

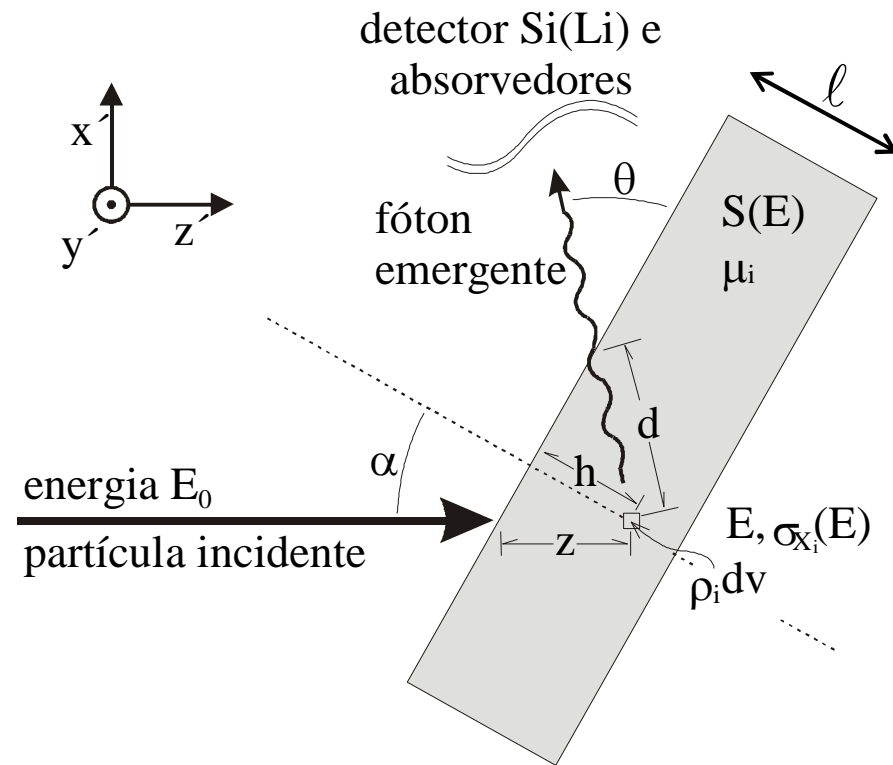
Universidade de São Paulo

Instituto de Física

PGF5207 - Técnicas de Raios-X e de feixe iônico aplicados à
análise de materiais

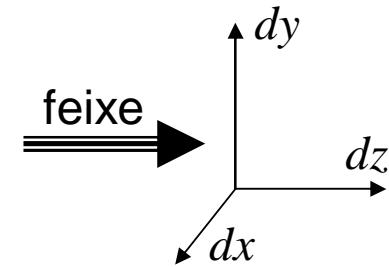
Manfredo H. Tabacniks
FI3

Produção de Raios-X de um elemento de volume



$$dN_X = \frac{\Omega}{4\pi} \varepsilon \sigma_X(E) n(x, y) \rho_n T(z) dx dy dz$$

Produção de Raios-X de um elemento de volume



$$dN_{Xi} = n(x, y) \rho_i \sigma_{Xi}(E) T(z) dx dy dz$$

$$N_{Xi} = \frac{Q}{q \cdot e \cdot \cos \alpha} \frac{\rho_i}{\rho} \frac{N_0}{A_i} \int_{E_0}^E \frac{\sigma_{Xi}(E') \cdot e^{-\frac{\mu_i \cos \alpha}{\rho \sin \theta} \int_{E_0}^{E'} \frac{dE''}{S(E'')}}}{S(E')} dE'$$

$$dz = \frac{1}{\rho S} dE$$

i refere elemento químico, ou linha de raio-x do elemento;

ρ_i densidade massa [g/cm³] do elemento i ;

ρ densidade de massa do material todo ($\rho = \rho_i$ se monoelementar)

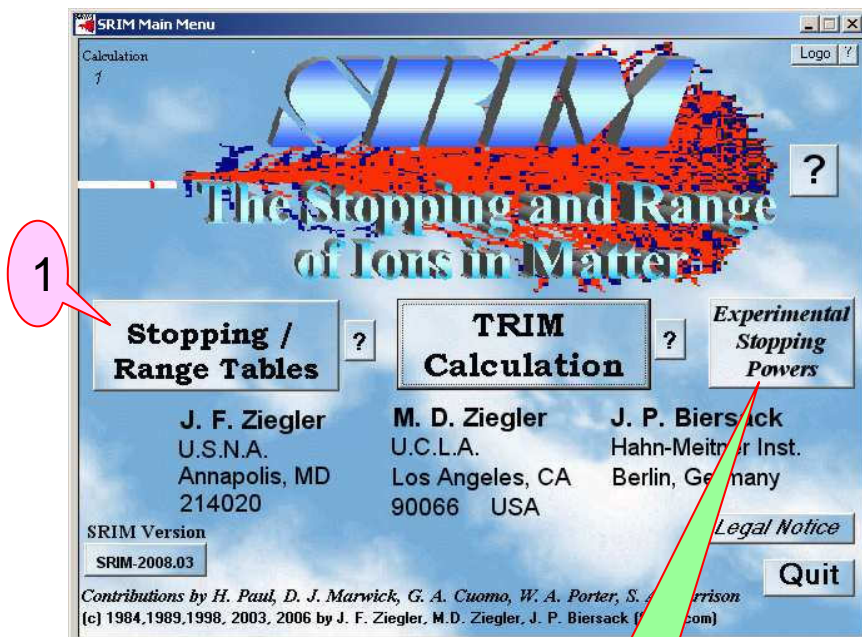
$$\sigma_X = \sigma_I \cdot \omega \cdot k$$

$$N'_{Xi} = \frac{\Omega}{4\pi} \varepsilon_i \frac{Q}{q \cdot e \cdot \cos \alpha} \frac{\rho_i}{\rho} \frac{N_0}{A_i} \int_{E_0}^E \frac{\sigma_{Xi}(E') \cdot e^{-\frac{\mu_i \cos \alpha}{\rho \sin \theta} \int_{E_0}^{E'} \frac{dE''}{S(E'')}}}{S(E')} dE'$$

Inclui efeitos de eficiência e ângulo sólido de detecção

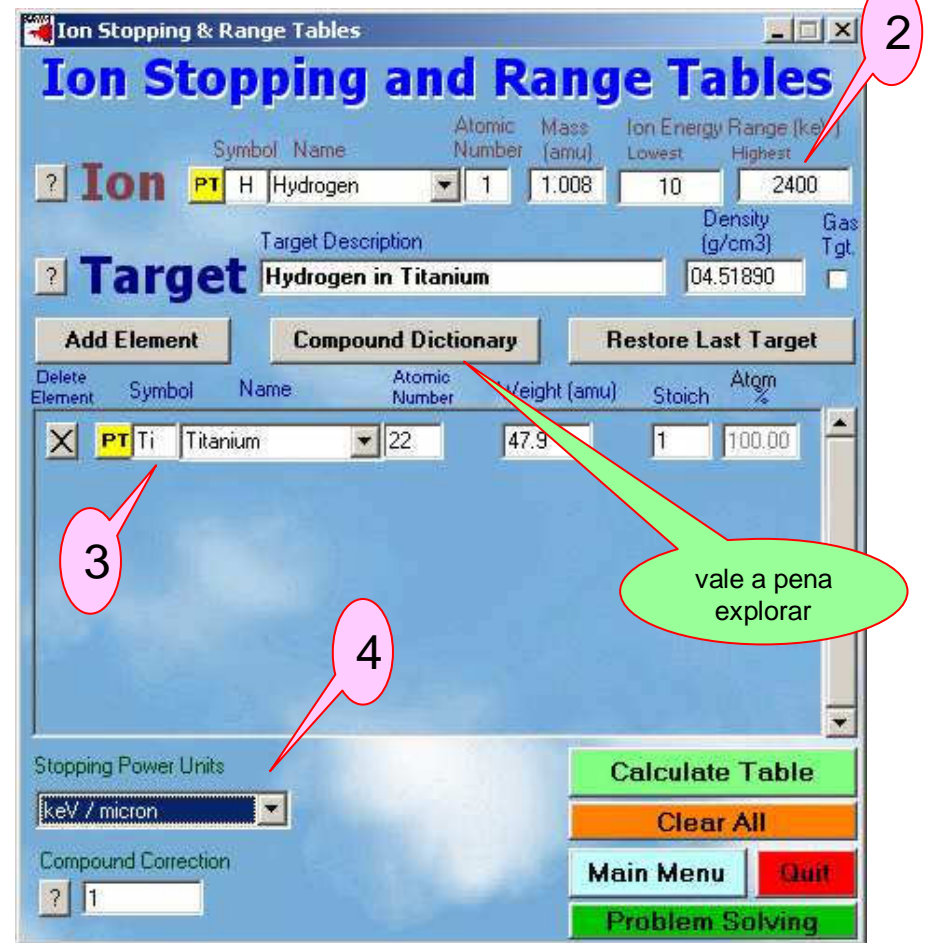
Gráfico do número (dN/dz) de fótons K gerados por um feixe de prótons com energia inicial de 2,4 MeV em função da profundidade em titânio.

