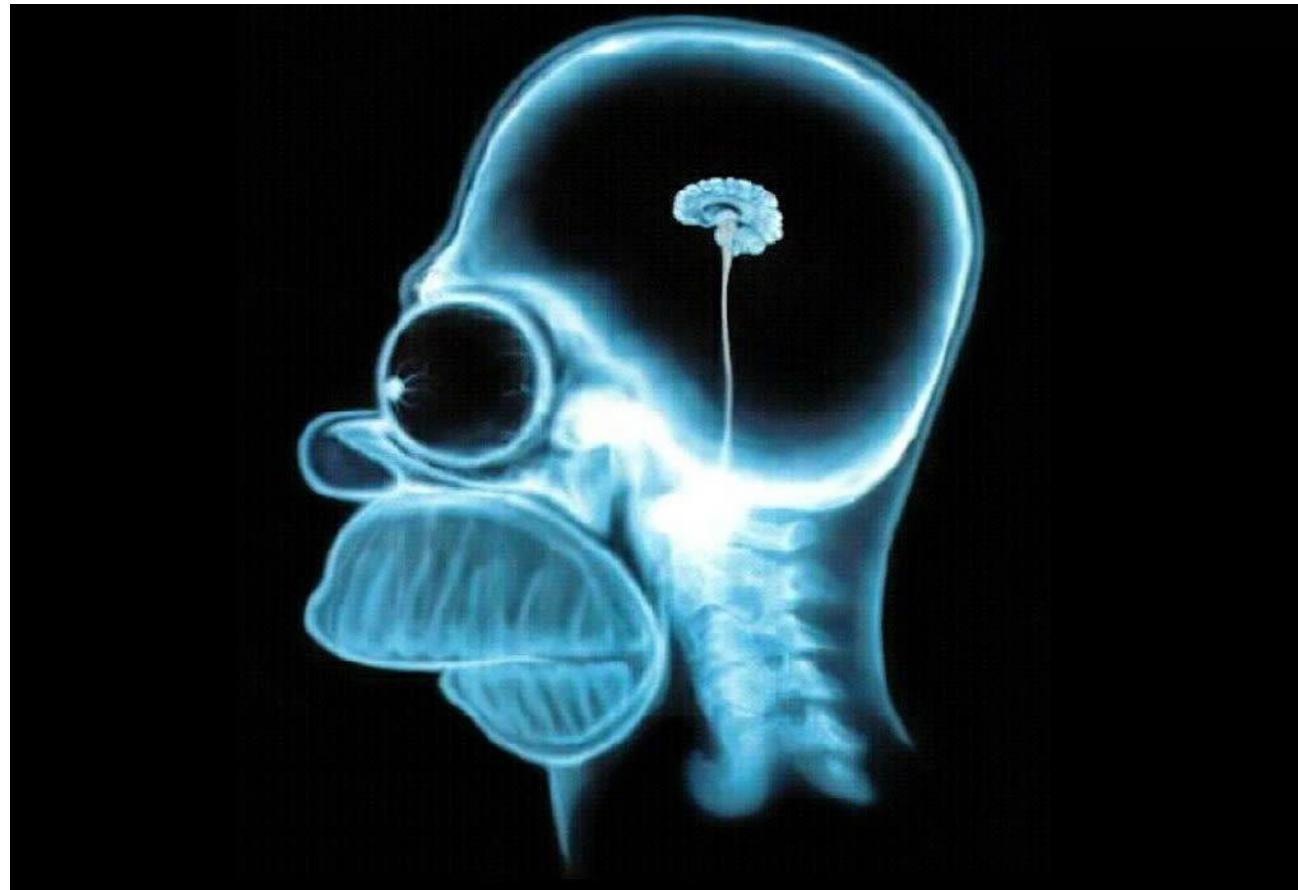
Martín Mizrahi – Lisandro Giovanetti



Contenidos

- Proceso de absorción.
- Coeficiente de atenuación lineal.
- Origen de las oscilaciones EXAFS.
- Modelo de las oscilaciones EXAFS.
- Parámetros de la ecuación EXAFS.
- Pre-tratamiento de datos.
- Medidas de espectros de absorción.
- Ventajas de la técnica.
- Ejemplos

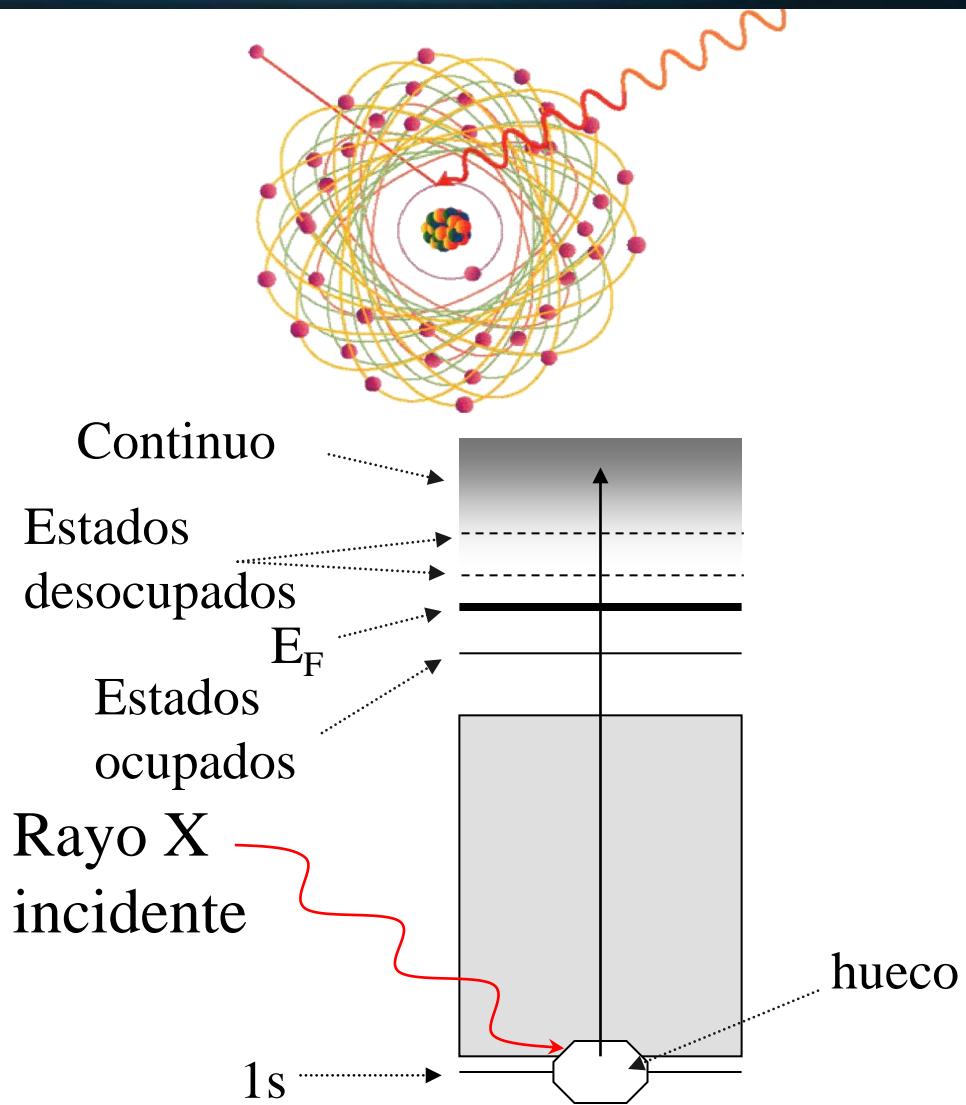
Proceso de absorción



10

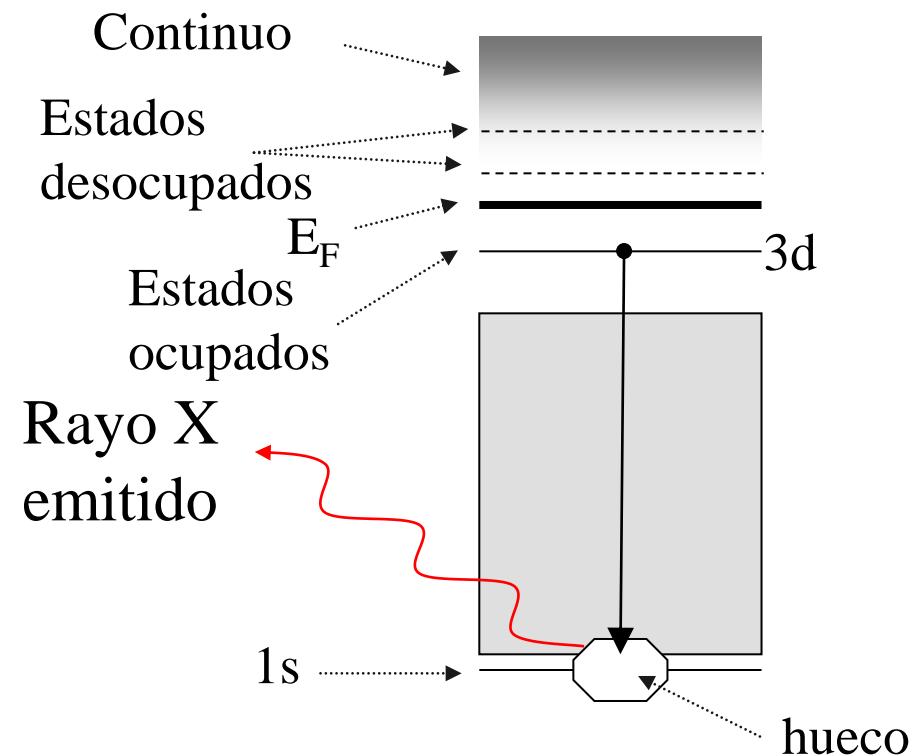
Proceso de absorción

- Los rayos X son absorbidos vía efecto fotoeléctrico.
- La absorción ocurre siempre y cuando los rayos X incidentes tengan la energía suficiente para poder “arrancar” un electrón de una capa interna.
- El átomo quedará con un hueco en algún determinado nivel electrónico.
- Cualquier exceso de energía del rayo X incidente se transmite al electrón eyectado.



Proceso de fluorescencia

- El hueco generado será ocupado por un electrón de algunos de los niveles excitados.
- En este proceso se emitirá un rayo X.
- La energía del rayo X emitido por la fluorescencia poseerá una energía característica del átomo absorbente.



Coeficiente de atenuación

- Intensidad de la radiación pasando a través de un material con un determinado espesor “t”:

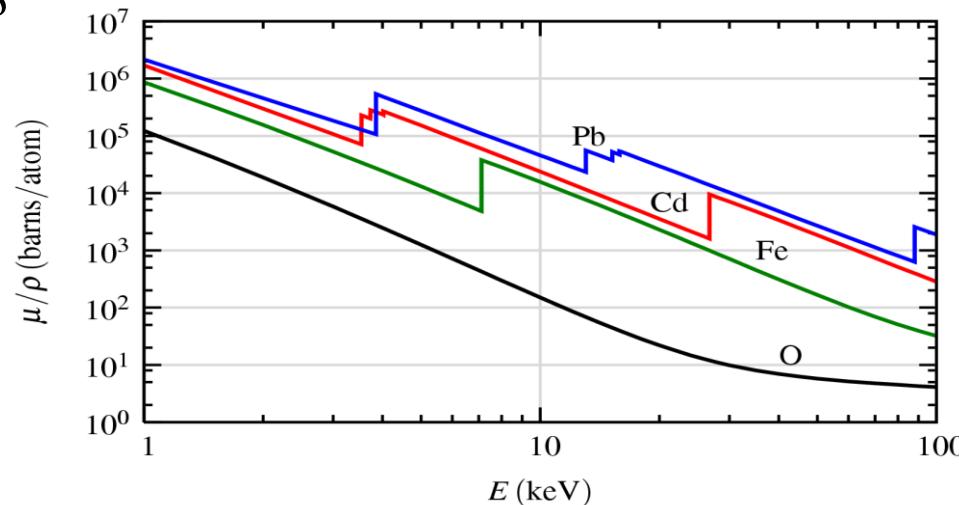
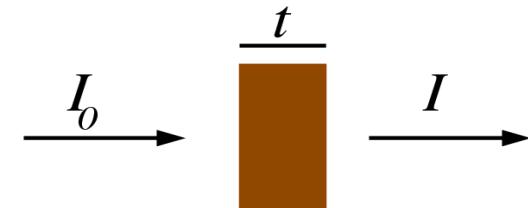
Ley de Beer:

$$I = I_0 e^{-\mu t}$$

$$\mu \approx \frac{\rho Z^4}{AE^3}$$

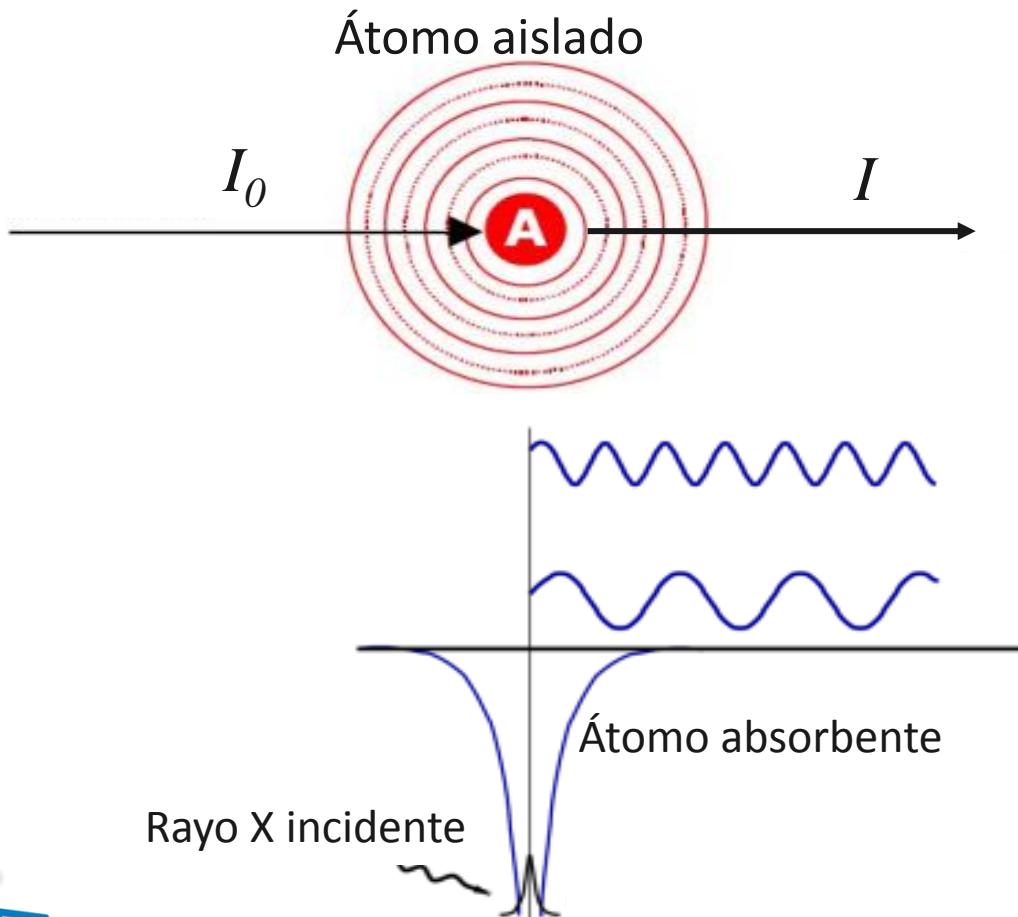
μ es el coeficiente de atenuación lineal o coeficiente de absorción. Depende de:

- La energía incidente E
- Número atómico del material Z
- Densidad del material ρ
- Masa atómica del material A

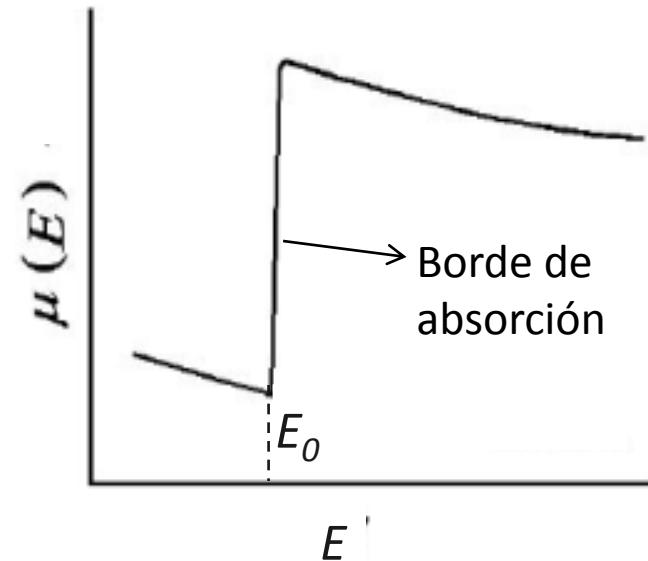


Absorción átomo aislado

El coeficiente de absorción de un átomo aislado varía suavemente con la energía de la radiación incidente luego del borde de absorción:

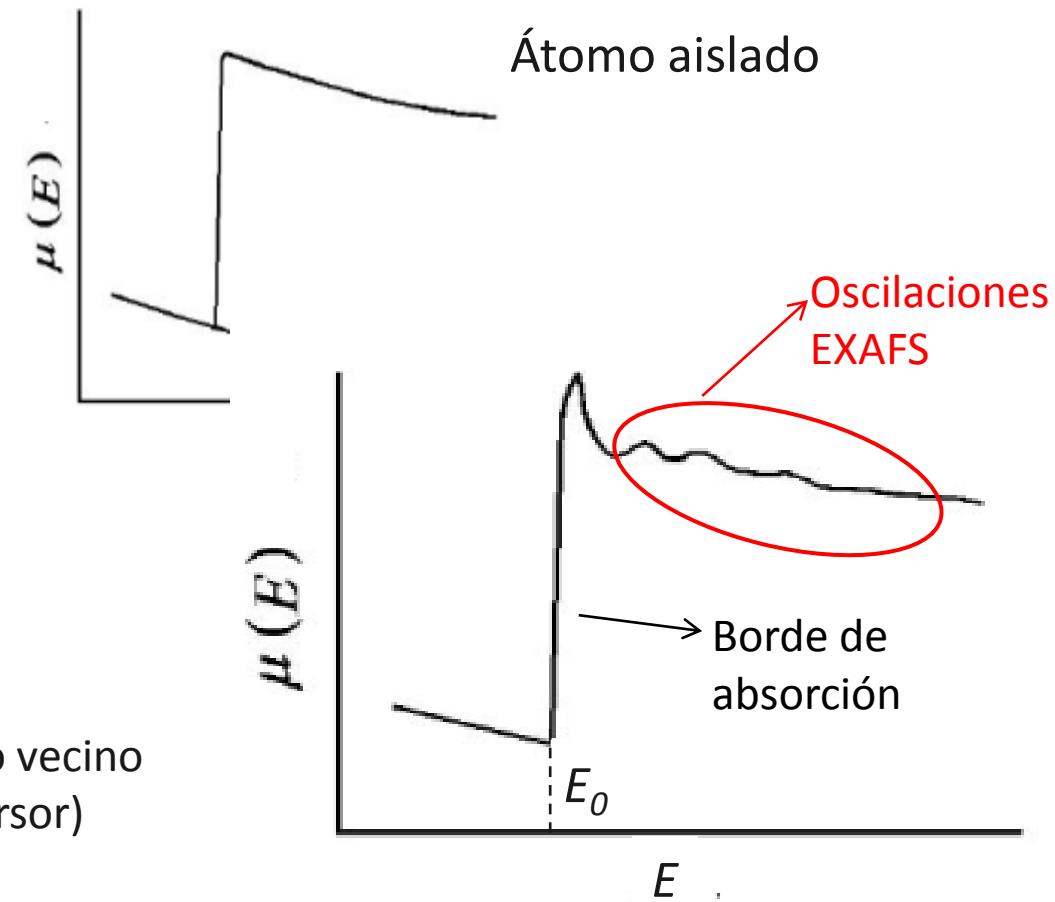
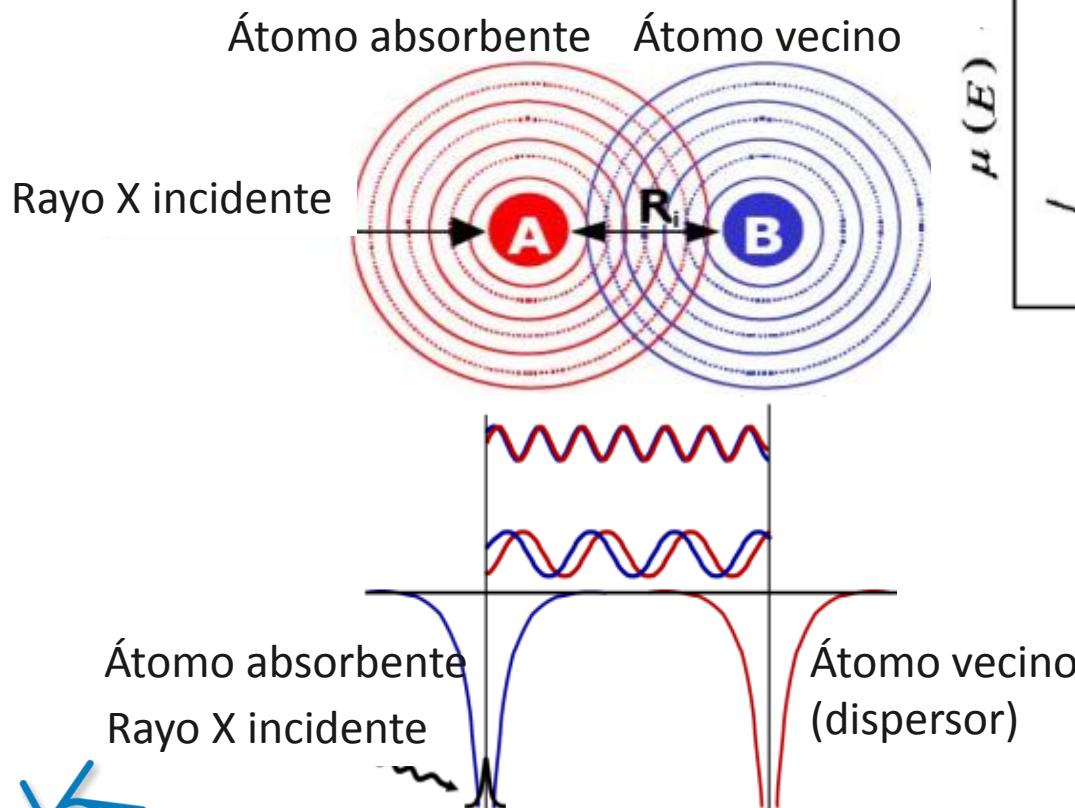


