



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

“JULIO DE MESQUITA FILHO”

Luiza Leite de Castro Meira

**VIABILIDADE DO CÓDIGO MCNPX PARA O
ESTUDO DA TÉCNICA DE FLUORESCÊNCIA DE
RAIOS-X POR REFLEXÃO TOTAL**

Botucatu

2013

Luiza Leite de Castro Meira

**Viabilidade do Código MCNPX para o Estudo da Técnica de
Fluorescência de Raios-X por Reflexão Total**

Trabalho de conclusão de curso apresentado
ao Instituto de Biociências, Universidade
Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”,
Campus de Botucatu, para obtenção do título
de Bacharel em Física Médica.

Orientador: Prof. Dr. Joel Mesa Hormaza

Botucatu

2013

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por estar sempre do meu lado me guiando e guardando.

À minha mãe, Luciana, por tudo. Tudo que fiz foi devido ao apoio dela.

A toda minha família que também sempre acreditou em mim. Principalmente ao meu pai, meus irmãos, meus avós e tios. Em especial meu avô Valmir e meu tio Ademar que sempre incentivaram meus estudos.

Ao Rodrigo, meu amigo e namorado pelo apoio e carinho.

A todos os meus amigos que torceram por mim desde meu ingresso na faculdade até hoje. Mas agradeço em especial àqueles que estiveram comigo durante os quatros anos mais importantes da minha vida, fizeram meus dias melhores e meus estudos mais prazerosos, meus colegas de classe e amigos: Deivid, Humberto, Guilherme, Lucas e Mariane.

Às minhas amigas da república Dayane, Larissa e Thaylane, por também fazerem essa caminhada mais feliz.

A todos os veteranos, mestrando e doutorandos do Departamento de Física e Biofísica que me ensinaram e ajudaram sempre que precisei. Ao Guilherme, Anna Flávia, mas principalmente à Letícia pela colaboração e paciência.

A todos os professores que foram essenciais a minha formação.

E agradeço ao meu orientador Joel Mesa, pela oportunidade e por tudo que me ensinou.

Resumo

A análise por fluorescência de raios-X (FRX) é uma importante técnica para a determinação qualitativa e quantitativa de componentes químicos numa amostra. Ela se fundamenta na medição da intensidade de radiação característica emitida pelos elementos da amostra, depois de serem adequadamente excitados. Uma das modalidades desta técnica é a Fluorescência de raios-X por reflexão total (TXRF). Na reflexão total de raios-X, o ângulo de refração do feixe incidente tende para zero e o feixe é refratado é tangente à interface de suporte da amostra. Assim, existe um ângulo de incidência mínima a que não existe feixe refratado e toda a radiação incidente sofre reflexão total. Como esta técnica é implementada em amostras muito pequenas, na forma de filme fino, efeitos como autoabsorção devem ser pouco relevantes. Neste estudo, analisou-se a viabilidade de utilização do código MCNPX (Monte Carlo N-Particle eXtended), para simular uma medida implementada pela técnica de TXRF. Foi verificada a qualidade de resposta de um sistema de espectroscopia por TXRF utilizando radiação síncrotron mediante o código MCNPX para uma configuração simples, mediante a recuperação das energias características e das concentrações dos elementos de uma amostra. Os passos de processamento dos dados, depois de obtidos os espectros de excitação, foram os mesmos de um experimento real e incluíram a obtenção da curva de sensibilidade do sistema simulado. Foi obtida uma concordância menor que 1% entre os valores simulados e teóricos de energias $K\alpha$ características para os diferentes elementos da amostra. A recuperação da concentração dos elementos da amostra teve erros relativamente altos (entre 6 e 60%) devidos a falta de conhecimento em relação a parâmetros físicos da amostra realísticos, como a densidade. Neste sentido, isso não inviabiliza o emprego do código MCNPX para este tipo de aplicação.

Palavras chave: TXRF. Monte Carlo. MCNPX. Radiação síncrotron.

Abstract

The X-ray fluorescence analysis (XRF) is an important technique for the qualitative and quantitative determination of chemical components in a sample. It is based on measurement of the intensity of the emitted characteristic radiation by the elements of the sample, after being properly excited. One of the modalities of this technique is the total reflection x-ray fluorescence (TXRF). In TXRF, the angle of refraction of the incident beam tends to zero and the refracted beam is tangent to the sample-support interface. Thus, there is a minimum angle of incidence that there is no refracted beam and all the incident radiation undergoes total reflection. As it is implemented in very small samples, in a film format, self-absorption effects should not very relevant. In this study, we evaluated the feasibility of using code MCNPX (Monte Carlo N - Particle eXtended), to simulate a measure implemented by the TXRF technique. In this way, it was verified the quality of response of a system by TXRF spectroscopy using synchrotron radiation as excitation beam for a simple setup, by retrieving the characteristic energies and the concentrations of the elements in the sample. The steps of data processing, after obtaining the excitation spectra, were the same as in a real experiment and included the obtaining of the sensitivity curve for the simulated system. The agreement between the theoretical and simulated values of Ka characteristic energies for different elements was lower than 1 % .The obtained concentration of the elements of the sample had high relatively errors (between 6 and 60 %) due mainly to lack of knowing about some realistic physical parameters of the sample , such as density . In this way, this result does not preclude the use of MCNPX code for this type of application.

Key words: TXRF. Monte Carlo. MCNPX. Synchrotron radiation.

Lista de Figuras

Figura 1: Ilustração dos processos básicos da XRF (SERPA, 2007).....	1
Figura 2: Representação esquemática do efeito Auger (NASCIMENTO-FILHO, 1999).....	5
Figura 3: Emissão dos raios-X característicos e transições eletrônicas dos níveis atômicos.	6
Figura 4: Geometria de excitação-detecção da TXRF, com linhas contínuas representando os raios-X incidentes e espalhados, e os tracejados representando os raios-X característicos.....	9
Figura 5: Arranjo experimental.....	11
Figura 6: a) Área irradiada, superfície da fonte (1 mm) e altura igual a Δh . b) A irradiação da amostra inicia em $y=D_1$ e vai até a $y=D_2$, com altura $\Delta h=h_2 - h_1$	12
Figura 7: Espectro da radiação síncrotron.	15
Figura 8: Curva de sensibilidade do sistema.....	17
Figura 9: Espectro de fluorescência simulado.	18

Lista de Tabelas

Tabela 1: Concentração dos elementos da amostra padrão (mg/g).....	14
Tabela 2: Concentração dos elementos da amostra a ser analisada.	14
Tabela 3: Energias (keV) dos fótons de fluorescência dos elementos componentes da amostra analisada.....	16
Tabela 4: Sensibilidade dos elementos constituintes da amostra padrão.....	17
Tabela 5: Comparativo das energias teóricas e simuladas de $K\alpha$, probabilidade de incidência e sensibilidade dos elementos constituintes da amostra analisada.	19
Tabela 6: Comparativo das concentrações reais e calculadas dos elementos constituintes da amostra analisada.	19

Sumário

1. Introdução	1
1.1. Simulação por Monte Carlo	3
1.1.1. MCNPX	3
2. Objetivo.....	5
3. Fundamentos Teóricos	5
3.1. TXRF.....	7
3.2. Análise Quali-quantitativa.....	9
4. Metodologia	11
4.1. Arranjo experimental.....	11
4.2. Arquivo de entrada INP.....	12
4.3. Procedimento.....	13
5. Resultados e Discussões	15
5.1. Curva de Sensibilidade.....	16
5.2. Determinação da concentração de elementos.....	18
6. Conclusão.....	20
7. Referências.....	21

1. Introdução

A espectroscopia por Fluorescência de Raios-X (XRF, *X-Ray Fluorescence*) é uma técnica de análise quali-quantitativa da composição química de amostras baseada na medida das intensidades dos raios-X característicos emitidos pelos elementos químicos componentes da amostra, quando devidamente excitada (Figura 1). A excitação pode ser feita de várias maneiras: excitação por partículas aceleradas como elétrons, prótons ou íons, partículas alfa, beta ou raios gama emitidos por radionuclídeos, ou raios-X, processo mais utilizado. Após excitação da amostra, os elementos emitem linhas espectrais com suas energias características e cujas intensidades estão relacionadas com sua concentração na amostra (NASCIMENTO-FILHO, 1999).

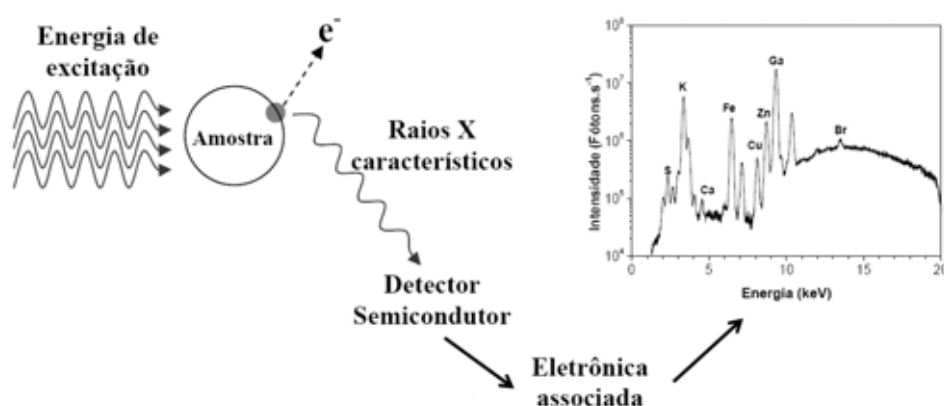


Figura 1: Ilustração dos processos básicos da XRF (SERPA, 2007).

A XRF é uma técnica analítica multielementar bastante difundida e com aplicações em várias áreas da ciência e tecnologia. A análise multielementar é uma ferramenta poderosa em estudos de tecidos biológicos, pois é possível correlacionar as concentrações de certos elementos a determinadas doenças. O método de XRF é vantajoso, pois se trata de uma técnica não destrutiva que possibilita a análise multielementar em uma única medida e permite uma avaliação quantitativa da composição química de vários tipos de amostras biológicas (KUBALA-KUKUS *et al*, 1999,2007; CHWIEJ *et al*, 2005; LEITÃO, 2009).

