

# Estação de espectrometria e *software* para caracterização de materiais com feixes de íons

MÜLLER, M. V. W. W.<sup>1</sup>, PEZZI, R. P.<sup>2</sup>, KRUG C.<sup>3</sup>

1 Matheus Vicente Wrasse Wiebusch Müller, Engenharia Física, UFRGS

2 Rafael Peretti Pezzi

3. Cristiano Krug



## Estação de espectrometria

### INTRODUÇÃO

O uso de sistemas de aquisição de dados antiquados é um grande limitante para os usuários. A fins de criar um sistema de aquisição modernizado, foi desenvolvida uma estação de espectrometria portátil utilizando o Módulo Multicanal da CAEN N957.

### METODOLOGIA

Para tanto, foi criado um *software* que foi dividido em duas partes: Uma parte para a comunicação entre o módulo multicanal CAEN N957 com o computador, e outra para a comunicação do usuário com o computador. O *software* assim foi dividido, pois as bibliotecas de comunicação do módulo foram criadas na linguagem C, obrigando o uso desta linguagem para se comunicar com o módulo. Já uma linguagem mais prática para se criar uma interface gráfica com o usuário é *python*. Também foi criado um método para cálculo e acompanhamento das áreas de regiões de interesse, onde o usuário pode adicionar quantas regiões de interesse desejar, e para cada uma pode escolher os pontos inicial e final, que o programa atualiza na frequência de recursão a área contida entre os pontos (Figura 1).

### RESULTADOS E CONCLUSÕES

A estação de espectrometria foi testada em um experimento de *Proton Induced X-ray Emission* (PIXE) para o estudo de contaminação em Óxido de Estanho aerogel (Figura 2). A estação desenvolvida apresentou uma frequência de aquisição superior à montagem prévia. A estação ainda pode ser melhorada adicionando-se funcionalidades como o cálculo automático da reta de calibração do equipamento e o controle angular da amostra via interface do usuário.

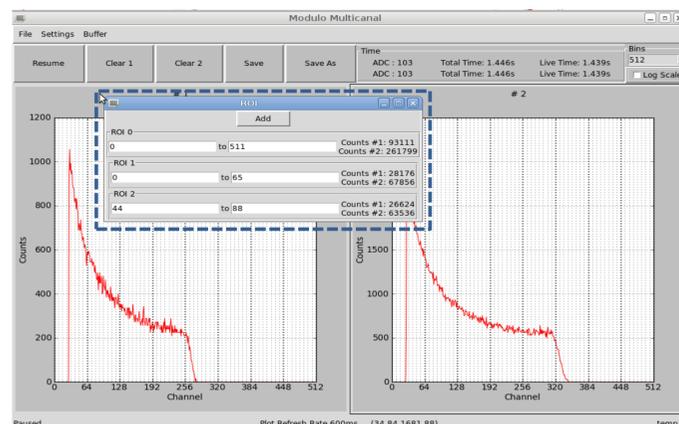


Figura 1. Interface gráfica da estação de espectrometria, realizando aquisição de dados para uma reta de calibração. Em destaque, o cálculo de áreas para regiões de interesse.

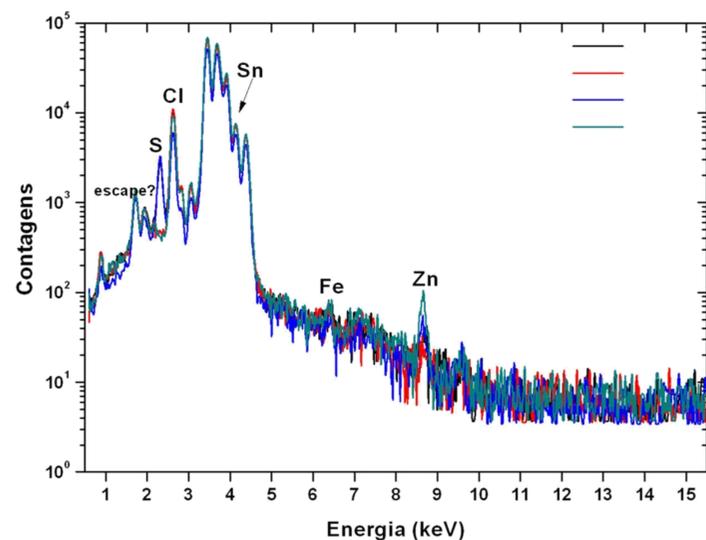


Figura 2. Experimento de PIXE para o estudo de contaminação em Óxido de Estanho aerogel, revelando a presença de cloro, enxofre e zinco.

## Open Flatus (*software* para caracterização de materiais com feixes de íons)

Dando continuidade ao trabalho realizado no período anterior, foram feitas modificações no *Open Flatus* (*software* de simulações computacionais utilizando modelos avançados de perda de energia dos íons na matéria).

Foram criadas, além de facilidades como controle de curvas no gráfico, duas classes; *spectro* e *profile*, representando o espectro de perda de energia e o perfil de concentração da amostra, respectivamente. Em destaque às modificações, foi criada uma ferramenta de cálculo de perda de energia para perfis com gradiente de concentração, utilizando-se de um método de monocamadas, podendo assim variar as constantes de perda de energia (*stopping power* e *straggling*) em função da profundidade da amostra (Figura 3).

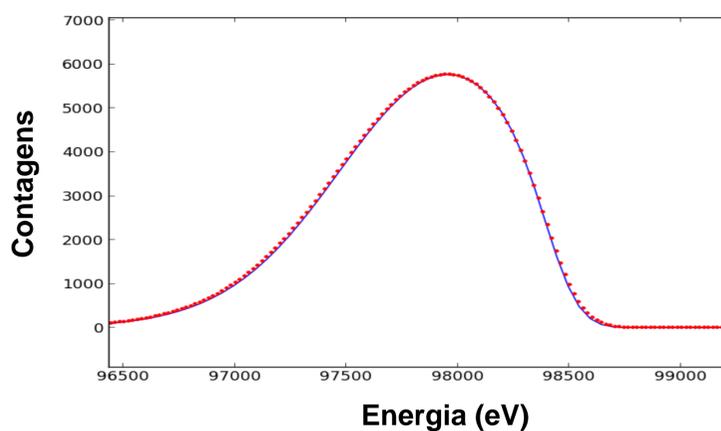


Figura 3. Demonstra a equivalência entre o método monocamadas e o método previamente utilizado, simulando a perda de energia de feixe de H<sup>+</sup> a 100KeV incidindo em filme homogêneo de 1nm de Hf com ângulo de espalhamento de 110°.

## REFERÊNCIAS

- R. P. Pezzi, P. L. Grande, M. Copela, G. Schiwietz, C. Krug, I. J. R. Baumvol - Advanced ion energy loss models: Applications to subnanometric resolution elemental depth profiling.
- R. P. Pezzi C. Krug, P. L. Grande, E. B. O. da Rosa, G. Schiwietz, I. J. R. Baumvol - Analytical energy loss distribution for accurate high resolution depth profiling using medium energy ion scattering
- P.L. Grande, A. Hentz, R.P. Pezzi, I.J.R. Baumvol, G. Schiwietz - An analytical energy-loss line shape for high depth resolution in ion-beam analysis



MODALIDADE  
DE BOLSA

PIBIC CNPq-UFRGS