$$\mu(E) \propto -\ln(I/I_0)$$

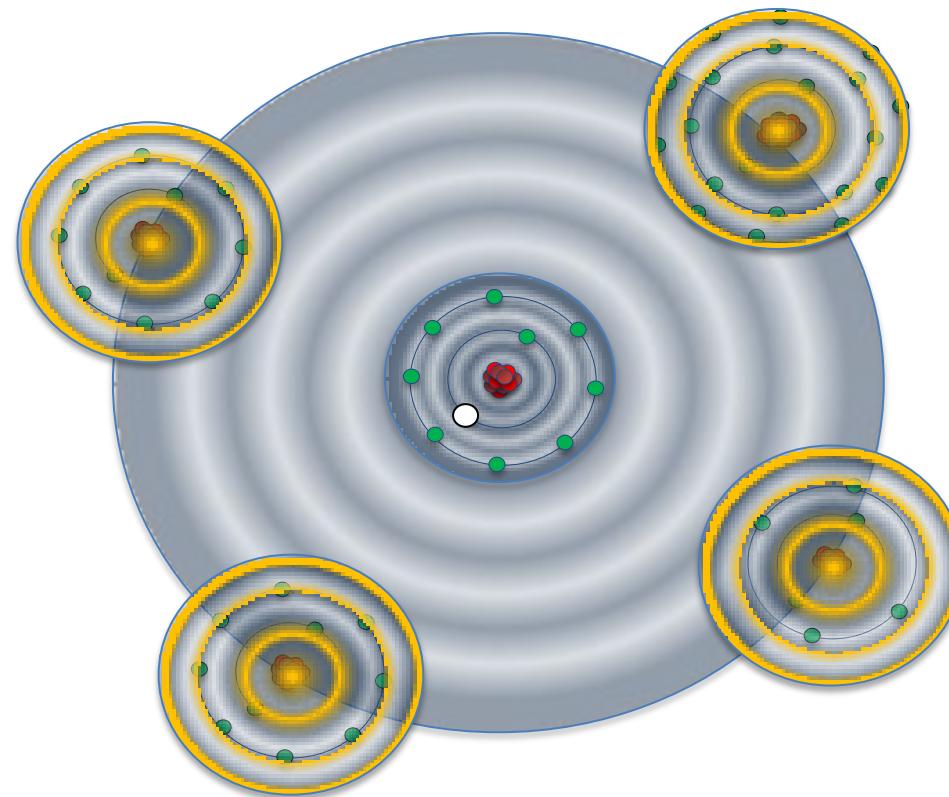


Absorción átomo no aislado

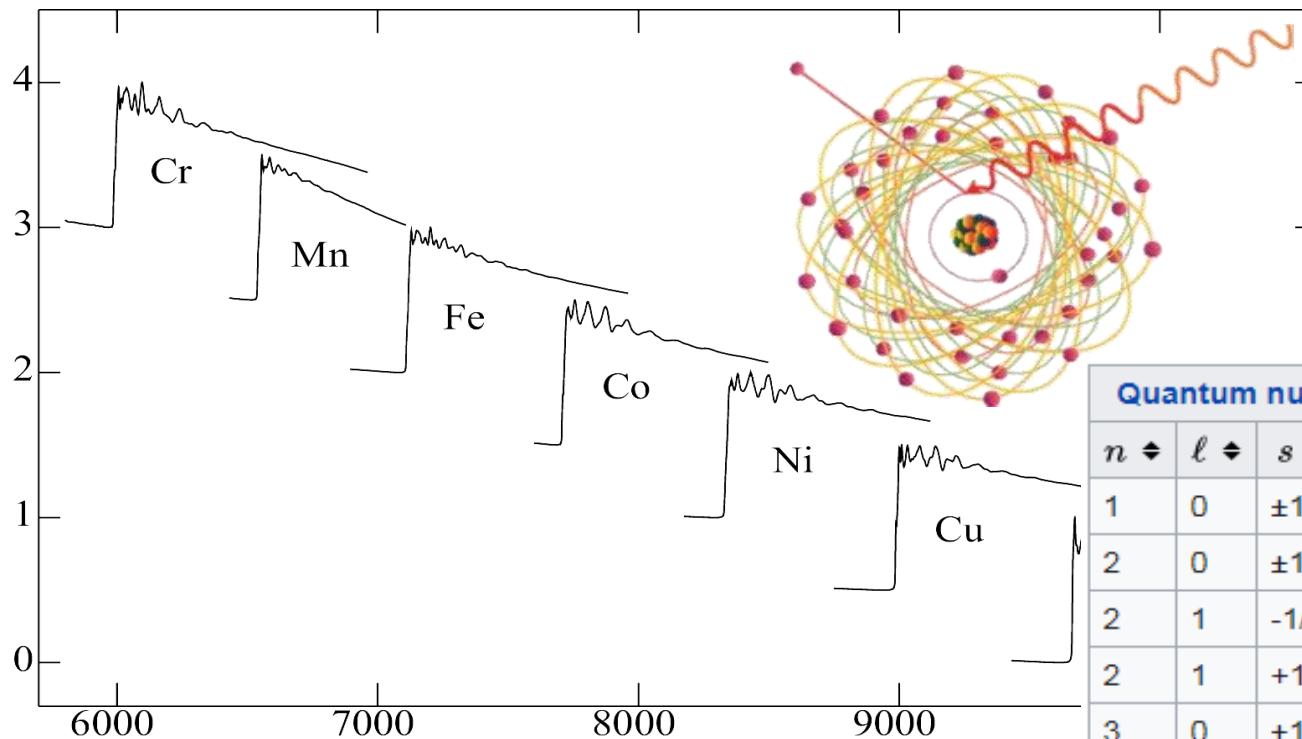
La estructura fina de absorción de rayos X es la modulación del coeficiente de absorción en la región posterior el borde de absorción:



Oscilación EXAFS



Selectividad química



Quantum numbers				Atomic notation	X-ray notation
$n \uparrow$	$\ell \uparrow$	$s \uparrow$	$j \uparrow$		
1	0	$\pm 1/2$	$1/2$	$1S_{1/2}$	K ₁
2	0	$\pm 1/2$	$1/2$	$2S_{1/2}$	L ₁
2	1	-1/2	$1/2$	$2P_{1/2}$	L ₂
2	1	+1/2	$3/2$	$2P_{3/2}$	L ₃
3	0	$\pm 1/2$	$1/2$	$3S_{1/2}$	M ₁
3	1	-1/2	$1/2$	$3P_{1/2}$	M ₂
3	1	+1/2	$3/2$	$3P_{3/2}$	M ₃
3	2	-1/2	$3/2$	$3D_{3/2}$	M ₄
3	2	+1/2	$5/2$	$3D_{5/2}$	M ₅

Energías de absorción

Name	Iron	Edge	Energy(eV)	Name	Gold	Edge	Energy(eV)
Number	26	K	7112	Number	79	K	80725
Weight	55.85 amu	L1	844.6	Weight	197.2 amu	L1	14353
Density	7.86 g/cm^3	L2	719.9	Density	19.37 g/cm^3	L2	13734
Filter	Mn	L3	706.8	Filter	Ga	L3	11919
		M1	91.3			M1	3425



RaySpec X-ray Trans Energies

Periscope Design Education

★★★★★ 31

Everyone

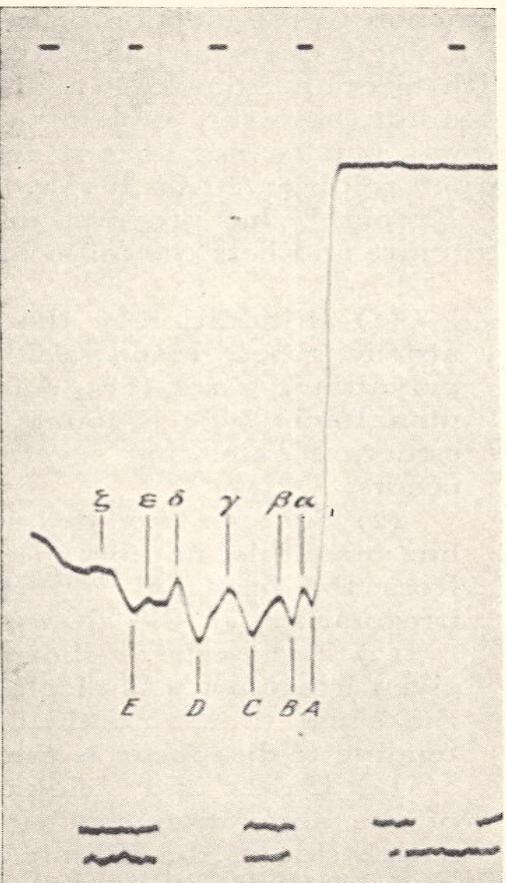
⚠ You don't have any devices.

Add to wishlist

Install



La historia del EXAFS



- Primeras observaciones de absorción de rayos de Broglie en 1913.
- Primeras observaciones de las oscilaciones EXAFS en 1920.
- Explicaciones del fenómeno fueron dadas por Kronig en 1931.
 - Utilizó orden de largo alcance en cristales para predecir lo que denominó estructuras oscilatorias de Kronig.
- Posteriormente se comenzó explicar el fenómeno basado en orden de corto alcance utilizando el concepto de la retrodispersión de los fotoelectrones.
 - Started by Kronig (1932)
 - Advanced by Peterson (phase shifts-1936)
 - Kostarev (all condensed matter-1949)
 - Sawada (mean free path-1959)
 - Shmidt (disorder-1961)

Coster and Veldkamp, Z. Phys.
70, 306 (1931).

La historia del EXAFS



Sayers, Stern and Lytle,
Phys. Rev. Lett. **71**, 1204
(1971)

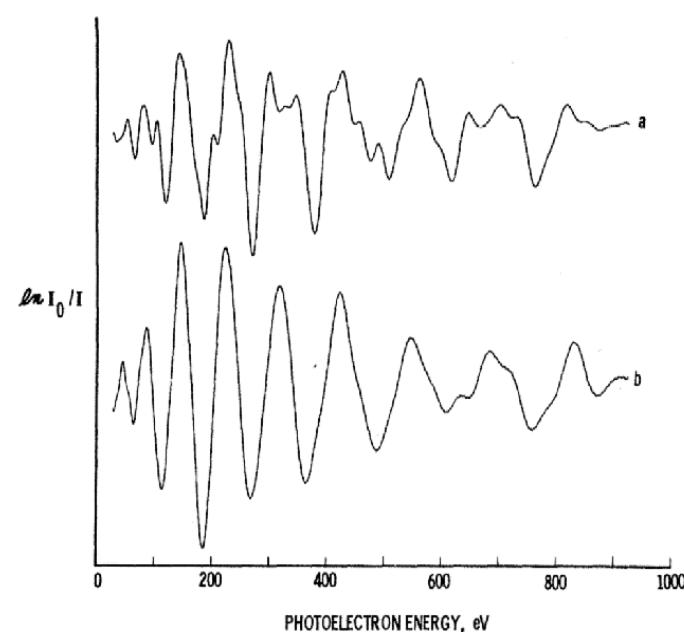


FIG. 1. Smoothed experimental EXAFS data for (a) crystalline and (b) amorphous Ge. Only the oscillatory part χ of the absorption edge is shown.

- Contempla las distintas dispersiones posibles del fotoelectrón con los átomos vecinos.
- Usa el concepto de Transformada de Fourier para el análisis de las oscilaciones EXAFS, usando computadoras con 32 kB RAM!

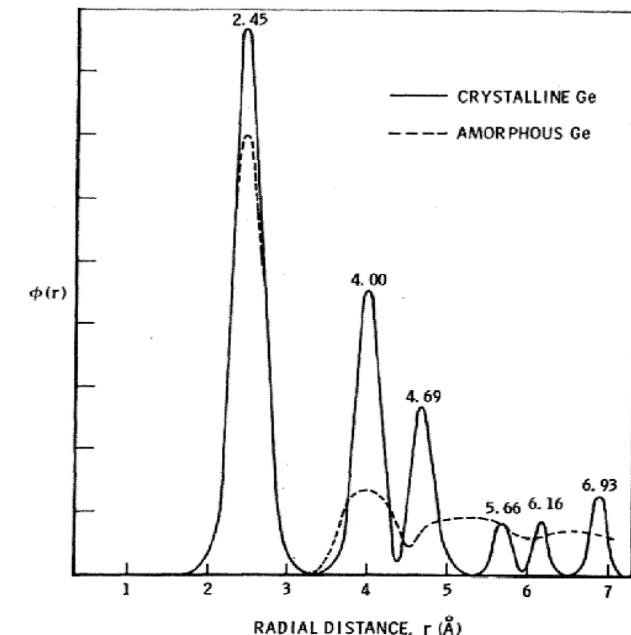


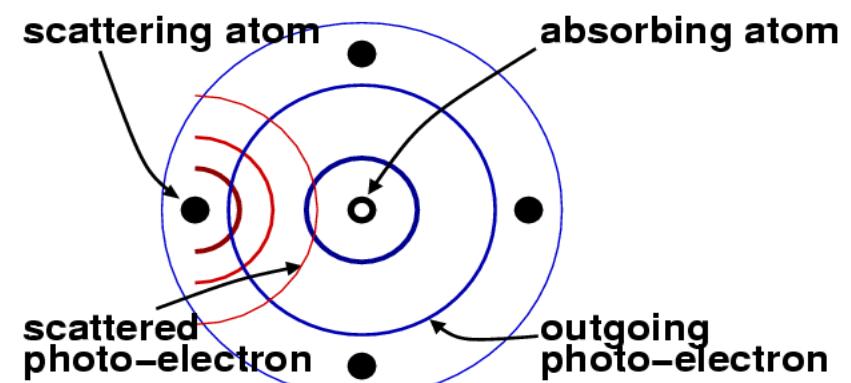
FIG. 2. Fourier transformation of the data of Fig. 1, $\phi(r)$, a radial structure function, compares amorphous and crystalline Ge. Numbers over the peaks indicate the measured distances in Å.

Modelo para EXAFS

- Modelo más simple asume que la oscilación EXAFS es proporcional a la amplitud del fotoelectrón dispersado en la posición del átomo absorbente.

Fotoelectrón:

1. Deja el átomo absorbente.
2. Es retrodispersado por los 1^{ros} vecinos
3. Retorna al átomo absorbente.



Usando la Regla de Oro de Fermi:

$$\mu(E) = \langle i | \hat{H} | f \rangle$$

$$|f\rangle = |f_0 + \Delta f\rangle$$

Átomo
aislado

Efecto de
los vecinos

$$\mu(E) = \langle i | \hat{H} | f_0 \rangle + \langle i | \hat{H} | \Delta f \rangle$$

$$\mu_0(E) \quad \chi(E)$$

Ecuación EXAFS

$$\chi(k) = \sum_i S_0 N_i \frac{F_i(k)}{k R_i^2} \exp(-2k^2 \sigma_i^2) \exp\left(\frac{-2R_i}{\lambda}\right) \sin[2kR_i + \delta_i(k)]$$

Debo conocer:

- $F(k)$: Amplitud de la onda retrodispersada.
- $\delta(k)$: Cambio de fase de la onda retrodispersada.
- λ : Camino libre medio del fotoelectrón.



- Referencias experimentales.
- Cálculos *ab-initio* (FEFF).

Para determinar:

- N_i : Número de coordinación de una determinada esfera.
- R_i : Distancia interatómica entre el átomo absorbente y los vecinos de una determinada esfera.
- σ_i^2 : Desorden térmico y estructural en las distancias de una determinada esfera.



- Modelo + ajuste.

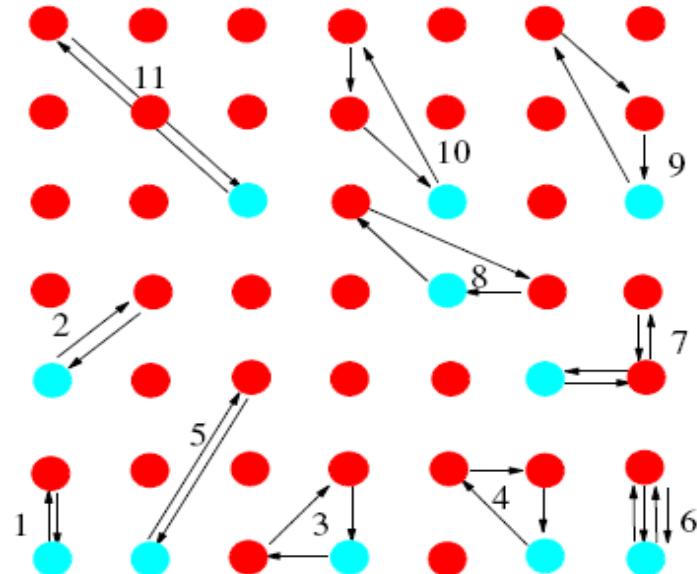
Ecuación EXAFS

$$\chi(k) = \sum_i S_0 N_i \frac{F_i(k)}{k R_i^2} \exp(-2k^2 \sigma_i^2) \exp\left(\frac{-2R_i}{\lambda}\right) \sin[2k R_i + \delta_i(k)]$$

La sumatoria se realiza sobre todas las esferas de coordinación del átomo absorbente. En primera aproximación se suele hacer el ajuste sólo contemplando la 1^{ra} esfera de coordinación (simple scattering).

Para obtener información de las esferas más lejanas hay que contemplar las posibles dispersiones múltiples.

Se complica



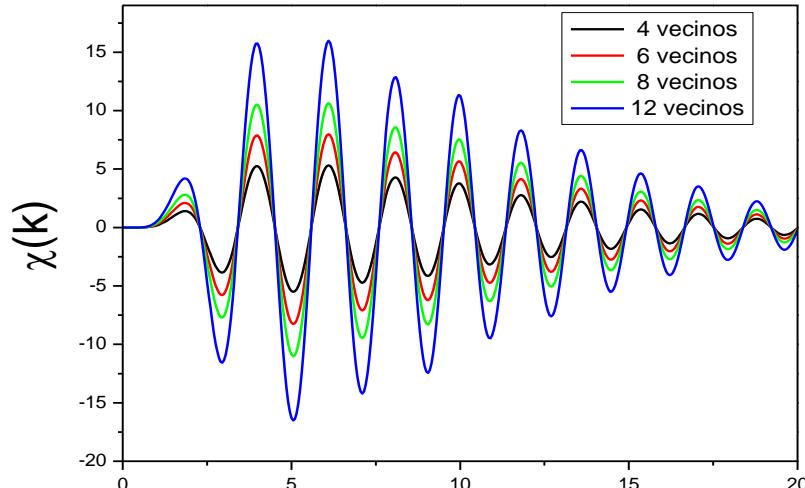
S_0 se denomina factor de atenuación, y contempla los procesos inelásticos y de relajación de los e⁻ en el átomos absorbente. Estos efectos atenúan la señal EXAFS y por lo tanto deben ser estimados si se quiere obtener información cuantitativa.