Até 1966, a XRF era realizada unicamente por espectrômetros por dispersão por comprimento de onda (WD-XRF, *Wavelength Dispersive X-ray Fluorescence*). Neste método, os

raios-X característicos são selecionados por um cristal difrator de acordo com seus comprimentos de onda, obedecendo a lei de Bragg da difração. O surgimento da fluorescência de raios-X por dispersão de energia (ED-XRF, *Energy Dispersive X-ray Fluorescence*) foi possível graças ao desenvolvimento do detector semicondutor de Si(Li), capaz de discriminar raios-X de energias próximas.

A fluorescência de raios-X por reflexão total (TXRF, *Total Reflection X-ray Fluorescence*), uma variante da ED-XRF, vem sendo bastante desenvolvida e tem sido aplicada principalmente na análise de elementos traços (na faixa de ppb) em amostras líquidas (da ordem de microlitros).

No intuito de se produzir reflexão total, a TXRF utiliza para irradiação um ângulo de incidência muito rasante à superfície da amostra a ser analisada. A reflexão se dá na interface do ar com a amostra e desta com o material refletor posicionado como suporte para amostra. Devido à pequena espessura utilizada para as amostras há pouca interação da radiação com o material da amostra, com isso o espalhamento da radiação incidente será diminuído e o limite de detecção será melhor.

Em análises com as técnicas ED-XRF e WD-XRF há interação entre os elementos das amostras, sendo necessários métodos para correção do efeito de matriz, como absorção e reforço (*enhancement*) dos raios-X característicos. Estes efeitos não ocorrem na TXRF, pois são utilizadas quantidades muito pequenas das amostras depositadas em um suporte, de modo a formar um filme fino. Dessa forma, não há necessidade de correção para o efeito matriz, podendo-se utilizar nas análises quantitativas uma regressão linear simples entre as intensidades dos raios-X e as concentrações dos elementos presentes nas amostras.

Entre as vantagens da fluorescência de raios-X para a análise química de elementos pode-se citar: (a) adaptabilidade para automação, (b) análise rápida multielementar, muito importante devido a interdependência entre os micronutrientes nos sistemas biológicos, (c) preparação simplificada da amostra e (d) limite de detectabilidade dentro do exigido por muitas amostras biológicas (NASCIMENTO-FILHO, 1999).

1.1. Simulação por Monte Carlo

O método de Monte Carlo é uma solução numérica para problemas que modelam objetos interagindo com outros objetos, ou seu ambiente, com base simples objeto-objeto ou relação ambiente-objeto. Ele representa uma tentativa de modelar a natureza através de simulação direta das dinâmicas essenciais do sistema em questão. Neste sentido, o método de Monte Carlo é essencialmente simples em sua abordagem de uma solução para um sistema macroscópico através da simulação de suas interações microscópicas (X-5 MCT, 2003).

1.1.1. MCNPX

MCNPX (*Monte Carlo N-Particle eXtended*) é um código de propósito geral que pode ser usado para transporte de nêutrons, fótons, elétrons, ou transporte de fóton / elétron / nêutrons acoplados. Ele fornece definição de fonte e a configuração geométrica muito prática e versátil, e numerosas e flexíveis respostas, permitindo os cálculos mais precisos de transporte de radiação para vários problemas, incluindo radioterapia e problemas de imagem. Este código simula os processos físicos, bombardeando um grande número (por exemplo, bilhões) de partículas de origem aleatória em relação ao fantoma e marcando os resultados (*tally*) seguindo cada partícula de interesse. Normalmente, são permitidos erros estatísticos menores que 5% para resultados razoáveis e, por vezes, para atingir o nível aceitável iria custar muito tempo de execução do computador (X-5 MCT, 2003; BELMONTE, 2005).

Os dados referentes a cada simulação devem ser introduzidos em um arquivo de entrada chamado INP. Neste arquivo estão todas as informações necessárias ao programa para a simulação do problema, como o tipo de fonte, as configurações geométricas, a composição da amostra, as propriedades físicas do meio e a quantidade de partículas a serem simuladas. Também é possível escolher o tipo de resposta desejado.

O arquivo de entrada é dividido em blocos. Cada bloco é composto por linhas de comando denominadas *cards*, onde serão descritos os dados da simulação. Um \$ finaliza a entrada de dados de uma linha. Linhas em branco são usadas como delimitadoras e as entradas de dados são separadas por um ou mais espaços. Abaixo são indicados os blocos e suas informações. O anexo I ilustra um arquivo de entrada com seus respectivos blocos.

Bloco de células: O número da célula é o primeiro registro e deve começar nas primeiras cinco colunas. A próxima entrada é o número do material da célula, que é arbitrariamente estabelecido pelo utilizador. O material é descrito em um bloco de materiais que tem o mesmo número do material. Se a célula é vazia, um zero é inserido para o número do material. O número da célula e do material não pode exceder 5 dígitos cada. Em seguida está a densidade do material da célula. A entrada positiva é interpretada como densidade atômica em 10^{24} átomos/cm³. A entrada negativa é interpretada como densidade de massa em unidade de g/cm³. Nenhuma densidade é introduzida para uma célula vazia. Uma especificação completa da geometria da célula vem em seguida. Esta especificação inclui uma lista de superfícies delimitadoras das células em que o sinal denota o sentido de regiões definidas pelas superfícies. As regiões são combinadas com união e intersecção de operadores Boleanos.

Bloco de superfícies: O número da superfície é a primeira entrada. A primeira entrada é em alfabeto mnemônico indicando o tipo de superfície. A seguir estão os coeficientes numéricos da equação da superfície na ordem adequada. Os tipos de superfície, equações e a ordem dos registros no bloco são apresentados no Anexo II.

Bloco de dados: Contém os cartões de descrição da fonte, dos materiais e das respostas esperadas.

Linha SDEF: definição da fonte. Esta linha de comando indica em qual superfície a fonte será alocada, qual energia utilizada, o ângulo de espalhamento do feixe, o vetor de superfície de acordo com os eixos utilizados para a construção da geometria, a posição da fonte e o tipo de partícula que a fonte produzirá.

Descrição dos materiais: neste *card* estão as informações da composição elementar da amostra. A primeira linha inicia com o nome do material, seguido do número atômico do primeiro elemento componente, seguido de sua densidade e proporção na amostra.

Cartão de respostas: o primeiro *card* desse bloco define qual será a grandeza de interesse, a partícula de interesse e a célula relativa à interação desejada (X-5 MCT, 2003; BELMONTE, 2005). O anexo III apresenta uma tabela com opções de grandezas de respostas oferecidas pelo MCNPX, bem como suas unidades e comandos de entrada.

No final do arquivo de entrada INP, o parâmetro NPS indica o número de histórias (eventos) que se deseja simular.

2. Objetivo

Este trabalho tem como objetivo avaliar a capacidade do código MCNPX em simular o fenômeno da fluorescência de raios-X por reflexão total. Será verificada a qualidade de resposta de um sistema de espectroscopia por TXRF utilizando radiação síncrotron através do método de Monte Carlo com o código MCNPX para uma configuração simples, mediante a recuperação das concentrações dos elementos de uma amostra através da curva de sensibilidade do sistema simulado.

3. Fundamentos Teóricos

Uma vez que a amostra é excitada, o campo eletromagnético da radiação interage com os elétrons dos átomos do material no qual ele incide. Dependendo do elemento absorvedor e da energia do fóton incidente, o fóton pode ser absorvido ou espalhado por diferentes processos, entre eles, o efeito Compton, o efeito fotoelétrico e a geração de pares elétron-pósitron.

Quando há absorção do fóton por níveis internos, o átomo fica em um estado excitado e tendem a ejetar elétrons. Consequentemente, os elétrons dos níveis mais afastados realizam um salto quântico para preencher a vacância causada. Há dois processos de decaimento que seguem a criação da vacância: a emissão de fótons fluorescentes e de elétrons Auger (Figura 2) (MANICA, 2006; LEITÃO, 2009).

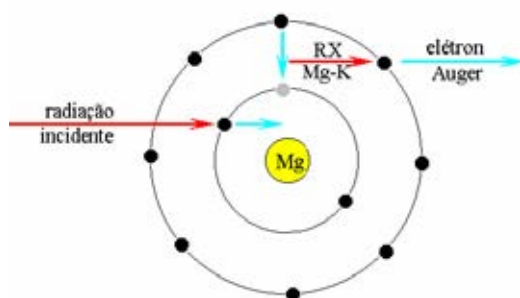


Figura 2: Representação esquemática do efeito Auger (NASCIMENTO-FILHO, 1999).

As emissões de fótons de fluorescência e elétrons Auger são processos de decaimento concorrentes e a predominância de um ou outro depende basicamente do número atômico do

elemento analisado na amostra. O efeito Auger é mais comum em elementos com baixo número atômico ($Z < 20$) porque os elétrons estão mais fracamente ligados e os fótons característicos são mais facilmente absorvidos. A emissão de elétrons Auger é a principal limitação na sensibilidade de experimentos com elementos com baixo número atômico (OLIVEIRA, 2000; LEITÃO, 2009).

Para a produção de raios-X característicos é necessário retirar elétrons das camadas mais internas do átomo. Para que isso ocorra, a energia mínima de excitação deve ser superior a energia de ligação do elétron nessa camada. Essa energia é denominada energia de ligação eletrônica ou corte de absorção.

Durante essa transição eletrônica há perda de energia do elétron, sendo essa emitida na forma de um fóton de raios-X de energia característica e própria de cada elemento (Figura 3). Assim, a análise por fluorescência de raios-X consiste de três fases: excitação dos elementos que constituem a amostra, dispersão dos raios-X característicos emitidos pela amostra e detecção desses raios-X (NASCIMENTO-FILHO, 1999).

Os raios-X emitidos por um elemento são reunidos sob a denominação $K\alpha$ e $K\beta$ devido às transições L-K e M-K, respectivamente, e os raios-X devido à transição M-L e N-L são denominados de $L\alpha$ e $L\beta$, etc, como representado na figura 3 (LEITÃO, 2009).

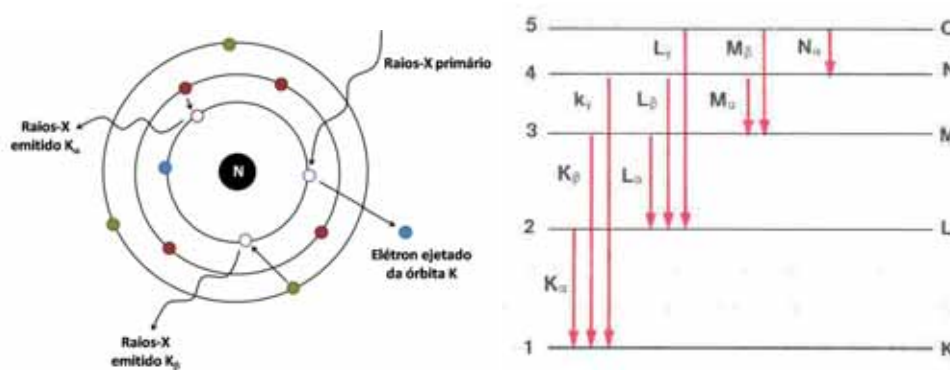


Figura 3: Emissão dos raios-X característicos e transições eletrônicas dos níveis atômicos.

