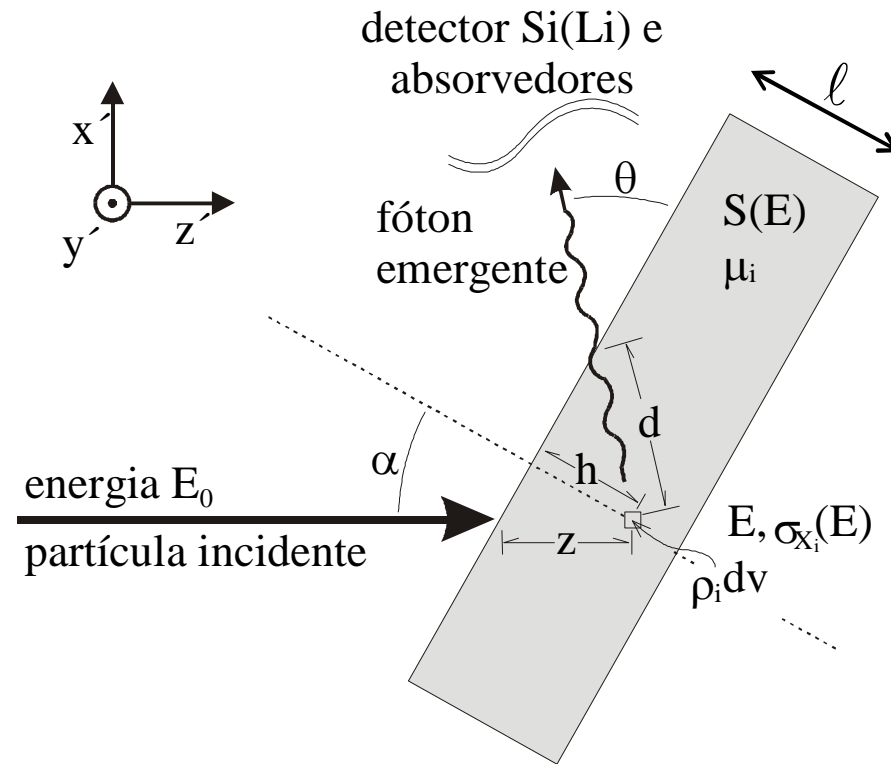


Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FAP5844 - Técnicas de Raios-X e de feixe iônico aplicados à
análise de materiais

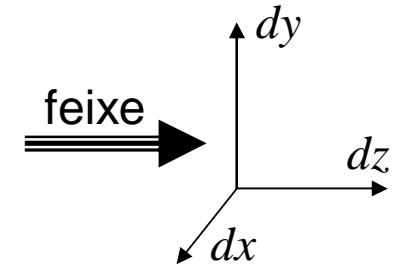
Manfredo H. Tabacniks
FI3-2008

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



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

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

The diagram shows three colored arrows pointing from the differential equation above to the corresponding terms in the integrated equation below: a blue arrow from $n(x, y)$ to $\frac{\rho_i}{\rho}$, a red arrow from $\rho_i \sigma_{Xi}(E)$ to $\sigma_{Xi}(E')$, and a green arrow from $T(z)$ to the second integral term.

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

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)

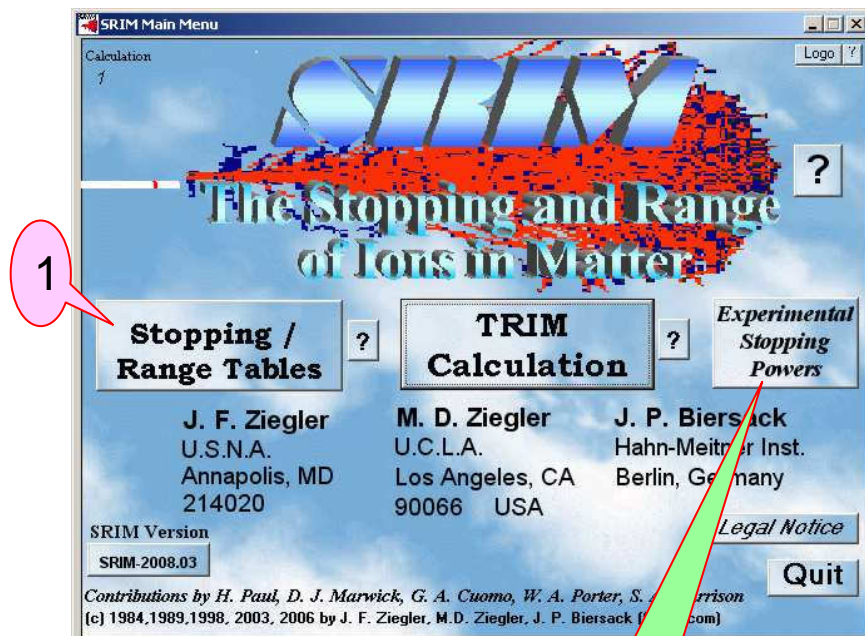
$$\sigma_X = \sigma_I \cdot \omega \cdot k$$

