

ESTUDOS SOBRE MONOCROMADORES DE ULTRA VIOLETA DE VACUO
E RAIOS X MOLES

por

Eunice d' Avila Samogin

Orientador: Prof. Dr. Antonio R. Britto de Castro†

Este exemplar corresponde à peça final
da tese de mestrado defendida pela aluna
Eunice d'Avila Samogin e aprovada pela
Banca Examinadora.

Campinas 18 set 1991

A. Rubens B. de Castro

Tese apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin
da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP,
como parte dos requisitos necessários
para a obtenção do título de Mestre em Ciências
Campinas, 30 de agosto de 1991

RESUMO

Nesta monografia, discutimos sobre alguns aspectos da ótica de monocromadores para Radiação Síncrotron na faixa de VUV e Raios X Moles (10eV - 1000eV). Apresentamos os conceitos e resultados teóricos envolvidos no projeto ótico de um monocromador e com o uso de um programa de traçado de raios, avaliamos o desempenho de monocromadores de elementos esféricos (SGM) e toroidais (TGMD). Fizemos também o traçado de raios de um sistema ótico SGM projetado para obter alto poder resolutivo na faixa de 250eV a 1000eV.

ABSTRACT

In this monograph we discuss about some aspects of VUV and Soft X Ray (10eV - 1000eV) monochromators for Synchrotron Radiation. We show the basic concepts and theoretical results involved in the optical project of a monochromator, and we use a ray tracing program to evaluate the performance of spherical (SGM) and toroidal (TGM) elements monochromators. We also made the ray tracing for a optical system (SGM) designed for obtain high resolving power in the range of 250eV to 1000eV.

AGRADECIMENTOS

Ao prof. Rubens, pela disponibilidade e atenção com as quais sempre orientou este trabalho,

Aos meus pais e às minhas irmãs, pelo incentivo e apoio,

A Míriam e à Marina, sempre dividindo comigo os "altos e baixos" desta nossa vida "sacrificada" de físicas,

Ao Paulo de Tarso, pelas discussões muito úteis sobre monocromadores, ao "Zig", pela solução dos meus "intrincados" problemas de computação,

A todos do grupo de instrumentação do LNLS,

Ao pessoal do laboratório 104 do DEQ - IFGW pelo uso da sala de estudos e do micro,

Ao CNPq, cujo apoio financeiro contribuiu para a execução deste trabalho.

INDICE

I) Introdução.....	03
II) Radiação Síncrotron	
II.1) Historico	05
II.2) Teoria	07
II.3) Fonte Síncrotron.....	13
III) Monocromadores	
III.1) Classificação.....	17
III.2) Refletividade.....	20
III.3) Aspectos do "design" de monocromadores de rede.....	23
III.4) Aberrações.....	30
III.5) Tipos de monocromadores.....	43
IV) Projeto Ótico	
IV.1) Uso do programa "Shadow".....	53
IV.2) Projeto.....	58
V) Conclusão.....	85
Referências.....	87

1) Introdução

O advento da luz síncrotron representou uma nova era no desenvolvimento de ciência básica e tecnologia em todo o mundo. Suas características peculiares de espectro contínuo, polarização e estrutura de tempo, representam um recurso de fundamental importância em espectroscopia.

Com a construção de "anéis de armazenamento", o laboratório de pesquisa ganhou um caráter interdisciplinar, abrigando diversas aplicações.

Existem cerca de 20 anéis de armazenamento no mundo distribuídos entre centros de pesquisa europeus e norte americanos. No Brasil, o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron já tem construído o acelerador linear de elétrons, que é a primeira etapa do seu projeto de construção de uma fonte síncrotron. Ao mesmo tempo, o LCLS desenvolve junto a universidades e outros institutos de pesquisa, os projetos para construção de estações experimentais e a instrumentação necessária.

Este trabalho de tese espera ser uma contribuição para as atividades em andamento no LNLS e para o trabalho de pesquisadores da área.

II) Radiação Síncrotron

II.1) Histórico

A radiação síncrotron foi observada pela primeira vez em 1947 por Floyd Haber, um técnico do síncrotron de 70 MeV da General Electric⁽¹⁾. Nessa época, os síncrotrons funcionavam apenas como aceleradores de partículas para a pesquisa em física nuclear. Mas os resultados teóricos sobre a radiação emitida dos aceleradores suscitaram o interesse científico na utilização dessa radiação como uma fonte de luz espectroscópica.

A partir de meados da década de 50, surgiram os primeiros trabalhos desse tipo e muitos aceleradores (de elétrons) passaram a exercer a função extra de "fontes de luz". Entretanto, devido a sua própria concepção, os síncrotrons não eram fontes adequadas: a intensidade da radiação emitida e o espectro produzido variavam com a órbita do elétron e muito tempo era gasto entre uma e outra injeção⁽²⁾ da fonte.