A partir da teoria de Bohr para o átomo de hidrogênio e das considerações de Moseley, pode-se calcular a energia de ligação aproximada dos elétrons dos níveis K e L, dos átomos de um elemento através da seguinte equação:

$$E = \frac{m e^4 (Z - b)^2}{8 \varepsilon_0^2 h^2 n^2} \quad (1)$$

onde E é a energia de ligação do elétron no nível, medida em J; m é a massa de repouso do elétron ($m = 9,11 \times 10^{-31}$ kg); e é o valor absoluto da carga elétrica do elétron ($e = 1,60 \times 10^{-19}$ C); Z é o número atômico do átomo; b é a constante de Moseley, $b=1$ (nível K) ou $b= 7,4$ (nível L); ϵ_0 é a permissividade elétrica no vácuo ($\epsilon_0 = 8,8534 \times 10^{-12}$ C.N⁻¹.m⁻²); h é a constante de planck ($h = 6,625 \times 10^{-34}$ J.s) e n é o número quântico principal do nível eletrônico.

Assim, considerando o mesmo salto quântico, a energia dos raios-X é proporcional ao quadrado do número atômico do elemento. A energia dos raios-X característicos pode ser calculada por:

$$E_x = E_{ni} - E_{nf} \quad (2)$$

onde, E_x é a energia dos raios-X característicos, E_{ni} energia dos elétrons no nível inicial e E_{nf} energia dos elétrons no nível final (NASCIMENTO-FILHO, 1999).

A emissão dos raios-X característicos dos elementos que constituem uma amostra pode ser obtida através da excitação por partículas carregadas e radiação eletromagnética. Os raios-X podem ser gerados em tubos e através da radiação síncrotron.

A radiação síncrotron é a radiação eletromagnética emitida por partículas carregadas aceleradas em direção ao centro de uma órbita circular. Estas partículas, ao mudarem sua direção através da ação de dipolos magnéticos, emitem uma intensa radiação eletromagnética, de alto brilho espectral, denominada radiação síncrotron.

A radiação síncrotron combinada com a técnica de TXRF proporcionou um aumento de 8-12 vezes no brilho do feixe de elétron comparando-se com tubos de raios-X convencionais, além de reduzir o limite de detecção da TXRF (INJUK, GRIEKEN, 2003; SERPA, 2007).

3.1. TXRF

Quando um feixe de radiação monoenergética passa de um meio para um material podem ocorrer dois processos: refração e/ou reflexão. A ocorrência de um ou outro processo dependerá da energia da radiação incidente (E), da densidade eletrônica do material (ρ) e do ângulo de incidência da radiação.

Desse modo, há um ângulo, denominado ângulo crítico ϕ_{crit} , dado pela lei de Snell, em que a radiação não é refratada e tampouco refletida, permanecendo no plano da interface:

$$\phi_{\text{crit}} = \frac{1,65}{E} \sqrt{\frac{\rho Z}{A}} \quad (3)$$

onde E é dado em keV, ρ em g/cm³ e ϕ_{crit} em graus.

Se o ângulo de incidência do feixe for menor que o ângulo crítico, o feixe será totalmente refletido, não adentrando no suporte e, portanto não sofrerá espalhamento pelos efeitos Rayleigh ou Compton. O efeito de reflexão total é aplicado para minimizar a intensidade da radiação de fundo e intensificar o sinal de fluorescência.

Além disso, outra característica marcante da TXRF é a distância pequena entre a amostra e o detector, de apenas alguns milímetros, resultando em ângulo sólido grande, obtendo dessa forma, a detecção eficiente do sinal de fluorescência proveniente da amostra. A fluorescência é detectada por detectores de estado sólido posicionados sob a amostra.

Podemos destacar então que a principal diferença entre a ED-XRF e a TXRF consiste na geometria de excitação utilizada. Na ED-XRF a radiação é espalhada na amostra, resultando em um aumento contínuo no espectro da radiação característica detectada. Na TXRF, por utilizar-se um feixe rasante, não há espalhamento na amostra, reduzindo assim a radiação de fundo, e, conseqüentemente melhorando os limites de detecção.

A espessura da amostra é outra característica importante na TXRF. Ela é considerada como um filme fino (da ordem de < 10 µl de amostras líquidas e evaporadas ou < 10µg de amostras sólidas) o que permite desprezar os efeitos da absorção e reforço (presentes na XRF), simplificando, dessa forma, o cálculo da concentração elementar.

Pode-se afirmar que na TXRF o feixe incidente não interage com o suporte, mas atravessa todo o filme fino formado pela deposição da amostra, tanto no sentido da incidência quanto na emergência (Figura 4) e com isto há grande probabilidade de excitar os átomos que compõe a amostra.

Os suportes devem ser livres de impurezas, quimicamente inertes, não devem produzir pico fluorescente na região do espectro considerado e devem refletir totalmente os raios incidentes. (KLOCKEMKAMPER *et al.*, 1996; MOTA, 2008).

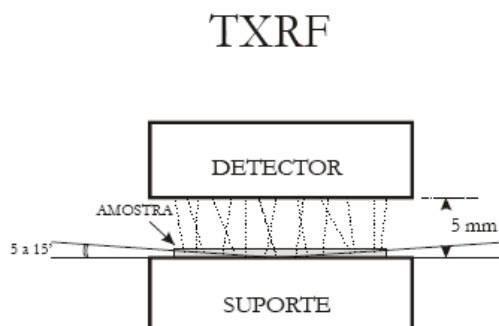


Figura 4: Geometria de excitação-deteção da TXRF, com linhas contínuas representando os raios-X incidentes e espalhados, e os tracejados representando os raios-X característicos.

Dois parâmetros são importantes quando ocorre reflexão total: o coeficiente de reflexão total (R), que é aproximadamente 100% para ângulos de incidência menores do que o ângulo crítico e poder de penetração (Z_p), que para ângulos menores do que o ângulo crítico é da ordem de 10^{-9} m.

Resumidamente, a técnica de TRXF possui as seguintes vantagens (NASCIMENTO-FILHO, 1999; LEITÃO, 2009):

- Redução da radiação de fundo;
- Dupla excitação da amostra por ambos os feixes primário e refletido;
- Pequena distância amostra-detector;
- Pequenos volumes da amostra;
- Limites de detecção em nível picograma.

3.2. Análise Quali-quantitativa

Sendo a amostra considerada um filme fino e desprezando os efeitos de absorção, a concentração elementar é determinada através de uma relação entre a intensidade da radiação fluorescente de um determinado elemento i , a sensibilidade do sistema de espectrometria para este elemento, o coeficiente de reflexão do refletor e a transmissão da radiação no ar é dado através da equação:

$$I_i(\alpha) = K \cdot I_0 \cdot S_i \cdot W_i \cdot [1 + R(\alpha)] \cdot T_{ar} \quad (4)$$

onde K é uma constante que depende apenas de fatores geométricos; I_0 é a intensidade da radiação incidente; S_i é a sensibilidade para o elemento i na amostra; W_i é a concentração do elemento i ; T_{ar} é a absorção da radiação no ar para o feixe incidente e o feixe de radiação fluorescente, $R(\alpha)$ é o coeficiente de reflexão do material utilizado como refletor para a energia da radiação incidente e α é o ângulo de incidência da radiação.

Na TXRF, em geral, a quantificação é realizada através do método da adição do padrão interno. Este método é baseado na adição de um elemento que a amostra não apresente. A função do padrão interno é eliminar o efeito de geometria porque o filme fino formado sobre o suporte não possui geometria regular e as intensidade dos raios-X dependem da posição do filme fino. Este efeito de geometria pode ser corrigido normalizando-se cada linha elementar de raios-X pelo padrão interno adicionado em todas as amostras e padrões (KLOCKEMKAMPER *et al.*, 1996; SERPA, 2007). Desta forma, a equação 4 pode ser escrita da seguinte forma em relação a um padrão com intensidade I_s .

$$\frac{I_i}{I_p} = \frac{K \cdot I_0 \cdot S_i \cdot W_i [1 + R(\alpha)] \cdot T_{ar}}{K \cdot I_0 \cdot S_p \cdot W_p [1 + R(\alpha)] \cdot T_{ar}} \quad (5)$$

onde: I_i e W_i são a intensidade da radiação fluorescente e a concentração do elemento i na amostra; I_p e W_p a intensidade da radiação fluorescente e a concentração do padrão interno na amostra; S_i e S_p são as sensibilidades para o elemento i e para o padrão interno, logo:

$$\frac{I_i}{I_p} \cdot W_p = \frac{S_i}{S_p} \cdot W_i \quad (6)$$

A equação 6 pode ainda ser escrita como:

$$I_{r,i} = S_{r,i} \cdot W_i \quad (7)$$

onde: $I_{r,i}$ é chamado de intensidade relativa $\left(\frac{I_i}{I_p} \cdot W_p\right)$ e $S_{r,i}$ sua sensibilidade relativa $\left(\frac{S_i}{S_p}\right)$.

É válido acrescentar a existência de uma correlação matemática entre a sensibilidade elementar e o número atômico dos elementos. A partir das sensibilidades elementares obtidas através da solução padrão multielementar pode-se estimar a sensibilidade para um elemento detectado na amostra não contido na solução padrão e consequentemente estimar a sua concentração na amostra de interesse (LEITÃO, 2009).

4. Metodologia

A fim de se obter a concentração dos elementos de uma amostra utilizando o código MCNPX, apresentam-se abaixo os procedimentos adotados.

4.1. Arranjo experimental

O arranjo experimental foi construído com base nos experimentos reais de TXRF (Figura 5). Em todas as simulações realizadas a amostra possui uma espessura de 5 nm e 0,5 cm de raio, a fim de simular a fluorescência em filmes finos.