1. Como varia a energia do feixe em função da profundidade?



www.srim.org

vale a pena explorar



```

=====
Calculation using SRIM-2006
SRIM version ---> SRIM-2008.03
Calc. date ---> agosto 24, 2008
=====

```

Disk File Name = SRIM Outputs\Hydrogen in Titanium

Ion = Hydrogen [1] , Mass = 1.008 amu

Target Density = 4.5189E+00 g/cm3 = 5.6812E+22 atoms/cm3

=====
Target Composition
=====

Atom Name	Atom Numb	Atomic Percent	Mass Percent
Ti	22	100.00	100.00

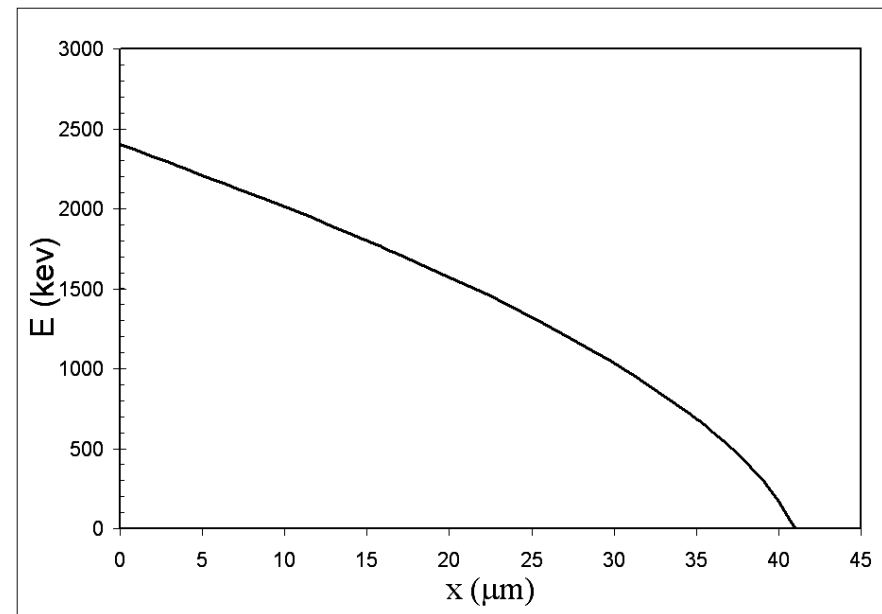
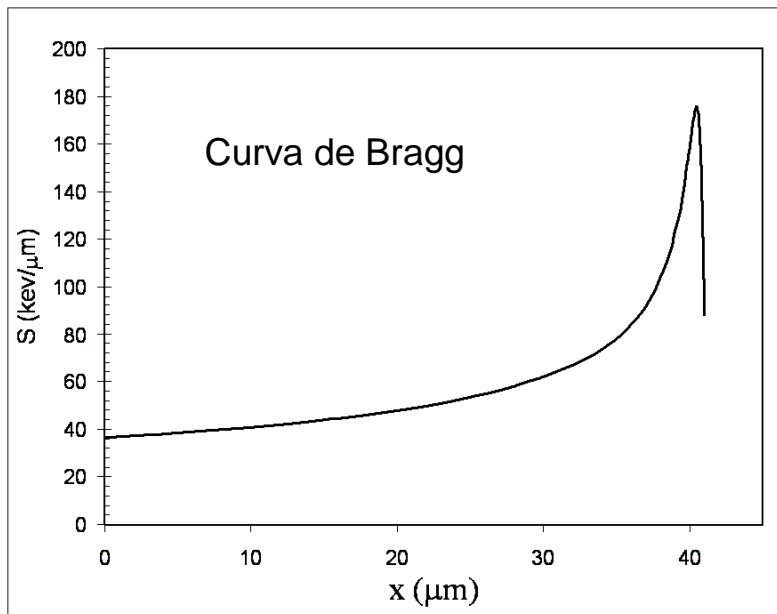
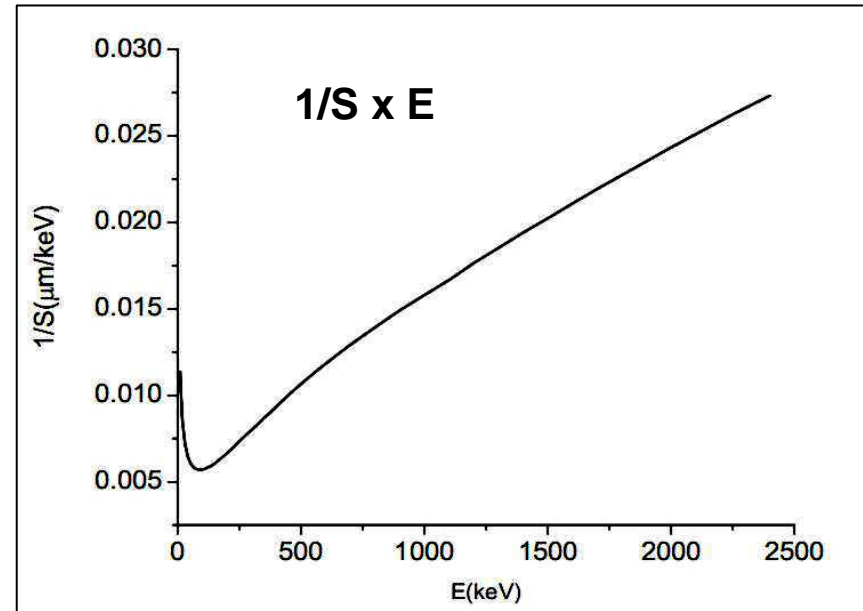
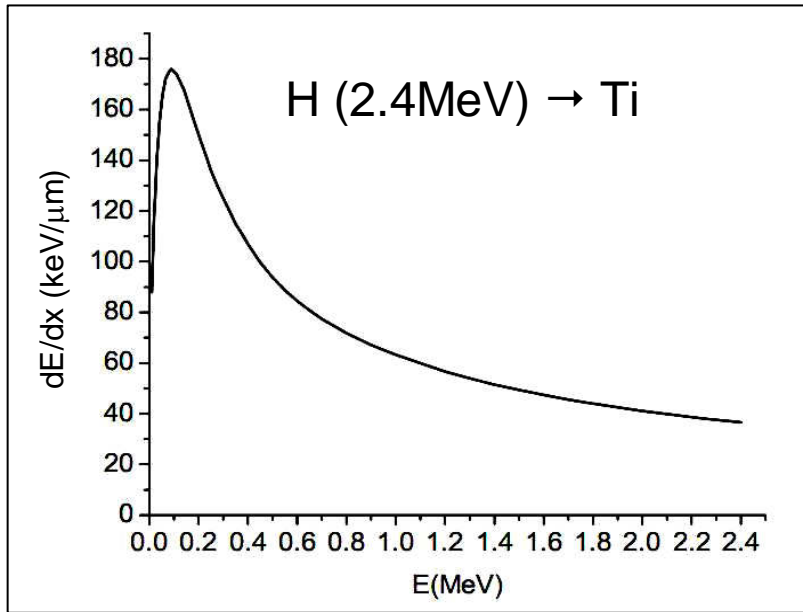
=====
Bragg Correction = 0.00%
Stopping Units = keV / micron

Ion Energy	dE/dx Elec.	dE/dx Nuclear	Projected Range	Longitudinal Stragglng	Lateral Stragglng
10.00 keV	8.673E+01	1.283E+00	935 A	489 A	429 A
11.00 keV	9.067E+01	1.222E+00	1016 A	509 A	451 A
2.00 MeV	4.112E+01	2.619E-02	30.35 um	1.43 um	2.10 um
2.25 MeV	3.810E+01	2.368E-02	36.60 um	1.78 um	2.49 um
2.40 MeV	3.658E+01	2.241E-02	40.58 um	1.92 um	2.74 um

