JOURNAL OF SYNCHROTRON RADIATION

Volume 25 (2018)

Supporting information for article:

Elemental fingerprinting of mineral species in iron-fortified milk: anomalous small-angle X-ray scattering (ASAXS) and resonant soft X-ray scattering (RSoXS) studies

Bridget Ingham, Nigel Kirby, Cheng Wang, Mike Brady and Alistair Carr

Table S1 Compositions of the various components in skim milk (at%).

Element	Micelle	Solution^	Windows	Total*
H	48.76	65.37		39.33
C	28.88	2.10		1.26
N	3.42	0.25	57.14	22.91
O	18.46	32.25		19.40
Si			42.86	17.07
P	0.17	0.012		0.007
S	0.07	0.005		0.003
Ca	0.17	0.012		0.007
Fe (10 mM)	0.08	0.006		0.004
Total	100.00	100.00	100.00	100.00

^ Comprising 3.14 wt% micelles, 0.63 wt% whey protein, 5.23 wt% lactose, 91.00 wt% water

* Assuming 1 µm thick solution layer having density 1.039 g.cm^{-3} and 2 × 100 nm thick windows having density 3.44 g.cm^{-3} (total thickness is therefore t_s = 1.2 µm).

Table S2 Fluorescence lines and attenuation effects of elements with significant contributions.

		f'' at fluorescence				α_i at fluorescence^			
		C	N	O	Si	C	N	O	Si
Element	E_b [eV]	277 eV	394 eV	526 eV	96.1 eV	277 eV	394 eV	526 eV	96.1 eV
H	14	0.003	0.001	0.001	0.030	462	147	57	13048
C	284	0.155	2.781	1.808	0.728	1964	24733	12044	26576
N	410	0.348	0.171	3.019	1.517	3771	1302	17240	47444
O	543	0.636	0.374	0.239	2.675	6046	2496	1193	73269
Si	99	6.972	4.678	3.081	0.481	37728	17786	8776	7499
P	135	8.401	5.904	4.056	0.669	41231	20359	10478	9468
S	163	10.07	7.408	5.186	1.120	47718	24670	12939	15310
Ca	346	1.833	13.26	10.98	2.025	6953	35335	21914	22145
Fe	707	6.011	4.080	2.843	7.600	16359	7801	4073	59638
Average*						8690	4194	5857	31840

^ $\alpha_i = \frac{2r_e\lambda}{A_i m_{u,i}} f''(E)$

* Average $= \sum_i c_i \alpha_i$ where c_i values are given in Table S1.

Table S3 Fluorescence terms below the Ca absorption edge (340 eV), assuming the compositions given in Table S1.

Element	τ	ω_k	f’	α	μ_f	Total = $\tau.\ \omega_k$ .at%.μ_f
Solution						
H	4.31×10^{2}	0	0.002	2.45×10^{2}	0	
C	7.61×10^{5}	2.8×10^{-3}	3.419	3.53×10^{4}	4.98×10^{-5}	1.34×10^{-3}
N	6.28×10^{4}	0	0.244	2.15×10^{3}	6.51×10^{-5}	
O	1.01×10^{5}	0	0.477	3.69×10^{3}	5.88×10^{-5}	
P	1.46×10^{6}	6.5×10^{-4}	6.948	2.78×10^{4}	0	
S	1.79×10^{6}	5.2×10^{-4}	8.545	3.30×10^{4}	0	
Ca	3.10×10^{5}	0	1.599	4.94×10^{3}	0	
Fe	9.09×10^{5}	0	5.033	1.12×10^{4}	0	
Windows						
N	6.28×10^{4}	0	0.244	2.15×10^{3}	6.51×10^{-5}	
Si	1.13×10^{6}	7.5×10^{-4}	5.698	2.51×10^{4}	1.79×10^{-5}	2.59×10^{-3}
Solution						**1.34×10^{-3}**
Windows						**2.59×10^{-3}**
Total				**6.04×10^{3}**		**3.93×10^{-3}**

Table S4 Fluorescence terms above the Ca absorption edge (360 eV), assuming the compositions given in Table S1.

Element	τ	ω_k	f’	α	μ_f	Total = $\tau.\ \omega_k$ .at%.μ_f
Solution						
H	3.62×10^{2}	0	0.002	2.15×10^{2}	0	
C	6.64×10^{5}	2.8×10^{-3}	3.288	3.20×10^{4}	5.16×10^{-5}	1.21×10^{-3}
N	5.49×10^{4}	0	0.227	1.89×10^{3}	6.72×10^{-5}	
O	8.80×10^{4}	0	0.454	3.32×10^{3}	6.08×10^{-5}	
P	1.31×10^{6}	6.5×10^{-4}	6.727	2.54×10^{4}	0	
S	1.62×10^{6}	5.2×10^{-4}	8.308	3.03×10^{4}	0	
Ca	2.71×10^{6}	6.6×10^{-4}	14.78	4.31×10^{4}	0	
Fe	8.17×10^{5}	0	4.816	1.01×10^{4}	0	
Windows						
N	5.49×10^{4}	0	0.227	1.89×10^{3}	6.72×10^{-5}	
Si	9.90×10^{5}	7.5×10^{-4}	5.503	2.29×10^{4}	1.88×10^{-5}	2.39×10^{-3}
Solution						**1.21×10^{-3}**
Windows						**2.39×10^{-3}**
Total				**5.48×10^{3}**		**3.60×10^{-3}**

Table S5 Fluorescence terms below the Fe absorption edge (700 eV), assuming the compositions given in Table S1.

Element	τ	ω_k	f’	α	μ_f	Total = $\tau.\ \omega_k$ .at%.μ_f
Solution						
H	3.72×10^{1}	0	0.0004	2.29×10^{1}	0	
C	1.17×10^{5}	2.8×10^{-3}	1.195	5.99×10^{3}	5.30×10^{-5}	2.19×10^{-4}
N	1.97×10^{5}	5.2×10^{-3}	2.010	8.63×10^{3}	6.89×10^{-5}	1.06×10^{-4}
O	3.05×10^{5}	8.3×10^{-3}	3.104	1.17×10^{4}	6.24×10^{-5}	3.07×10^{-2}
P	2.63×10^{5}	6.5×10^{-4}	2.671	5.19×10^{3}	0	
S	3.46×10^{5}	5.2×10^{-4}	3.514	6.59×10^{3}	0	
Ca	7.71×10^{5}	9.7×10^{-4}	7.788	1.17×10^{4}	0	
Fe	2.02×10^{5}	0	2.049	2.21×10^{3}	0	
Windows						
N	1.97×10^{5}	5.2×10^{-3}	2.010	8.63×10^{3}	6.89×10^{-5}	1.61×10^{-2}
Si	1.96×10^{5}	7.5×10^{-4}	1.990	4.26×10^{3}	1.95×10^{-5}	4.89×10^{-4}
Solution						$\mathbf{3.10 \times 10^{-2}}$
Windows						$\mathbf{1.66 \times 10^{-2}}$
Total				$\mathbf{5.05 \times 10^{3}}$		$\mathbf{4.76 \times 10^{-2}}$

Table S6 Fluorescence terms above the Fe absorption edge (720 eV), assuming the compositions given in Table S1.

Element	τ	ω_k	f''	α	μ_f	Total = $\tau.\ \omega_k$ .at%.μ_f
Solution						
H	3.42×10^{1}	0	0.0004	2.10×10^{1}	0	
C	1.09×10^{5}	2.8×10^{-3}	1.154	5.62×10^{3}	5.41×10^{-5}	2.09×10^{-4}
N	1.85×10^{5}	5.2×10^{-3}	1.937	8.08×10^{3}	7.02×10^{-5}	1.01×10^{-4}
O	2.87×10^{5}	8.3×10^{-3}	3.007	1.10×10^{4}	6.36×10^{-5}	2.93×10^{-2}
P	2.46×10^{5}	6.5×10^{-4}	2.579	4.87×10^{3}	0	
S	3.24×10^{5}	5.2×10^{-4}	3.398	6.20×10^{3}	0	
Ca	7.26×10^{5}	9.7×10^{-4}	7.568	1.10×10^{4}	0	
Fe	1.43×10^{6}	1.26×10^{-2}	17.02	1.78×10^{4}	0	
Windows						
N	1.85×10^{5}	5.2×10^{-3}	1.937	8.08×10^{3}	7.02×10^{-5}	1.54×10^{-2}
Si	1.83×10^{5}	7.5×10^{-4}	1.917	3.99×10^{3}	2.01×10^{-5}	4.70×10^{-4}
Solution						**2.96×10^{-2}**
Windows						**1.59×10^{-2}**
Total				**4.75×10^{3}**		**4.55×10^{-2}**