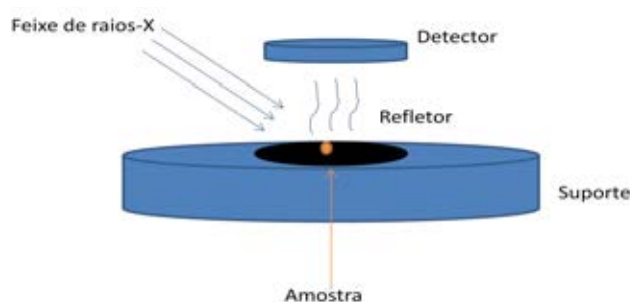


Figura 5: Arranjo experimental

Para composição das amostras (não necessariamente reais) foram escolhidos elementos que apresentam picos de fluorescência $K\alpha$ distribuídos ao longo do espectro da radiação síncrotron utilizado. Para suporte da amostra o refletor utilizado é constituído por quartzo e possui um raio de 2,5 cm e espessura de 0,3 cm.

Para excitação da amostra utilizou-se uma fonte de radiação síncrotron de 16,5 keV posicionada a um ângulo onde toda a radiação incida no centro da amostra e seja totalmente refletida, ou seja, foi utilizado o ângulo crítico do material refletor. Através da equação 3 obteve-se o valor do ângulo crítico igual a $0,111724939^\circ$.

O detector foi posicionado a 90° do plano da amostra, a 1 cm de distância do centro da amostra e suas dimensões são de 1,4 cm de largura e 1 mm de espessura.

4.2. Arquivo de entrada INP

O anexo I traz um exemplo de arquivo de entrada do programa.

Para a construção da amostra, foi criado um cilindro paralelo ao eixo Z com raio igual a 0,5 cm, centro em $x = 0$ e $y = 3$. Esse cilindro foi limitado por dois planos cortando perpendicularmente o eixo Z, o inferior em $z = 0$ e o superior em $z = 5 \times 10^{-7}$ com a parte interna do cilindro entre os dois planos criou-se a célula referente à amostra.

Assim como para a amostra, para o refletor criou-se um cilindro paralelo a Z com centro em $x = 0$ e $y = 3$, porém com raio igual a 2,5 cm, planos limitantes em $z = 0$ para o superior e $z = -0,3$ para o inferior.

Para a entrada da fonte, foi criado um plano perpendicular a Y em $y = 0$. A janela criada nesse plano tem uma largura igual a 1 mm. Os pontos em Z que definiram sua altura, foram calculados de forma que um feixe paralelo incidente, a partir desse plano com ângulo de incidência igual ao ângulo crítico, irradiasse a amostra de $y=2,75$ até $y=3,25$, garantindo assim que toda radiação emitida incidisse sobre a amostra. As figuras 6 e 7 ilustram a geometria utilizada:

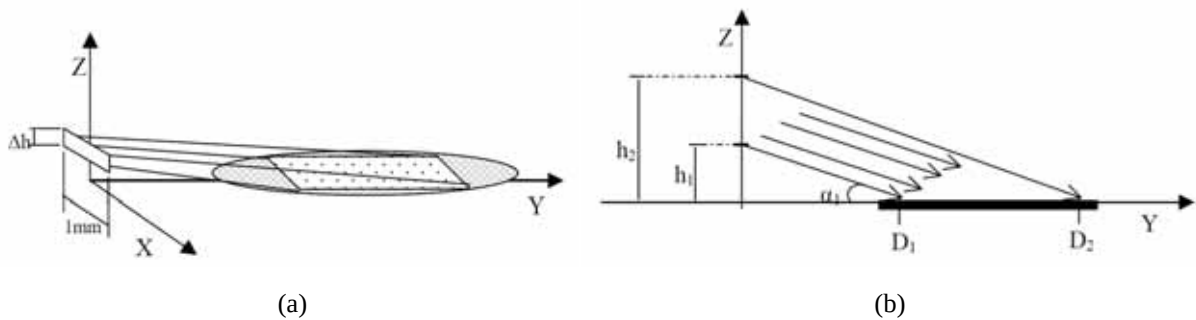


Figura 6: a) Área irradiada, superfície da fonte (1 mm) e altura igual a Δh . b) A irradiação da amostra inicia em $y=D_1$ e vai até a $y=D_2$, com altura $\Delta h=h_2 - h_1$ (BELMONTE, 2005).

$$h_1 = D_1 \operatorname{tg} \alpha_1$$

$$h_2 = D_2 \operatorname{tg} \alpha_2$$

$$\Delta h = h_2 - h_1$$

$$\Delta h = \operatorname{tg} \alpha_1 (D_2 - D_1)$$

onde: h_1 é o limite inferior da janela em Z; h_2 é o limite superior da janela em Z; D_1 é o limite inferior em y da área irradiada na amostra que é igual a 2,75; D_2 é o limite superior em y da área irradiada na amostra que é igual a 3,25; α_1 é o ângulo de incidência e Δh é a largura em Z da fonte plana. Portanto, se α_1 igual $0,111724939^\circ$, h_1 é igual a $5,362 \times 10^{-3}$ e h_2 $6,337 \times 10^{-3}$.

Como o objetivo não é comparar os dados obtidos com dados experimentais, o detector foi considerado ideal, ou seja, toda radiação que passa por ele é detectada. O material que o compõe é o ar. E para sua formação foram criadas duas esferas com centro em (0,3,0) coincidindo com o centro da amostra. A esfera menor com raio de 1 cm e a maior com raio de 2 cm. Dois planos inclinados em relação a Z e Y paralelos entre si e em relação a X foram criados. A distância entre eles é fixa em 1 mm e o ângulo destes em relação ao eixo Y caracteriza o ângulo de detecção ao plano da amostra. O eixo de rotação dos planos para a variação angular é fixo no ponto $y=3$ de forma que coincida com o centro da amostra.

A resposta (*tally*) escolhida foi o fluxo médio de partículas que atravessam o detector por centímetro quadrado (F4, conforme anexo III). A faixa de energia solicitada para a resposta é de 1 keV a 30 keV dividida em 1000 intervalos de energia. A resposta é interpretada como a probabilidade de incidência relativa à célula em questão para cada intervalo de energia.

4.3. Procedimento

Em todas as simulações deste trabalho utilizou-se o mesmo arranjo experimental, conforme a figura 5, e 3×10^8 (histórias).

Foram construídas um total de 8 amostras. Em todas elas utilizou-se o mesmo arranjo experimental, conforme a figura 6, e um número de eventos simulados igual a 3×10^8 histórias. Também foi utilizada a mesma proporção de H, C e O (4-1-1) em todas as composições elementares. Estes elementos não aparecem no espectro de fluorescência.

Para calcular a concentração dos elementos de uma amostra através das suas probabilidades de incidência deve-se conhecer a curva de sensibilidade do sistema. Para conhecer essa curva foi necessária a criação de uma amostra padrão com concentrações conhecidas e um padrão interno. As concentrações desses elementos foram aumentadas enquanto o padrão interno

se manteve constante. A composição dessa amostra e suas concentrações estão apresentadas na tabela 1.

Tabela 1: Concentração dos elementos da amostra padrão (mg/g).

Z	Elementos	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7
13	Al	5	8	11	14	17	20	23
17	Cl	5	8	11	14	17	20	23
20	Ca	5	8	11	14	17	20	23
22	Ti	5	8	11	14	17	20	23
24	Cr	5	8	11	14	17	20	23
26	Fe	5	8	11	14	17	20	23
30	Zn	10	10	10	10	10	10	10
31	Ga	5	8	11	14	17	20	23
34	Se	5	8	11	14	17	20	23
36	Kr	5	8	11	14	17	20	23
37	Rb	5	8	11	14	17	20	23
38	Sr	5	8	11	14	17	20	23

Por fim foi simulada uma amostra com concentrações conhecidas para que através das intensidades de radiação fluorescente e utilizando a curva de sensibilidade levantada, fossem medidas suas concentrações simuladas e comparadas às concentrações reais fornecidas no arquivo de entrada. Os elementos com seus respectivos números atômicos e suas concentrações são apresentados na tabela 2.

Tabela 2: Concentração dos elementos da amostra a ser analisada.

Z	Elemento	Concentração (mg/g)
14	Si	15
16	S	10
19	K	8
25	Mn	20
28	Ni	9
29	Cu	5
32	Ge	7
35	Br	13

Para excitação da amostra foi utilizado um espectro de radiação síncrotron de 16,5 keV de energia (Figura 7).

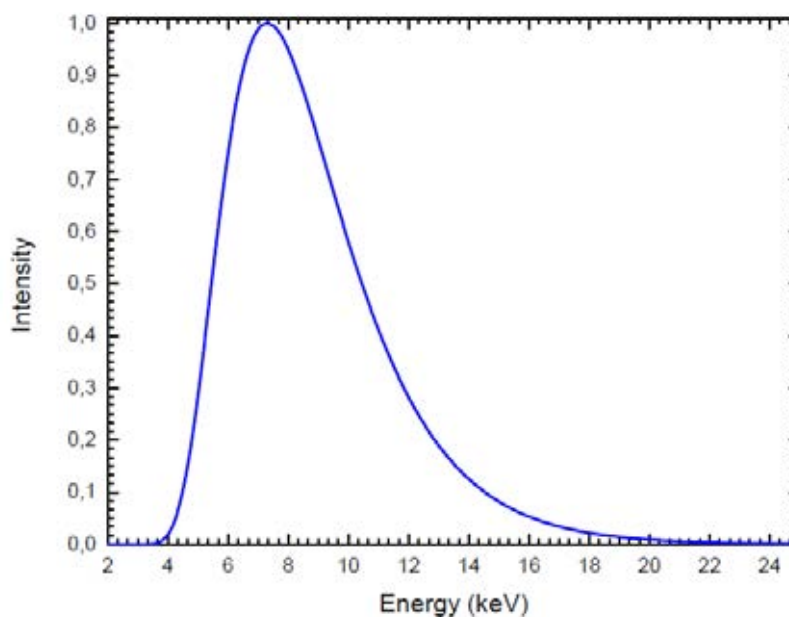


Figura 7: Espectro da radiação síncrotron.

5. Resultados e Discussões

Cada simulação efetuada gerou um arquivo de saída cuja resposta é apresentada em uma tabela com três colunas de dados. A primeira coluna contém os dados referentes aos intervalos de energia. Estes intervalos podem ser interpretados como canais em um sistema de detecção. A segunda coluna traz dados referentes à primeira coluna, este dado de probabilidade de incidência de radiação. A terceira coluna está ligada a margem de erro em cada intervalo de energia que se pede. O anexo IV apresenta um exemplo do arquivo de resposta.