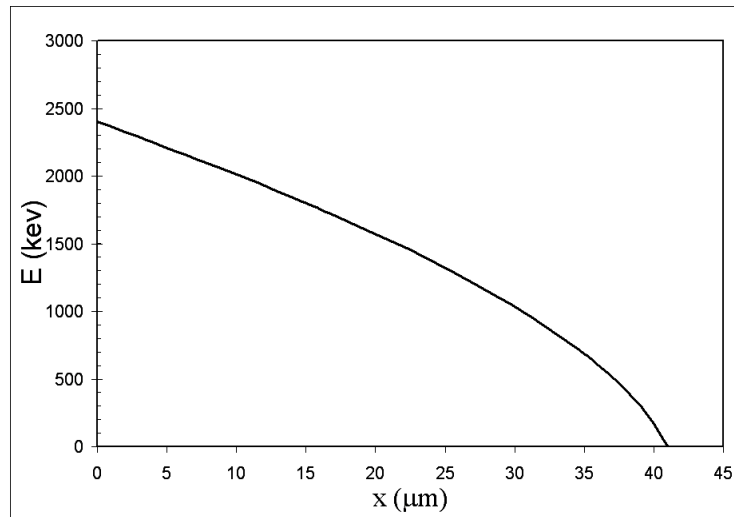
Multiply Stopping by for Stopping Units

1.0000E-01	eV / Angstrom
1.0000E+00	keV / micron
2.2130E-03	keV / (ug/cm2)
1.7602E-01	eV / (1E15 atoms/cm2)
1.3649E-01	L.S.S. reduced units

=====
(C) 1984,1989,1992,1998,2008 by J.P. Biersack and J.F. Ziegler



1. Como varia a energia do feixe em função da profundidade?



$$E(z) = A + B1*z + B2*z^2 + B3*z^3 + B4*z^4 + B5*z^5 + B6*z^6 + B7*z^7$$

B	Value	Erro
A	2398	5
B1	-24.7	3.8
B2	-4.27	0.86
B3	0.474	0.078
B4	-0.0247	0.0033
B5	5.89E-4	6.7E-5
B6	-5.33E-6	5.2E-7

1. Determinar $dE/dz \times E$ com SR do SRIM
2. Inverter: $1/S \times E$
3. Integrar de $E=E_0$ a $E=0$ e obter $z(E)$
4. Inverter e ajustar polinômio $E(z)$

2. Como depende a seção de choque de ionização com a energia do feixe?

Há várias possibilidades na literatura. A mais simples é o ajuste semiempírico de Johansson e Johansson: *Nucl. Instr. And Meth.*, **137**, 476, 1976.

Existe um ajuste semelhante e um pouco mais preciso, para cada elemento da tabela periódica, por Campbell e usado no programa GUPIX .

O esquema JJ

$$\ln(\sigma u_i^2) = \sum_{n=0}^5 b_n x^n$$

$$x = \ln(E_p / \lambda u_i)$$

u_i é a energia de ionização da camada

E_p é a energia do próton (eV)

σ em 10^{-14} cm^2

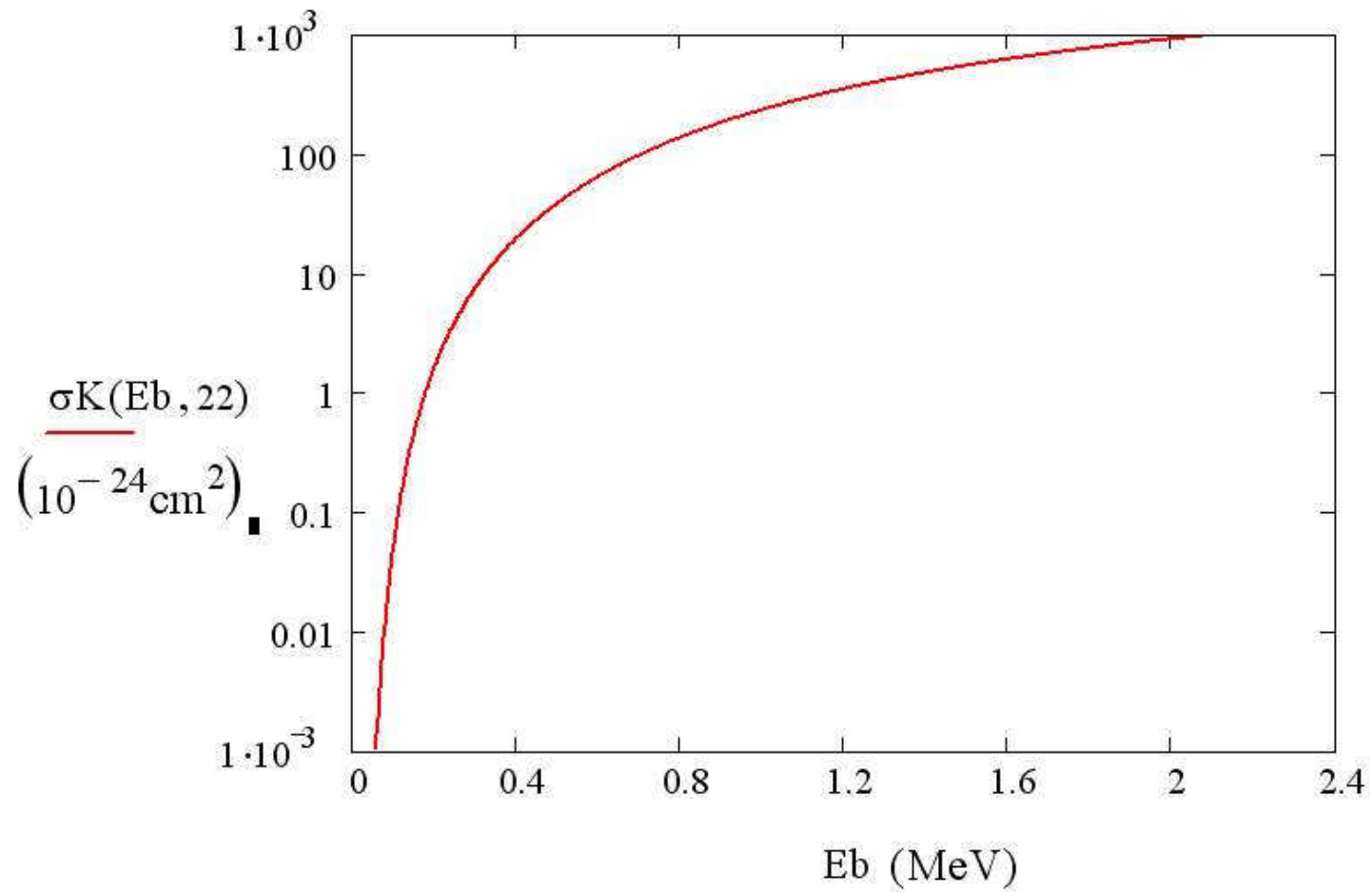
$\lambda = m_p / m_e = 1836.1514$

$$u_L = \frac{1}{4} (u_{L1} + u_{L2} + 2u_{L3})$$

Coefficientes do polinômio para o cálculo da seção de choque de ionização da camada K e L.

Camada	b_0	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5
K	2.0471	-0.0065906	-0.47448	0.09919	0.046063	0.0060853
L	3.6082	0.37123	-0.36971	-0.78593x10-4	0.25063x10-2	0.12613x10-2

Seção de choque de ionização do Titânio sob feixe de prótons com 2,4 MeV
Esquema JJ.

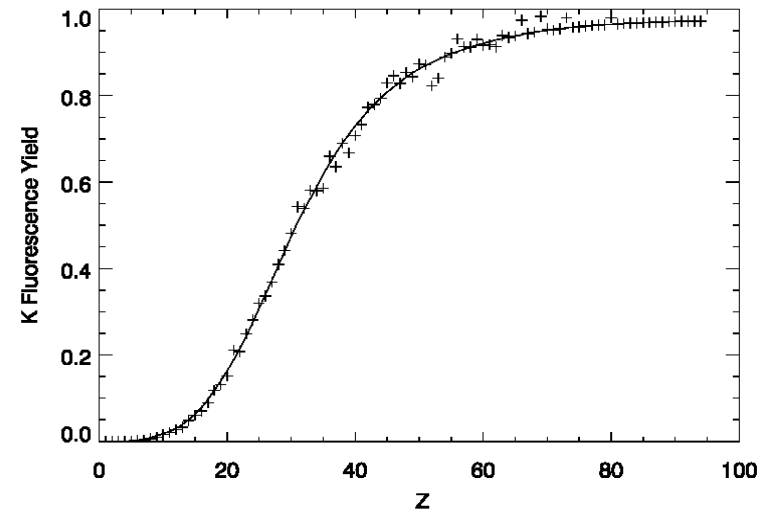


Seção de choque de produção de raios-X

$$\sigma_X = \sigma_I \omega k$$

ω rendimento fluorescente

k probabilidade da linha no grupo



$$\left(\frac{\omega_K}{1 - \omega_K} \right)^{\frac{1}{4}} = \sum_{i=0}^3 B_i Z^i$$

$$\left(\frac{\bar{\omega}_L}{1 - \bar{\omega}_L} \right)^{\frac{1}{4}} = \sum_{i=0}^3 B_i Z^i$$