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

Inclui efeitos de eficiência e ângulo sólido de detecção

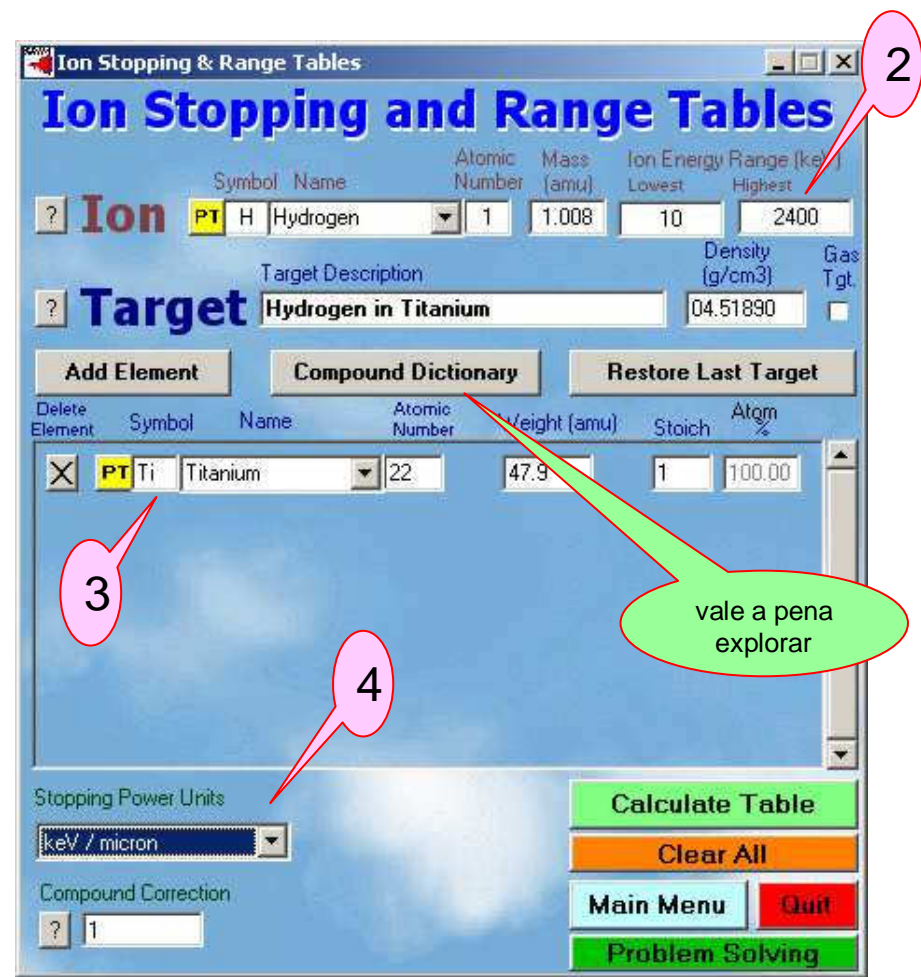
Gráfico do número (dN/dz) de fótons **K** gerados por um feixe de prótons com energia inicial de 2,4 MeV em função da profundidade em titânio.