O gráfico que relaciona a primeira coluna com a segunda é similar a um espectro de radiação de uma amostra excitada.

Para análise dos resultados é necessária a comparação das energias de possíveis picos aparentes nos espectros resultantes com energias conhecidas de picos de fluorescência, para tanto a tabela 3 traz os dados das energias de fótons de fluorescência em keV para todos os elementos utilizados nesse trabalho (NIST, 2010).

Tabela 3: Energias (keV) dos fótons de fluorescência dos elementos componentes da amostra analisada.

Elemento	Z	A	K α	Elemento	Z	A	K α
H	1	1		Mn	25	55	5,898801
C	6	12		Fe	26	56	6,404006
O	8	16		Ni	28	59	7,478252
Al	13	27	1,486708	Cu	29	63	8,047823
Si	14	28	1,739985	Zn	30	64	8,638906
S	16	32	2,307885	Ga	31	70	9,251674
Cl	17	35	2,622440	Ge	32	73	9,886520
Ar	18	40	2,957682	Se	34	79	11,22252
K	19	39	3,313948	Br	35	80	11,92436
Ca	20	40	3,691719	Kr	36	84	12,64800
Ti	22	48	4,510899	Rb	37	85	13,39549
Cr	24	52	5,414805	Sr	38	88	14,16520

5.1. Curva de Sensibilidade

Na perspectiva de conhecer a concentração de elementos na amostra, através de seus raios-X característicos, é necessário que se trace uma relação da intensidade de radiação da fluorescência (I) com a concentração (W_i) do elemento i na amostra.

A partir da simulação das sete amostras padrão mostradas na tabela 1, avaliou-se as probabilidades de incidência de cada um de seus elementos: Al, Cl, Ca, Ti, Cr, Fe, Zn, Ga, Se, Kr, Rb e Sr.

Como visto anteriormente, a intensidade relativa I_R de cada elemento é obtida através da expressão:

$$I_R = \frac{I_i}{I_p} \cdot W_p$$

Analogamente será calculada a probabilidade de incidência relativa.

A intensidade relativa e, nesse caso, a probabilidade de incidência é proporcional à massa do elemento da amostra. Contudo, na amostra padrão as concentrações, em mg/g estão sendo alteradas, e conseqüentemente a massa de cada elemento também. Assim, para garantir que a probabilidade de incidência esteja proporcional a uma massa de 1g, multiplicamos a massa da amostra, presente no arquivo de saída, pela probabilidade de incidência relativa, e assim traçamos a reta de sensibilidade de cada elemento.

Sabendo que a probabilidade de incidência do sistema é análoga a expressão 7, a sensibilidade do sistema para cada elemento é o coeficiente angular de cada reta de sensibilidade. Assim, de posse das probabilidades de incidência relativas, as retas de cada elemento foram traçadas. No anexo V encontram-se as retas de sensibilidade de cada elemento.

Para a construção da curva de sensibilidade utilizou-se os dados da tabela 4, que contem os coeficientes angulares das retas do anexo V, os valores de $K\alpha$ simulados para cada pico aparente no arquivo de saída e seu erro percentual em relação ao teórico mostrado na tabela 1.

Tabela 4: Sensibilidade dos elementos constituintes da amostra padrão.

Z	Elemento	$K\alpha$ teórico (keV)	$K\alpha$ simulado (keV)	Erro (%)	Sensibilidade
13	Al	1,486708	1,4925	0,39	0,0000001
17	Cl	2,62244	2,6224	0,001	0,000002
20	Ca	3,691719	3,6653	0,72	0,000007
22	Ti	4,510899	4,4765	0,77	0,000009
24	Cr	5,414805	5,4036	0,21	0,000007
26	Fe	6,404006	6,3886	0,24	0,000006
31	Ga	9,251674	9,2278	0,26	0,000002
34	Se	11,22252	11,198	0,22	0,0000017
36	Kr	12,648	12,617	0,25	0,0000003
37	Rb	13,39549	13,371	0,18	0,0000002

A partir dos valores de sensibilidade obtidos (tabela 4) podemos obter a seguinte curva:

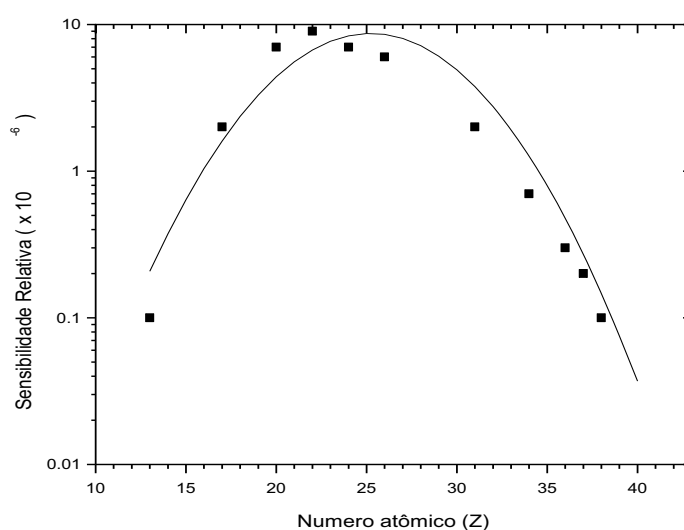


Figura 8: Curva de sensibilidade do sistema.

Por interpolação, estima-se a probabilidade de incidência de elementos não presentes nas amostras padrão. Com alguns ajustes na curva de sensibilidade é extraída a equação 9:

$$S_{r,i}(Z) = \exp (-0,025*Z^2 + 1,261*Z - 27,553) \quad (9)$$

5.2. Determinação da concentração de elementos

Através da equação 9, obteve-se a sensibilidade de cada elemento de uma nova amostra composta pelos seguintes elementos: H, C, O, Si, S, K, Mn, Ni, Cu, Ge e Br.

A figura 9 mostra o espectro de saída da simulação da irradiação da amostra cujos elementos estão dispostos na tabela 5.

Pode-se perceber um pico de fluorescência intenso próximo a energia de 2,96 keV, que é a energia $K\alpha$ teórica do Argônio. Este elemento está presente na construção do material 20, como pode ser visto no arquivo de entrada (Anexo I), constituinte do ar.

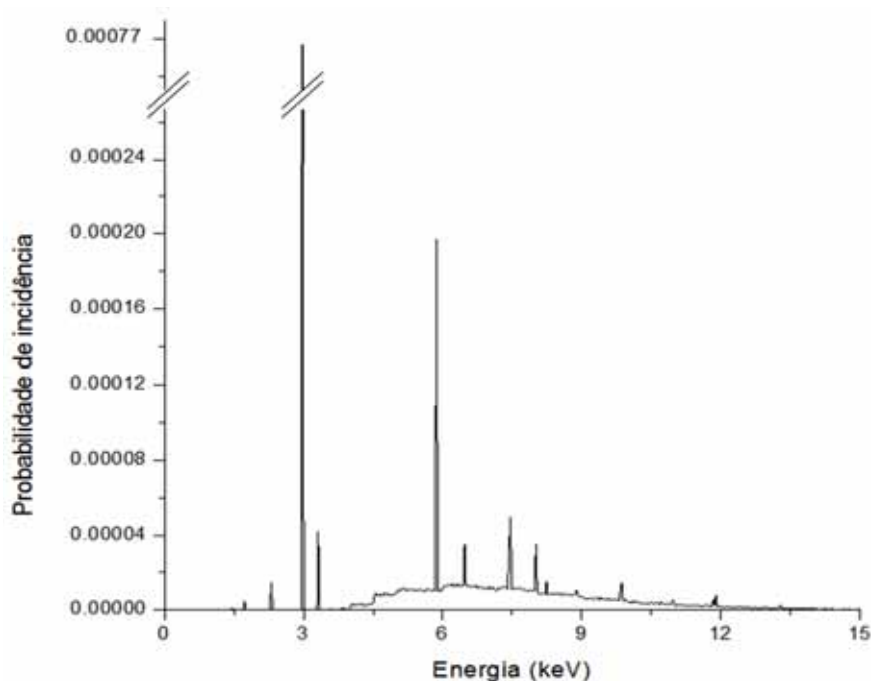


Figura 9: Espectro de fluorescência simulado.

A tabela 5 traz os picos de fluorescência encontrados para cada elemento, seu erro percentual em comparação com o teórico da tabela 3 e suas probabilidades de incidência. Por interpolação, a partir do número atômico dos elementos, pode-se determinar a sensibilidade de cada um, as quais também estão dispostas na tabela 5.

Tabela 5: Comparativo das energias teóricas e simuladas de K α , probabilidade de incidência e sensibilidade dos elementos constituintes da amostra analisada.

Z	Elementos	K α teórico (keV)	K α simulado (keV)	Erro (%)	Probabilidade de incidência	Sensibilidade
14	Si	1,739985	1,7243	0,9014	5,29155E-06	3,74E-07
16	S	2,307885	2,3037	0,1813	1,46444E-05	10,39E-07
19	K	3,313948	3,3177	0,113	4,18312E-05	33,09E-07
25	Mn	5,898801	5,8671	0,5374	1,96855E-04	86,93E-07
28	Ni	7,478252	7,4605	0,2374	4,97482E-05	71,74E-07
29	Cu	8,047823	8,011	0,4575	3,53106E-05	60,90E-07
32	Ge	9,886520	9,8651	0,2167	1,46572E-05	27,58E-07
35	Br	11,92436	11,893	0,263	8,10881E-06	7,97E-07

De posse das probabilidades de incidência e das sensibilidades de cada elemento presente na amostra suas concentrações são calculadas através da expressão 10, análoga a expressão 7:

$$W_i = \frac{I_i}{S_i}$$

A tabela 6 mostra as concentrações calculadas e as concentrações reais fornecidas como entrada para a simulação e seu erro percentual em relação às reais.

Tabela 6: Comparativo das concentrações reais e calculadas dos elementos constituintes da amostra analisada.

Elementos	Concentração real (mg/g)	Concentração calculada (mg/g)	Erro (%)
Si	15	14,19	6
S	10	14,10	41
K	8	12,65	58
Mn	20	22,64	13
Ni	9	6,93	23
Cu	5	5,79	16
Ge	7	5,31	24
Br	13	10,18	21

Os erros relativos dos resultados obtidos variaram entre 6% para o Si, até quase 60% para o K. Essas diferenças se devem ao fato de que é muito difícil simular com um número de eventos razoável o que acontece em um experimento real. Mesmo quando utilizamos 3×10^8 eventos esse número é muito pequeno se comparado com os valores de intensidade de fótons de radiação síncrotron.