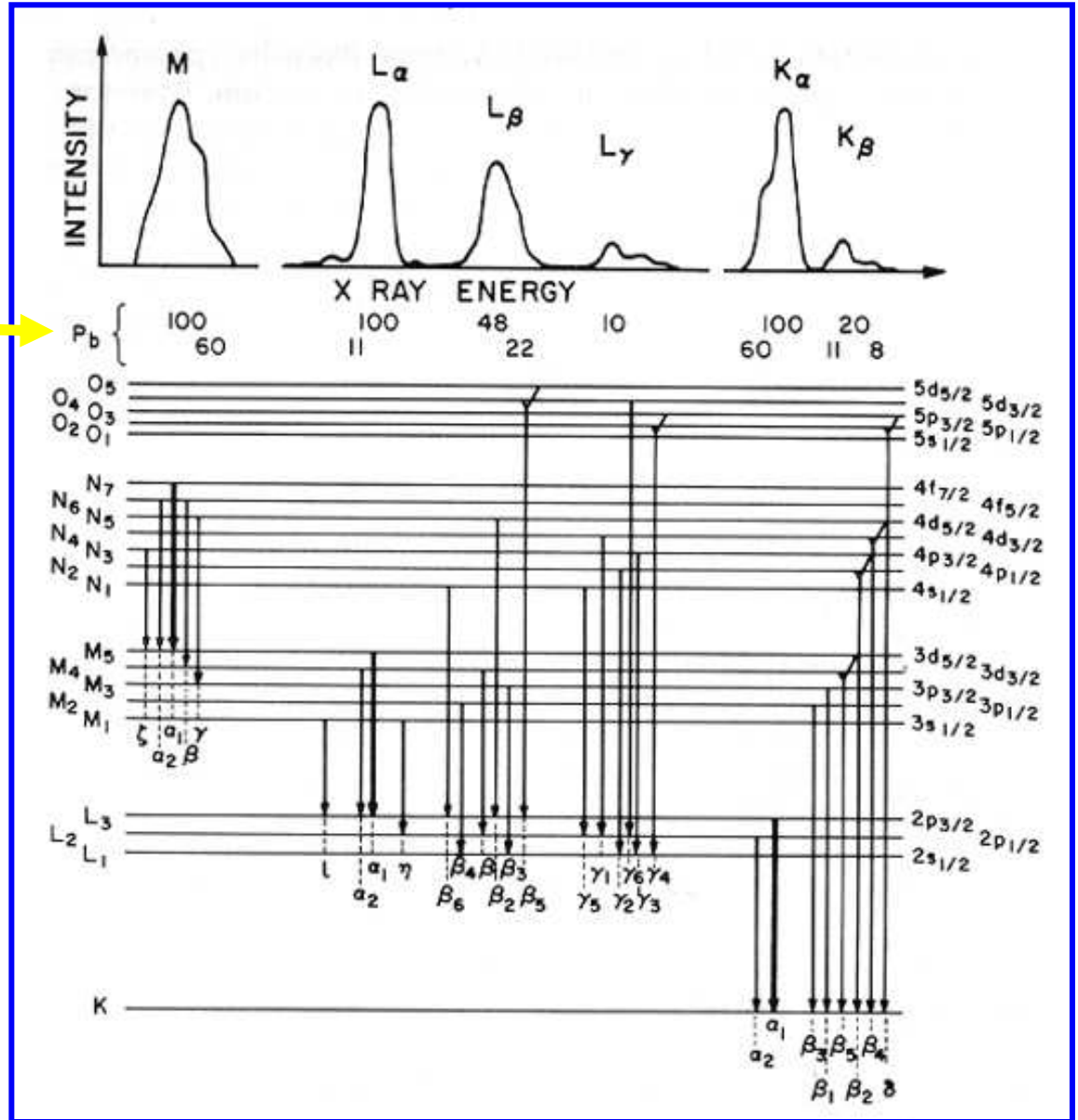
Coeficientes do polinômio para cálculo do rendimento fluorescente das camadas K e L.

	K	L
B_0	$(3.70 \pm 0.52) \times 10^{-2}$	0.17765
B_1	$(3.112 \pm 0.044) \times 10^{-2}$	2.98937×10^{-3}
B_2	$(5.44 \pm 0.11) \times 10^{-5}$	8.91297×10^{-5}
B_3	$-(1.25 \pm 0.07) \times 10^{-6}$	-2.67184×10^{-7}

Espectro M Espectro L Espectro K

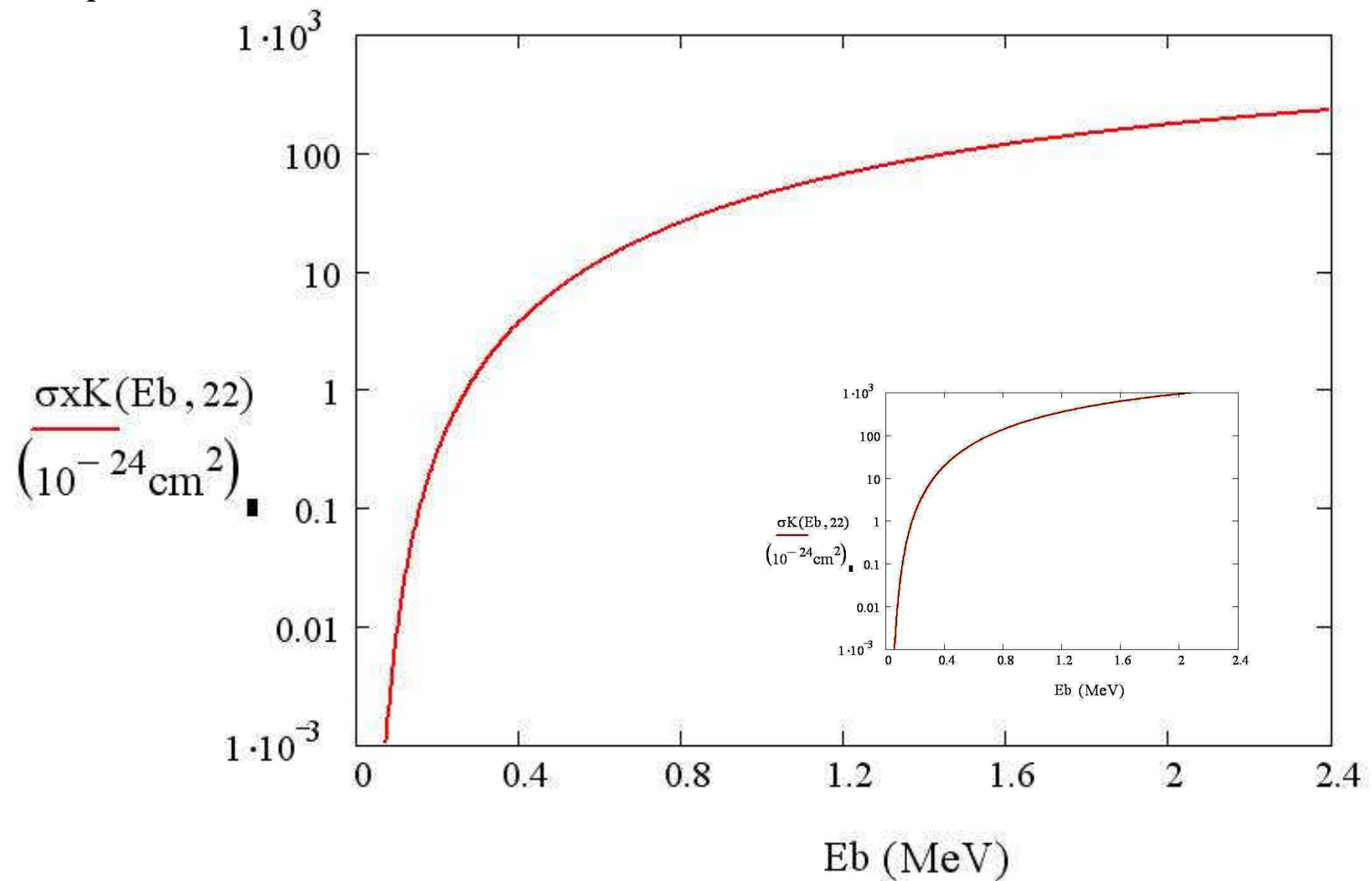
$$k_{K\alpha} = \frac{160}{199} = 0,80$$

