Título:

Cálculo de las Constantes Ópticas del Cobre Basada en el Paquete FEFF 9: Una Actualización de Resultados Previos

Link de la memoria:

https://drive.google.com/file/d/1qpYjZOM1t15mqgtzhLedRx02jfZByif5/view

Memoria página 200 del documento 225 del PDF

Cálculo de las Constantes Ópticas del Cobre Basada en el Paquete FEFF 9: Una Actualización de Resultados Previos *Abdiel Ramirez Reyes (abdiel.ramirez@uacj.mx), Universidad Autónoma de Ciudad Juárez;*
Hector Alejandro Trejo Mandujano (htrejo@uacj.mx), Universidad Autónoma de Ciudad Juárez;
**Gildardo Rivas Valles (grivas@uacj.mx), Universidad Autónoma de Ciudad Juárez; *Expositor.*

El paquete de software FEFF se basa en una teoría de primeros principios de la teoría de la dispersión utilizando la de Green en el espacio real (RSGF por sus siglas en inglés) para calcular la estructura fina en la absorción de rayos X (XAFS), y la amplitud de dispersión frontal (FSA). Se describe un procedimiento para estimar estas cantidades para un material cristalino por medio de la versión 9 del paquete FEFF, aplicado al cobre cristalino metálico como ejemplo. A partir de éstas se obtiene una constante dieléctrica compleja, a partir de la cual se derivan otras constantes ópticas. Se comparan los resultados con valores tomados de la literatura. Se encuentra que estos concuerdan en la región de los rayos X, pero para fotones correspondientes al rango ultravioleta (debajo de los 120 eV) el acuerdo es sólo cualitativo.