Uma possibilidade para melhorar estes resultados esta em considerar mais parâmetros que interferem na resposta do sistema de forma mais adequada, como por exemplo, a densidade da amostra. O incremento desta magnitude aumenta a intensidade de emissão de cada elemento, assim como a atenuação e autoabsorção dentro da amostra.

6. Conclusão

O código MCNPX se mostrou adequado para ser empregado em aplicações de fluorescência de raios-X. É importante salientar que o arranjo experimental simulado é muito simples se comparado ao real. Neste sentido os resultados obtidos foram satisfatórios.

A qualidade da resposta de um sistema de espectroscopia por TXRF utilizando radiação síncrotron através do método de Monte Carlo com o código MCNPX é satisfatória em relação ao aparecimento dos picos de fluorescência no espectro de saída com erros de energia $K\alpha$ menor que 1%.

Os erros na determinação da concentração dos elementos da amostra foram altos (entre 6 e 60%). A falta de conhecimento em relação a parâmetros como a densidade pode ter contribuído com esse resultado. Desta forma, é possível empregar o código para esse tipo de aplicação, mas é necessário o conhecimento do maior número possível de parâmetros físicos da amostra.

7. Referências

- BELMONTE, E. P. **Espectrometria por fluorescência de raios-X por reflexão total: um estudo simulado utilizando o método de Monte Carlo**. 2005. 176p. Dissertação (Mestrado). UFRJ, Rio de Janeiro.
- CHWIEJ, J.; SZCZERBOWSKA-BORUCHOWSKA, M.; LANKOSZ, M. *et al.* Preparation of tissue samples for X-ray fluorescence microscopy. **Spectrochimica Acta Part B**, v.60, p.1531-1537, 2005.
- INJUK, J.; GRIEKEN, R. V. Literature trends in X-ray emissions spectrometry in the period 1999-2000 – a review. **X-ray Spectrometry**, v.32, p.35-39, 2003.
- KLOCKEMKÄMPER, R.; VON BOHLEN, A. Elemental analysis of environmental samples by total reflection fluorescent: a review. **X-ray Spectrometry**, v.25, p.156-162, 1996.
- KUBALA-KUKUS, A.; BRAZIEWICZ, J.; BANAS, D. *et al.* Trace element load in cancer and normal lung tissue. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, v.150, p.193-199, 1999.
- KUBALA-KUKUS, A.; BANAS, D.; BRAZIEWICZ, J. *et al.* Analysis of elemental concentration censored distributions in breast malignant and breast benign neoplasm tissues. **Spectrochimica Acta Part B**, v.62, p.696-701, 2007.
- LEITÃO, R. G. **Análise Multielementar de tecidos de próstata usando fluorescência de raios-X por reflexão total e radiação síncrotron**. 2009. 128p. Dissertação (Mestrado). UFRJ, Rio de Janeiro.
- MANICA, J. **Estrutura eletrônica dos rutenatos 2D e 3D: Sr_2RuO_4 e SrRuO_3** . 2006. 120p. Dissertação (Mestrado). UFPR, Curitiba.
- MOTA, C. L. S. **Estudo de amostras de sangue humano e hemocomponentes irradiado com baixa dose utilizando a técnica de fluorescência de raios-X por reflexão total**. 2008. 85p. Dissertação (Mestrado). UFRJ, Rio de Janeiro.

NASCIMENTO-FILHO, V. F. Centro de Energia Nuclear na Agricultura - CENA. **Técnicas analíticas nucleares de fluorescência de raios-X por dispersão de energia (ED-XRF) e por reflexão total (TXRF)**, 1999. Disponível em: <www.cena.usp.br/apostilas/Virgilio/cen-5723/EDXRF_TXRF.doc>. Acesso em: 15 out. 2013.

NIST. National Institute of Standards and Technology. **X-ray transition energies database**, 2010. Disponível em: <<http://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayTrans/Html/search.html>>. Acesso em: 22 jun. 2013.

OLIVEIRA, L. C. M. **X-rays Fluorescence Spectroscopy**, 2000. Disponível em: <<http://www.dsif.fee.unicamp.br/~furio/IE607A/XRF.pdf>>. Acesso em: 15 out. 2013.

SERPA, R. F. B. **Análise Multielementar de tecidos cerebrais através da microfluorescência de raios-X e fluorescência de raios-X por reflexão total**. 2007. 185p. Tese (Doutorado). UFRJ, Rio de Janeiro.

X-5 MCT (MONTE CARLO TEAM). **MCNP – A general Monte Carlo N-particle transport code**, version 5. Volume II: User's guide, 2003.

Anexo I

Arquivo de entrada (INP) utilizado no programa MCNPX:

```
c ----- Definição de Células -----
c
c
10 10 -0.7220012 -101 -102 103 IMP:P=1      $ Corpo de prova
c
c
0 20 -0.00125 (1 -2 3 -4 5 -6) #10#20 IMP:P=1  $ Cubo de ar
c
c
20 20 -0.00125 (-21 22 -23) VOL=0.098175 IMP:P=1  $ Detector variando em YxZ
c
c
40 40 -2.5 (-401 402 -103) IMP:P=1          $ Suporte refletor de quartzo
c
c
30 0      -1:2:-3:4:-5:6 IMP:P=0            $ Fora do Sistema

c
c
c
c -----Definição de Superfícies-----
c
c
c -----Referente a célula 0 UNIVERSO IMPORTANTE-----
c
1  px -3
2  px 3
3  py -0.5
4  py 6
5  pz -2
6  pz 2
c
c
c -----corpo de prova "célula 10"-----
c
101 c/z 0 3 0.5
102 pz 0.0000005
103 pz 0
c
c
c -----Detector "célula 20"-----
c
21 c/z 0 3 1
22 pz 0.5
23 pz 1
c
```

```

c
c -----Refletor de quartzo-----
c
401  c/z  0 3 2.5
402  pz -0.3
c
c
c
c -----Superfície da fonte-----
7   py  0
c

c
c ----- Blodo de dados -----
c
c -----Definição de fonte-----
c
mode p                      $ fótons
c
SDEF sur=7 x=D2 y=0 z=D3 vec=0 0.999998098 -0.001949966806 dir=1 erg=D1
c
c
c Fonte de 16,5 kV ... 0.111724939 Graus (Ang. crit. para Si)
c
SI2  -0.05 0.05
SP2   0 1
SI3   0.005362418913 0.006337404169
SP3   0 1
c
SI1   0.0010 0.0035 0.0040 0.0045 0.0050 0.0060 0.0070 0.0080
      0.0090 0.0100 0.0110 0.0120 0.0130 0.0140 0.0150 0.0160
      0.0170 0.0180 0.0190 0.0200 0.0210 0.0220 0.0230 0.0240
      0.0250 0.0260 0.0270 0.0280 0.0290 0.0300
SP1   0 0.0010200 0.0190700 0.1041200 0.2868400 0.7515000 0.9889500
      0.9490200 0.7754100 0.5799500 0.4112500 0.2819200 0.1892200
      0.1251700 0.0818800 0.0531500 0.0343100 0.0220000 0.0141100
      0.0090100 0.0057400 0.0036500 0.0023100 0.0014600 0.0009280
      0.0005854 0.0003695 0.0002338 0.0001470 0.0000933
c
c
c -----Definição de materiais----- (Ag)
c
c
c
M10   01001 -0.608666
      06012 -0.152167
      08016 -0.152167
      14028 -0.015
      16032 -0.01
      19039 -0.008
      25055 -0.02
      28059 -0.009
      29063 -0.005
      32073 -0.007
      35079 -0.013      c
c -----Ar-----
c

```



```

c
M20    7014 -0.755    $ Nitrogênio
      8016 -0.232    $ Oxigênio
      18040 -0.013    $ Argônio
c
c
c -----material refletor-----
c
c
M40    014028 -0.33333 $ Silício
      008016 -0.66667 $ Oxigênio
c
c
c -----material do detector-----
c
c M30    006012 1.000    $ carbono
c
c
c -----Tally - resposta desejada-----
c
F4:P 20          $ Fluxo médio sobre uma célula
E4 1-3 1000i 30-3    $ de 1 a 30 keV com 2000 canais
c
c MPLOT   FREQ 10000 NONORM NOERRBAR LINLOG
c
NPS  300000000

```

Anexo II

Tipos de superfície, equações e a ordem dos registros no bloco são apresentados na tabela abaixo (X-5 MCT,2003):

Mnemonic	Type	Description	Equation	Card Entries
P	Plane	General	$Ax + By + Cz - D = 0$	ABCD
PX		Normal to X -axis	$x - D = 0$	D
PY		Normal to Y -axis	$y - D = 0$	D
PZ		Normal to Z -axis	$z - D = 0$	D
SO	Sphere	Centered at Origin	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
S		General	$(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} R$
SX		Centered on X -axis	$(x - \bar{x})^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} R$
SY		Centered on Y -axis	$x^2 + (y - \bar{y})^2 + z^2 - R^2 = 0$	$\bar{y} R$
SZ		Centered on Z -axis	$y^2 + y^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{z} R$
C/X	Cylinder	Parallel to X -axis	$(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{y} \bar{z} R$
C/Y		Parallel to Y -axis	$(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \bar{z} R$
C/Z		Parallel to Z -axis	$(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \bar{y} R$
CX		On X -axis	$y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CY		On Y -axis	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CZ		On Z -axis	$x^2 + y^2 - R^2 = 0$	R
K/X	Cone	Parallel to X -axis	$\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(x - \bar{x}) = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} t^2 \pm 1$
K/Y		Parallel to Y -axis	$\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(y - \bar{y}) = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} t^2 \pm 1$
K/Z		Parallel to Z -axis	$\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - t(z - \bar{z}) = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} t^2 \pm 1$
KX		On X -axis	$\sqrt{y^2 + z^2} - t(x - \bar{x}) = 0$	$\bar{x} t^2 \pm 1$
KY		On Y -axis	$\sqrt{x^2 + z^2} - t(y - \bar{y}) = 0$	$\bar{y} t^2 \pm 1$
KZ		On Z -axis	$\sqrt{x^2 + y^2} - t(z - \bar{z}) = 0$	$\bar{z} t^2 \pm 1$ ± 1 used only for 1 sheet cone
SQ	Ellipsoid Hyperboloid Paraboloid	Axis parallel to X -, Y -, or Z -axis	$A(x - \bar{x})^2 + B(y - \bar{y})^2 + C(z - \bar{z})^2$ $+ 2D(x - \bar{x}) + 2E(y - \bar{y})$ $+ 2F(z - \bar{z}) + G = 0$	A B C D E F G $\bar{x} \bar{y} \bar{z}$
GQ	Cylinder Cone Ellipsoid Hyperboloid Paraboloid	Axes not parallel to X -, Y -, or Z -axis	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz$ $+ Fzx + Gx + Hy + Jz + K = 0$	A B C D E F G H J K
TX	Elliptical or circular torus. Axis is parallel to X -, Y -, or Z -axis	$(x - \bar{x})^2 / B^2 + (\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - A)^2 / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} A B C$	
TY		$(y - \bar{y})^2 / B^2 + (\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - A)^2 / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} A B C$	
TZ		$(z - \bar{z})^2 / B^2 + (\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - A)^2 / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} A B C$	

Anexo III

Opções de grandezas de respostas oferecidas pelo MCNPX, suas unidades e comandos de entrada (X-5 MCT,2003; BELMONTE, 2005).