Intensidades
relativas →



Seção de choque de produção de raios-X do Titânio sob feixe de prótons com 2,4 MeV
Esquema JJ.

$$\sigma_X = \sigma_I \omega k$$



Número (dn/dz) de **fótons Ka** que chega num detector função da profundidade (z) numa amostra de Titânio para incidência normal

$$\Omega = 10^{-3} \text{ sr}$$

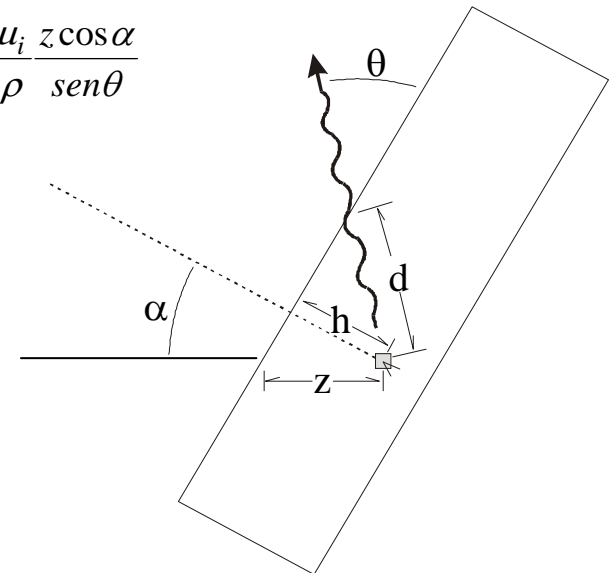
$$\varepsilon = 1$$

Prótons com 2,4 MeV

Incidência normal

$$N'_{Xi} = \frac{\Omega}{4\pi} \varepsilon_i \frac{Q}{q \cdot e \cdot \cos \alpha} \frac{\rho_i}{\rho} \frac{N_0}{A_i} \int_{E_0}^E \frac{\sigma_{Xi}(E') \cdot e^{-\frac{\mu_i \cos \alpha}{\rho} \int_{E_0}^{E'} \frac{dE''}{S(E'')}}}{S(E')} dE'$$

$$\frac{dN'_{Xi}}{dz} = \frac{\Omega}{4\pi} \varepsilon_i \frac{Q}{q \cdot e \cdot \cos \alpha} \frac{\rho_i N_0}{A_i} \sigma_I(E(z)) \omega k e^{-\frac{\mu_i z \cos \alpha}{\rho \sin \theta}}$$



Todos elementos são conhecidos exceto o termo de absorção:

Opção 1: Determinar μ_i usando XCOM.

Opção 2: Usar “utilities” do QXAS.

QXAS

$$E_{K\alpha}(Ti) = 4.508 \text{ keV}$$

$$\mu(4.508 \text{ keV} > Ti) = 112 \text{ cm}^2 / \text{g}$$

```

c:\ AXIL.EXE
Axil X-ray Analysis Package

Utilities
* Fundamental parameters' tables
* Calculation of average atomic number
* Spectral distribution of X-ray tubes
* Absorption coefficients, absorption correction
* Incident and take-off angles, Geometry constants, *.sen file
    
```

```

c:\ AXIL.EXE
X-RAY FUNDAMENTAL PARAMETER TABLES - VER. 1.0
Mass-absorption coefficients:      1 <= Z <= 94
K-series X-ray production cross-sec.: 11 <= Z <= 94
L-series X-ray production cross-sec.: 28 <= Z <= 94
Primary photon energy range [keV]: 1 <= E <= 200
    
```

Arrows: move selection
Enter the atomic number Z (1 <= Z <= 94):

```

c:\ AXIL.EXE
ELEMENT SYMBOL: Ti ATOMIC WEIGHT = 47.900 DENSITY [g/cm3] = 4.500E+0000
I      II      III     IV      V      VI      VII
PHOTOELECTRIC ABSORPTION EDGES:
K-EDGE [keV]: 4.966
L-EDGES [keV]: 0.563 0.462 0.456
M-EDGES [keV]: 0.060 0.035 0.035
N-EDGES [keV]:
O-EDGES [keV]:
NATURAL EDGE WIDTHS:
K-EDGE [eV]: 0.940
L-EDGES [eV]: 2.340 0.240 0.220
FLUORESCENCE YIELDS:
K-EDGE : 0.214
L-EDGES : 0.000 0.002 0.002
COSTER-KRONIG YIELDS: 0.000 0.000 0.000
MCMASTER LN-LN PARAMETER TABLES:
K      L
0 1.435E+0001 1.311E+0000
1 -1.663E+0000 -2.536E+0000
2 -3.315E+0001 -9.572E+0000
3 2.621E+0002 0.000E+0000
Enter photon energy E (<1 keV < E < 200 keV):
    
```

```

c:\ AXIL.EXE
ELEMENT: Ti, ENERGY = 4.508 [keV]
MASS-ABSORPTION COEFFICIENTS [cm2/g]:
PEC = 1.0948E+0002 COH = 2.0660E+0000 INC = 5.3892E+0002 TOTAL = 1.1160E+0002
X-RAY PRODUCTION CROSS-SECTIONS:
K-SERIES
LINE SYMBOL ENERGY RATE CROSS-SECT.
K-L1 Ka3 0.000 0.0000 0.000E+0000
K-L2 Ka2 4.504 0.2965 0.000E+0000
K-L3 Ka1 4.510 0.5842 0.000E+0000
K-M2 Kb3 4.931 0.0400 0.000E+0000
K-M3 Kb1 4.931 0.0793 0.000E+0000
K-M4 Kb5II 0.000 0.0000 0.000E+0000
K-M5 Kb5I 0.000 0.0000 0.000E+0000
K-N2 Kb2II 0.000 0.0000 0.000E+0000
K-N3 Kb2I 0.000 0.0000 0.000E+0000
K-N4 Kb4II 0.000 0.0000 0.000E+0000
K-N5 Kb4I 0.000 0.0000 0.000E+0000
K-O2 Kb2III 0.000 0.0000 0.000E+0000
K-O3 Kb2IV 0.000 0.0000 0.000E+0000
Enter photon energy E (<1 keV < E < 200 keV):
    
```

$$E_{K\alpha} = \frac{E_{K\alpha 1} \cdot k_{K\alpha 1} + E_{K\alpha 2} \cdot k_{K\alpha 2}}{k_{K\alpha 1} + k_{K\alpha 2}}$$