Efecto del N

$$\chi(k) = S_0 N \frac{F(k)}{k R^2} \exp(-2k^2\sigma^2) \exp\left(\frac{-2R}{\lambda}\right) \sin[2kR + \delta(k)]$$

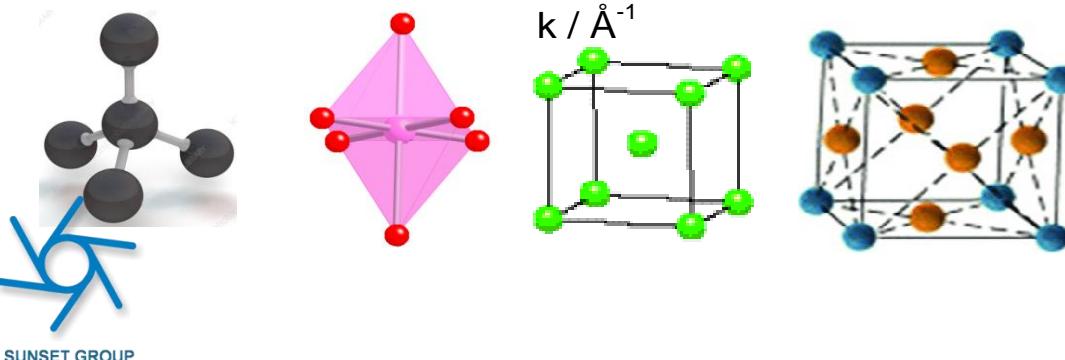
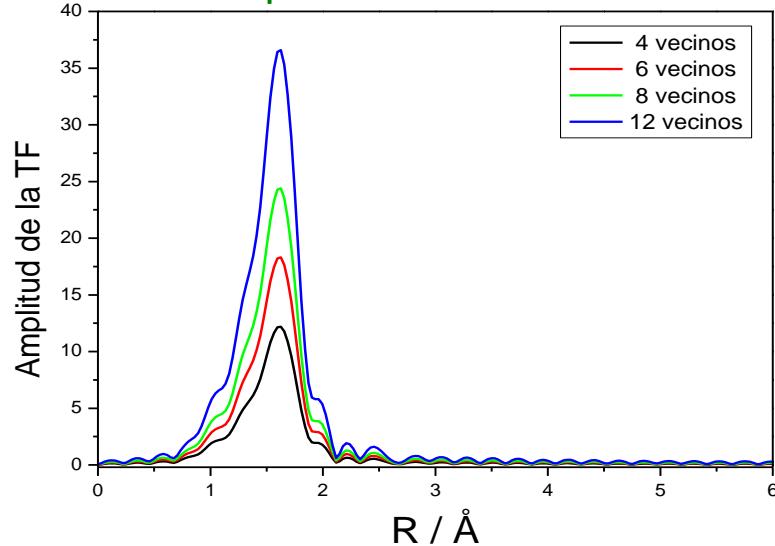
Estudio el efecto de la cantidad de 1^{ros} vecinos en torno al átomo absorbente.

Señal EXAFS



TF

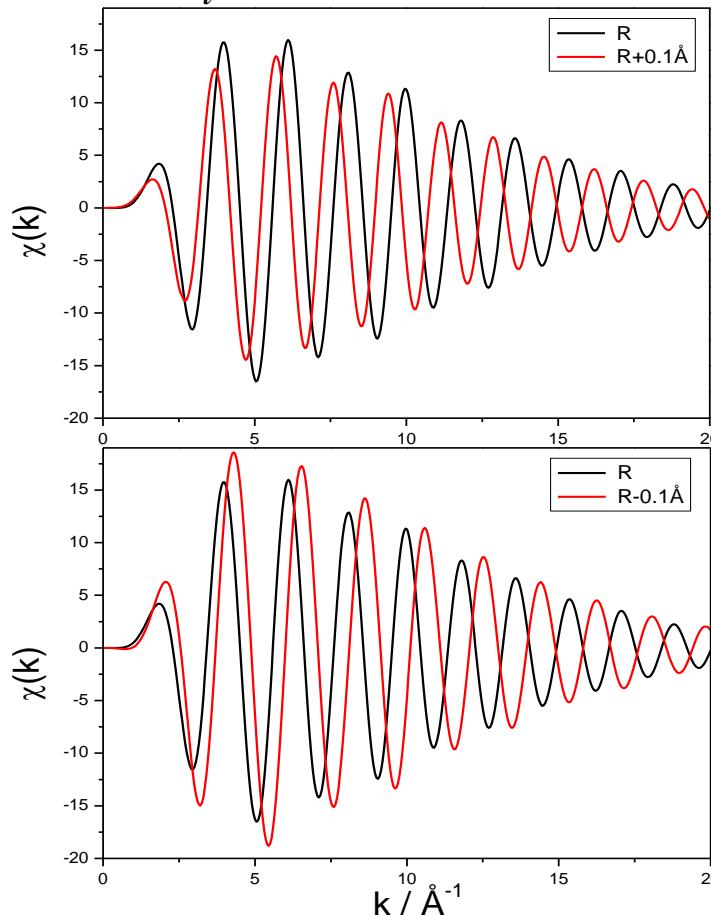
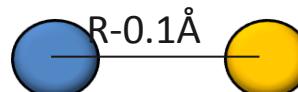
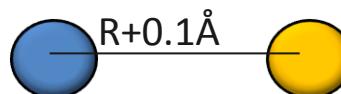
Distribución pseudo-radial de distancias



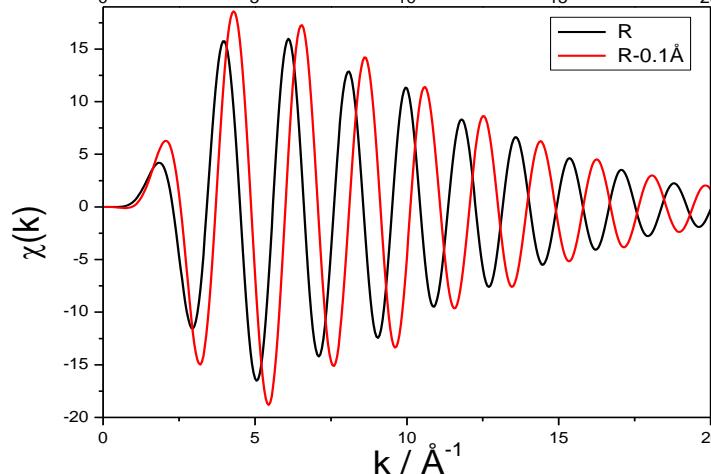
Asumo que la distancia entre el absorbente y sus 1^{ros} vecinos es la misma en todas las estructuras

Ecuación EXAFS

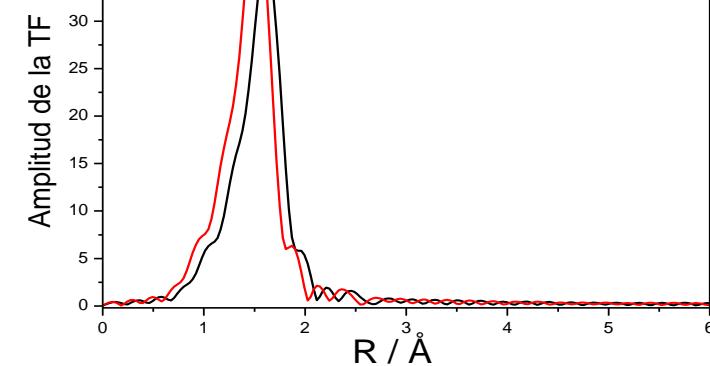
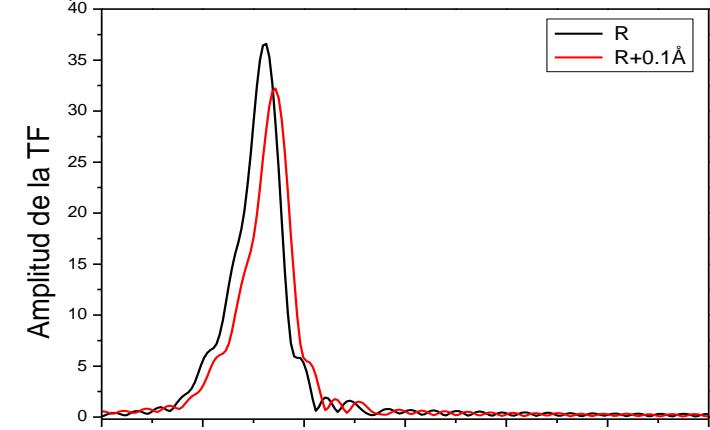
$$\chi(k) = \sum_i S_0 N_i \frac{F_i(k)}{k R_i^2} \exp(-2k^2 \sigma_i^2) \exp\left(\frac{-2R_i}{\lambda}\right) \sin[2k R_i + \delta_i(k)]$$



TF

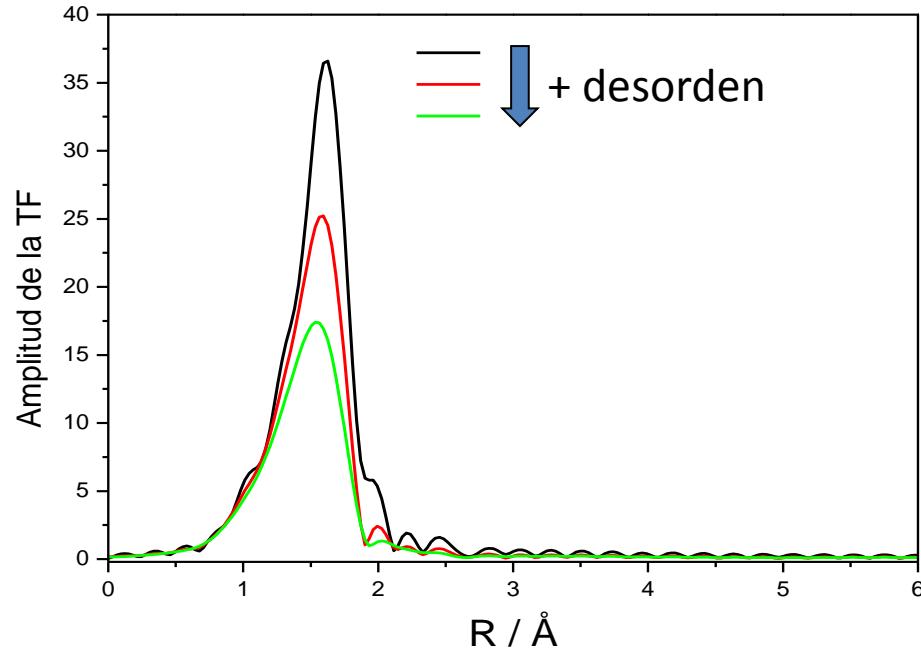
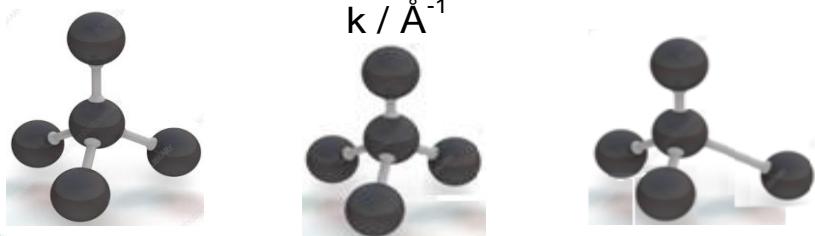
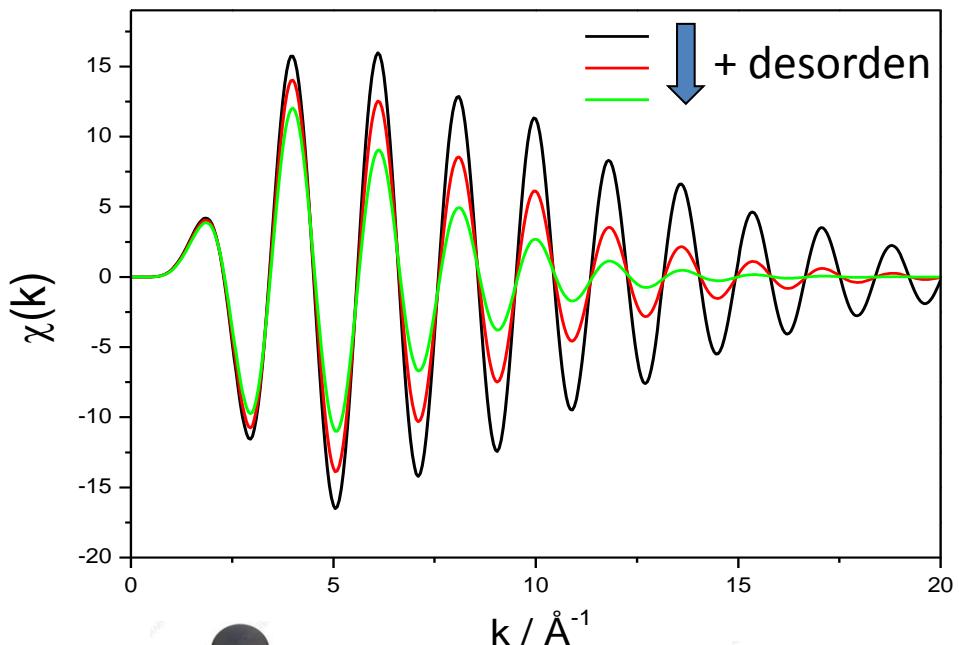


TF



Ecuación EXAFS

$$\chi(k) = \sum_i S_0 N_i \frac{F_i(k)}{k R_i^2} \exp(-2k^2 \sigma_i^2) \exp\left(\frac{-2R_i}{\lambda}\right) \sin[2k R_i + \delta_i(k)]$$

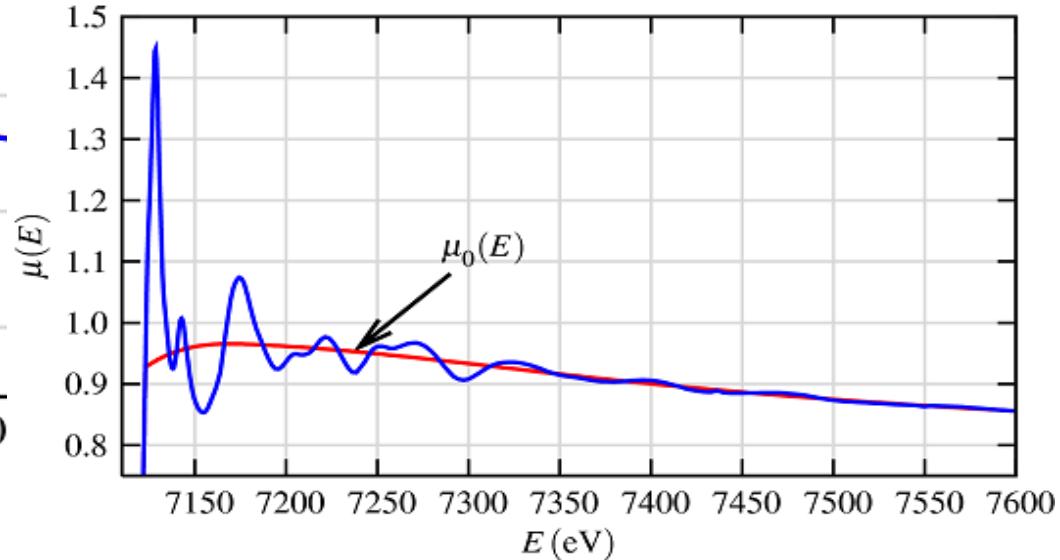
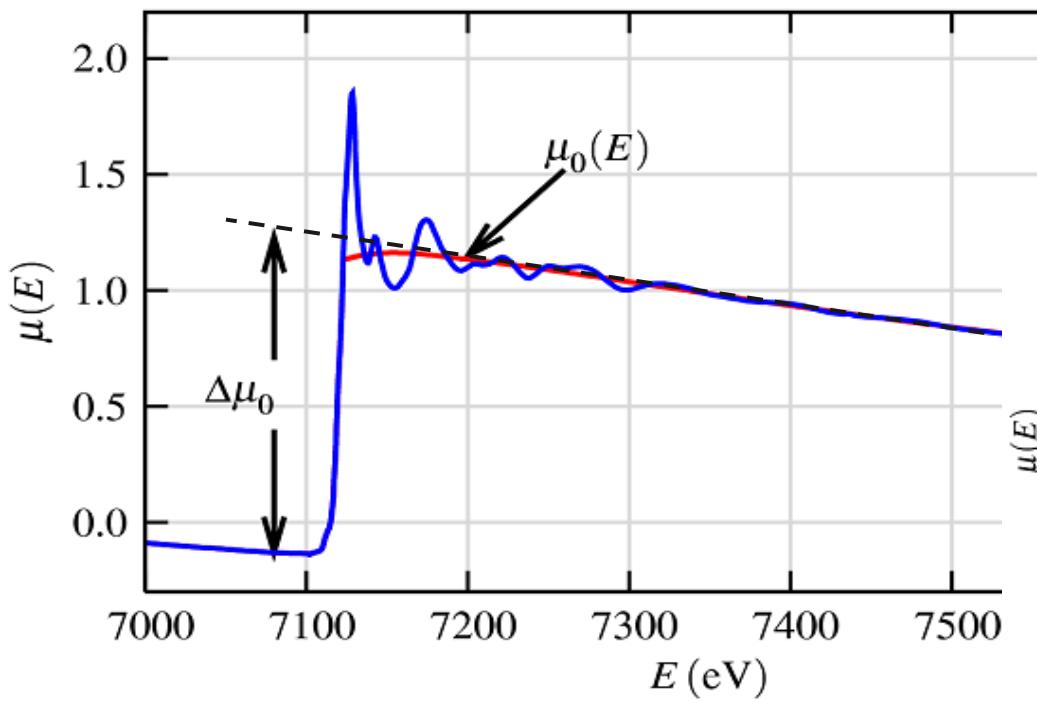


El N* de coordinación y el desorden están muy correlacionados.