Tipo	Descrição	Unidade
F1:N,P,E	Corrente integrada sobre uma superfície	nº de partículas que atravessam uma superfície
F2:N,P,E	Fluxo médio sobre uma superfície	Partículas / cm ²
F4:N,P,E	Fluxo médio sobre uma célula	Partículas / cm ²
F5:N,P	Fluxo em um detector pontual	Partículas / cm ²
F6:N,P,E	Energia média depositada em uma célula	MeV/g
F8:P,E	Distribuição de pulsos de energia criados em um detector	Pulsos

Anexo IV

Arquivo de saída (resposta) do programa MCNPX:

```
1- c
2- 10 10 -0.758613 -101 -102 103 IMP:P=1 $ Corpo de prova
3- c
4- c
5- 0 20 -0.00125 (1 -2 3 -4 5 -6) #10#20 IMP:P=1 $ Cubo de ar
6- c
7- c
8- 20 20 -0.00125 (-21 22 -23) VOL=0.098175 IMP:P=1 $ Detector variando em YxZ
9- c
10- c
11- 40 40 -2.5 (-401 402 -103) IMP:P=1 $ Suporte refletor de quartzo
12- c
13- c
14- 30 0 -1:2:-3:4:-5:6 IMP:P=0 $ Fora do Sistema
15-
16- c
17- c
18- c
19- c -----Definição de Superfícies-----
20- c
21- c
22- c -----Referente a célula 0 UNIVERSO IMPORTANTE-----
23- c
24- 1 px -3
25- 2 px 3
26- 3 py -0.5
27- 4 py 6
28- 5 pz -2
29- 6 pz 2
30- c
31- c
32- c -----corpo de prova "célula 10"-----
33- c
34- 101 c/z 0 3 0.5
35- 102 pz 0.0000005
36- 103 pz 0
37- c
38- c
39- c -----Detector "célula 20"-----
40- c
41- 21 c/z 0 3 1
42- 22 pz 0.5
43- 23 pz 1
44- c
45- c
46- c -----Refletor de quartzo-----
47- c
48- 401 c/z 0 3 2.5
```

```

49- 402 pz -0.3
50- c
51- c
52- c
53- c -----Superfície da fonte-----
54- 7 py 0
55- c
56-
57- c -----Definição de fonte-----
58- c
59- mode p $ fótons
60- c
61- SDEF sur=7 x=D2 y=0 z=D3 vec=0 0.999998098 -0.001949966806 dir=1 erg=D1
62- c
63- c
64- c Fonte de 16,5 kV ... 0.111724939 Graus (Ang. crit. para Si)
65- c
66- SI2 -0.05 0.05
67- SP2 0 1
68- SI3 0.005362418913 0.006337404169
69- SP3 0 1
70- c
71- SI1 0.0010 0.0035 0.0040 0.0045 0.0050 0.0060 0.0070 0.0080
72- 0.0090 0.0100 0.0110 0.0120 0.0130 0.0140 0.0150 0.0160
73- 0.0170 0.0180 0.0190 0.0200 0.0210 0.0220 0.0230 0.0240
74- 0.0250 0.0260 0.0270 0.0280 0.0290 0.0300
75- SP1 0 0.0010200 0.0190700 0.1041200 0.2868400 0.7515000 0.9889500
76- 0.9490200 0.7754100 0.5799500 0.4112500 0.2819200 0.1892200
77- 0.1251700 0.0818800 0.0531500 0.0343100 0.0220000 0.0141100
78- 0.0090100 0.0057400 0.0036500 0.0023100 0.0014600 0.0009280
79- 0.0005854 0.0003695 0.0002338 0.0001470 0.0000933
80- c
81- c
82- c -----Definição de materiais----- (Ag)
83- c
84- c
85- c
86- M10 01001 -0.608666
87- 06012 -0.152167
88- 08016 -0.152167
89- 14028 -0.015
90- 16032 -0.01
91- 19039 -0.008
92- 25055 -0.02
93- 28059 -0.009
94- 29063 -0.005
95- 32073 -0.007
96- 35079 -0.013
97- c
98- c -----Ar-----
99- c
100- c
101- M20 7014 -0.755 $ Nitrogênio
102- 8016 -0.232 $ Oxigênio
103- 18040 -0.013 $ Argônio
104- c

```

```

105- c
106- c -----material refletor-----
107- c
108- c
109- M40 014028 -0.33333 $ Silício
110- 008016 -0.66667 $ Oxigênio
111- c
112- c
113- c -----material do detector-----
114- c
115- c M30 006012 1.000 $ carbono
116- c
117- c
118- c -----Tally - resposta desejada-----
119- c
120- F4:P 20 $ Fluxo médio sobre uma célula
121- E4 1-3 1000i 30-3 $ de 1 a 30 keV com 2000 canais
122- c
123- c MPlot FREQ 10000 NONORM NOERRBAR LINLOG
124- c
125- NPS 300000000

```

warning. 1 energy bins of tally 4 are below energy cutoff.

1LAHET physics options:

print table 41

```

lca ielas ipreq iexisa ichoic jcoul nexite npidk noact icem
lca 2 1 1 23 1 1 0 1 0

lcb flenb(i),i=1,6 ctofe flim0
lcb 3.4900E+03 3.4900E+03 2.4900E+03 2.4900E+03 8.0000E+02 8.0000E+02 -1.0000E+00 -1.0000E+00

lea ipht icc nobalc nobale ifbrk ilvden ievap nofis
lea 1 4 1 0 1 0 0 1

leb yzere bzere yzero bzero
leb 1.5000E+00 8.0000E+00 1.5000E+00 1.0000E+01

```

1cells

print table 60

			atom	gram		photon			
	cell	mat	density	density	volume	mass	pieces	importance	
1	10	10	2.86916E-01	7.58613E-01	3.92699E-07	2.97907E-07	1	1.0000E+00	
2	0	20	5.17494E-05	1.25000E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	0	1.0000E+00	
3	20	20	5.17494E-05	1.25000E-03	9.81750E-02	1.22719E-04	1	1.0000E+00	
4	40	40	8.06872E-02	2.50000E+00	5.89049E+00	1.47262E+01	1	1.0000E+00	
5	30	0	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0	0.0000E+00	
total					5.98866E+00	1.47263E+01			

warning. surface 7 is not used for anything.

random number control 0.830205014835200E+14

minimum source weight = 1.0000E+00 maximum source weight = 1.0000E+00

2 warning messages so far.

1cross-section tables

print table 100

table length

tables from file mcplib04

1000.04p	1898	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 1-H	mat 100	02/07/03
6000.04p	3152	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 6-C	mat 600	02/07/03
7000.04p	3194	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 7-N	mat 700	02/07/03
8000.04p	3272	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 8-O	mat 800	02/07/03
14000.04p	4792	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 14-SI	mat1400	02/07/03
16000.04p	4654	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 16-S	mat1600	02/07/03
18000.04p	4696	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 18-AR	mat1800	02/07/03
19000.04p	5047	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 19-K	mat1900	02/07/03
25000.04p	5598	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 25-MN	mat2500	02/07/03
28000.04p	5826	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 28-NI	mat2800	02/07/03
29000.04p	5754	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 29-CU	mat2900	02/07/03
32000.04p	7027	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 32-GE	mat3200	02/07/03
35000.04p	6853	ENDF/B-VI Release 8 Photoatomic Data for 35-BR	mat3500	02/07/03

total 61763

maximum photon energy set to 100.0 mev (maximum electron energy)

tables from file el03

1000.03e	2329	6/6/98
6000.03e	2333	6/6/98
7000.03e	2333	6/6/98
8000.03e	2333	6/6/98
14000.03e	2339	6/6/98
16000.03e	2339	6/6/98
18000.03e	2341	6/6/98
19000.03e	2343	6/6/98
25000.03e	2345	6/6/98
28000.03e	2347	6/6/98
29000.03e	2347	6/6/98
32000.03e	2349	6/6/98
35000.03e	2349	6/6/98

1particles and energy limits

print table 101

particle type	particle cutoff energy	maximum particle energy	smallest table maximum	largest table maximum	always use table maximum	always use model below	always above
2 p photon	1.0000E-03	1.0000E+02	1.0000E+02	1.0000E+05	1.0000E+05	1.0000E+37	1.0000E+37
3 e electron	1.0000E-03	1.0000E+02	1.0000E+02	1.0000E+02	1.0000E+02	1.0000E+37	1.0000E+37

decimal words of dynamically allocated storage

```
general      0
tallies      9468
bank         71041
cross sections 61764

total        0  =  0 bytes
```


dump no. 1 on file runtpe nps = 0 coll = 0 ctm = 0.00 nrm = 0

2 warning messages so far.

dump no. 2 on file runtpe nps = 62907270 coll = 6917011 ctm = 15.00 nrm = 430557347

dump no. 3 on file runtpe nps = 126029207 coll = 13857908 ctm = 30.01 nrm = 862602772

dump no. 4 on file runtpe nps = 189116131 coll = 20799104 ctm = 45.02 nrm = 1294429916

dump no. 5 on file runtpe nps = 252273751 coll = 27747097 ctm = 60.03 nrm = 1726721375