QXAS

$$E_{K\alpha}(\text{Ti}) = 4.508 \text{ keV}$$

$$\mu(4.508 \text{ keV} > \text{Ti}) = 112 \text{ cm}^2 / \text{g}$$

$$abs(z) = e^{-\frac{\mu_i z \cos \alpha}{\rho \sin \theta}}$$

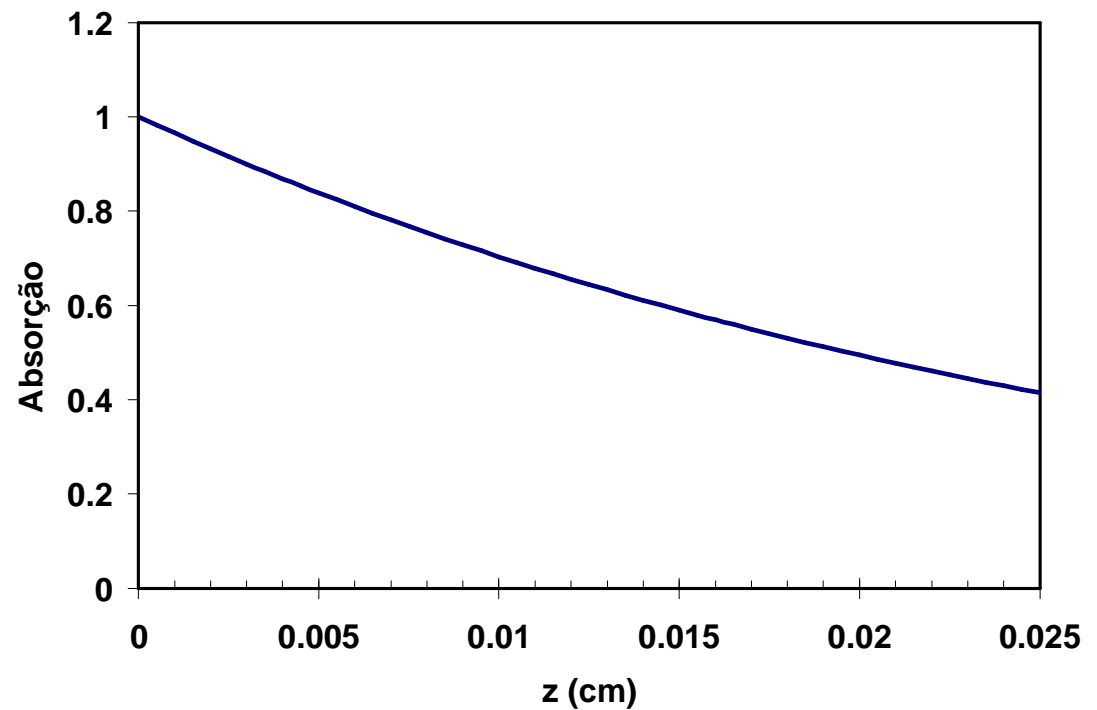
Incidência normal: $\alpha = 0$

Supondo detecção em 45°

$$\sin 45 = 0,707$$

$$\rho(\text{Ti}) = 4,5 \text{ g/cm}^3$$

$$abs(z) = e^{-\left(\frac{112}{4,5}\right) \frac{z}{0,707}}$$



Feixe de He com 9,6 MeV

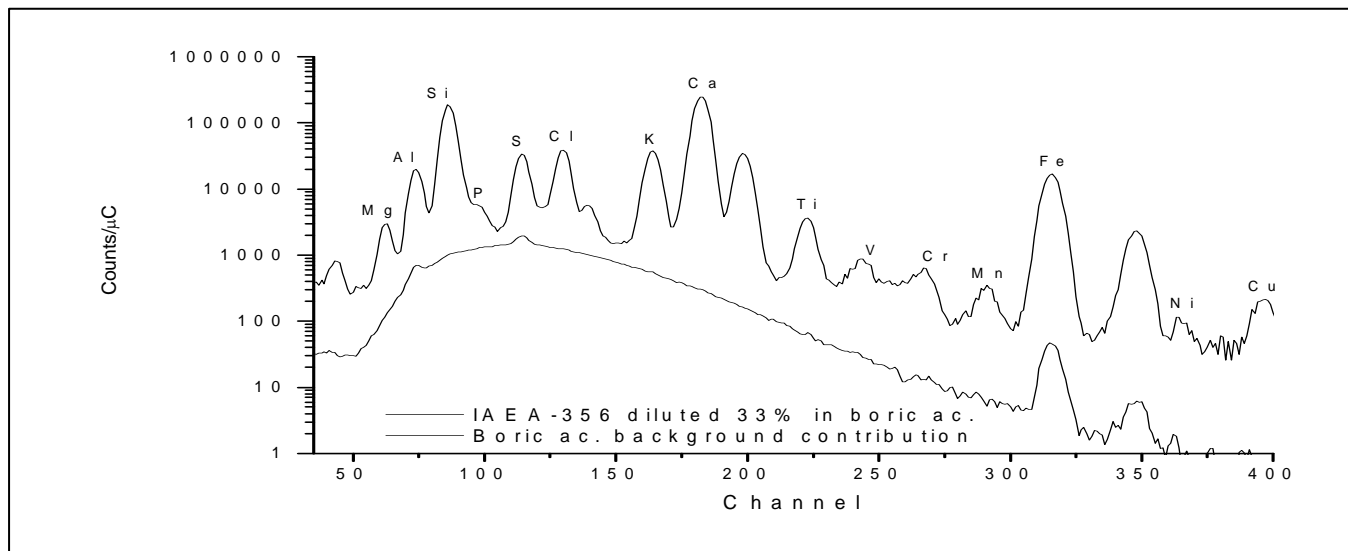
Lei de escalas (Teoria do encontro binário)

$$\sigma_{A,Z}(E) = Z^2 \cdot \sigma_{1,1}(E/A)$$

$$\sigma_{4,2}(9,6) = 2^2 \cdot \sigma_{1,1}(9,6/4)$$

$$\sigma_{4,2}(9,6) = 4 \cdot \sigma_{1,1}(2,4)$$

A redução de um espectro de raios X



Espectro PIXE do padrão IAEA-356 (sedimento marinho) diluído 33% em ácido bórico. A curva inferior é a componente do fundo contínuo do ácido bórico puro.

Espectro multielementar de uma amostra com k elementos obtido com um detector tipo Si(Li) e linhas K, L e M pode ser modelado com um somatório de espectros característicos elementares somados a um fundo contínuo

Um espectro multielementar de uma amostra com k elementos obtido com um detetor tipo Si(Li) e linhas K, L e M pode ser modelado com um somatório de espectros característicos elementares somados a um fundo contínuo.

$$N(\kappa) = \left[\sum_n \alpha_n \cdot F_n(\kappa) + A_0 \cdot BG(\kappa) \right] + SUM(\kappa) + ESC(\kappa)$$

The diagram illustrates the components of the equation above. Arrows point from the terms in the equation to their respective labels:

- An arrow from the summation term $\sum_n \alpha_n \cdot F_n(\kappa)$ points to the label "n espectros independentes".
- An arrow from the background term $A_0 \cdot BG(\kappa)$ points to the label "fundo contínuo".
- An arrow from the $SUM(\kappa)$ term points to the label "principais picos soma".
- An arrow from the $ESC(\kappa)$ term points to the label "principais picos escape".

$$N(\kappa) = \left[\sum_n \alpha_n \cdot F_n(\kappa) + A_0 \cdot BG(\kappa) \right] + SUM(\kappa) + ESC(\kappa)$$

$$F_r(\kappa) = \sum_i \beta_i \cdot G(E_i(\kappa), \Gamma_i(\kappa))$$

Função gaussiana (ou similar assimétrica) centrada em E_i com largura Γ

Um elemento pode ter mais que um grupo de espectros “independentes” O espectro L tem 3 grupos: L1, L2 e L3

calibração energia x canal

$$E_i = A_1 + A_2 \cdot \kappa$$

calibração resolução x energia

$$\Gamma_i^2 = A_3^2 + A_4 \cdot E_i$$

Parâmetros alteram a gaussina de forma não linear: **ajuste iterativo**

O programa AXIL (QXAS) para ajuste não linear de espectros de raios-x

<http://www.iaea.or.at/programmes/ripc/physics/faznic/winqxas.htm>

```
Shortcut to axil.bat

QXAS  Quantitative X-ray Analysis System

      Developed under the auspices of the
      International Atomic Energy Agency

      In cooperation with
      The University of Antwerp, Belgium
      La Direccion Nacional de Tecnologia Nuclear, Uruguay
      La Direccion General de Energia Nuclear, Guatemala
      Ruder Boskovic Institute, Yugoslavia
      Instituto de Asuntos Nucleares, Colombia

-----+-----
Current Directory: C:\AXIL
Set directory: C:\AXIL
-----+-----

<Enter>=Save_Change & done  <Esc>=Done  F1=HELP  replace on <Ins>
```

Diretório com os seus espectros.
Acrescentar o arquivo de parâmetros .inp

```
Axil X-ray Analysis Package
* System hardware setup
* Execute DOS command
* Spectrum analysis
* Simple quantitative analysis
* Utilities
```

```
Axil X-ray Analysis Package
Spectrum analysis
* Perform spectrum fitting
* Specify parameters for spectrum analysis
* X-ray library management
```

```
Current parameter file:
* Select parameter file
* Create new parameter file
```

```
Current parameter file:
* Select parameter file
* Create new parameter file
File name: GENAXILN
```

definindo o arquivo de parâmetros

definindo as condições experimentais

```
Current parameter file:
* Select parameter file
* Create new parameter file
Specify experimental parameters
* Excitation mode
* Excitation conditions
* Detector characteristics
* Filter absorption
* Funny filter absorption
* Path length
```

Condições experimentais

```
Current parameter file:
* Select parameter file
* Cr----- Set excitation mode -----
Sp: * Proton induced X-ray emission (PIXE)
* Excitation mode
* Excitation conditions
* Detector characteristics
* Filter absorption
* Funny filter absorption
Toggle with the + or - keys to select the appropriate
excitation mode: XRF, PIXE or EPMA. The choice you make
is irrelevant for the current version of the spectrum
analysis procedure. It is implemented for compatibility
with further releases.
```

F1 ativa
Help
contextual

```
Current parameter file:
* Select parameter file
* Cr----- Set excitation conditions -----
Sp: Primary excitation energy (KeV) : 16.5000
    Angle of incidence (degrees) : 45.0000
    Detector take-off angle (degrees): 45.0000
*
* Detector characteristics
* Filter absorption
* Funny filter absorption
* Path length
```

Características
do detector

```
Current parameter file:
* Select parameter file
* Cr----- Set detector characteristics -----
Sp: Beryllium window (micron) : 7.620000
    Gold layer (micron) : 0.020000
    Detector type : Si(Li)
    Detector dead layer (micron) : 0.300000
    Detector active depth (mm) : 3.000000
*
* Pulse pileup resolution time (micro sec) 2.000
*
```


Condições experimentais

```
Current parameter file:
* Select parameter file
* Cr+--- Specify absorbers between sample and detector ---+
!Sp
Excitation mode : PIXE
Thickness (g/cm^2) : 0.00000
Composition :
element      amount
             0.00000
             0.00000
Enter the mass per unit area (g/cm^2) of any filter that
is placed between the sample and the detector.
Enter a value of zero if no filter is used.
This information will be used to correct the fitting
model for the absorption that take place when the X-rays
leaving the sample travel through this filter.
```

Absorvedor de raios-X. Influi apenas na razão de intensidade das linhas.

```
Current parameter file:
* Select parameter file
* Cr+--- Specify path between sample and detector ---+
!Sp
Path          : Air
Path length (cm) : 3.000000
* Excitation conditions
* Detector characteristics
* Filter absorption
* Funny filter absorption
* Path length
```

Em PIXE também se usa um tipo de absorvedor chamado “funny filter”. É um filtro com furo. O objetivo é modelar a curva de absorção de forma que não tenda a $-\infty$ quando a energia tende à zero.

Parâmetros de análise

```
Current parameter file: C:\AXIL\TESTE.INP
* Select parameter file
* Create new parameter file
* Specify spectrum analysis parameters
* Specify experimental parameters
```

```
Current parameter file: C:\AXIL\TESTE.INP
* Select parameter file
* Specify spectrum analysis parameters
* Background parameters
* Calibration parameters
* Fitting control parameters
* Sample absorption
```

Um espectro PIXE varia sobre até 6 ordens de grandeza. O modelo de fundo tem que acompanhar essa variação. Para isso usa-se um fundo exponencial de um polinômio. Seu uso exige paciência. Um fundo simples e é o filtro, que calcula inúmeras médias móveis do espectro e com isso alisa os picos: o que sobra é o fundo. Aumentar o número de iterações abaixa o fundo.

```
Current parameter file: C:\AXIL\TESTE.INP
* Select parameter file
* Sp Set background type
* Ca Specify exponential background parameters
* Fi
* Sa
Order of linear polynomial : 3
Order of exponential polynomial : 4
The higher order terms of the Exponential polynomial
can be kept constant :
Number of constant terms : 0
Parameter 1: 0.00000 Parameter 5: 0.00000
Parameter 2: 0.00000 Parameter 6: 0.00000
Parameter 3: 0.00000 Parameter 7: 0.00000
Parameter 4: 0.00000 Parameter 8: 0.00000
Initialize parameters automatically (y/n): y
Energy near background maximum (keV): 0.00000
```


Parâmetros de análise

```
Current parameter file: C:\AXIL\TESTE.INP
* Select parameter file
*----- Specify calibration constants -----*
* Sp
* Energy calibration      : E = ZERO + Channel * GAIN
* Resolution calibration : FWHM^2 = NOISE^2 + 2.35 * FANO * E
*
* ZERO (eU) : 0.00000      NOISE (eU) : 120.000
* D_ZERO (eU) : 100.000    D_NOISE(eU) : 40.0000
* GAIN (eU/ch) : 20.0000   FANO-factor : 0.11400
* D_GAIN(eU/c) : 2.00000   D_FANO      : 0.05000
```

Estes são os parâmetros de calibração de energia e resolução. Controla-se o ajuste “liberando” ou “amarrando” os desvios dos parâmetros: D_ZERO, D_GAIN, D_NOISE e D_FANO. Em espectros de poucos picos especialmente se concentrados numa região, o modelo pode correr os parâmetros de calibração. Nesse caso, ou quando os parâmetros são bem conhecidos, convém reduzir os D_s para algo em torno de 1% ou menos, evitando assim que o modelo de ajuste seja fisicamente irreal.

Os arquivos do QXAS

parametros.inp

elementos
para
análise

calibração

fundo

condições
experimentais

detector

```
$FIT_ROI:
  80  600
$PEAK:
  4   1
  1  14 10001
  1.7400  1.0000  1
  2  16 10001
  2.3070  .9419  1
  2.4640  .0581  3
  2  20 10001
  3.6910  .8883  1
  4.0130  .1117  3
  2  26 10001
  6.3990  .8816  1
  7.0590  .1184  3
$SPEC_CAL:
-2.2806E+002 1.9714E+001 1.0800E+002 3.6100E-002
1.0000E+002 2.0000E+000 4.0000E+001 5.0000E-002
$BACK:
  2  0  4
  0 0.000000 200 1
  0.00000E+000 0.00000E+000 0.00000E+000 0.00000E+000
  0.00000E+000 0.00000E+000 0.00000E+000 0.00000E+000
$FIT_CON:
0.000000 20 0.100000 1
$EX_COND:
  1
45.000000 45.000000 2400.000000
$DETEC:
7.6200E-004 2.0000E-006 3.0000E-005 3.0000E-001
14 2.0000E+000
$DET_PATH:
0 0.0000E+000 2.0000E+000
```

Os arquivos do QXAS

espectro.spe

```
$SPEC_ID:
zr02 = 2% sco2
$MEAS_TIM:
600
$DATA:
```

} remover
brancos à
direita

0	1023									
600	584	31	1	07	15	32	0	0	1024	
0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	
0	13	85	337	783	1381	1737	1912	1795	1575	
1353	1329	1030	861	721	559	461	387	339	328	
301	312	284	288	281	266	294	286	297	274	
289	285	254	294	271	238	251	197	212	199	
226	220	247	221	219	228	236	200	228	202	
193	209	180	207	229	198	201	175	207	219	
225	246	270	263	323	315	361	337	348	414	
498	618	803	982	1157	1171	1364	1462	1755	2264	
2848	3234	3397	3265	3073	2846	2826	3482	5885	12183	
24647	45706	72309	98021	114557	117995	109471	96379	82432	69027	
55697	43051	31866	22693	15140	9810	5704	3408	2065	1269	
980	663	596	588	658	851	975	1153	1196	1094	

Os arquivos do QXAS

espectro.out

```
+-----+
| AXIL IBM-PC V3.00                               01-31-2007   16:28:42 |
| Spectrum: B3147.SPE                               600.s      |
+-----+
| Fitting Region:  channels 150 -1000;           ChiSqr =      2.8 |
+-----+
| Line | Ener. (KeV) | Peak area | st.dev. | Chi_sq |
| Ca-Ka | 3.691 | 375. ñ | 18. | 1.33 |
| Sc-Ka | 4.089 | 189407. ñ | 177. | 7.47 |
| Ti-Ka | 4.509 | 4373. ñ | 50. | 16.56 |
| V -Ka | 4.950 | -407. ñ | 10. | 4.11 |
| Fe-Ka | 6.399 | 174. ñ | 8. | 1.95 |
| Zr-Ka | 15.746 | 37870. ñ | 76. | 1.14 |
| Hf-La | 7.894 | 2690. ñ | 15. | 15.38 |
+-----+
```

Saída tipo “breaF” (note que tanto full como breaF usam a terminação .out)

ideal para cálculos posteriores

\$SPEC_ID:

zro2 + 13% sco2

\$MEAS_TIM:

600

0 0 0 0

\$PEAKS:

7

20	1	3.691	375.	18.	1.33
21	1	4.089	189407.	177.	7.47
22	1	4.509	4373.	50.	16.56
23	1	4.950	-407.	10.	4.11
26	1	6.399	174.	8.	1.95
40	1	15.746	37870.	76.	1.14
72	2	7.894	2690.	15.	15.38

espectro.out tipo "full"

```

-----
AXIL IBM-PC V3.00                12-17-2005  16:58:03
Spectrum: B630.SPE                200.s
-----
Fitting Region: channels 45 - 800      5 iterations done
ChiSquare =      4.6 last change = .04%  lambda= 1.E-07
-----
CALIBRATION DATA
-----
              Initial estimate      Final estimate
-----
ZERO (eV)      -141.4 n .5      -141.4 n .3
GAIN (eV/ch)   19.486 n .100     19.486 n .004
det NOISE (eV) 117.6 n 1.0      117.6 n .2
FANO factor    .028 n .000      .028 n .000
-----
PEAK DATA
-----
# Line      E(KeV)  rel. int.  peak area  st. dev  chi-sq
            chan#  fwhm (eV)  backgr    tot. abs
-----
1 Al-K
  KA1       1.487  1.00000   654676. n  812.    21.2
            83.563  121.37   3186.    4.33E-05
2 Fe-K
  KA1       6.399  .87732   1709. n   42.    4.5
            335.635  132.94   39.      8.53E-01
  KB1       7.059  .12268   210. n   7.     3.6
            369.505  134.42   28.     8.89E-01
3 Au-L1
  L1M3     11.610  .39333   9. n     9.     1.4
            603.051  144.21   7.     9.74E-01
  L1M2     11.205  .33863   3. n     4.     .7
            582.268  143.37   3.     9.71E-01
  L1N3     13.809  .11133   1. n     1.     .4
            715.899  148.71   7.     9.78E-01
  L1N2     13.710  .08815   0. n     0.     .3
            710.818  148.51   1.     9.79E-01
  L1O3     14.291  .03574   0. n     0.     .0
            740.634  149.67   0.     9.80E-01
  L1M5     12.147  .01704   0. n     1.     .4
            630.609  145.32   1.     9.70E-01
  L1M4     12.062  .01135   0. n     1.     .7
            626.247  145.14   2.     9.70E-01
  L1N5     14.020  .00272   2. n     2.     .0
            726.727  149.13   8.     9.79E-01
  L1N4     13.999  .00171   1. n     1.     .0
            725.649  149.09   1.     9.79E-01
4 Au-L2
            128. n   13.
-----

```

```

-----
4 Au-L2
  L2M4     11.442  .78883   128. n   13.
            594.430  143.86   101. n  10.
            6.     9.73E-01
  L2N4     13.382  .16499   21. n    2.
            693.986  147.84   1.     9.77E-01
  L2M1     10.308  .02136   3. n    2.
            536.236  141.48   3.     9.63E-01
  L2N1     12.974  .00561   0. n    8.
            673.049  147.02   2.     9.75E-01
  L2O4     13.730  .01730   2. n    0.
            711.845  148.55   1.     9.79E-01
  L2O1     13.626  .00111   0. n    7.
            706.508  148.34   5.     9.79E-01
  L2M3     10.992  .00080   0. n    0.
            571.337  142.92   0.     9.69E-01
5 Au-L3
  L3M5     9.716   .69912   475. n  23.
            505.856  140.22   8.     9.56E-01
  L3M4     9.628   .07941   38. n   3.
            501.340  140.03   8.     9.54E-01
  L3N5     11.585   .13995   66. n   4.
            601.768  144.16   7.     9.73E-01
  L3N4     11.567   .01555   7. n    3.
            600.845  144.12   7.     9.73E-01
  L3M1     8.494   .03843   18. n   4.
            443.146  137.58   12.    9.34E-01
  L3N1     11.160   .00983   5. n    2.
            579.958  143.27   2.     9.70E-01
  L3O1     11.811   .00193   0. n    2.
            613.366  144.63   6.     9.75E-01
  L3O5     11.916   .01579   7. n    2.
            618.755  144.84   4.     9.76E-01
6 Au-M
  M1       2.120   .53159   8683. n 119.
            116.047  122.92   4762.  93.
  M2       2.200   .46841   4067. n 93.
            120.153  123.12   4735.  1.92E-02
            2.82E-02
7 GR01
            2.435  1.00000   1525. n 71.
            132.212  123.69   1525. n 97.
            4400.  6.36E-02
8 GR02
            2.766  1.00000   3433. n 79.
            149.198  124.49   3433. n 98.
            3360.  54.5
            1.47E-01
9 Pile_up
            2.974   .95576   7847. n 103.
            159.872  124.99   7500. n 111.
            3.644   .02535   2523.  89.3
            194.280  126.58   199. n  27.
            4.25E-01
            4.253   .01004   745.  3.5
            225.508  128.02   79. n  18.
            336.  5.84E-01
            3.922   .00445   35. n  22.
            208.522  127.24   502.  1.4
            7.886   .00440   35. n  4.
            411.945  136.25   19.  5.03E-01
            9.19E-01
-----
FILTER BACKGROUND
-----

```

Resultados: alvo fino

saída do axil (qxas): área dos picos

Calibração (Fator de resposta de alvo fino)

elem	Z	M	pks	keV	counts	stdstat	chi	uC	Rbx cm2/ug/uC	c(fino) ug/cm2	F(clara) g/cm2	ppm massa
Ca	20	40	1	3.691	650	19	1.69	0.1389	1.16E+04	4.03E-01	1.58E-03	256
Sc	21	44.96	1	4.089	26766	69	2.65	0.1389	9.18E+03	2.10E+01	1.98E-03	10585
Ti	22	47.9	1	4.509	2285	31	2.74	0.1389	7.48E+03	2.20E+00	2.45E-03	899
Fe	26	56	1	6.399	171	7	1.52	0.1389				
Zr	40	91.22	1	15.746	47297	85	0.88	0.1389	9.77E+01	3.49E+03	6.48E-03	538035
Hf	72	178.5	2	7.894	3273	16	21.56	0.1389	6.94E+02	3.40E+01	5.53E-03	6137

$$n_i = Q \cdot r_i \cdot (\rho_n \cdot \ell)$$

Resultados: alvo grosso usando CLARA

saída do axil
(qxas): área
dos picos

Calibração (Fator
de resposta de
alvo fino)

elem	Z	M	pks	keV	counts	stdstat	chi	uC	Rbx cm2/ug/uC	c(fino) ug/cm2	F(clara) g/cm2	ppm massa
Ca	20	40	1	3.691	650	19	1.69	0.1389	1.16E+04	4.03E-01	1.58E-03	256
Sc	21	44.96	1	4.089	26766	69	2.65	0.1389	9.18E+03	2.10E+01	1.98E-03	10585
Ti	22	47.9	1	4.509	2285	31	2.74	0.1389	7.48E+03	2.20E+00	2.45E-03	899
Fe	26	56	1	6.399	171	7	1.52	0.1389				
Zr	40	91.22	1	15.746	47297	85	0.88	0.1389	9.77E+01	3.49E+03	6.48E-03	538035
Hf	72	178.5	2	7.894	3273	16	21.56	0.1389	6.94E+02	3.40E+01	5.53E-03	6137

$$N_i = Q \cdot r_i \cdot F_i \cdot \frac{\rho_n}{\rho}$$

$$R_i = r_i \cdot F_i$$

CLARA

X-ray yield calc

Geometry

Alpha - (deg): 45 geom. factor
 Theta - (deg): 75 0.7321

proton α photon θ

Line of interest

Z	Symb	Name	Line
13	Al	Aluminum	Ka1

photon energy - (eV): 1486.7
 mi/rho - (cm²/g): 1.377E+03

Calc mode

Initial energy - keV: 1100
 Thin target
 Final energy - keV: 25
 Effective final energy

Effect final energy attenuation

I/Io - [%]	h - [cm]	rho * t [g/cm ²]	t [cm]
1	2.520E-03	3.346E-03	2.609E-03
		4.570E-03	3.564E-03

Photon:
Proton:

Integral step

Automatic Ptos: 100

Stopping Power model

Ziegler (1985)

Ionization cross-section model

Johanson and Johanson
 Campbell

Fluorescence yield model

Bambynek
 WL médio

Matrix composition

```

Z      mass %
1      2.6239
5      14.0724
8      83.3037
Elements: 3
Density of bulk: 1.2822 g/cm3
  
```

Thin target results

* Proton *	Omega [Z]	b [Z]	Sigma K	=	Sigma X
keV	Bambynek	Ka	(cm ²)	=	(cm ²)

Results

final energy	h	photon t	proton t	rho*t	I/Io	Integral	...	Integral X
keV	[cm]	[cm]	[cm]	[g/cm ²]	%	[g]	...	[g]

Correction factor

Integral X / Sigma X: [g/cm²]

Log results

Calc

CLARA

Matrix composition

Main matrix:

	Z	Symb	Name	Mass	E	mass %
1	1	H	Hydrogen	1.0079	2	2.6239
2	5	B	Boron	10.811	1	14.0724
3	8	O	Oxygen	15.9994	4	83.3037
4						0.0000
5						0.0000
6						0.0000
7						0.0000
8						0.0000
9						0.0000
10						0.0000

Main matrix concentration (%): 100.0000
Density - (g/cm3): 1.2822 | 1 | 1.2822

Secondary matrix:

	Z	Symb	Name	Mass	E	mass %
1						0.0000
2						0.0000
3						0.0000
4						0.0000
5						0.0000
6						0.0000
7						0.0000
8						0.0000
9						0.0000
10						0.0000

Secondary matrix concentration (%): 0
Density - (g/cm3): 0.0000 | 0 | 0.0000

ABURAYA, Jim Heiji; ADDED, Nemitala; TABACNIKS, Manfredo Harri; RIZZUTTO, Marcia de Almeida; BARBOSA, Marcel Dupret Lopes. X-ray production yield in standardized thick target PIXE. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B - Beam Interactions With Materials and Atoms*, v. **249**, p. 792-795, 2006.