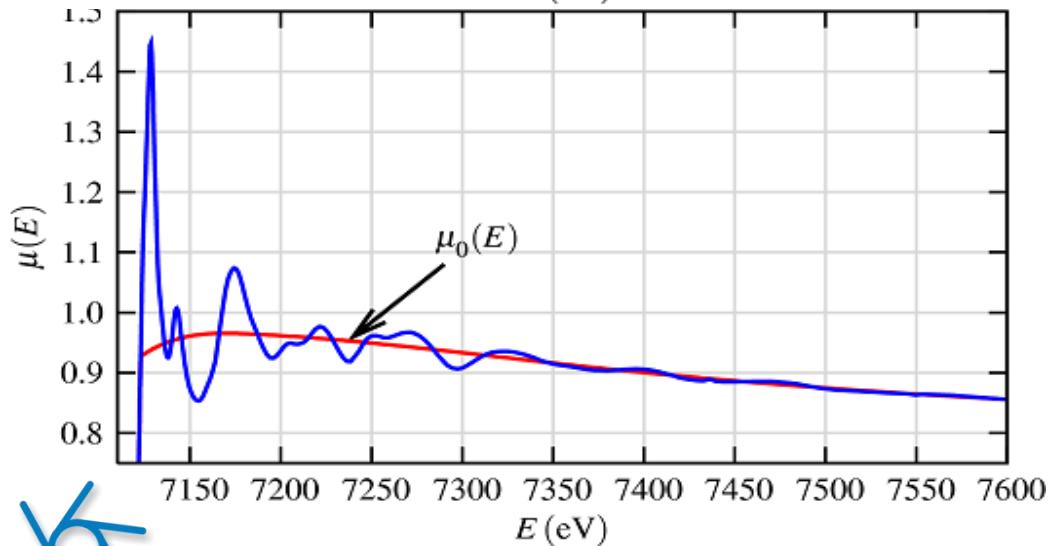
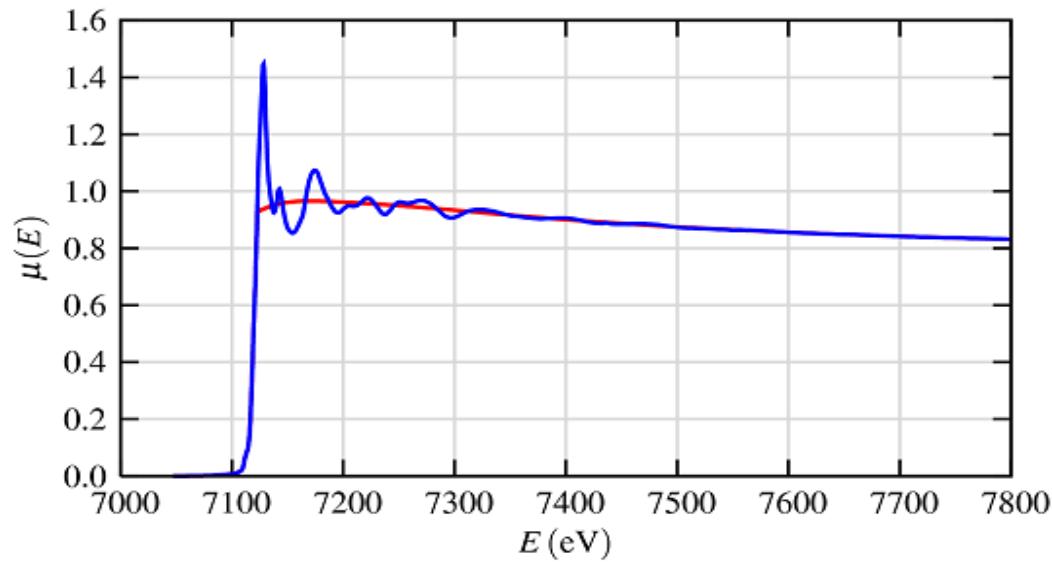
Pre tratamiento de datos

Necesitaremos aislar la oscilación de χ del el espectro de absorción completo. Para ello se debe restar al espectro la contribución del átomo aislado $\mu_0(E)$ y dividir por el salto $\Delta\mu_0(E_0)$ para obtener las oscilaciones normalizadas a 1 evento de absorción:

$$\chi(E) = \frac{\mu(E) - \mu_0(E)}{\Delta\mu_0(E_0)}$$



Pre tratamiento de datos



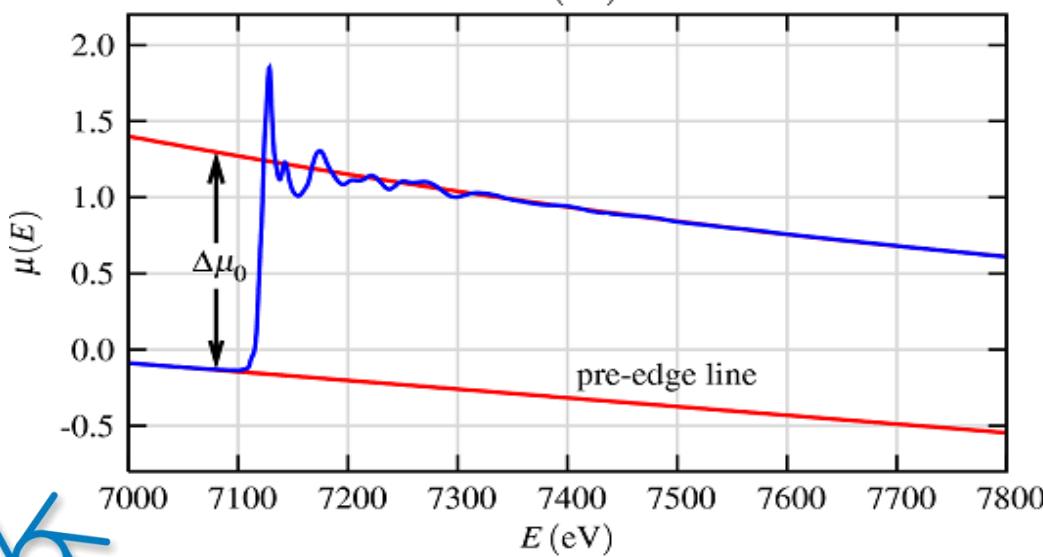
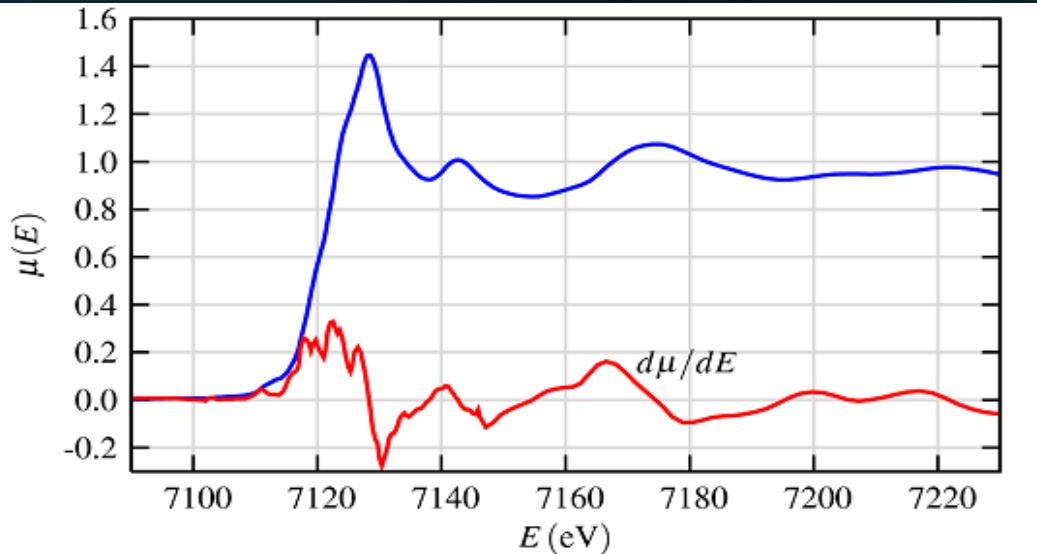
Sustracción del background:

Como no se cuenta con una medida de $\mu_0(E)$ (coeficiente de absorción del átomo aislado), lo aproximamos con una función polinómica suave.

CUIDADO: si se usa un grado muy grande para el polinomio se pueden eliminar parte de las oscilaciones EXAFS!!!

Elegimos un grado del polinomio que elimine sólo las contribuciones de baja frecuencia.

Pre tratamiento de datos



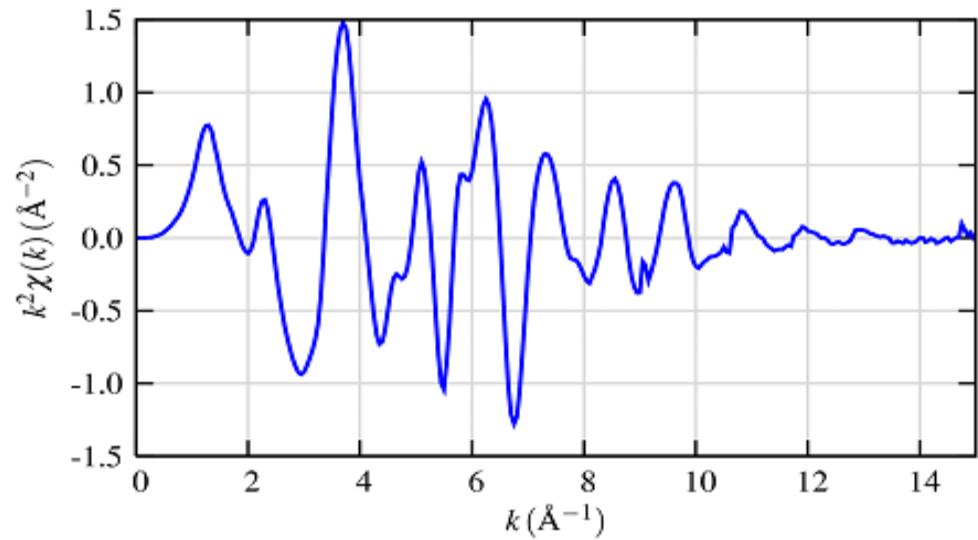
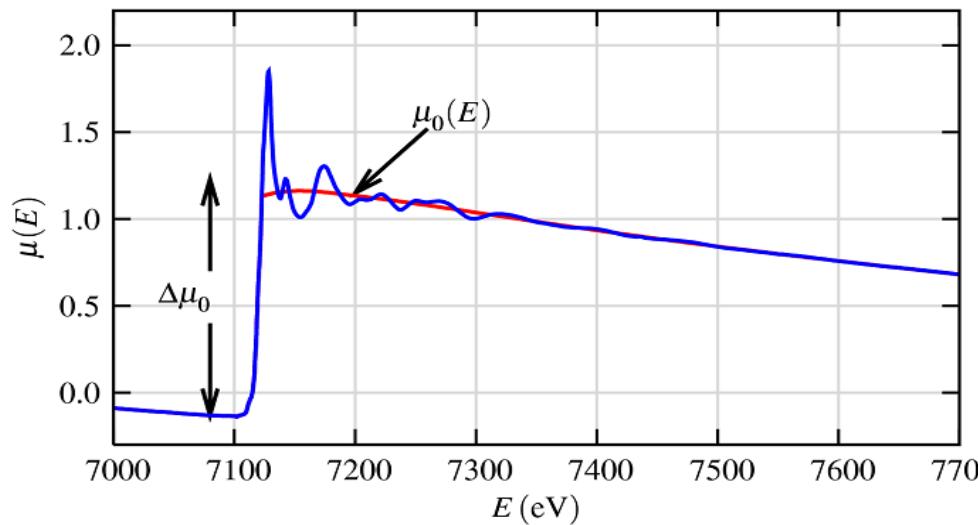
E_0 : La energía del borde de absorción se puede determinar del punto de inflexión del borde de absorción.

Sustracción del pre-borde: Permite eliminar contribuciones provenientes de otros bordes cercanos. Junto con la línea ajustada en el post-borde se estima el salto $\Delta\mu_0(E_0)$.

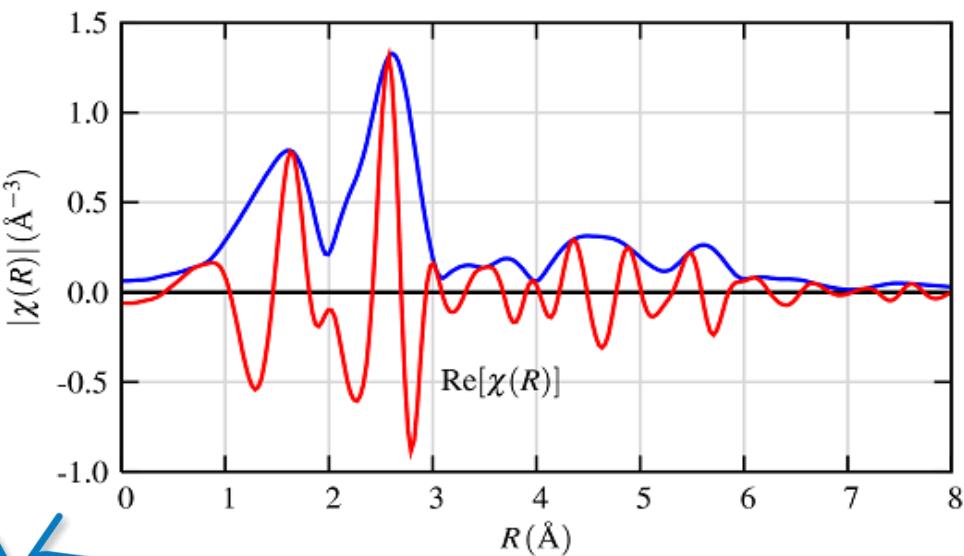
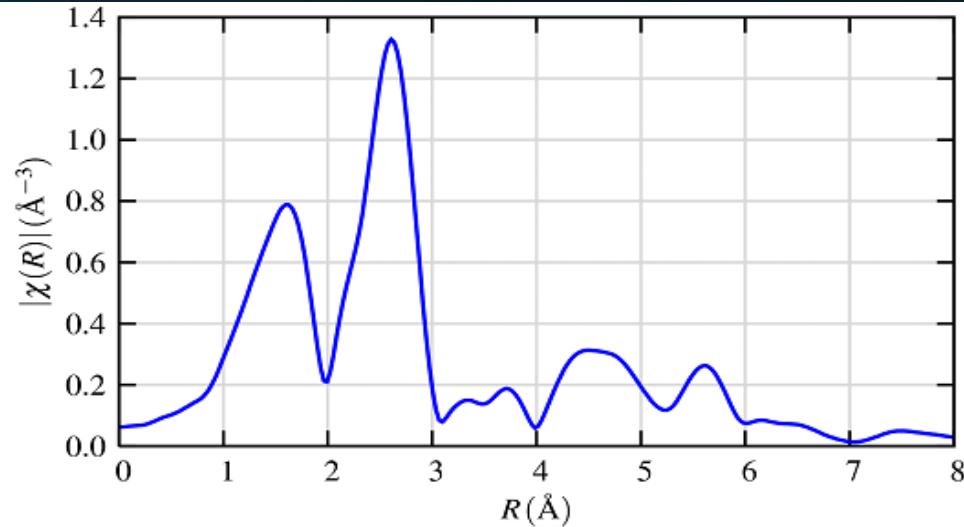
Pre tratamiento de datos

La oscilación EXAFS es un efecto de “interferencia” que depende del número de onda “k” del fotoelectrón. Este se relaciona con la energía incidente por:

$$\mathbf{k} = \sqrt{\frac{2m(E - E_0)}{\hbar^2}}$$



Pre tratamiento de datos

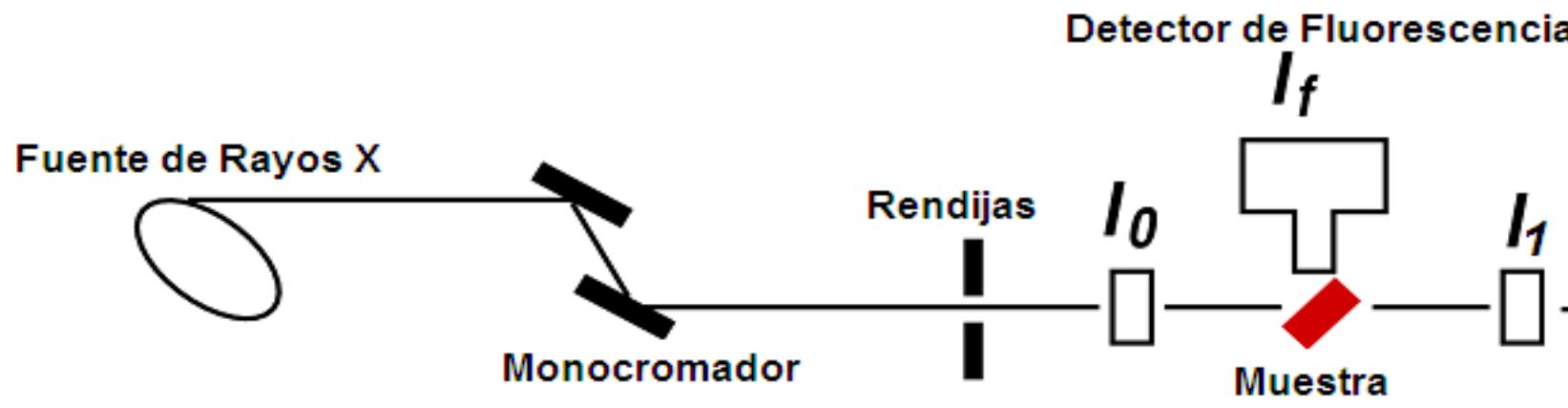


Transformada de Fourier de $\chi(k)$:

$\chi(R)$ es la TF de $\chi(k)$. En el caso del FeO, esta posee 2 picos principales correspondientes a las primeras 2 esferas de coordinación: Fe-O y Fe-Fe. La distancia Fe-O es de 2,14 \AA , sin embargo el primer pico se encuentra en 1,6 \AA . Esta diferencia es producto del corrimiento de fase $\delta(k)$: $\text{sen}[2kR+\delta(k)]$. Un corrimiento de 0,5 \AA es típico.

$\chi(R)$ es una cantidad compleja.

Medidas de absorción



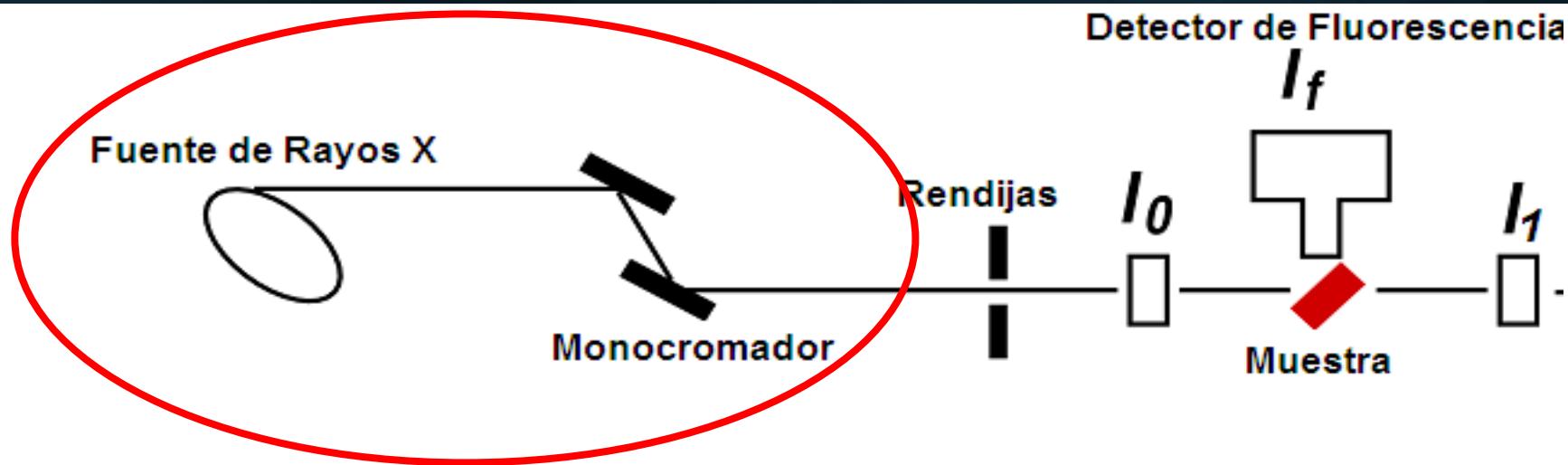
Transmisión:

$$I_1 = I_0 \exp(-\mu(E)t)$$
$$\mu(E) \propto -\ln(I_1/I_0)$$

Fluorescencia:

$$\mu(E) \propto (I_f / I_0)$$

Medidas de absorción



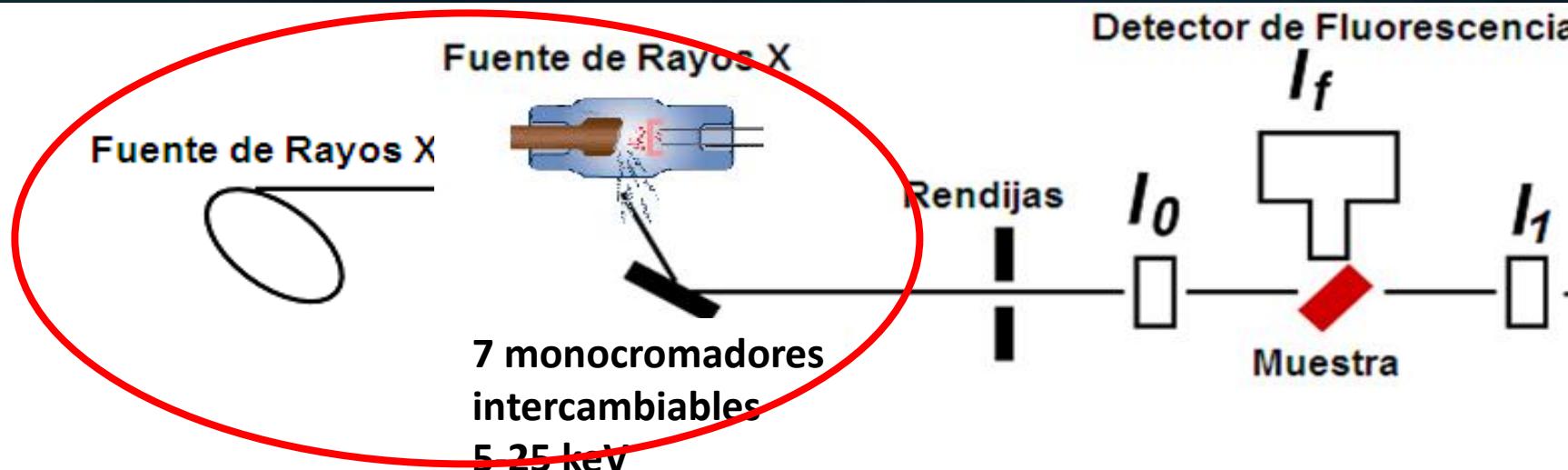
UVX

SIRIUS

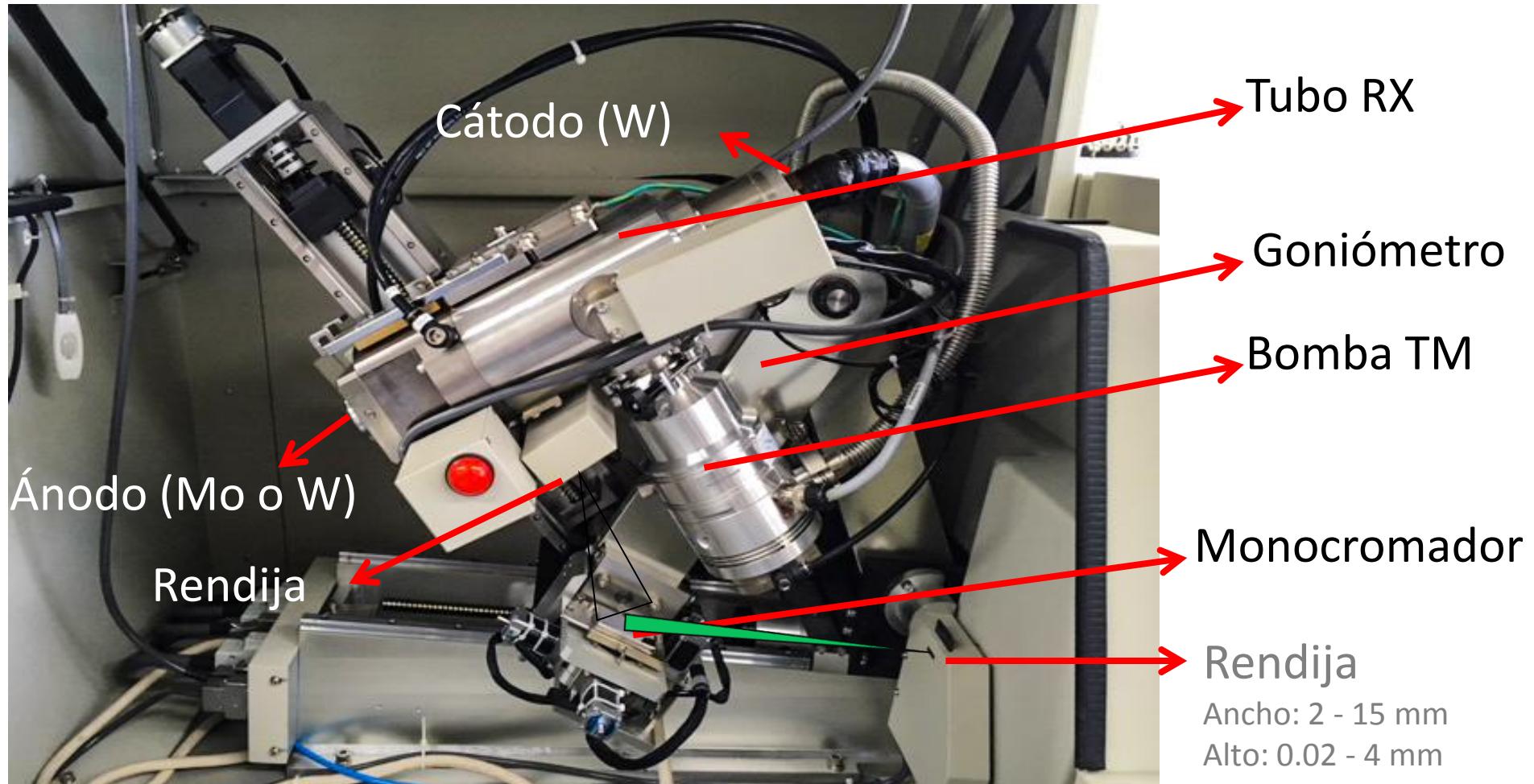
Campinas - Brasil



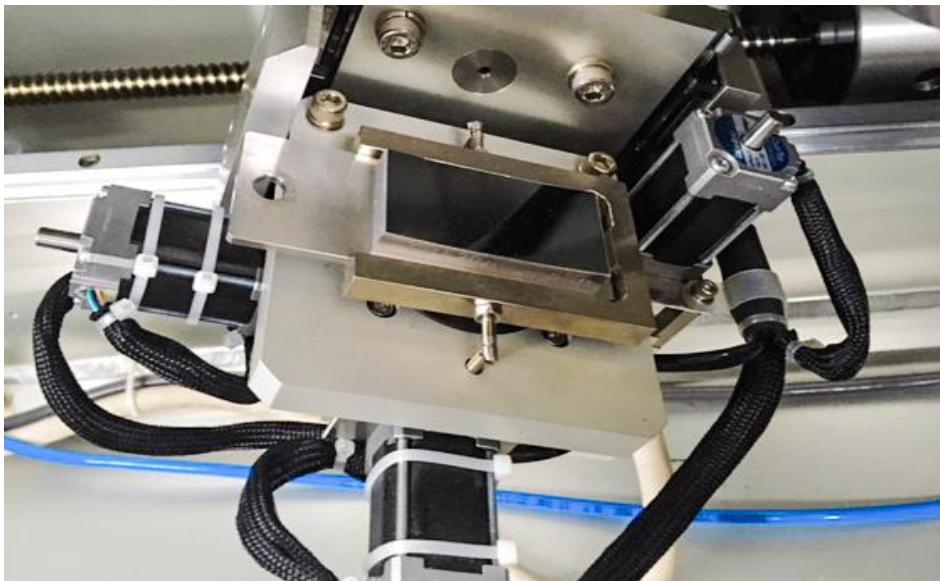
Medidas de absorción



EXAFS @ LP



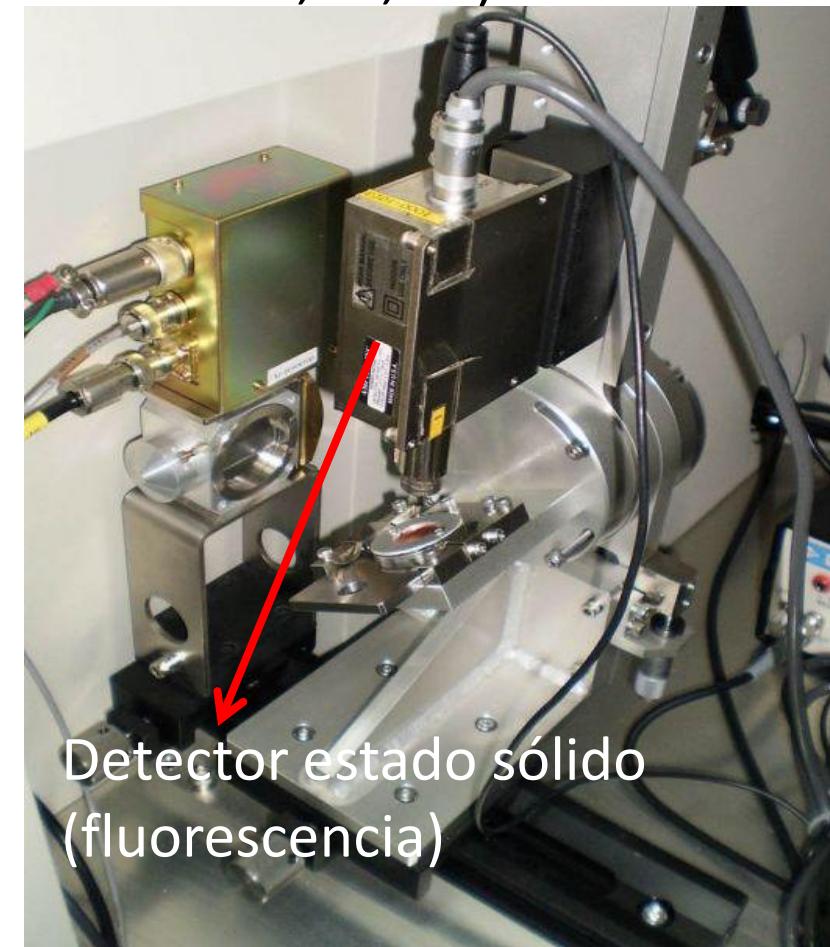
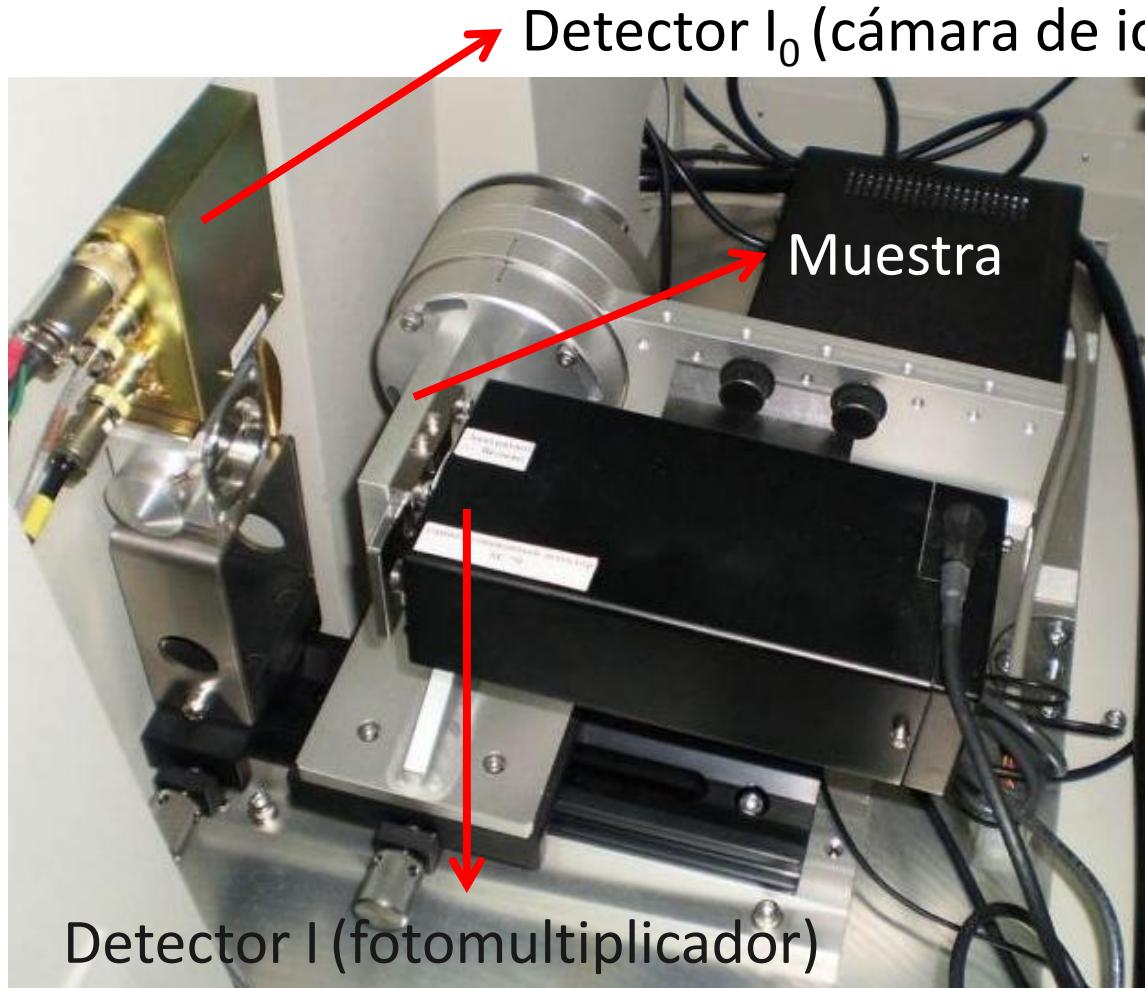
EXAFS @ LP



Monocromadores:

- Ge 111: 4,7~6,2 keV
- Ge 220: 4,7~11 keV
- Si 400: 6,7~16,7 keV
- Ge 311: 5,4~13,5 keV
- Ge 400: 6,4~16 keV
- Si 620: 10,5~25 keV
- Ge 840: 14~25 keV

EXAFS @ LP



EXAFS @ LP

TABLA PERIODICA DE ELEMENTOS

- Borde de absorción K
- Borde de absorción L3

1	1 H HIDROGENO 1.1 -298.2 -252.7 0.6709	2 He HELIOS -258.7 -258.9 0.126
2	3 Li LITIO 1.0 180.5 1300 0.539 1277 2779 1.85	4 Be BERILIO 1.5 24.312 1.2
3	11 Na SCODIO 0.9 97.3 462.8 0.871 1107 1.74	12 Mg MAGNESIO 2.0 660 1.2
4	19 K POTASIO 0.8 63.7 780 0.862 1440 1.55 2730	20 Ca CALCIO 1.0 1529 1529 3.4 1668 2345 1.6
5	37 Rb RUBERO 0.8 38.8 506 1.532 1389 2.6 2927	38 Sr ESTRONGIO 1.0 768 1309 3.0 1852 234 1.6
6	55 Cs CESIO 0.7 38.7 500 1.58 1340 3.61 3470	56 Ba BARIO 0.9 714 409 3 2280 6.17 5400 13.1 5400
7	87 Fr FRANCO 0.7 709 229 0.8 1050 227 1.1	88 Ra RADIO 0.8 1090 227 1.1 Ac ACTINIO 3 KU KURCIATOVIO 4 Ha HANIO 0
	58 Ce CERIO 1.1 276 3468 22.036 Th TORIO 4 1792 3850	59 Pr PRASEODIMIO 1.1 605 6.77 3127 140.12 140.907 140.907 60 Nd NEODIMIO 1.2 1624 6.78 3027 144.24 144.24 61 Pm PROMETIO 1.2 1627 7.00 150.35 150.35 62 Sm SAMARIO 1.2 1672 7.54 1436 151.36 151.36 63 Eu EUROPIO 2.3 1636 7.26 2000 157.29 157.29 64 Gd GADOLINIO 3 1612 7.89 2000 158.904 158.904 65 Tb TERBIO 3 1607 8.27 2000 162.50 162.50 66 Dy DISPROSIO 3 1607 8.54 2000 164.93 164.93 67 Ho HOLMIO 3 1601 8.82 2000 167.26 167.26 68 Er ERBIO 3 1645 9.05 1727 168.934 168.934 69 Tm TULIO 2.3 1645 9.23 1427 170.173 173.04 70 Yb YTERBIO 2.3 1645 9.46 13027 174.971 174.971 71 Lu LUTENIO 3 1652 9.64

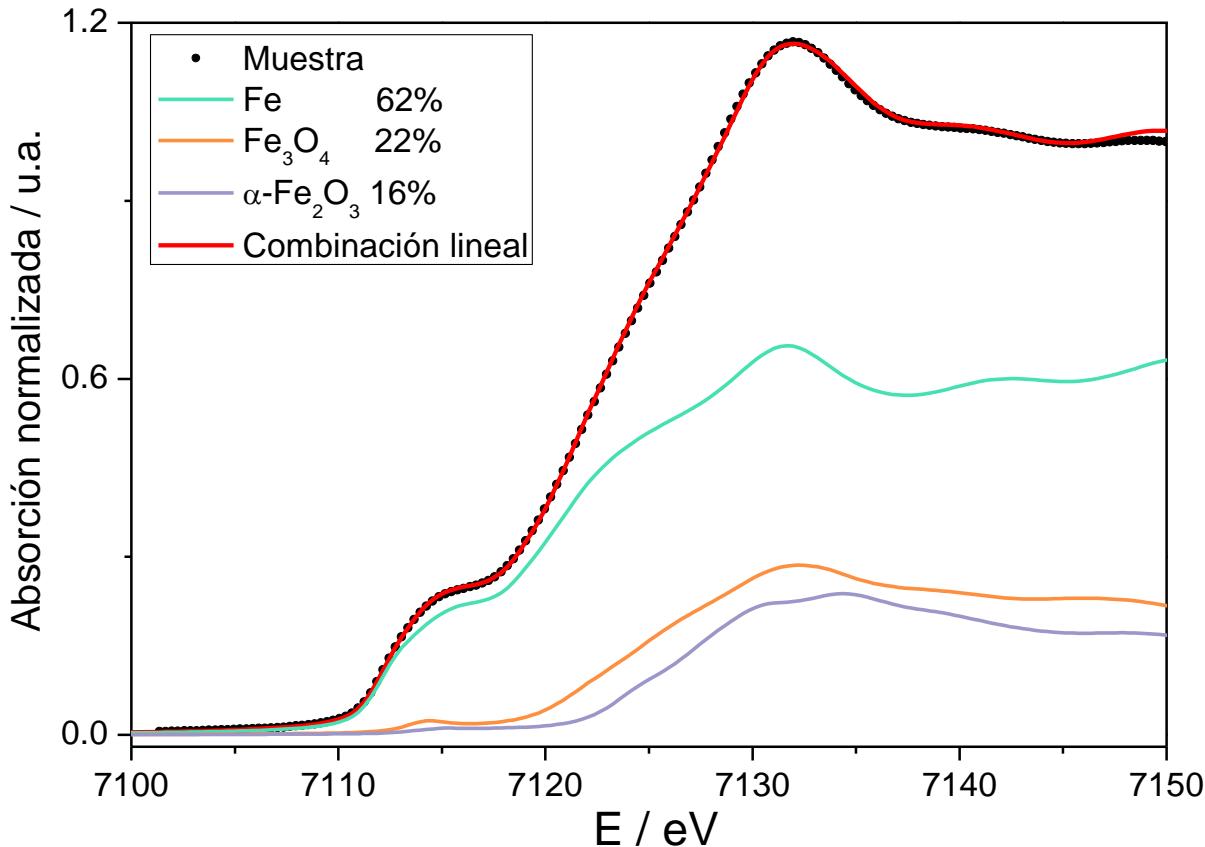
LANTANIDOS

ACTINIDOS



CAPACIDADES

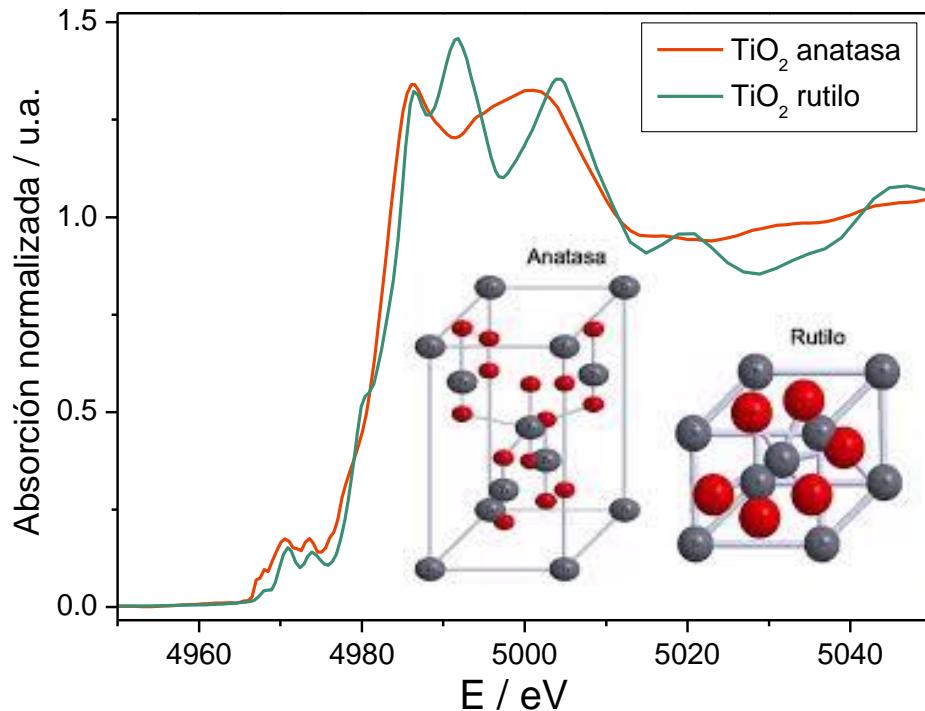
Cuantificación de fases presentes (XANES)



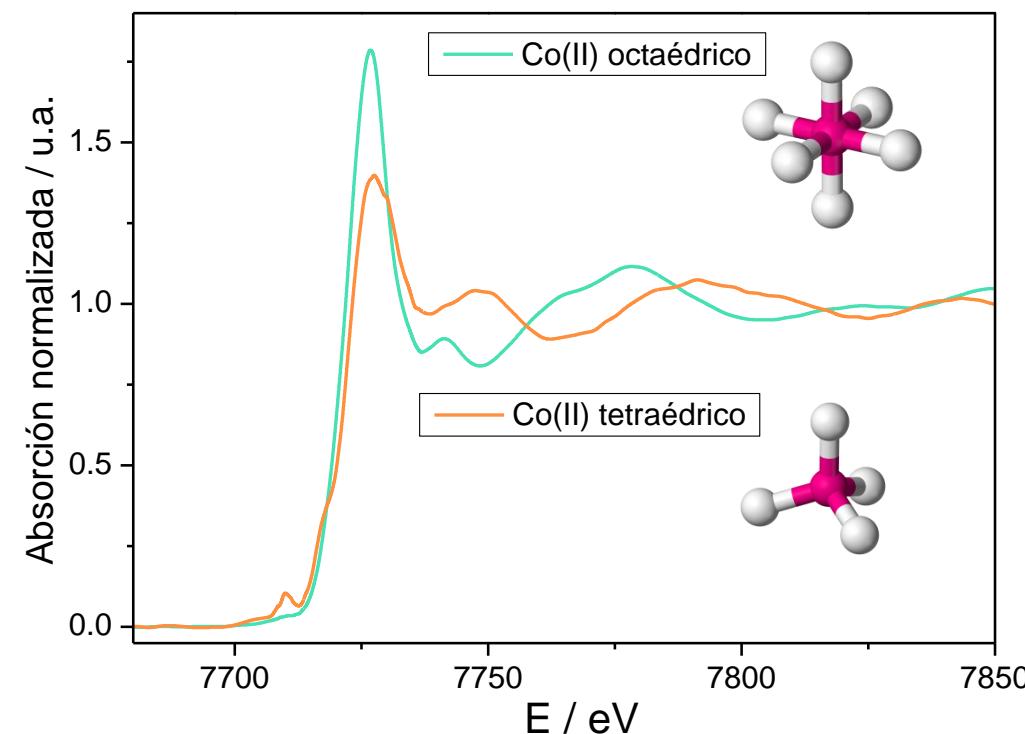
Mediante el mejor ajuste de una combinación lineal de espectros de referencia de las posibles fases presentes, se puede determinar la proporción de cada una de ellas en la muestra analizada.

CAPACIDADES

Geometría del entorno atómico (XANES)



Dos fases con el mismo estado de valencia del átomo absorbente pueden ser diferenciadas.

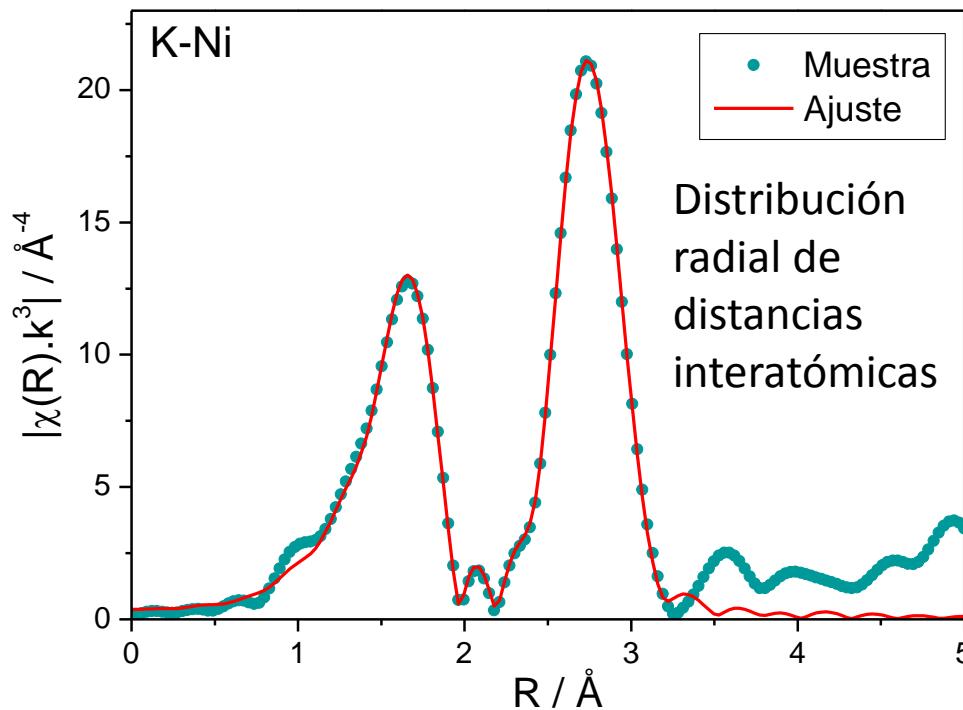


CAPACIDADES

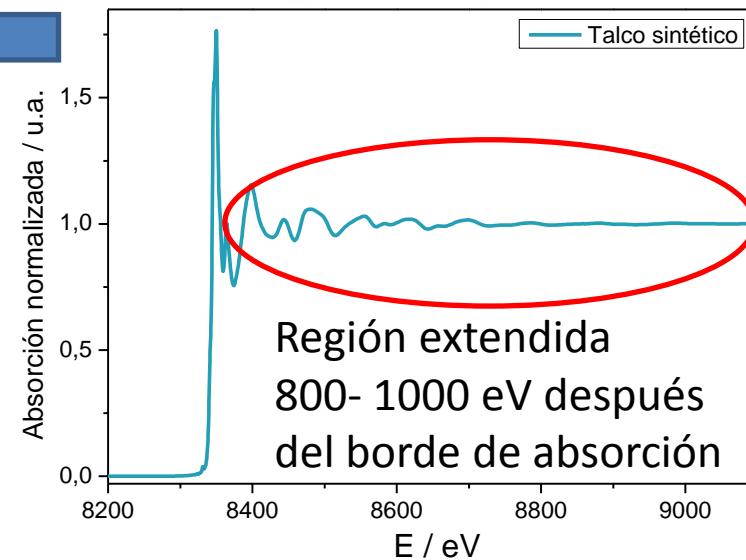
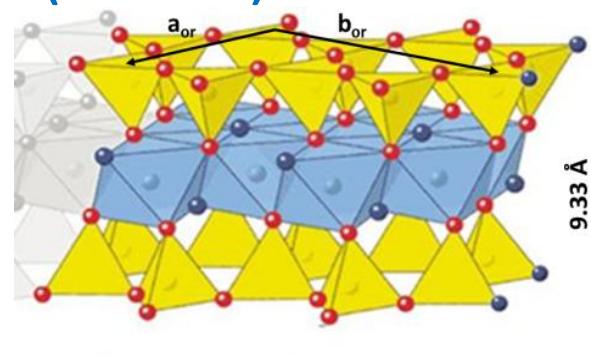
Parámetros estructurales (EXAFS)

Talco sintético: Estructuras laminares

Tetraedros de Si y octaedros de Ni:



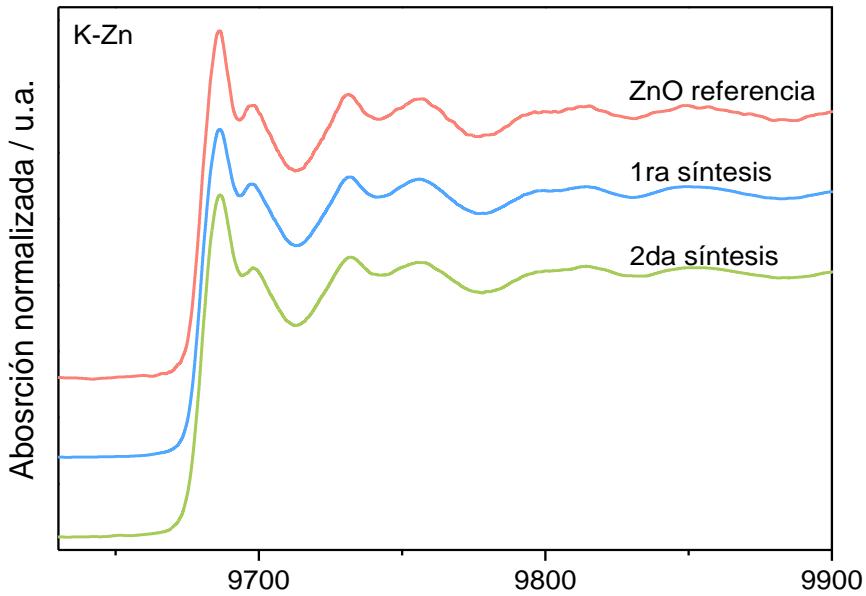
Transformada de Fourier



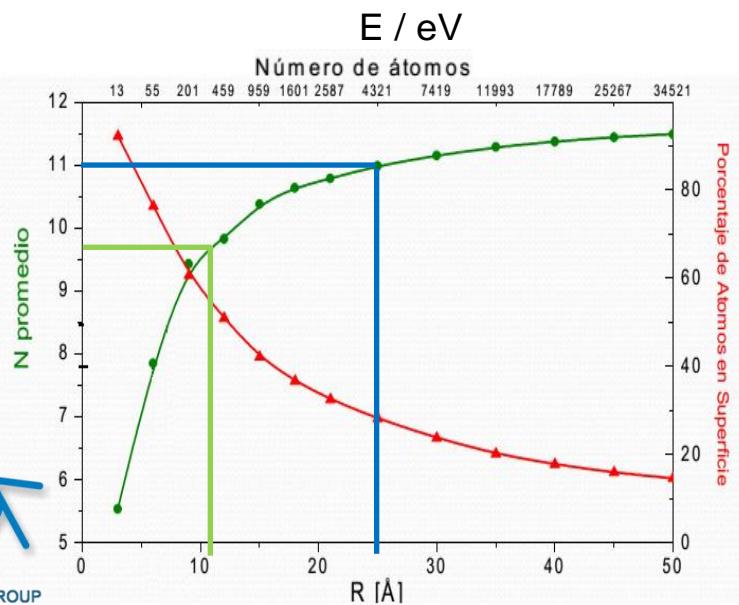
Ni-O			Ni-Ni			Ni-Si		
Nº C _{Ni-O}	R _{Ni-O} (Å)	σ ² _{Ni-O} (Å ²)	Nº C _{Ni-Ni}	R _{Ni-Ni} (Å)	σ ² _{Ni-Ni} (Å ²)	Nº C _{Ni-Si}	R _{Ni-Si} (Å)	σ ² _{Ni-Si} (Å ²)
6.5 (0.2)	2.056 (0.003)	0.0053 (0.0004)	6.0 (1.2)	3.05 (0.01)	0.005 (0.001)	3.4 (0.8)	3.27 (0.02)	0.004 (0.002)

CAPACIDADES

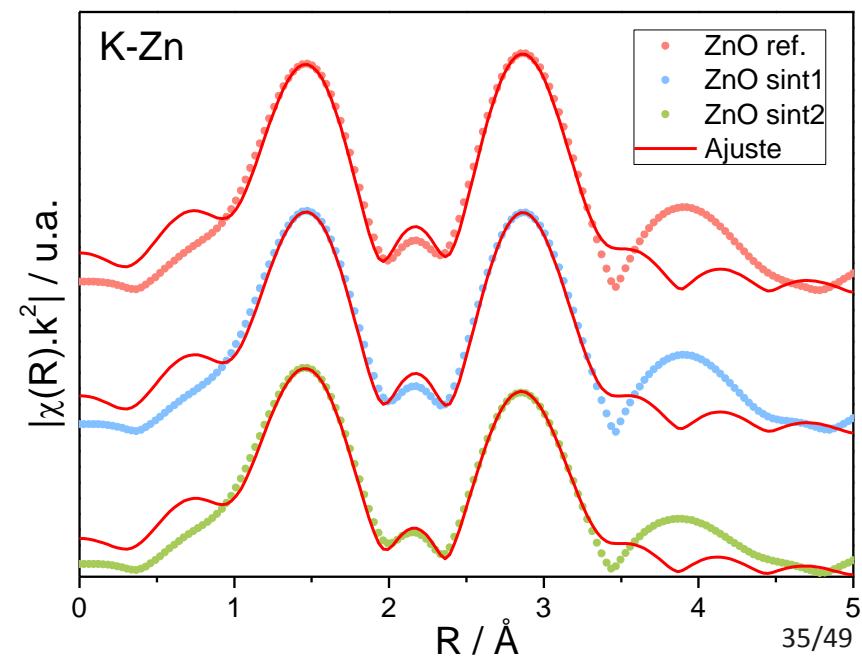
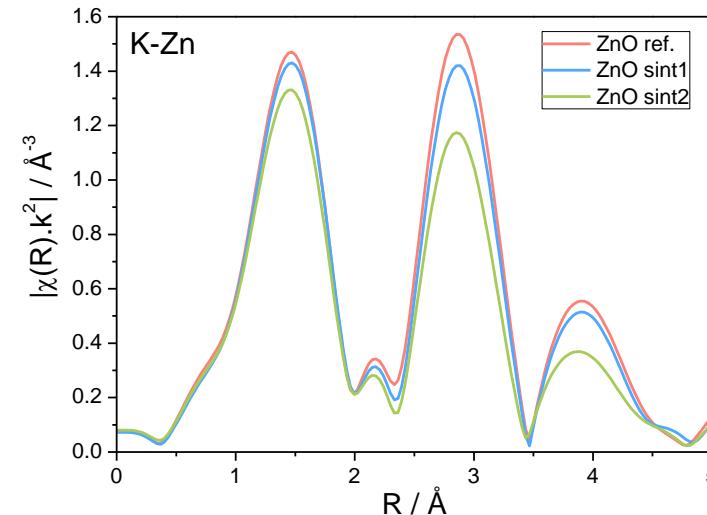
Nº de coordinación en nanomateriales (EXAFS)



Transformada
de Fourier

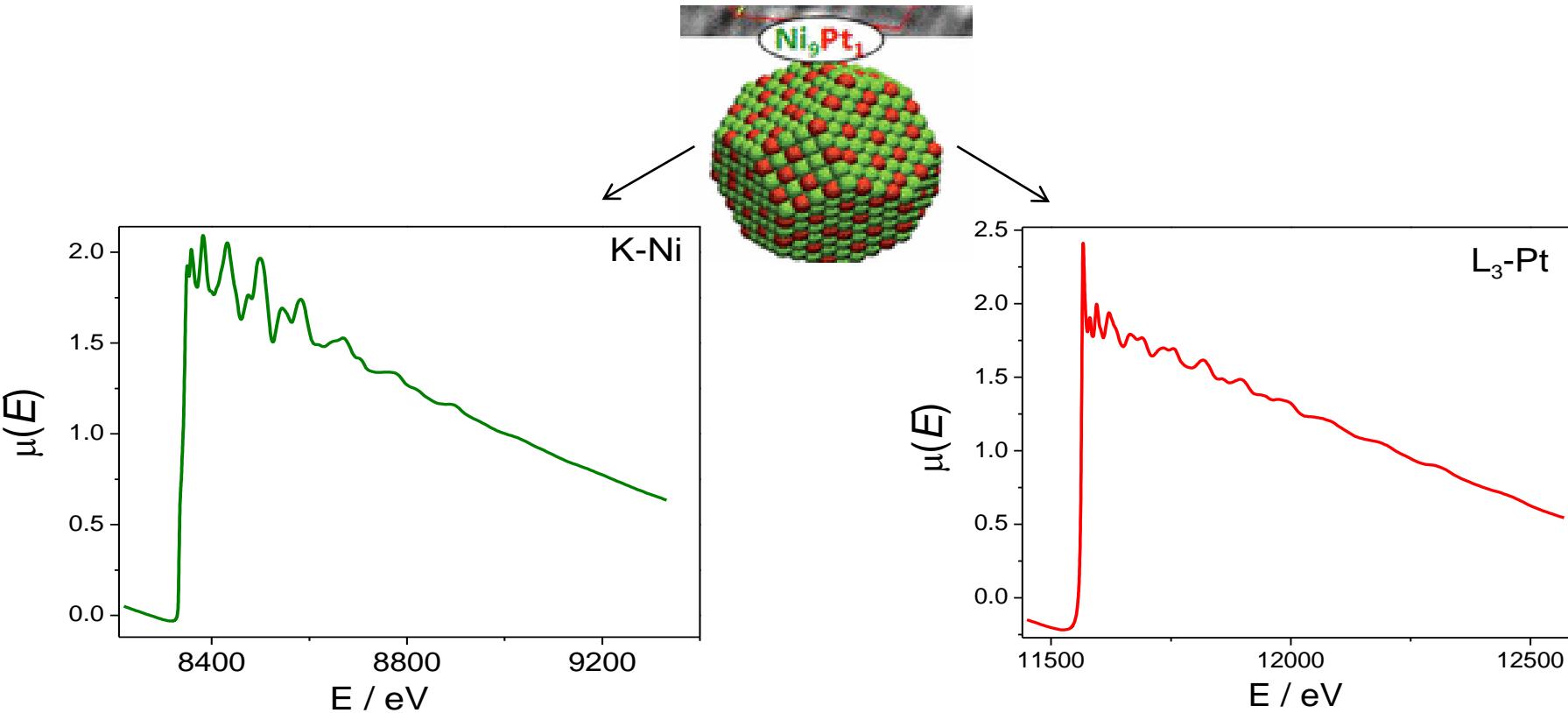


	N_{Zn-Zn}
Ref.	12
Sínt1	11
Sínt2	9,7



Beneficios de XANES y EXAFS

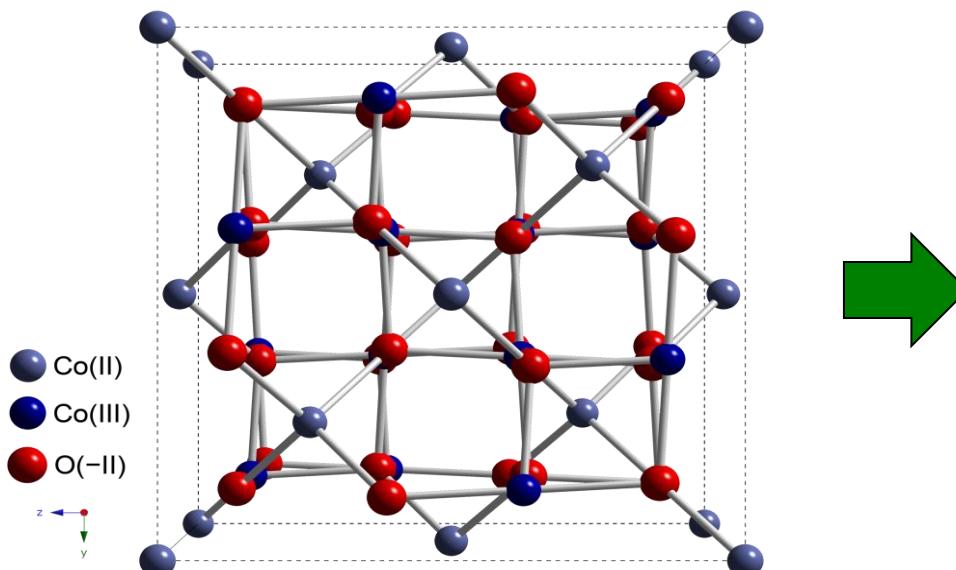
- Técnicas químicamente selectivas: puedo estudiar cada elemento por separado.



Beneficios de XANES y EXAFS

- Brinda información promedio con respecto a todos los átomos absorbentes.

XANES y EXAFS dan información que estará promediada entre todos los átomos absorbentes en el material, los cuales podrían no contribuir con la misma señal al total.



Se obtendrá un estado de valencia de los átomos de Co entre 2 y 3 pesado por la abundancia en cada sitio. Lo mismo ocurrirá con los números de coordinación, distancias interatómicas, etc.

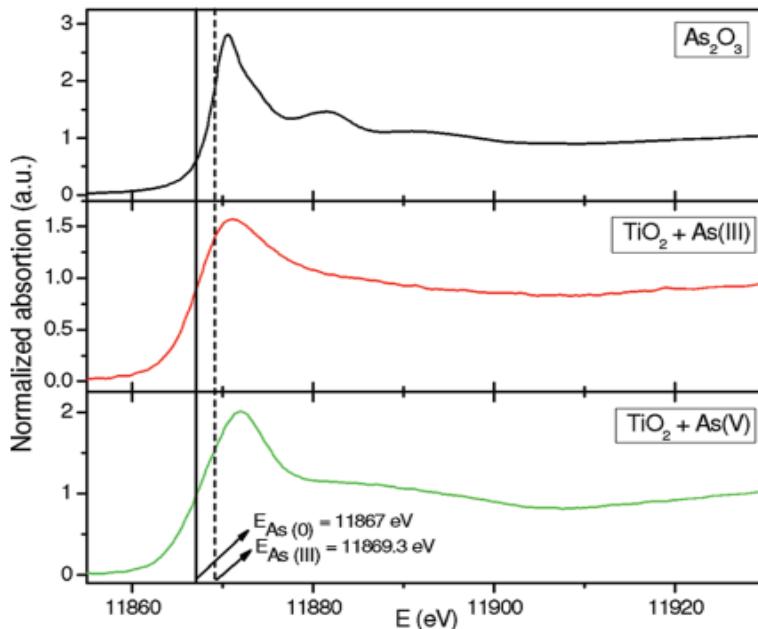
Beneficios de XANES y EXAFS

- Da información local del entorno del átomo absorbente.
- No se necesita orden de largo alcance. Se pueden estudiar muestras líquidas, geles y sólidos amorfos.
- Técnica no destructiva.
- Información que se puede obtener de cada elemento que se mida:
 - ✓ Estado de valencia.
 - ✓ Geometría del sitio.
 - ✓ Número de coordinación y elemento vecino.
 - ✓ Distancias interatómicas (con hasta centésimas de Å)
 - ✓ Grado del desorden en la estructura.

Ejemplos de XANES y EXAFS

TiO₂-Photocatalytic Reduction of Pentavalent and Trivalent Arsenic: Production of Elemental Arsenic and Arsine

Ivana K. Levy,^{†,‡,§} Martín Mizrahi,^{||} Gustavo Ruano,[⊥] Guillermo Zampieri,^{⊥,‡,§} Félix G. Requejo,^{||,‡} and Marta I. Litter*,^{†,‡,§,▽}

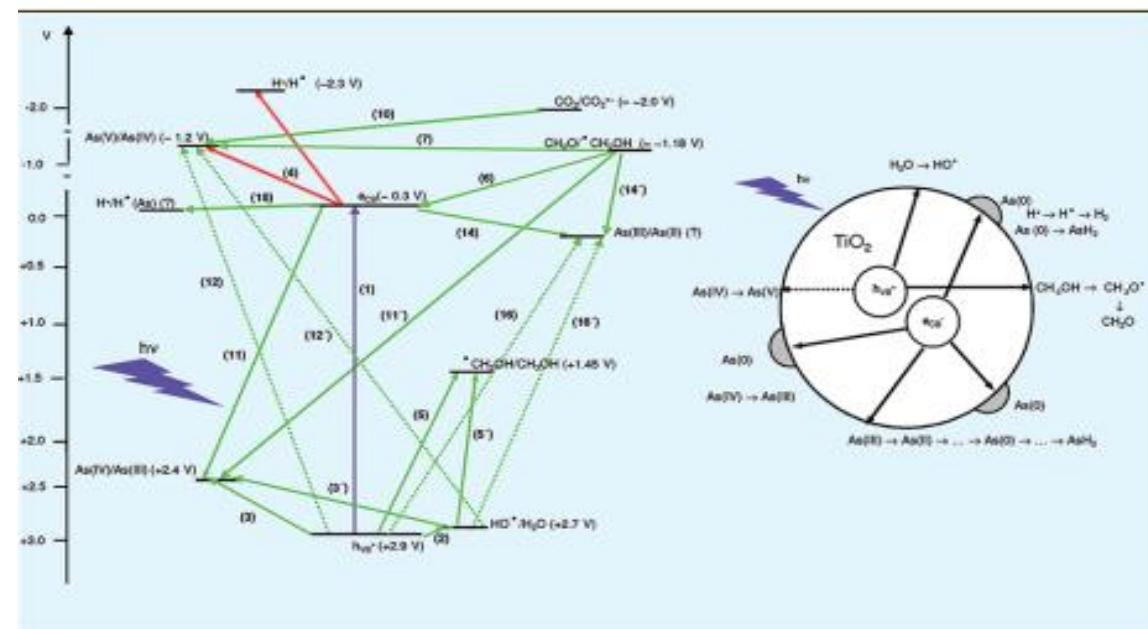


Cite this: *Environ. Sci. Technol.* 2012, 46, 4, 2299-2308

Publication Date: January 5, 2012

<https://doi.org/10.1021/es202638c>

Copyright © 2012 © 2012 American Chemical Society



Ejemplos de XANES y EXAFS

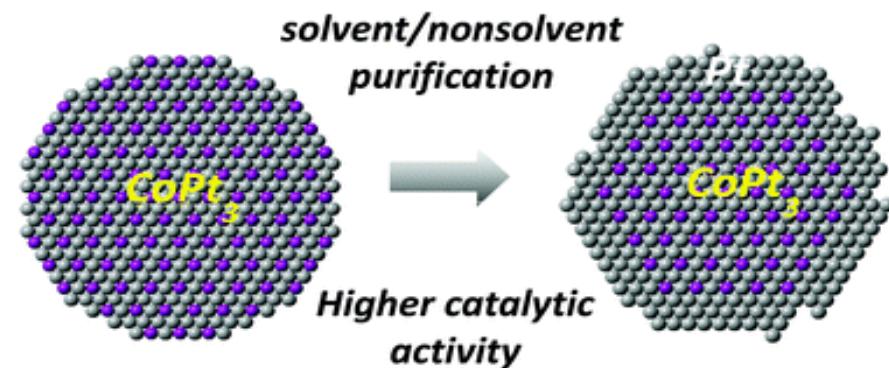
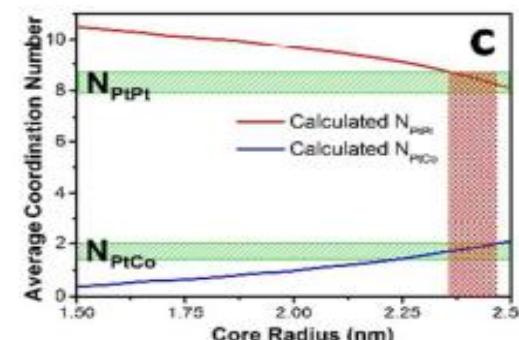
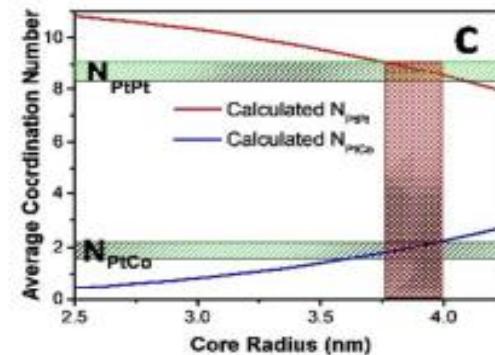
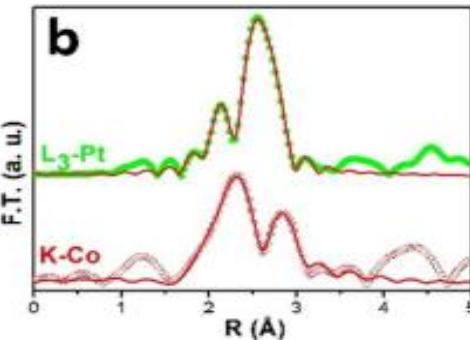
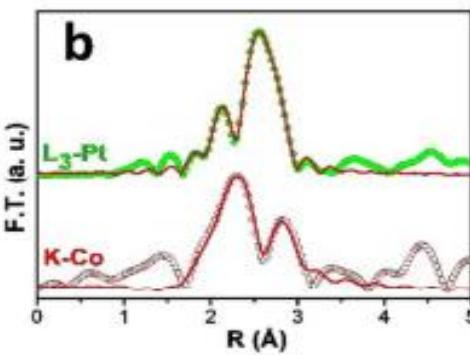
Unexpected Compositional and Structural Modification of CoPt₃ Nanoparticles by Extensive Surface Purification

Martín D. Mizrahi,^a Galyna Krylova,^b Lisandro J. Giovanetti,^a José M. Ramallo-López,^a Yuzi Liu,^b Elena V. Shevchenko,^{b,*} and Félix G. Requejo^{a,*}

Nanoscale
Accepted Manuscript



This article can be cited: Nanoscale, 2018, DOI: 10.1039/C8NR00060C



Ejemplos de XANES y EXAFS

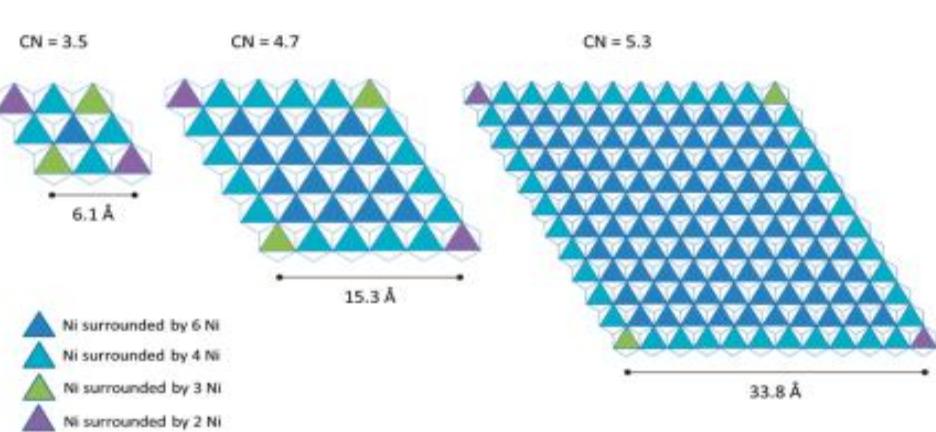
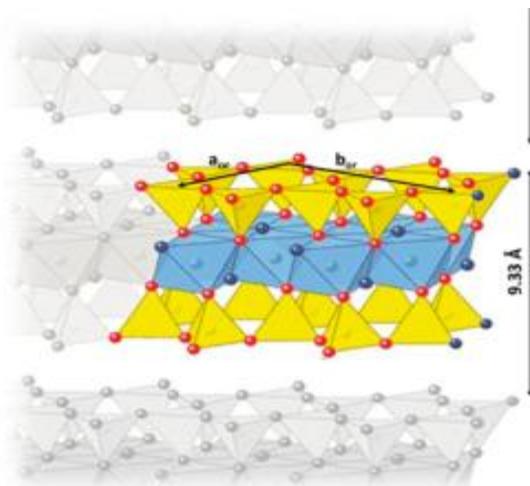
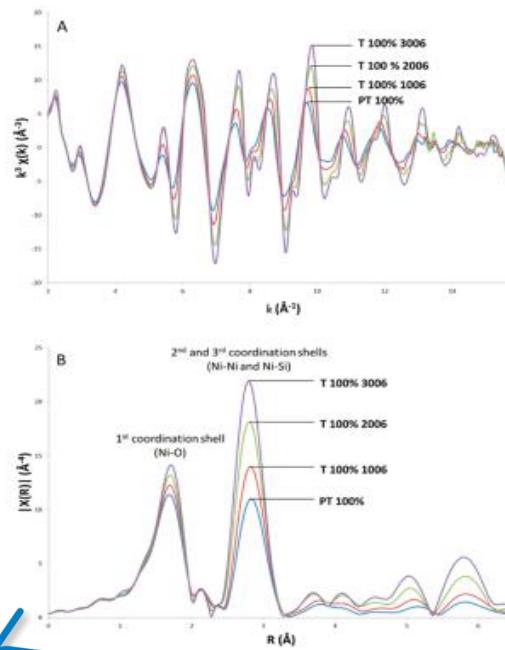
CRYSTAL
GROWTH
& DESIGN

Article

pubs.acs.org/crystal

Local and Extended-Order Evolution of Synthetic Talc during Hydrothermal Synthesis: Extended X-ray Absorption Fine Structure, X-ray Diffraction, and Fourier Transform Infrared Spectroscopy Studies

Angela Dumas,^{*,†,‡} Martín Mizrahi,[†] François Martin,[‡] and Felix G. Requejo[†]



Cite this: *Cryst. Growth Des.* 2015, 15, 11, 5451-5463

Publication Date: October 5, 2015

Copyright © 2015 © 2015 American Chemical Society

Ejemplos de XANES y EXAFS

Bioelectrochemistry 121 (2018) 169–175

Contents lists available at ScienceDirect

Bioelectrochemistry



journal homepage: www.elsevier.com/locate/bioelechem



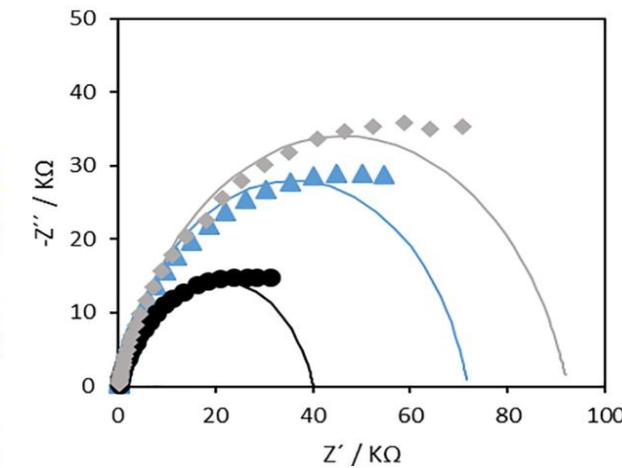
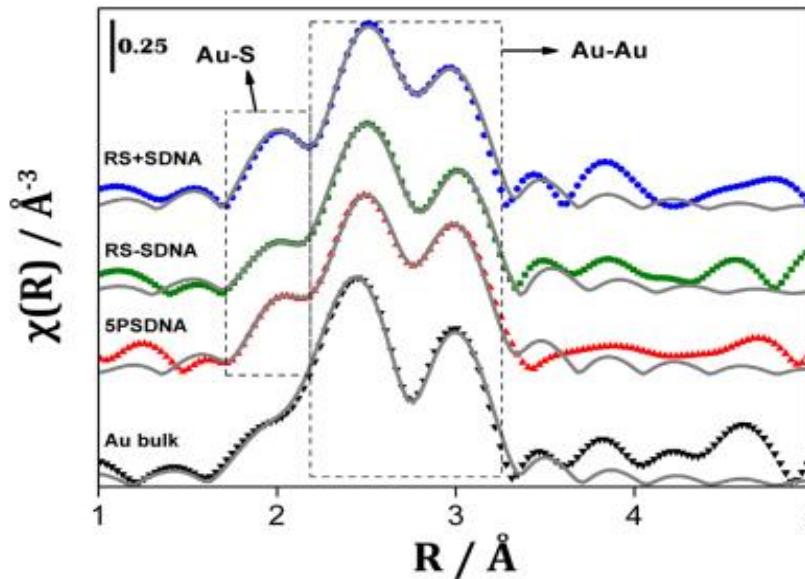
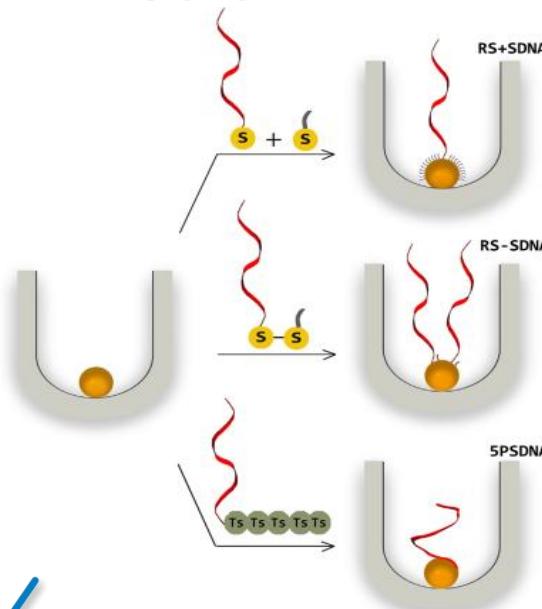
[Bioelectrochemistry, 121, \(2018\)](#)

DOI:<https://doi.org/10.1016/j.bioelech.2018.02.002>

Characterization and electrochemical response of DNA functionalized 2 nm gold nanoparticles confined in a nanochannel array



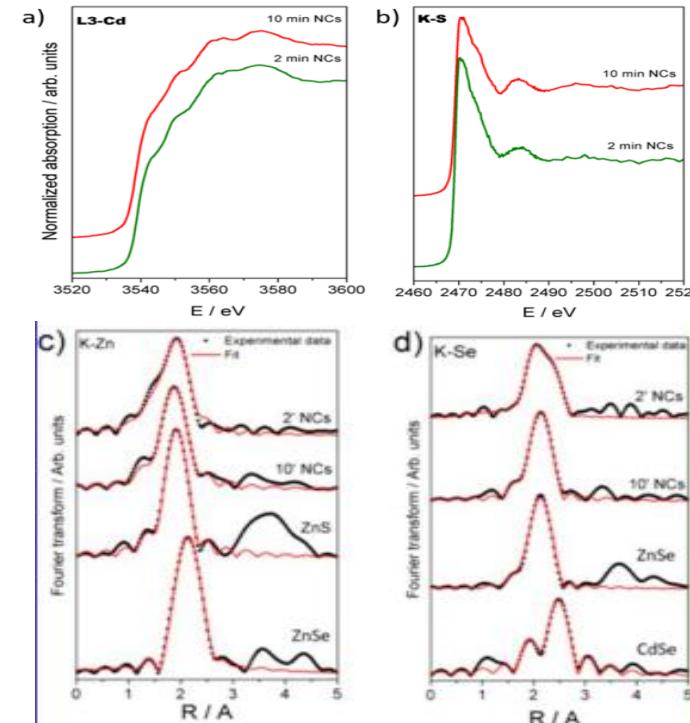
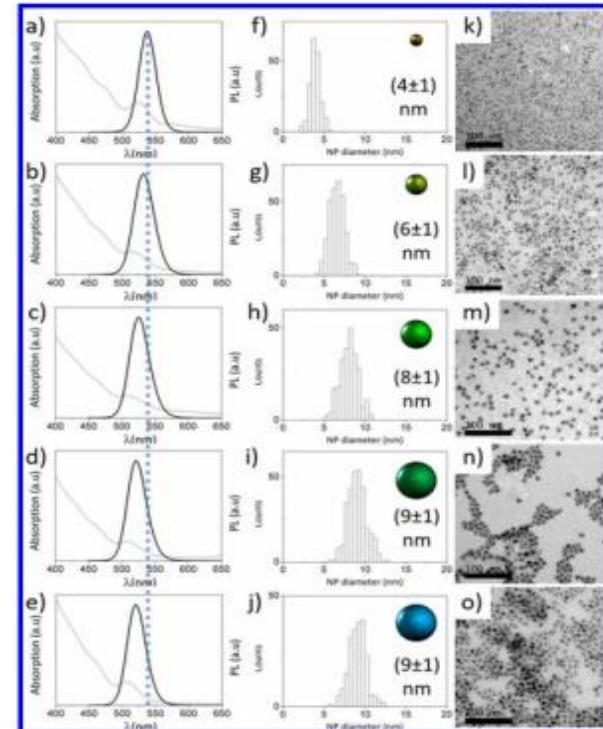
Ana S. Peinetti ^a, Helena Ceretti ^b, Martín Mizrahi ^c, Graciela A. González ^a, Silvana A. Ramírez ^b, Félix G. Requejo ^c, Javier M. Montserrat ^b, Fernando Battaglini ^{a,*}



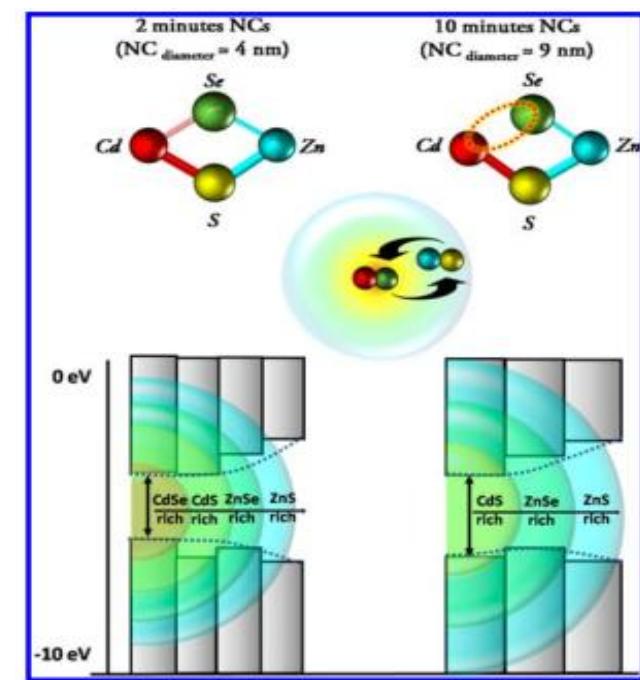
Ejemplos de XANES y EXAFS

Unexpected Optical Blue Shift in Large Colloidal Quantum Dots by Anionic Migration and Exchange

María Acebrón,[†] Juan F. Galisteo-López,[‡] Cefe López,[§] Facundo C. Herrera,^{||} Martín Mizrahi,^{||} Félix G. Requejo,^{||} F. Javier Palomares,[§] and Beatriz H. Juárez*,^{*,†,⊥}



Cite this: *J. Phys. Chem. Lett.* 2018, 9, 11, 3124-3130
Publication Date: May 21, 2018
Copyright © 2018 American Chemical Society



Ejemplos de XANES y EXAFS

Nanoscale

PAPER



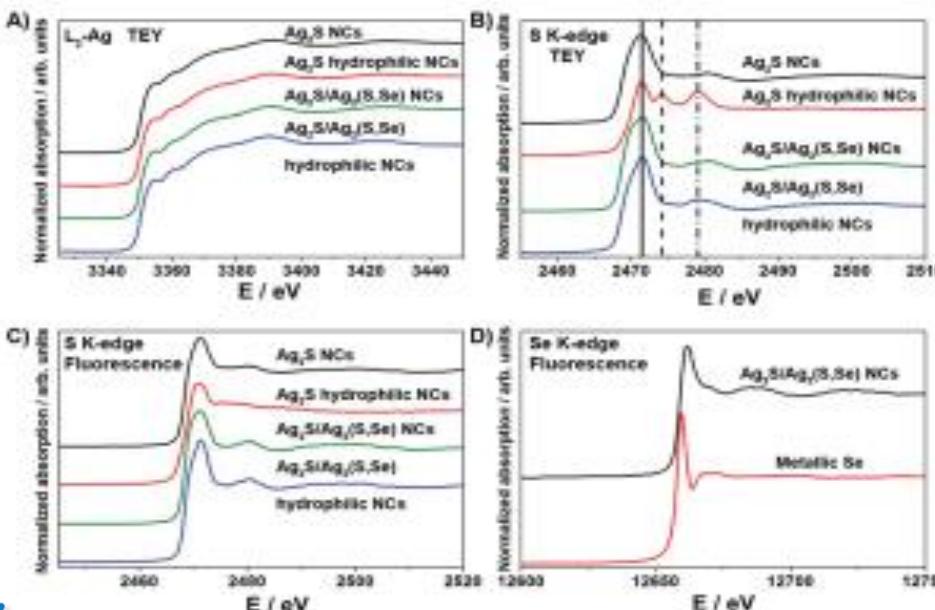
[View Article Online](#)
[View Journal](#)

Check for updates

Cite this: DOI: 10.1039/c9nr02087j

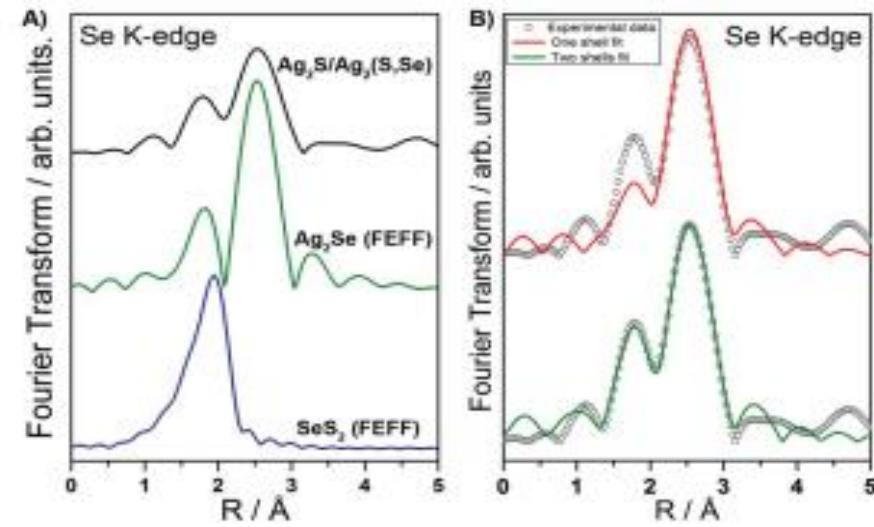
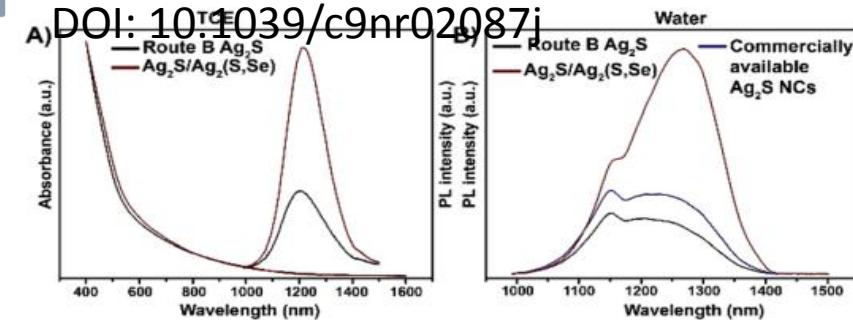
Synthesis and characterization of Ag_2S and $\text{Ag}_2\text{S}/\text{Ag}_2(\text{S},\text{Se})$ NIR nanocrystals†

Diego Ruiz,^{ID,a} Martín Mizrahi,^b Harrisson D. A. Santos,^{c,d} Daniel Jaque,^{ID,c} Callum M. S. Jones,^{ID,e} José Marqués-Hueso,^{ID,e} Carlos Jacinto,^{ID,d} Félix G. Requejo,^b Almudena Torres-Pardo,^f José M. González-Calbet^{f,g} and Beatriz H. Juárez^{ID,**a,h}



Cite this: *Nanoscale*, 2019, 11, 9194-9200

DOI: 10.1039/c9nr02087j



Ejemplos de XANES y EXAFS

Journal of Colloid and Interface Science 516 (2018) 371–378

Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Colloid and Interface Science

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jcis

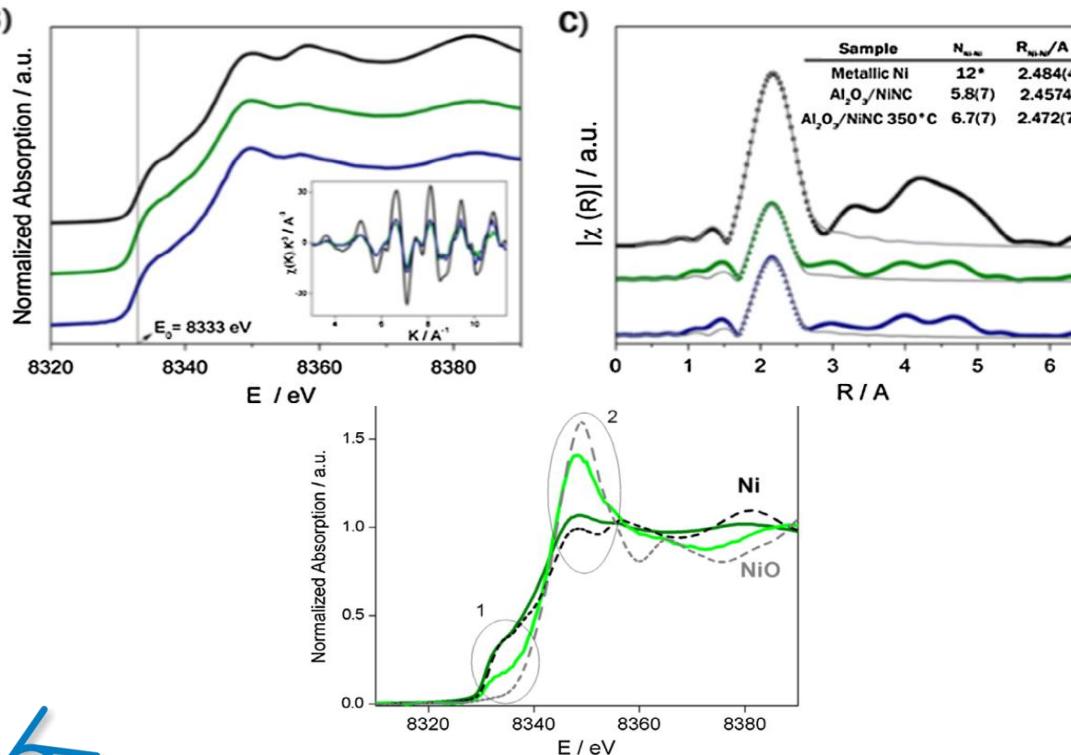


Regular Article

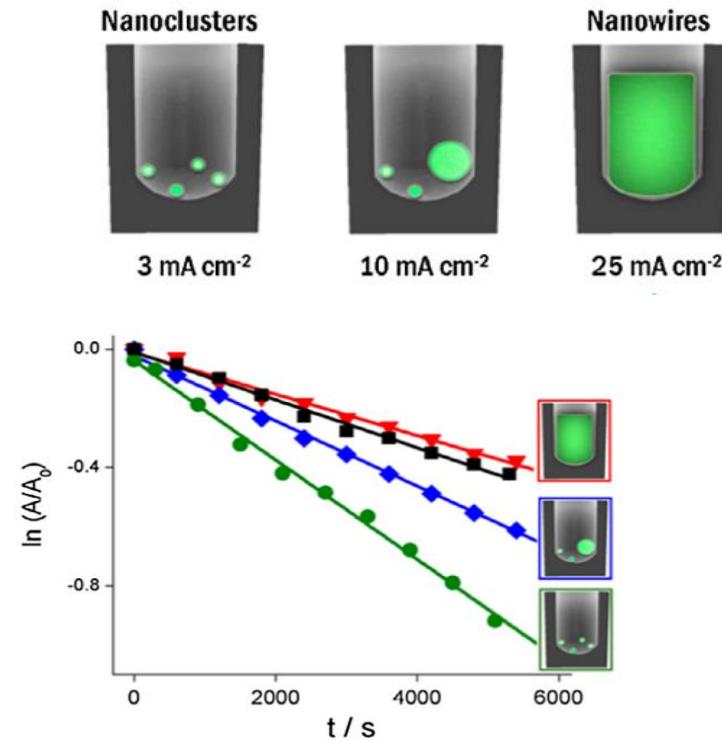
Synthesis of nickel entities: From highly stable zerovalent nanoclusters to nanowires. Growth control and catalytic behavior



Ana S. Peinetti ^a, Martín Mizrahi ^b, Félix G. Requejo ^b, David Buceta ^c, M. Arturo López-Quintela ^c.



Journal of Colloid and Interface Science 516, (2018)
DOI: [10.1016/j.jcis.2018.01.083](https://doi.org/10.1016/j.jcis.2018.01.083)

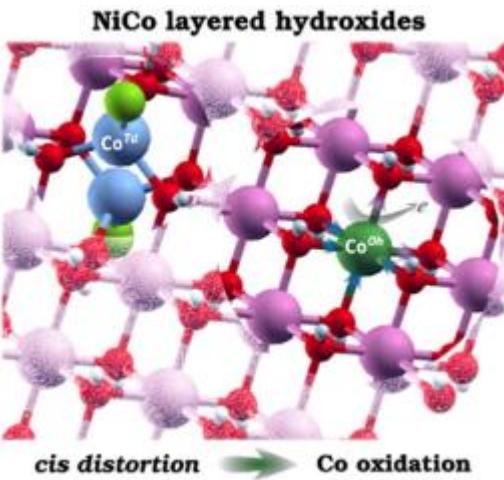


Ejemplos de XANES y EXAFS

Chemistry
A European
Journal



European Chemical
Societies Publishing

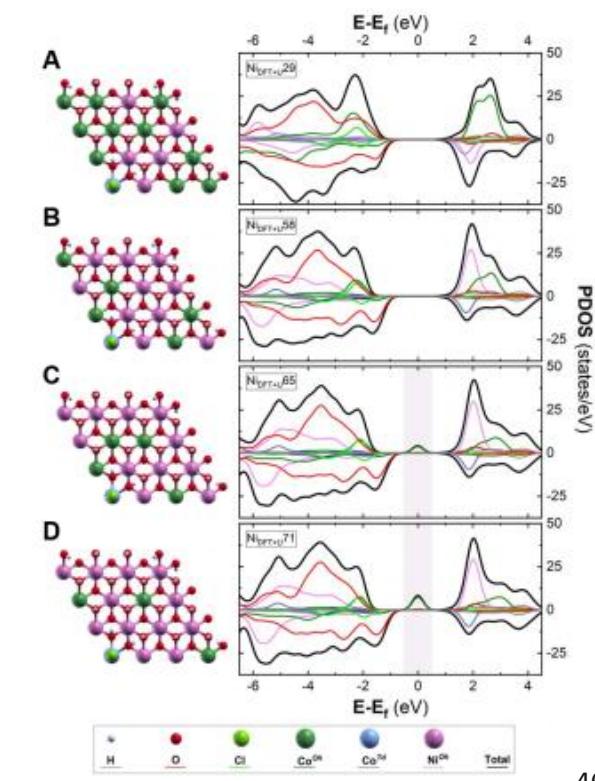
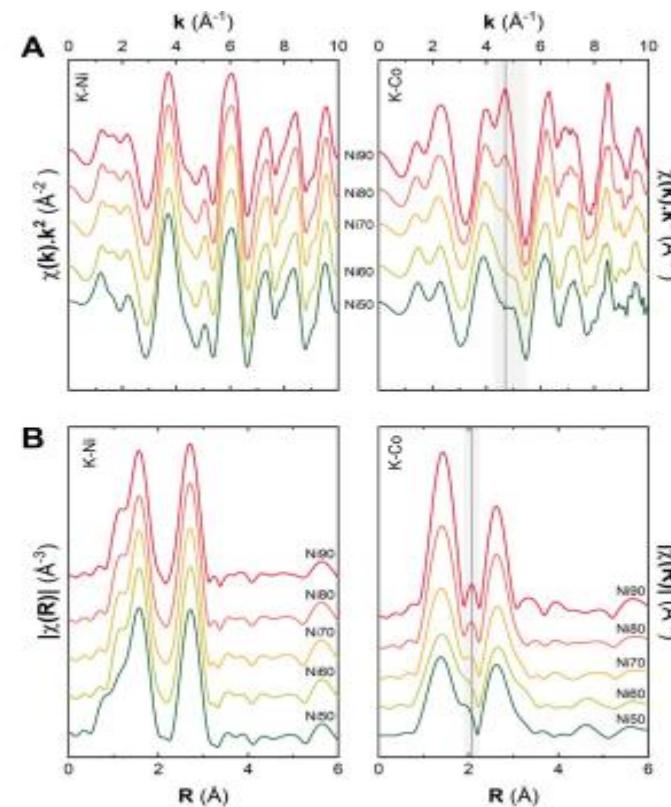


SUNSET GROUP

Unveiling the occurrence of Co(III) in NiCo layered electroactive hydroxides: the role of distorted environments

Diego Hunt,^{*1#} Victor Oestreicher,^{*2#‡} Martin Mizrahi,^{3,4} Felix G. Requejo,³ and Matías Jobbágy^{*2}

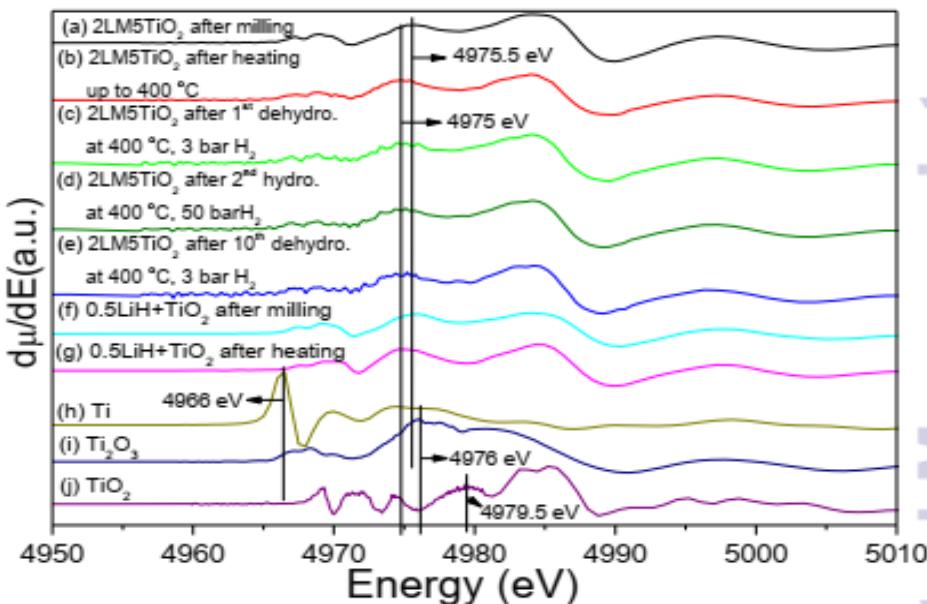
To be cited as: *Chem. Eur. J.* 10.1002/chem.202001944



Ejemplos de XANES y EXAFS

Novel catalytic route for hydrogenation-dehydrogenation of 2LiH+MgB₂ via *in-situ* formed core-shell Li_xTiO₂ nanoparticles†

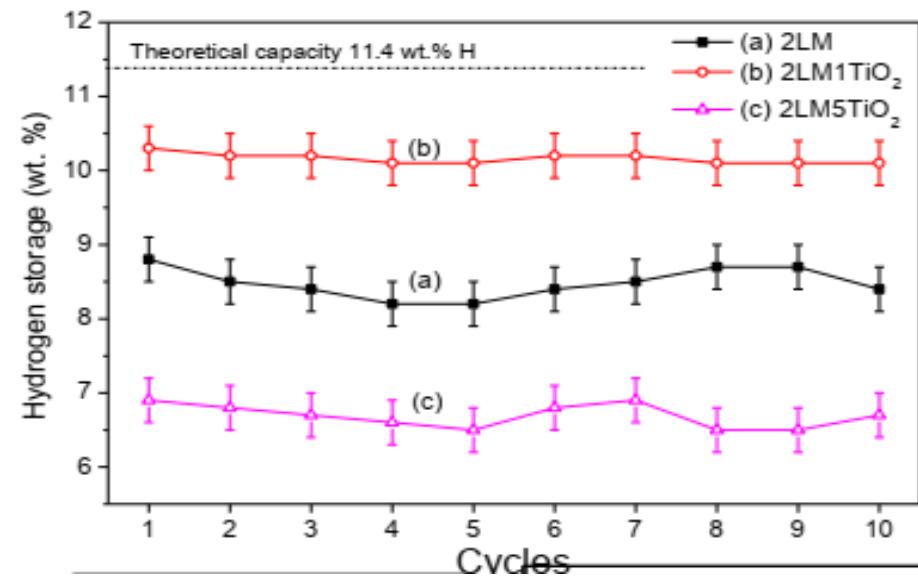
J.A. Puszkiel,^{*a,d} M.V. Castro Riglos,^b J.M. Ramallo-López,^c M. Mizrahi,^c F. Karimi,^d A. Santoru,^d A. Hoell,^e F.C. Gennari,^a P. Arneodo Laroche, ^a C. Pistidda,^{d,f} T. Klassen,^{d,f} J.M. Bellosta von Colbe^d and M. Dornheim^d



Journal of
Materials Chemistry A



This article can be cited *J. Mater. Chem. A*, 2017,
DOI: 10.1039/C7TA03117C.



Bibliografía

- www.xafs.org
- <http://cars.uchicago.edu/xafs/>
- **Books and Review Articles:**

*X-ray Absorption: Principles, Applications, Techniques of EXAFS, SEX-
AFS, and XANES*, in *Chemical Analysis* 92, D. C. Koningsberger and
R. Prins, ed., John Wiley & Sons, 1988.

Basic Principles and Applications of EXAFS, Chapter 10 in *Handbook
of Synchrotron Radiation*, pp 995–1014. E. A. Stern and S. M. Heald,
E. E. Koch, ed., North-Holland, 1983
- **Tutorials and other Training Material:**

<http://gbxafs.iit.edu/training/tutorials.html> Grant Bunker's tutorials

<http://srs.dl.ac.uk/XRS/courses/> Tutorial from Daresbury Lab, UK

<http://leonardo.phys.washington.edu/~ravel/course/> Bruce Ravel's
Course on Advanced EXAFS Analysis.
- **Software Resources:**

<http://www.esrf.fr/computing/scientific/exafs/>

http://cars9.uchicago.edu/IXS-cgi/XAFS_Programs

<http://leonardo.phys.washington.edu/feff>

¡Muchas gracias!