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%

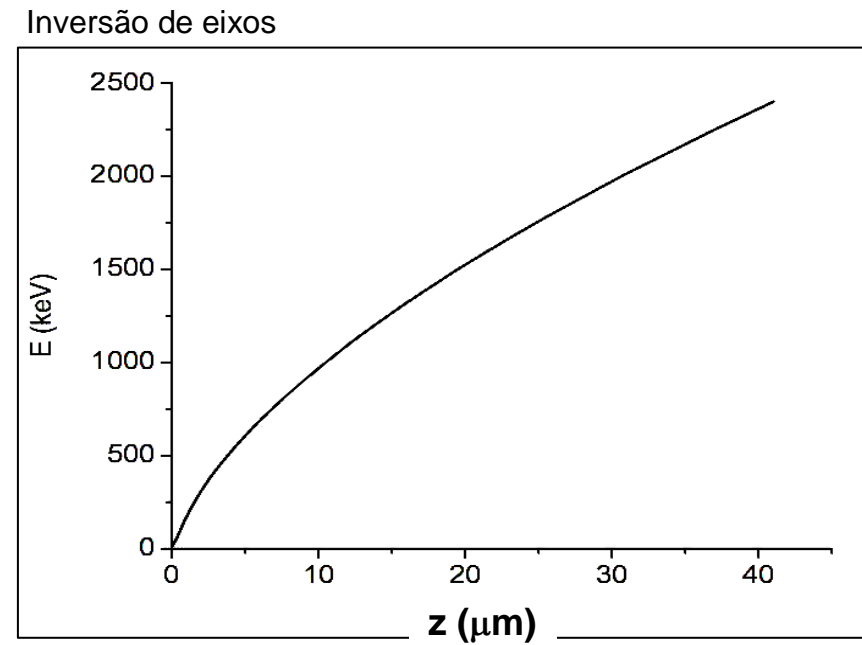
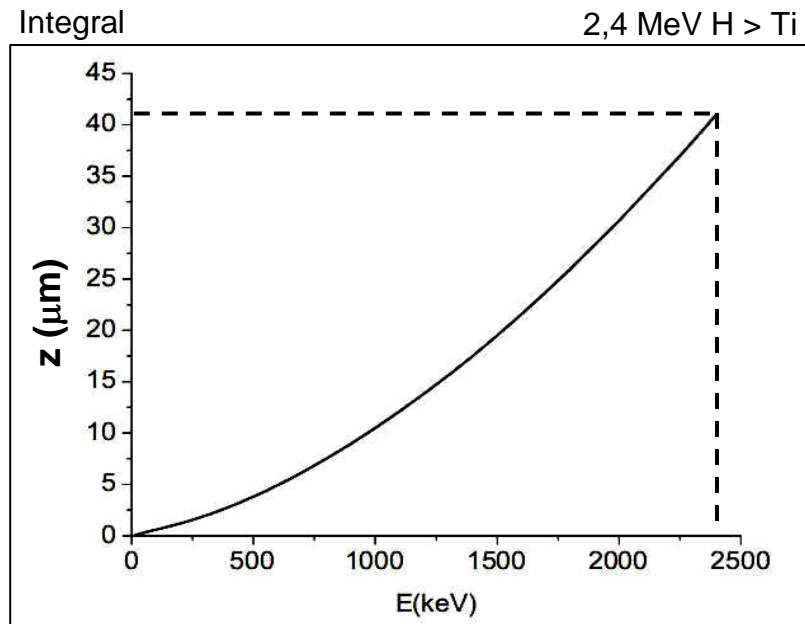
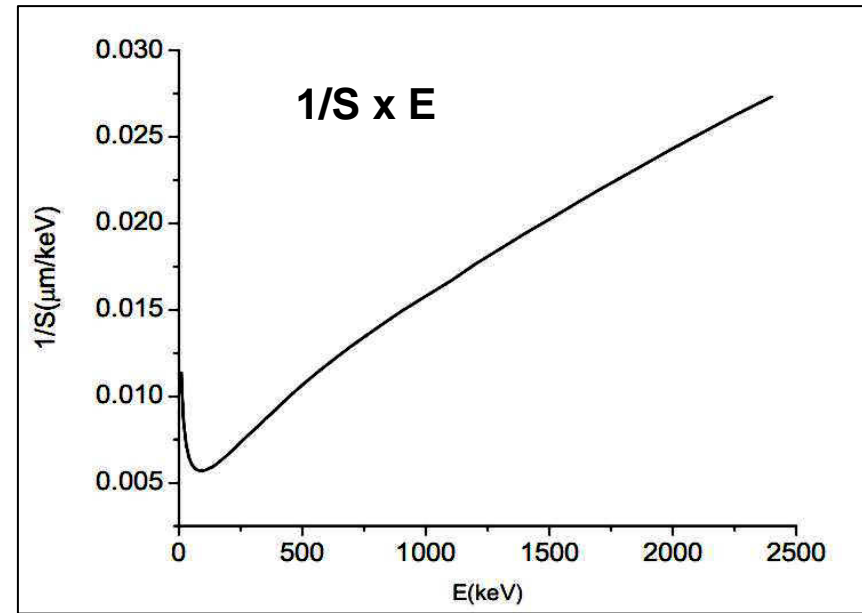
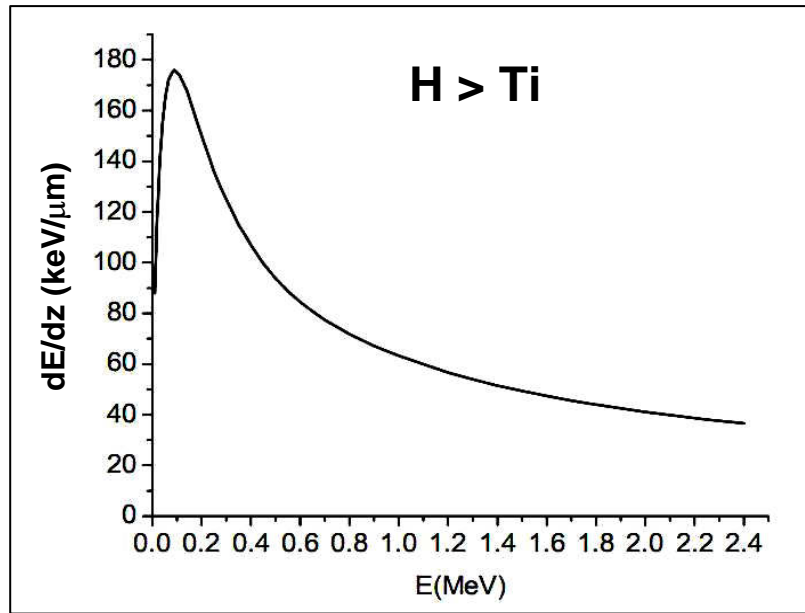
Stopping Units = keV / micron

| 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 |

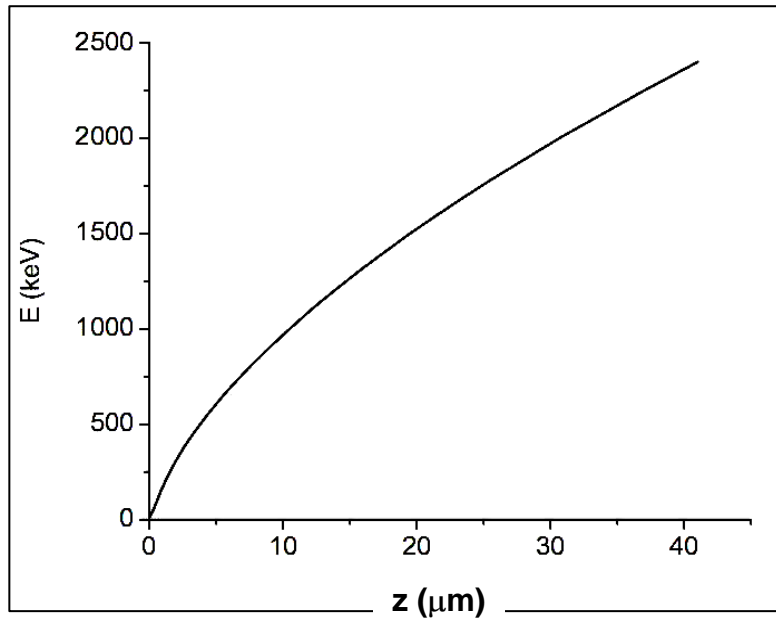
Multiply Stopping by for Stopping Units

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 | 1.17 | 0.93 |
| B1 | 183.3 | 2.3 |
| B2 | -19.2 | 1.2 |
| B3 | 1.82 | 0.27 |
| B4 | -0.109 | 0.028 |
| B5 | 0.0040 | 0.0016 |
| B6 | -8.6E-5 | 5.0E-5 |
| B7 | 10.1E-7 | 8.1E-7 |

1. Determinar $dE/dz \times E$ com SR do SRIM
2. Inverter: $1/S \times E$
3. Integrar 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

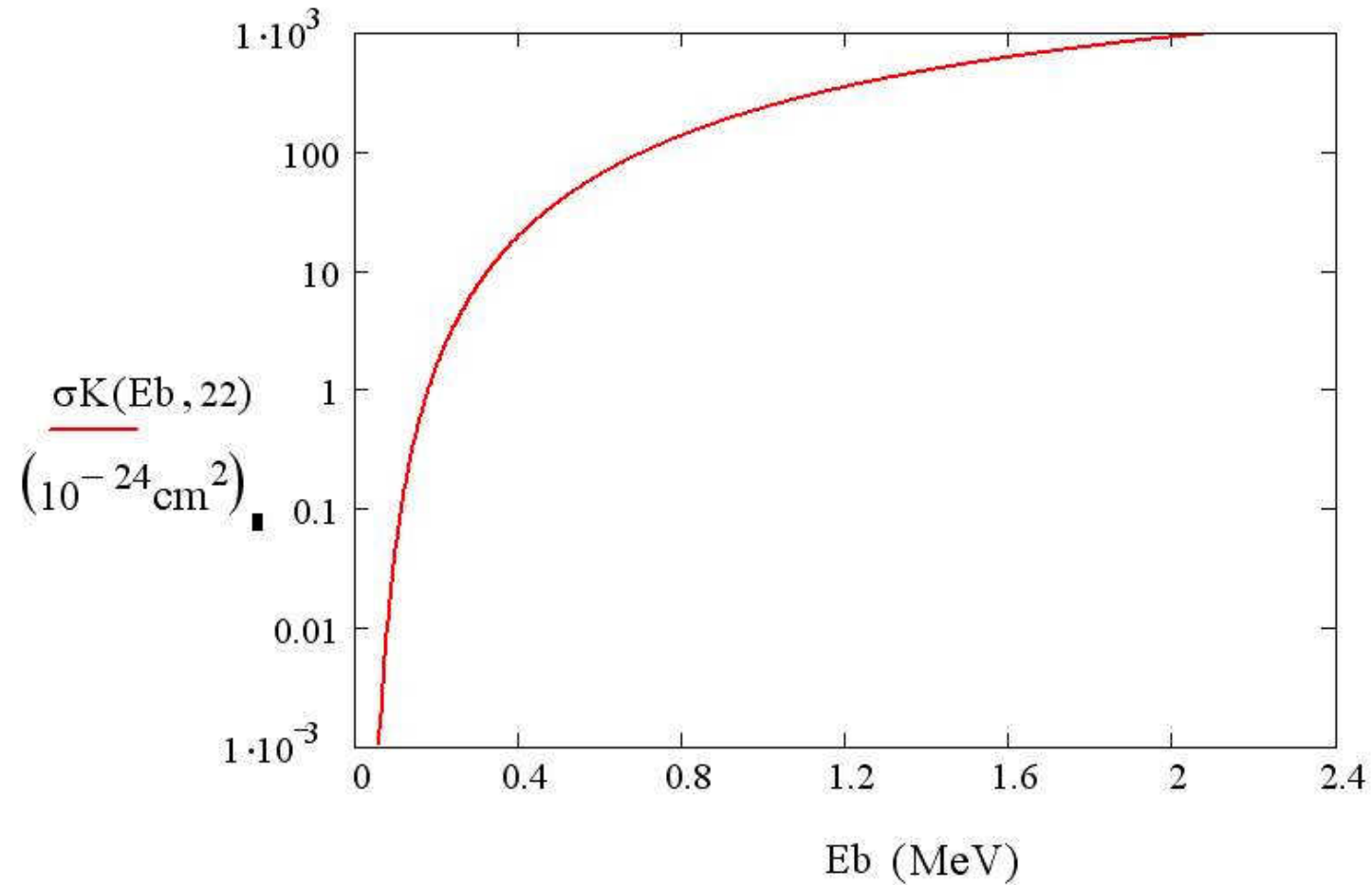
$\lambda = m_p/m_e = 1836.1514$

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

Coeficientes 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.