1problem summary

run terminated when 300000000 particle histories were done.
+ 11/11/13 13:58:36
c probid = 11/11/13 12:46:56

photon creation	tracks	weight	energy	photon loss	tracks	weight	energy
	(per source particle)				(per source particle)		
source	300000000	1.0000E+00	8.2578E-03	escape	268543412	8.9514E-01	7.5823E-03
nucl. interaction	0 0.	0.	energy cutoff	0 0.	1.5147E-08		
particle decay	0 0.	0.	time cutoff	0 0.	0.		
weight window	0 0.	0.	weight window	0 0.	0.		
cell importance	0 0.	0.	cell importance	0 0.	0.		

weight cutoff	0	0.	0.	weight cutoff	0	0.	0.
energy importance	0	0.	0.	energy importance	0	0.	0.
dxtran	0	0.	0.	dxtran	0	0.	0.
forced collisions	0	0.	0.	forced collisions	0	0.	0.
exp. transform	0	0.	0.	exp. transform	0	0.	0.
from neutrons	0	0.	0.	compton scatter	0	0.	1.5973E-07
bremsstrahlung	5040	1.6800E-05	5.3500E-08	capture	32022187	1.0674E-01	6.8179E-04
p-annihilation	0	0.	0.	pair production	0	0.	0.
photonuclear	0	0.	0.	photonuclear abs	0	0.	0.
electron x-rays	0	0.	0.				
1st fluorescence	560474	1.8682E-03	6.4351E-06				
2nd fluorescence	85	2.8333E-07	3.6599E-10				
(gamma,xgamma)	0	0.	0.				
tabular sampling	0	0.	0.				
total	300565599	1.0019E+00	8.2643E-03	total	300565599	1.0019E+00	8.2643E-03

number of photons banked	5125	average time of (shakes)	cutoffs
photon tracks per source particle	1.0019E+00	escape	tco 1.0000E+34
photon collisions per source particle	1.0998E-01	capture	9.5204E-03 eco 1.0000E-03
total photon collisions	32994406	capture or escape	1.8895E-02 wc1 -5.0000E-01
	any termination	1.8895E-02	wc2 -2.5000E-01

computer time so far in this run	71.38 minutes	maximum number ever in bank	1
computer time in mcrun	71.37 minutes	bank overflows to backup file	0
source particles per minute	4.2033E+06	dynamic storage	0 words, 0 bytes.
random numbers generated	2053371434	most random numbers used was	82 in history280579464

range of sampled source weights = 1.0000E+00 to 1.0000E+00

source efficiency = 1.0000 in cell 0
 1photon activity in each cell

print table 126

	tracks	population	collisions	collisions	number	flux	average	average		
cell	entering		* weight	weighted	weighted	weighted	track weight	track mfp		
			(per history)	energy	energy	(relative)	(cm)			
1	10	283352759	283295247	916746	3.0558E-03	8.3712E-03	8.3712E-03	1.0000E+00	1.0572E-01	
2	0	582729342	300005124	32070473	1.0690E-01	8.3637E-03	8.3637E-03	1.0000E+00		
1.2204E+02										
3	20	178078	178059	7187	2.3957E-05	6.4935E-03	6.4935E-03	1.0000E+00	7.0185E+01	
4	40	0	0	0	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	
total 866260179 583478430 32994406 1.0998E-01										
1tally 4 nps =300000000										
tally type 4 track length estimate of particle flux. units 1/cm**2										
particle(s): photon										
volumes										
cell: 20										
9.81750E-02										
cell 20										
energy										
1.0000E-03 0.00000E+00 0.0000										
1.0290E-03 1.40595E-09 1.0000										
1.0579E-03 3.55919E-09 1.0000										

1.0869E-03	2.01085E-08	0.8840
1.1159E-03	1.75421E-08	0.6073
1.1449E-03	2.27606E-08	0.8571
1.1738E-03	7.88324E-08	0.4248
1.2028E-03	0.00000E+00	0.0000
1.2318E-03	3.09543E-08	0.6494
1.2607E-03	2.29049E-08	0.7852
1.2897E-03	3.23255E-08	0.7354
1.3187E-03	9.03580E-09	0.9736
1.3477E-03	6.30527E-09	1.0000
1.3766E-03	0.00000E+00	0.0000
1.4056E-03	2.86108E-08	0.7239
1.4346E-03	3.32286E-08	0.7834
1.4635E-03	1.20715E-06	0.1136
1.4925E-03	1.44511E-08	0.6404
1.5215E-03	6.64369E-09	0.8000
1.5504E-03	4.13947E-08	0.7069
1.5794E-03	2.80125E-08	0.7525
1.6084E-03	1.04706E-08	1.0000
1.6374E-03	1.35691E-08	0.8738
1.6663E-03	3.64248E-08	0.6435
1.6953E-03	7.21176E-08	0.5162
1.7243E-03	5.29155E-06	0.0573
1.7532E-03	9.00454E-08	0.5789
1.7822E-03	3.33946E-08	0.7137
1.8112E-03	1.11881E-08	0.9745

.
.
.
.
.
.

2.9652E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9681E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9710E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9739E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9768E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9797E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9826E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9855E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9884E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9913E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9942E-02	0.00000E+00	0.0000
2.9971E-02	0.00000E+00	0.0000
3.0000E-02	0.00000E+00	0.0000
total	3.41901E-03	0.0027

1analysis of the results in the tally fluctuation chart bin (tfc) for tally 4 with nps = 300000000 print table 160

normed average tally per history = 3.41901E-03	unnormed average tally per history = 3.35661E-04
estimated tally relative error = 0.0027	estimated variance of the variance = 0.0000
relative error from zero tallies = 0.0024	relative error from nonzero scores = 0.0013

number of nonzero history tallies = 178056	efficiency for the nonzero tallies = 0.0006
history number of largest tally = 234200332	largest unnormalized history tally = 2.09712E+00

(largest tally)/(average tally) = 6.24774E+03 (largest tally)/(avg nonzero tally)= 3.70816E+00
 (confidence interval shift)/mean = 0.0000 shifted confidence interval center = 3.41902E-03

if the largest history score sampled so far were to occur on the next history, the tfc bin quantities would change as follows:

estimated quantities	value at nps	value at nps+1	value(nps+1)/value(nps)-1.
mean	3.41901E-03	3.41908E-03	0.000021
relative error	2.70980E-03	2.70983E-03	0.000009
variance of the variance	1.22186E-05	1.22206E-05	0.000167
shifted center	3.41902E-03	3.41902E-03	0.000000
figure of merit	1.90806E+03	1.90803E+03	-0.000017

the estimated slope of the 196 largest tallies starting at 1.83690E+00 appears to be decreasing at least exponentially.

the large score tail of the empirical history score probability density function appears to have no unsampled regions.

=====

results of 10 statistical checks for the estimated answer for the tally fluctuation chart (tfc) bin of tally 4

tfc bin	--mean--	-----relative error-----			----variance of the variance----			--figure of merit--		-pdf-
behavior	behavior	value	decrease	decrease rate	value	decrease	decrease rate	value	behavior	
desired	random	<0.10	yes	1/sqrt(nps)	<0.10	yes	1/nps	constant	random	
observed	random	0.00	yes	yes	0.00	yes	yes	constant	random	
passed?	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	

=====

this tally meets the statistical criteria used to form confidence intervals: check the tally fluctuation chart to verify. the results in other bins associated with this tally may not meet these statistical criteria.

estimated asymmetric confidence interval(1,2,3 sigma): 3.4098E-03 to 3.4283E-03; 3.4005E-03 to 3.4376E-03; 3.3912E-03 to 3.4468E-03

estimated symmetric confidence interval(1,2,3 sigma): 3.4097E-03 to 3.4283E-03; 3.4005E-03 to 3.4375E-03; 3.3912E-03 to 3.4468E-03

fom = (histories/minute)*(f(x) signal-to-noise ratio)**2 = (4.203E+06)*(2.131E-02)**2 = (4.203E+06)*(4.539E-04) = 1.908E+03

1status of the statistical checks used to form confidence intervals for the mean for each tally bin

tally result of statistical checks for the tfc bin (the first check not passed is listed) and error magnitude check for all bins

4 passed the 10 statistical checks for the tally fluctuation chart bin result
missed all bin error check: 1003 tally bins had 268 bins with zeros and 480 bins with relative errors exceeding 0.10

the 10 statistical checks are only for the tally fluctuation chart bin and do not apply to other tally bins.

the tally bins with zeros may or may not be correct: compare the source, cutoffs, multipliers, et cetera with the tally bins.

warning. 1 of the 1 tallies had bins with relative errors greater than recommended.
1tally fluctuation charts

	tally	4				
nps	mean	error	vov	slope	fom	
16384000	3.3792E-03	0.0117	0.0002	10.0	1870	
32768000	3.3796E-03	0.0082	0.0001	10.0	1878	
49152000	3.3787E-03	0.0067	0.0001	10.0	1879	
65536000	3.3881E-03	0.0058	0.0001	10.0	1882	
81920000	3.3924E-03	0.0052	0.0000	10.0	1887	
98304000	3.4020E-03	0.0048	0.0000	10.0	1891	
114688000	3.4142E-03	0.0044	0.0000	10.0	1898	
131072000	3.4201E-03	0.0041	0.0000	10.0	1900	
147456000	3.4218E-03	0.0039	0.0000	10.0	1903	
163840000	3.4242E-03	0.0037	0.0000	10.0	1905	
180224000	3.4261E-03	0.0035	0.0000	10.0	1908	
196608000	3.4231E-03	0.0033	0.0000	10.0	1908	
212992000	3.4215E-03	0.0032	0.0000	10.0	1908	
229376000	3.4231E-03	0.0031	0.0000	10.0	1910	
245760000	3.4202E-03	0.0030	0.0000	10.0	1910	
262144000	3.4233E-03	0.0029	0.0000	10.0	1910	
278528000	3.4235E-03	0.0028	0.0000	10.0	1910	
294912000	3.4205E-03	0.0027	0.0000	10.0	1909	
300000000	3.4190E-03	0.0027	0.0000	10.0	1908	

dump no. 6 on file runtpe nps = 300000000 coll = 32994406 ctm = 71.37 nrn = 2053371434

3 warning messages so far.

run terminated when 300000000 particle histories were done.

computer time = 71.38 minutes

mcnp version 2.5.0 Mon Mar 21 08:00:00 MST 2005 11/11/13 13:58:36 probid = 11/11/13
12:46:56

Anexo V

Retas de sensibilidade dos elementos constituintes da amostra padrão analisada:

