



XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

Evento	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2023
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Análise de dados de EXAFS por Monte Carlo Reverso
Autor	VINICIUS BAYNE MULLER
Orientador	GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO

As grandes infraestruturas de pesquisa, como o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, estão por trás de enormes avanços tecnológicos e científicos nas mais diversas áreas, em especial na Física de Materiais. Se, por um lado, esses avanços possibilitam resolução e precisão experimentais cada vez maiores, por outro, a enorme quantidade de dados disponíveis impõe a necessidade de ferramentas mais eficientes para a sua análise. É nesse contexto que o presente trabalho se insere, buscando analisar dados de Estrutura Fina de Absorção de Raios-X Estendida (EXAFS) por meio de simulações de Monte Carlo Reverso (RMC). Com o objetivo de estudar a estrutura e a desordem dos materiais, buscou-se analisar dados de EXAFS de amostras do tipo $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ a diferentes temperaturas. Essas ligas foram escolhidas porque, além de um interesse natural por serem semicondutores, a sua estrutura permite o surgimento de desordem tanto química quanto estrutural. Ao invés de aderir ao método tradicional de análise de EXAFS, que consiste em um ajuste dos dados, utilizou-se o *software* EvAX, capaz de simular por RMC a estrutura do material a partir dos dados experimentais. Como auxílio para a simulação de RMC, utilizou-se também o programa LAMMPS, que realiza simulações de Dinâmica Molecular (MD). Após a simulação de RMC, obtém-se uma estrutura condizente com os dados experimentais; conhecendo-se a estrutura, pode-se calcular diretamente quaisquer quantidades de interesse, como a desordem térmica, química ou estrutural das amostras. Em amostras de Ge puro, observou-se que a simulação converge mais rapidamente quando os dados de entrada são previamente relaxados por MD. Também foi observado o efeito da desordem térmica a partir da diminuição da intensidade do sinal de EXAFS para camadas de coordenação mais altas.