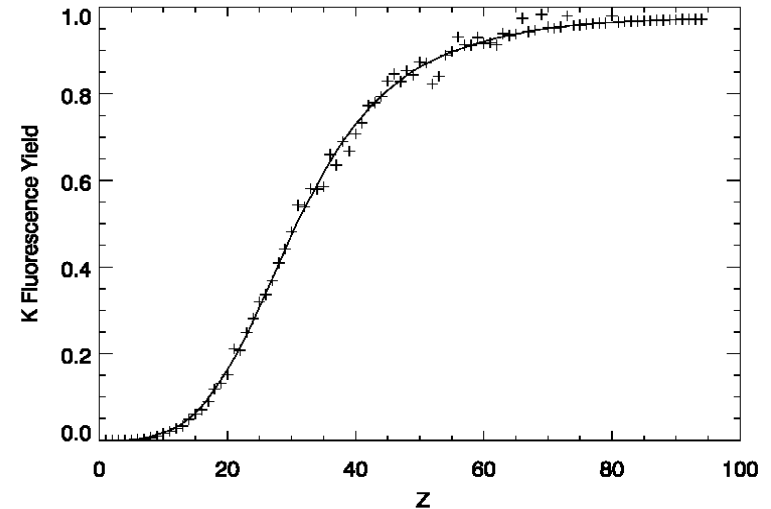


Seção de choque de produção de raios-X

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

ω rendimento fluorescente

k probabilidade da linha no grupo



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

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

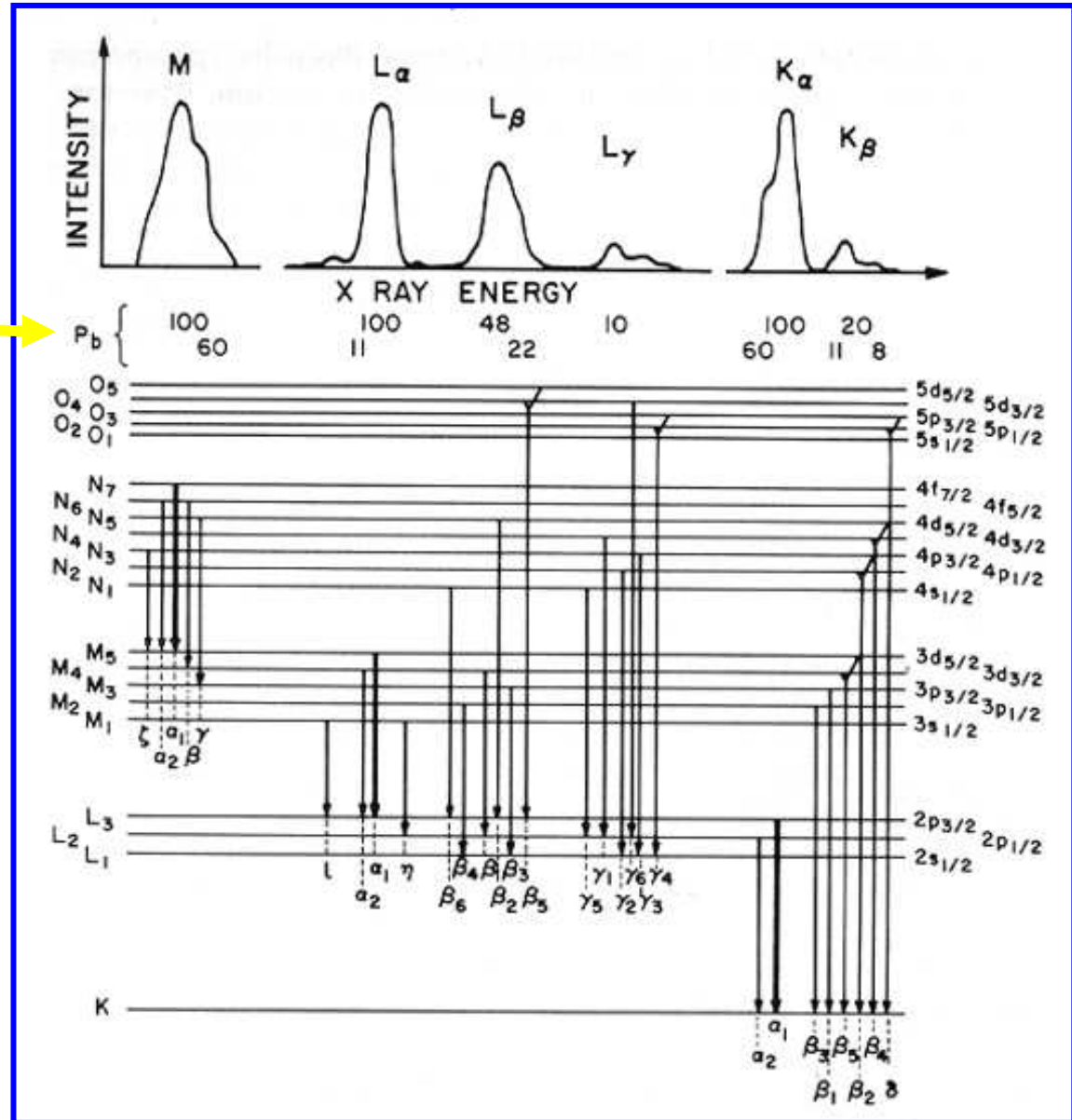
Coefficientes do polinômio para cálculo do rendimento fluorescente das camadas K e L.

| | 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

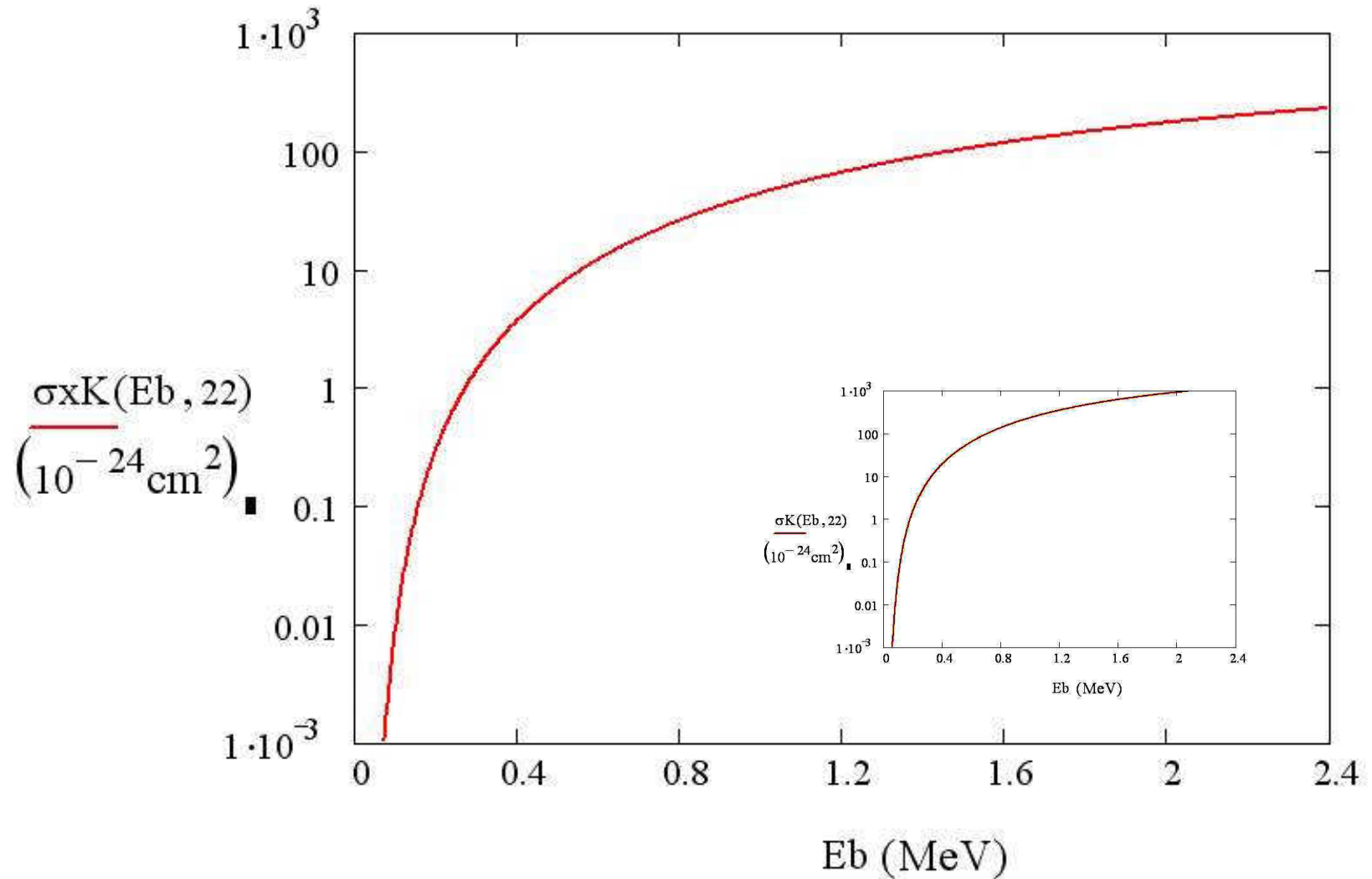
$$k_{K\alpha} = \frac{160}{199} = 0,80$$

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

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

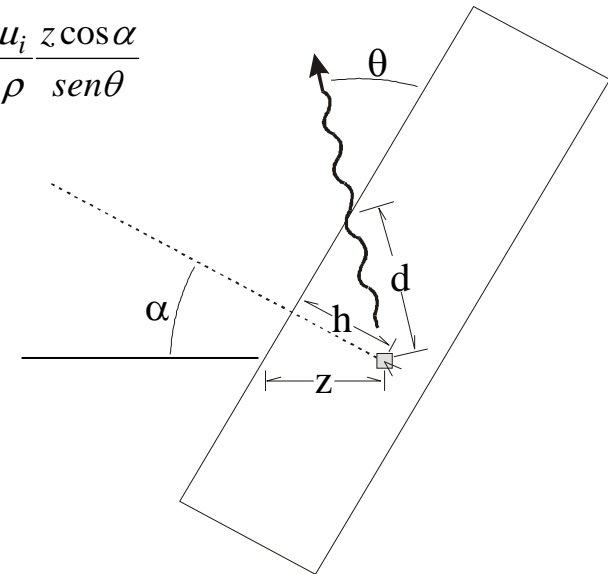
$$\varepsilon = 1$$

Prótons com 2,4 MeV

Incidência normal

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

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



Todos elementos são conhecidos exceto o termo de absorção:

Opção 1: Determinar μ_i usando XCOM.

Opção 2: Usar “utilities” do QXAS.

```

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 [keU]: 1 <= E <= 200

```

```

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 [keU]: 4.966
L-EDGES [keU]: 0.563 0.462 0.456
M-EDGES [keU]: 0.060 0.035 0.035
N-EDGES [keU]:
O-EDGES [keU]:
NATURAL EDGE WIDTHS:
K-EDGE [eU]: 0.940
L-EDGES [eU]: 2.340 0.240 0.220
FLUORESCENCE YIELDS:
K-EDGE : 0.214
L-EDGES : 0.000 0.002 0.002
COSTER-KRONIG YIELDS: 0.
MCMASTER LN-LN PARAMETER
K      L
0 1.435E+0001 1.311E+0
1 -1.663E+0000 -2.536E+0
2 -3.315E-0001 -9.572E-0
3 2.621E-0002 0.000E+0
Enter photon energy E (<

```

QXAS

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

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

```

c:\ AXIL.EXE
ELEMENT: Ti, ENERGY = 4.508 [keU]
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 keU < E < 200 keU):

```

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

QXAS

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

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

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

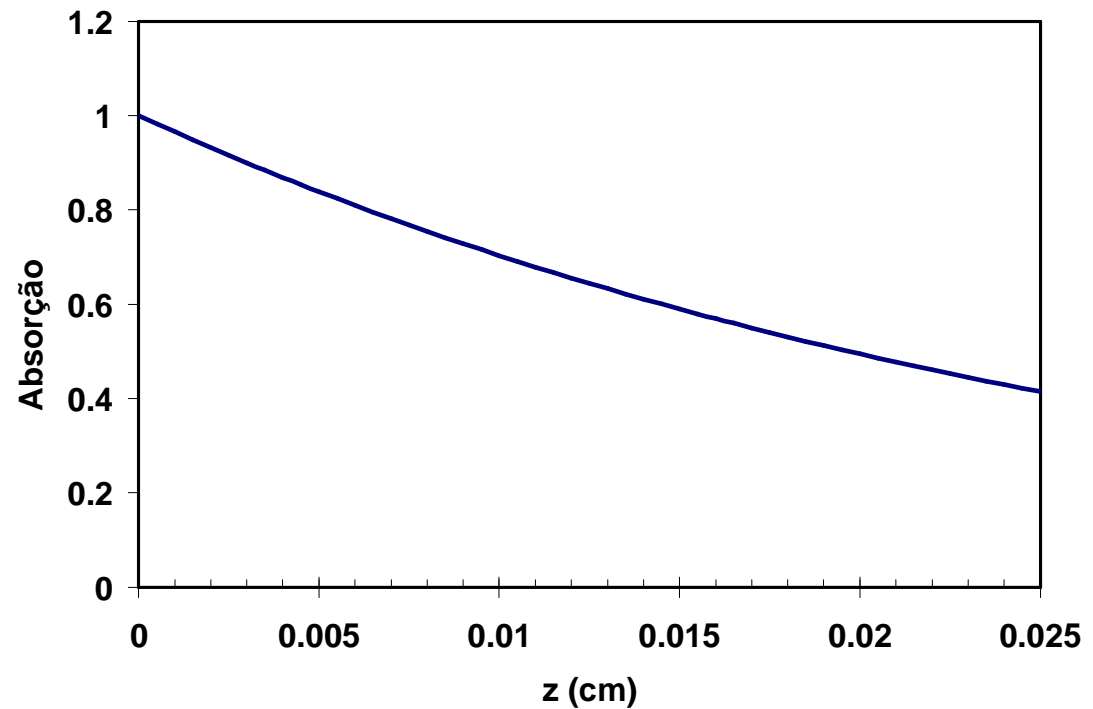
$$abs(z) = e^{-\left(\frac{112}{4,5}\right) \frac{z}{0,707}}$$

Incidência normal: $\alpha = 0$

Supondo detecção em 45°

$$\sin 45 = 0,707$$

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



Feixe de He com 9,6 MeV

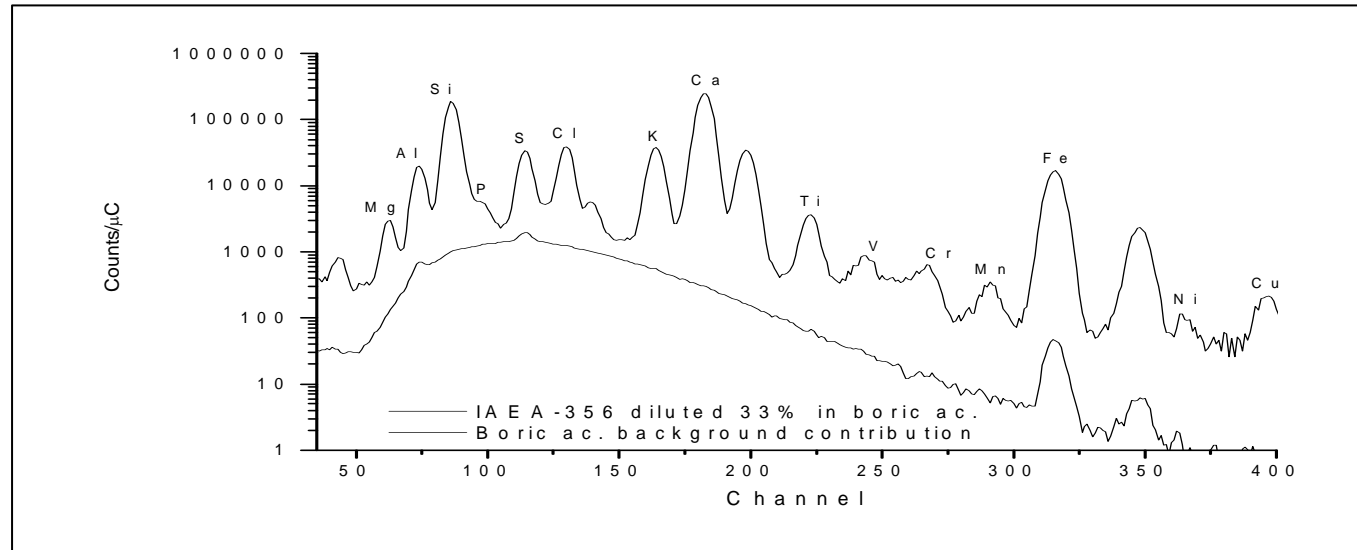
Lei de escalas (Teoria do encontro binário)

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

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

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

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 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.

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

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 gaussiana 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) : 0.000000
|*| Composition :
|*| element amount
|*| 0.000000
|*| 0.000000
+-----+
^ 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.
v
```

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      : 0
| Order of exponential polynomial : 4
|
| The higher order terms of the Exponential polynomial
| can be kept constant :
|   Number of constant terms :      0
|
| Parameter 1: 0.000000   Parameter 5: 0.000000
| Parameter 2: 0.000000   Parameter 6: 0.000000
| Parameter 3: 0.000000   Parameter 7: 0.000000
| Parameter 4: 0.000000   Parameter 8: 0.000000
|
| Initialize parameters automatically (y/n):  y
| Energy near background maximum (keV):    0.000000
```


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
$SCATTER:
  .0000  .0000
  .0000  .0000
  .0000  .0000  250
$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 } remover
$MEAS_TIM:      } brancos à
600             } direita
$DATA:
```

| | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|--|
| 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 “breaif” (note que tanto full como breaif 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 ħ   .5   | -141.4 ħ   .3   |
GAIN (eV/ch)        | 19.486 ħ  .100  | 19.486 ħ  .004  |
det NOISE (eV)      | 117.6 ħ   1.0   | 117.6 ħ   .2   |
FANO factor         | .028 ħ   .000   | .028 ħ   .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. ħ  812.    21.2
        83.563  121.37   3186.    4.33E-05
-----
2 Fe-K
  KA1    6.399   .87732   1709. ħ  42.     4.5
        335.635  132.94   39.     8.53E-01
  KB1    7.059   .12268   210. ħ  7.     3.6
        369.505  134.42   28.     8.89E-01
-----
3 Au-L1
  L1M3   11.610  .39333   9. ħ  9.     1.4
        603.051  144.21   7.     9.74E-01
  L1M2   11.205  .33863   3. ħ  4.     .7
        582.268  143.37   3.     9.71E-01
  L1N3   13.809   .11133   1. ħ  1.     .4
        715.899  148.71   7.     9.78E-01
  L1N2   13.710   .08815   0. ħ  0.     .3
        710.818  148.51   1.     9.79E-01
  L1O3   14.291   .03574   0. ħ  0.     .0
        740.634  149.67   0.     9.80E-01
  L1M5   12.147   .01704   0. ħ  1.     .4
        630.609  145.32   1.     9.70E-01
  L1M4   12.062   .01135   0. ħ  1.     .7
        626.247  145.14   2.     9.70E-01
  L1N5   14.020   .00272   2. ħ  2.     .0
        726.727  149.13   8.     9.79E-01
  L1N4   13.999   .00171   1. ħ  1.     .0
        725.649  149.09   1.     9.79E-01
-----
4 Au-L2
  L2M4   11.442   .78883   128. ħ  13.
        594.430  143.86   6.     9.73E-01
  L2N4   13.382   .16499   21. ħ  2.     .9
        693.986  147.84   1.     9.77E-01
  L2M1   10.308   .02136   3. ħ  2.     .4
        536.236  141.48   3.     9.63E-01
  L2N1   12.974   .00561   0. ħ  8.     .5
        673.049  147.02   2.     9.75E-01
  L2O4   13.730   .01730   2. ħ  0.     .3
        711.845  148.55   1.     9.79E-01
  L2O1   13.626   .00111   0. ħ  7.     .3
        706.508  148.34   5.     9.79E-01
  L2M3   10.992   .00080   0. ħ  0.     .2
        571.337  142.92   0.     9.69E-01
-----
5 Au-L3
  L3M5   9.716   .69912   475. ħ  23.
        505.856  140.22   8.     9.56E-01
  L3M4   9.628   .07941   38. ħ  3.     1.1
        501.340  140.03   8.     9.54E-01
  L3N5   11.585   .13995   66. ħ  4.     1.2
        601.768  144.16   7.     9.73E-01
  L3N4   11.567   .01555   7. ħ  3.     1.2
        600.845  144.12   7.     9.73E-01
  L3M1   8.494   .03843   18. ħ  4.     2.9
        443.146  137.58   12.    9.34E-01
  L3N1   11.160   .00983   5. ħ  2.     .5
        579.958  143.27   2.     9.70E-01
  L3O1   11.811   .00193   0. ħ  2.     1.1
        613.366  144.63   6.     9.75E-01
  L3O5   11.916   .01579   7. ħ  2.     .8
        618.755  144.84   4.     9.76E-01
-----
6 Au-M
  M1     2.120   .53159   8683. ħ  119.
        116.047  122.92   4762.   93.    3.2
  M2     2.200   .46841   4067. ħ  88.    3.9
        120.153  123.12   4735.   88.    2.82E-02
-----
7 GR01
  GR01   2.435   1.00000   1525. ħ  71.
        132.212  123.69   1525.   97.    10.4
        4400.    6.36E-02
-----
8 GR02
  GR02   2.766   1.00000   3433. ħ  79.
        149.198  124.49   3433.   98.    54.5
        3360.    1.47E-01
-----
9 Pile_up
  Pile_up 2.974   .95576   7847. ħ  103.
        159.872  124.99   7500.   111.   89.3
        3.644   .02535   2523.   199.   2.14E-01
        194.280  126.58   199.    27.    3.5
        4.253   .01004   745.    4.25E-01
        225.508  128.02   79.    18.    2.2
        3.922   .00445   336.    79.    5.84E-01
        208.522  127.24   35.    22.    1.4
        7.886   .00440   502.    35.    5.03E-01
        411.945  136.25   35.    4.     3.0
        19.     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 |

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

Final energy - keV: 25

Effective final energy

Effect final energy attenuation

| | |
|------------------------------|-----------|
| I/I ₀ - (%) | 1 |
| h - (cm) | 2.520E-03 |
| rho * t (g/cm ²) | t (cm) |
| Photon: 3.346E-03 | 2.609E-03 |
| Proton: 4.570E-03 | 3.564E-03 |

Integral step

Automatic Ptos: 100

Stopping Power model

Ziegler (1985)

Ionization cross-section model

Johanson and Johanson

Fluorescence yield model

Bambynek

Matrix composition

```

2      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/I ₀ | Integral | ... | Integral X |
|--------------|------|----------|----------|----------------------|------------------|----------|-----|------------|
| keV | (cm) | (cm) | (cm) | (g/cm ²) | % | (g) | ... | (g) |

Calc

Correction factor

Integral X / Sigma X: (g/cm²)

Log results

CLARA

The screenshot displays the 'Matrix composition' software interface, which is divided into two main sections: 'Main matrix' and 'Secondary matrix'.

Main matrix: The dropdown menu is set to 'Ác. bórico'. The table below lists the elements:

| | 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 |

Summary statistics for the Main matrix:

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

Secondary matrix: The dropdown menu is empty. The table below shows all values are zero:

| | 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 |

Summary statistics for the Secondary matrix:

| | | | |
|-------------------------------------|--------|---|--------|
| 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.