Com o avanço tecnológico, foram construídos, por volta de 1975, os "anéis de armazenamento" ou o que poderíamos realmente chamar de fonte ou "lâmpada" de luz síncrotron. Utilizados até hoje, essas estruturas permitem a realização simultânea de um grande número de pesquisas e aplicações, nas diversas áreas da ciência, em especial aquelas que utilizam a faixa de ultravioleta de vácuo e raios X (acima de 10eV), onde não existe fonte de radiação mais adequada.

Na última década, a sofisticada tecnologia da radiação síncrotron se manifesta através dos dispositivos de inserção ("wigglers" e onduladores) que deslocam o pico do espectro de emissão e colimam o feixe, além de possibilitar uma certa monocromatização (no caso de onduladores).

II.2) Teoria

Apresentamos nesta seção, os resultados teóricos sobre emissão de radiação por cargas aceleradas⁽²⁾, a fim de determinar as principais características da radiação síncrotron.

Consideremos um elétron relativístico descrevendo uma trajetória $\vec{r}(t)$ arbitrária, com velocidade $\vec{v}(t)$ e momento $\vec{p}(t) = \gamma m \vec{v}(t)$, onde $\gamma = (1-\beta^2)^{-1/2} \gg 1$. Das equações para os campos radiantes \vec{E} , \vec{B} podemos derivar a expressão para a distribuição angular de potência emitida pelo elétron:

$$\frac{dP(t)}{d\Omega} = \frac{q^2}{4\pi c} \left[\frac{\|\vec{n} \times (\dot{\vec{n}} - \dot{\vec{\beta}} \times \vec{\beta})\|^2}{(1 - \vec{n} \cdot \vec{\beta})^3} \right]_{t' = (t - (r-r')(t')/c)}$$

onde t' é o "tempo retardado" (ou o instante em que o elétron emitiu a radiação) e \vec{n} é o versor na direção de propagação dos campos, que tomamos aproximadamente constante em t' . Para órbitas circulares no plano xz , com \vec{n} apontando na direção radial \vec{r} , a expressão que se obtém para $dP/d\Omega$ tem um

pré-fator com denominador igual à $(1 - \beta \cos \theta)^3$. Portanto a potência irradiada é máxima para θ nulo. Fazendo a aproximação em série para θ pequeno, obtemos:

$$\frac{dP(t)}{d\Omega} = \frac{q^2 \dot{\beta}^2}{4\pi c} \frac{8 \gamma^6}{(1 + \gamma^2 \theta^2)^3} \left[\frac{1 - 4 \gamma^2 \theta^2 \cos^2 \phi}{(1 + \gamma^2 \theta^2)^2} \right]$$

Para $\phi = \mp \pi/2$ (plano zy) a distribuição espectral é mais larga e só é significativa para $\theta \cong 1/\gamma$. Para um síncrotron esse valor define a divergência vertical do feixe, que em geral é da ordem de 1 mrad.

Uma outra característica muito peculiar da radiação síncrotron é a sua distribuição angular de energia em função da frequência ω e da polarização ϵ . Neste caso, consideramos que a função $P(t)$ seja localizada no tempo (o elétron sofre aceleração num intervalo de tempo finito). A energia total irradiada por ângulo sólido $dW/d\Omega$ dada por $\int (dP(t)/d\Omega) dt$ pode ser expressa em termos das componentes de Fourier (componentes espectrais) do campo elétrico \vec{E} . O valor de

$dW/d\Omega$ é a integral do módulo dessas componentes que podemos escrever de maneira mais geral, para uma dada direção de polarização \hat{e} .

Para um elétron que descreve uma pequena variação angular em sua órbita retílinea, de modo que $v t / \rho \ll 1$, onde ρ é o raio de curvatura, obtém-se para a energia irradiada com polarização \hat{e} , por intervalo de ângulo sólido e por intervalo de frequência:

$$\frac{dI(\omega, \hat{e})}{d\Omega} = \frac{q^2 \omega^2 \rho^2}{3\pi^2 c^3} \left[\frac{1}{\gamma^2} + \theta^2 \right]^2 \left| \hat{e} \cdot \hat{e}_\perp \frac{\theta K_{1/3}(\xi)}{(1/\gamma^2 + \theta^2)^{1/2}} - i \hat{e} \cdot \hat{e}_\parallel K_{2/3}(\xi) \right|^2$$

onde \hat{e}_\perp \hat{e}_\parallel são versores perpendicular e paralelo ao plano da órbita, o argumento $\xi = (\rho \omega / 3c) (1/\gamma^2 + \theta^2)^{3/2}$ e $K_{1/3}(\xi)$ e $K_{2/3}(\xi)$ são funções de Bessel modificadas⁽⁴⁾. Por causa do comportamento dessas funções, a intensidade decresce para ω acima e abaixo de um certo valor ω_c , que definimos a seguir.

Teoricamente o espectro produzido abrange desde a frequência ω_0 do movimento circular do elétron até a

frequência correspondente ao intervalo Δt em que a radiação foi emitida, no referencial do observador. Em anéis de armazenamento a faixa útil vai do infravermelho ao raio X (1 eV a 10000 eV).

Define-se para a distribuição espectral no plano da órbita, a frequência crítica ω_c , a partir de $\xi = 1$. Essa frequência, cujo valor é $3\gamma^3\omega_0$, divide o espectro de distribuição de energia em duas regiões de mesma área. ou seja, regiões de mesma energia total irradiada.

A figura 2 ⁽⁵⁾ mostra o espectro calculado para a radiação de "bending magnet" dos anéis de armazenamento projetados para o LNS, com as respectivas energias críticas E_c . Resumindo, as principais características da radiação síncrotron são:

- 1) espectro contínuo do infravermelho ao raio X
- 2) divergência vertical da ordem de 1mrad
- 3) campo elétrico com polarização linear no plano da órbita, para um observador nesse plano

4) campo elétrico com polarização elíptica quando o observador está acima ou abaixo do plano da órbita

5) pulsos de radiação de 100 ps de duração

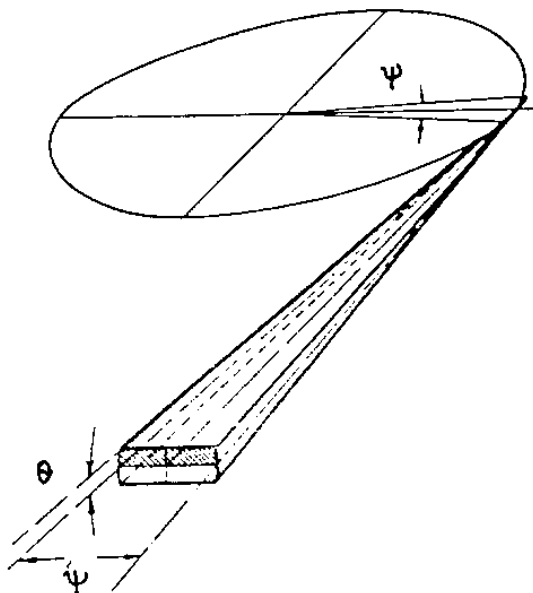


Fig.1 - Distribuição angular de potência (ref.2)

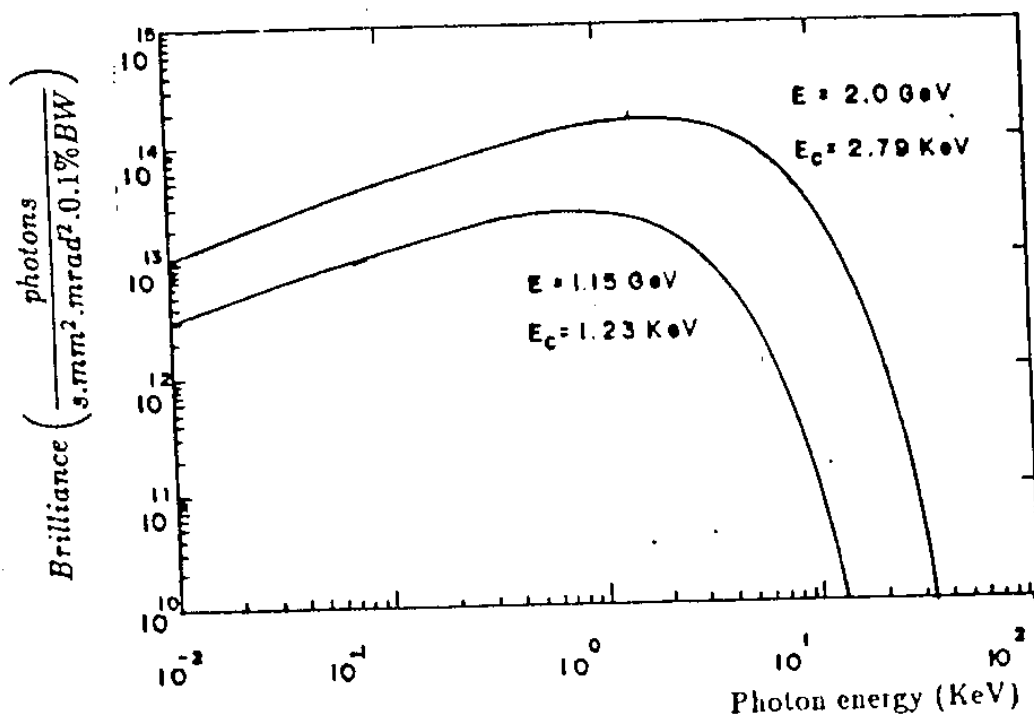


Fig.2 - Espectro calculado para a radiação emitida por "bending magnets" do LNSL (ref.5)

II.3) Fonte Síncrotron

A fonte, ou anel de armazenamento constitui-se de uma câmara metálica, onde os elétrons "circulam" sob condição de ultra alto vácuo (10^{-10} torr), emitindo radiação quando defletidos. A deflexão é causada por dipolos magnéticos ("bending magnets") com campos da ordem de 1 Tesla (10^4 gauss) e a radiação produzida tem as características definidas na seção anterior. Outros ímãs, de campos de quadrupolo e sextupolo são utilizados para manter a focalização do feixe de elétrons.

A figura 3 (2) mostra o esquema do síncrotron do NSLS (National Synchrotron Light Source, Brookhaven, EUA), indicando a disposição desses e outros componentes em uma unidade básica do anel.

Antes de "entrarem" no anel, os elétrons são acelerados em duas etapas: de 50 a 100 MeV por um acelerador linear ("Linac") e de 100 a 700 MeV por um síncrotron ("booster").

No síncrotron "booster", os elétrons são acelerados a cada volta pela radiação de microonda na faixa de 500 MHz, proveniente de uma válvula klystron. Este procedimento dá origem a "pulsos" de elétrons, cujo comprimento e duração (em geral da ordem de 20mm e 100 ps) dependem também dos parâmetros da rede do anel e da impedância da câmara de vácuo. Através de um processo semelhante, os elétrons são acelerados no anel de armazenamento até a energia de 2.5 GeV. Com esta energia, os elétrons produzem um espectro síncrotron de energia crítica igual a 4.3 KeV na saída do "bending magnet".

Nas seções retilíneas do anel podem ser instalados dispositivos de inserção, chamados "wigglers" e onduladores. Um "wiggler" é um estrutura magnética periódica que produz campos da ordem de 2 a 6 Tesla. O movimento oscilatório provocado nos elétrons produz um cone de radiação na direção da órbita mais estreito que o do "bending magnet" e com λ_c cinco vezes menor⁽⁶⁾. Um ondulador é um "wiggler" com um

grande número de períodos (acima de 50) e campo magnético mais fraco (cerca de 0.5 T). A interferência construtiva da radiação emitida nos vários períodos gera um espectro de mesmo λ_c que o do "bending magnet", com intensidade acentuada em uma pequena faixa ao redor de λ_c . A radiação sai do ondulator "monocromatizada".

Estruturas denominadas "linhas de luz" transportam a radiação emitida pelos ímãs para as estações experimentais, fazendo a transição do alto vácuo do anel (10^{-10} torr) para o vácuo da estação, que em geral é da ordem de 10^{-2} torr, para experimentos com raios X ($h\nu > 4$ KeV) e da ordem de 10^{-10} torr para experimentos com VUV (o alto vácuo é necessário pois a maioria dos materiais absorve radiação de VUV).

Ao longo dessas linhas são instalados os dispositivos monocromadores, que são o objeto de interesse neste trabalho.

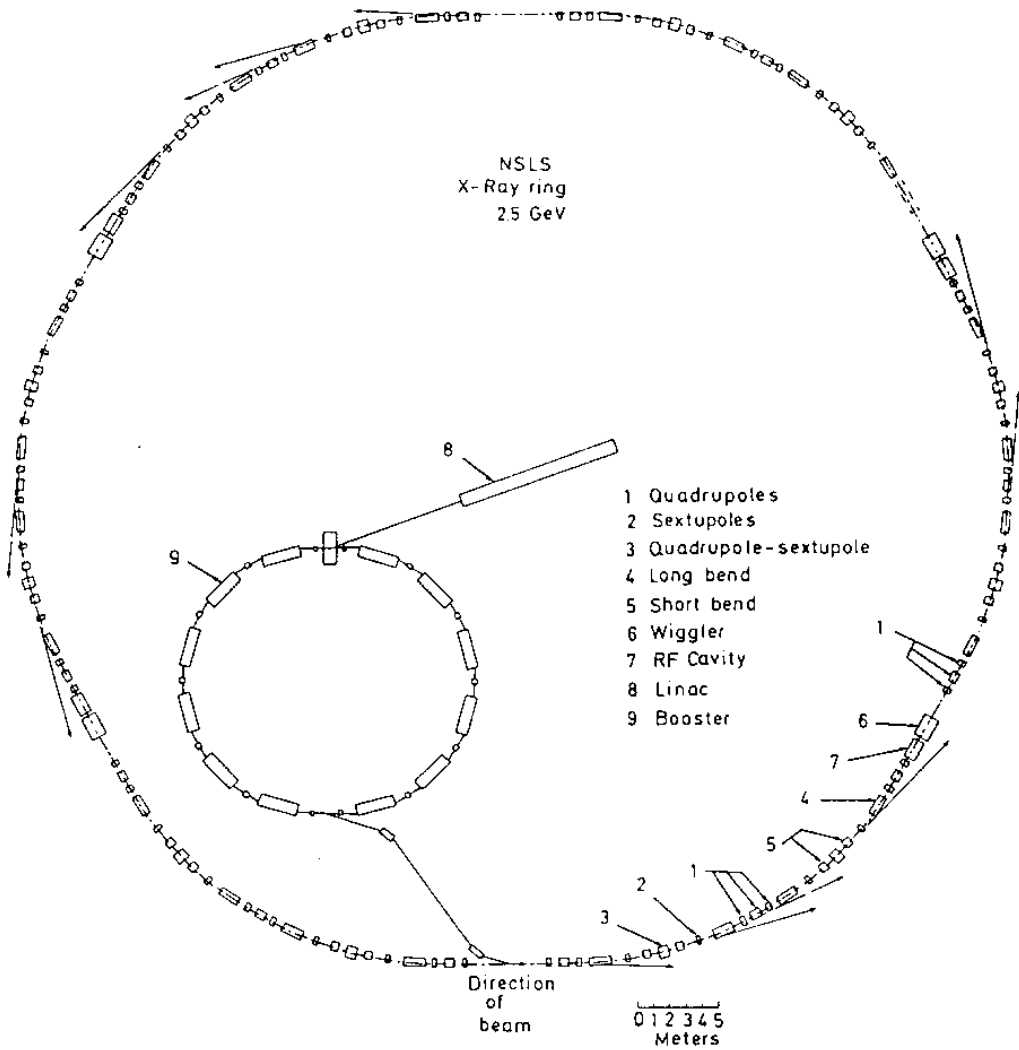


Fig 3 - Anel de Armazenamento do NSLS (Brookhaven, EUA) (ref. 2)

III) Monocromadores

III.1) Classificação

Monocromadores são instrumentos óticos que selecionam dentro do espectro da radiação síncrotron, uma faixa estreita de comprimentos de onda ou banda passante, compatível com um determinado experimento. Estes instrumentos compõem-se de espelhos focalizadores, fendas (em geral), e de um elemento dispersor do tipo rede ou cristal.

A tabela 1⁽⁷⁾ fornece uma estimativa numérica das regiões espectrais em que estes dispositivos são utilizados.

A região espectral que nos interessa é a região de VUV (vacuum ultraviolet) e raios X moles (300Å - 10Å; 40eV - 1200eV) onde são utilizadas redes de difração sob incidência rasante (ângulos da ordem de 2°).

A difração através de redes satisfaz a equação:

$$m\lambda = d (\text{sen}\alpha + \text{sen}\beta)$$

onde λ é o comprimento de onda, d é o espaçamento entre sulcos da rede e α, β os ângulos de incidência e difração e m

a ordem do espectro.

A difração por cristais é regida pela equação de Bragg:

$$m\lambda = 2d \sin\theta$$

onde θ é o ângulo entre o raio incidente e o plano cristalino e d é a distância entre planos cristalinos paralelos. Como os ângulos de incidência e difração são iguais, somente um λ é difratado, sendo o resto da luz incidente absorvida. Portanto, os monocromadores cristalinos estão mais sujeitos à deformação térmica do que os monocromadores de rede.

A deformação térmica é uma questão importante na implementação de um projeto de monocromador. A potência incidente no primeiro elemento ótico pode ser da ordem de $100\text{W}/\text{cm}^2$ ou mais⁽⁸⁾, prejudicando o desempenho do sistema.

Neste trabalho, vamos tratar apenas do projeto ótico, considerando redes e espelhos como elementos óticos ideais.

Tabela 1 - Classificação de Monocromadores (ref.7)

$\lambda, \text{\AA}$; (E, eV)	Elemento Dispersor
0.7 - 4.0 (18000-3000)	Cristal
4.0 - 12.0 (3000-1000)	Cristais esp./redes in.ras.
12.0 - 300 (1000 - 40)	Redes de incidência rasante
300 - 3000 (40 - 4)	Redes de incidência normal

III.2) Refletividade

Os elementos óticos são usados em incidência rasante na faixa de VUV e raios X moles ($12\text{\AA} < \lambda < 300\text{\AA}$), porque a refletividade de qualquer material nessa faixa, só é significativa para ângulos rasantes de alguns graus ou menos.

Derivamos este resultado das condições de contorno do campo eletromagnético em uma interface vácuo-matéria. Supondo que o campo elétrico tenha uma polarização perpendicular ao plano de incidência, a refletividade é dada por:⁽⁹⁾

$$\left| \frac{\vec{E}_o''}{\vec{E}_o} \right|^2 = \left| \frac{\sin \theta - (\epsilon' - \cos^2 \theta)^{1/2}}{\sin \theta + (\epsilon' - \cos^2 \theta)^{1/2}} \right|^2$$

onde θ é o ângulo em relação à interface, ϵ' é a constante dielétrica do meio refletor e \vec{E}_o, \vec{E}_o'' os campos incidente e refletido.

Considerando que a constante dielétrica é uma quantidade complexa, escrevemos: $\epsilon' = x + iy$ e $||\epsilon'|| = (x^2 + y^2)^{1/2} = \rho$ onde x, y estão relacionados ao vetor de onda \vec{k} e ao

coeficiente de atenuação α da onda, que são funções da frequência⁽³⁾. A refletividade fica na forma:

$$\left| \frac{\vec{E}_o''}{\vec{E}_o} \right|^2 = \frac{\theta^2 - \theta^2 (2(\rho + \kappa))^{1/2} + \rho}{\theta^2 + \theta^2 (2(\rho + \kappa))^{1/2} + \rho}$$

A refletividade depende da frequência através de ϵ' , e desta maneira para cada componente do feixe existe um ângulo crítico de reflexão θ_c acima do qual a radiação é absorvida. As componentes com ângulo crítico menor que o ângulo de incidência do feixe, são absorvidas e o elemento ótico funciona como um filtro, "cortando" o espectro da radiação. Como exemplo, as figuras 4a,b mostram as curvas de refletividade para Pt,Au (metais que servem de recobrimento para os elementos óticos) e C, na região de VUV e raio X mole⁽²⁾.

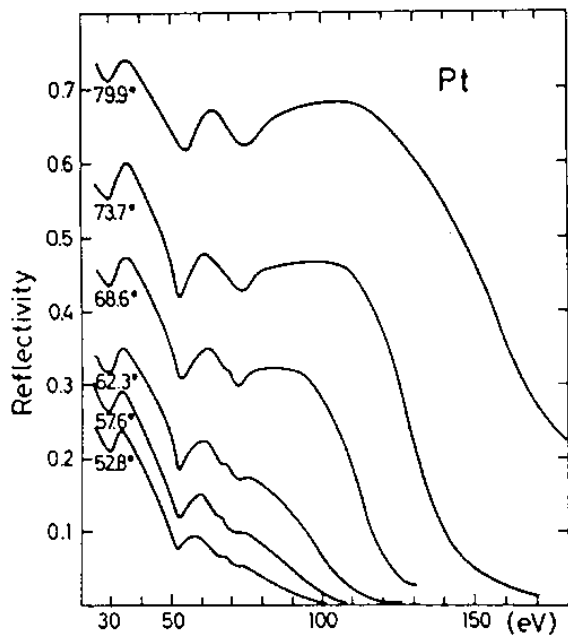


Fig.4a - Curvas de refletividade da Platina para energias de 30 a 150 eV e ângulos α de 52.8° a 79.9° (ref.2)

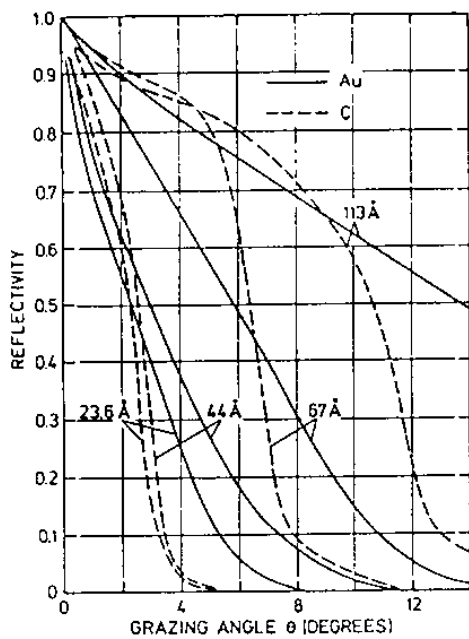


Fig.4b - Curvas de refletividade para o Au e C em função do ângulo e comprimento de onda (ref.2)

III.3) Aspectos do "design" de monocromadores de rede

a) direções fixas do feixe

Nas instalações síncrotron, é necessário usar monocromadores com direções fixas de entrada e saída do feixe, já que não é possível mover a fonte e nem é prático mover as câmaras experimentais. Deste modo, a varredura de λ se faz mais simples se utilizamos apenas a rotação da rede em torno de um eixo paralelo às ranhuras.

Da figura 5, podemos obter as relações entre ângulos α , β e o ângulo ϕ de rotação da rede e usando a equação da rede, temos para a varredura de λ :

$$\lambda = 2d \cos\theta \sin\phi$$

sendo $\phi, \beta < 0$ e $(\alpha - \beta) = 2\theta$ o ângulo de desvio constante.

Uma consequência importante de se conservar fixas as direções de entrada e saída é que para α ou β iguais a 90° , temos um comprimento de onda limite, acima do qual a eficiência da rede é nula. Os comprimentos de onda são difratados em ângulos β que não satisfazem a equação de

desvio constante e portanto são perdidos). Este comprimento de onda é chamado "comprimento de onda de horizonte" e dado por: $\lambda_H = (2\cos\theta)/Nm$, onde N é a densidade de linhas da rede, θ o ângulo de ordem zero e m a ordem de difração. O valor de N é escolhido de modo que o efeito de "horizonte" ocorra além da faixa espectral de interesse.

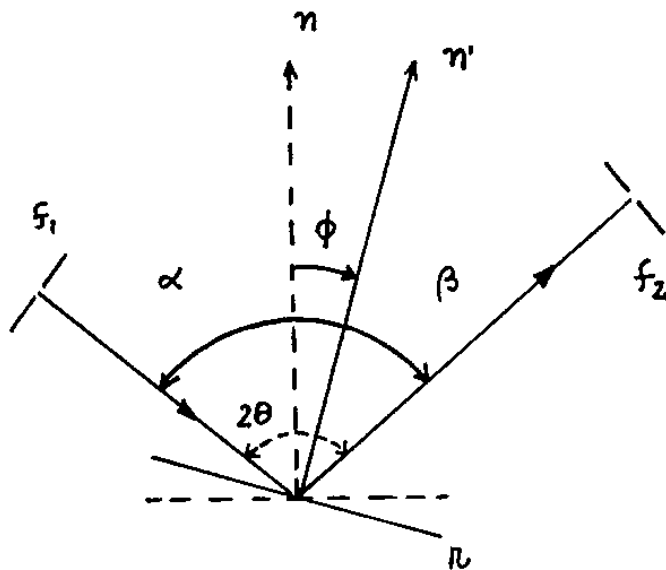


Fig.5 - Varredura angular da rede de difração com direções fixas de entrada e saída do feixe
 f_1, f_2 = fendas; r = rede

b) poder resolutivo

O poder resolutivo ($\lambda/\Delta\lambda$) ou ($E/\Delta E$) é o inverso da soma quadrática das bandas passantes devidas à aberração, tolerâncias na forma das superfícies, uso de fendas e deformação térmica dos elementos óticos, ou seja:

$$R.P. = \lambda/\Delta\lambda = [\sum (\Delta\lambda/\lambda)_i^2]^{-1/2}$$

onde o índice i se refere a cada uma das contribuições mencionadas e a sigla R.P. vem do inglês "resolving power". Excluindo o efeito da deformação térmica, o fator limitante do poder resolutivo sob condições de incidência rasante é a tolerância na forma⁽¹⁰⁾. Podemos estimar o valor r.m.s. dessa tolerância do seguinte modo: se o ângulo entre as normais das superfícies ideal e real do elemento ótico num dado ponto é δ , o desvio sofrido por um raio incidente neste ponto será 2δ e deverá corresponder à resolução espacial desejada no plano imagem. A banda passante relativa é dada por:

$$(\Delta\lambda/\lambda) = 2\delta \operatorname{ctg} \phi$$

onde ϕ é o ângulo de rotação da rede.

Usam-se fendas para bloquear parte da radiação que está fora da região espectral de interesse. A contribuição para a banda passante total é dada por:

$$(\Delta\lambda/\lambda) = (s/r) (\cos\alpha) / m (\sin\alpha + \sin\beta)$$

onde s é a largura da fenda, r a distância entre a rede e a fenda de entrada. Expressão análoga é válida para a fenda de saída.

O efeito das aberrações sobre o poder resolutivo será tratado na seção III.4 .

c) transmissão e "étendue"

A transmissão é a medida da eficiência total do monocromador e depende da montagem, refletividade e forma dos elementos do sistema ótico. Para um monocromador com rede e dois espelhos, por exemplo, podemos escrever a transmissão do sistema como:

$$T = R_1 \cdot R_2 \cdot E \cdot E'$$

onde $R_{1,2}$ é a refletividade de cada espelho, E a eficiência da rede e E' a razão entre a "étendue" do sistema e a emitância da fonte. Emitância é o produto da área da fonte pelo ângulo sólido emitido; étendue é o produto da área da abertura de entrada pelo ângulo sólido coletado.

Cada termo da equação anterior é descrito por expressões algébricas um tanto complicadas e relacionadas entre si pela dependência comum em λ , de modo que o cálculo teórico da transmissão não deva ser simples. Em laboratório, mede-se a transmissão em termos do fluxo de fótons por unidade de banda passante, numa dada energia do espectro.

Ao projetarmos um sistema ótico, queremos que o valor de T seja o mais próximo possível de 1. Considerando apenas os fatores geométricos, obtemos $T=1$ quando os elementos óticos têm a mesma "étendue". Nesta situação, o fluxo através do sistema pode ser calculado a partir da "étendue do feixe"⁽¹¹⁾: dadas uma fonte e uma abertura (fenda, elemento

ótico) a étendue do feixe é o produto entre um elemento de área da fonte e um elemento de ângulo sólido (visto da fonte) que subtende a abertura.

Conforme a figura abaixo, temos:

$$d^2U = \frac{dS \cos\alpha \, dS_A \cos\beta}{r^2} = dS \cos\alpha \, d\Omega \quad (1)$$

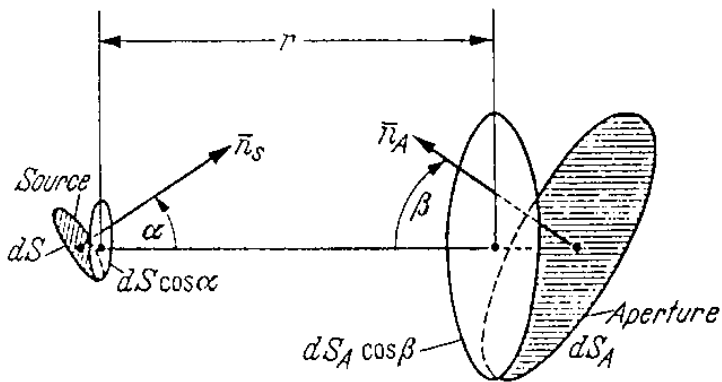


Fig. 6 - Geometria usada para cálculo do fluxo através de uma abertura (ref.11)

Se a fonte tem uma distribuição de fluxo por unidade de área e por unidade de ângulo sólido B ("brightness"), um feixe de raios "infinitesimal" que emerge da fonte, carrega um fluxo "infinitesimal" dado por: $d^2\phi = B dS \cos\alpha d\Omega$.

Então: $d^2\phi = B d^2U$; esta equação define o fluxo infinitesimal através da abertura, devido ao elemento de área dS da fonte. Integrando em $d\Omega$ e dS , o fluxo total que emerge da fonte e atravessa a abertura (subentendida pelo ângulo sólido Ω) fica dado por $\phi = B U$, considerando B constante para todos os pontos da fonte.

O ângulo sólido Ω define a "aceitação angular" (vertical e horizontal) do elemento ótico.

A étendue do feixe também é definida para a imagem formada pelo sistema ótico: é o produto da área da imagem pelo ângulo sólido Ω' que subentende a abertura, visto da imagem. Este ângulo é diferente de Ω , mas se os elementos óticos do sistema estão bem "casados" a étendue é a mesma.

III.4) Aberrações

Aberrações são deformações de imagem existentes em qualquer sistema ótico, porque as superfícies óticas reais em geral diferem da forma de frentes de onda com focos perfeitamente definidos. A determinação dessas deformações é feita através de cálculos analíticos e traçado de raios. No nosso caso, utiliza-se a ótica geométrica pois os comprimentos de onda envolvidos são muito menores que as dimensões do sistema ($\lambda/d = 100\text{\AA}/10\text{mm} = 10^{-6} \ll 1$).

A teoria da ótica geométrica baseia-se no conceito fundamental de caminho ótico, ou a distância percorrida pela radiação de comprimento de onda λ , num determinado tempo t . Os pontos do feixe de luz que têm o mesmo caminho ótico em relação ao objeto definem as superfícies de fase constante da onda chamadas "frentes de onda geométricas". Essas superfícies se repetem a cada período λ da onda e quando este é muito pequeno, podemos considerá-las "planas". Usando as equações de Maxwell e tomando $\lambda \rightarrow 0$, obtemos para uma onda de fase

$\phi(\vec{r}, t)$ arbitrária: ⁽⁹⁾

$$\nabla\phi \cdot \nabla\phi = (1/c^2) (\partial^2\phi / \partial t^2) \quad (1)$$

onde a solução das equações de Maxwell foi tomada como

$\vec{A} = \vec{A}_0 e^{i\phi(r,t)}$ (\vec{A} é o potencial vetor) e usamos a expansão

em série da fase $\phi(\vec{r}, t)$:

$$\phi(\vec{r}, t) = \phi_0 + \vec{r} \cdot \nabla\phi + t (\partial\phi / \partial t) + \dots \quad (1)$$

A equação (1) é a relação de dispersão da onda e é chamada de "equação do eikonal" (fase).

Como $\vec{k} = \nabla\phi$, temos $\nabla \times \vec{k} = 0$ e podemos escrever para uma superfície S, tal que \vec{k} lhe seja tangente: $\int (\nabla \times \vec{k}) \cdot \vec{n} dS = 0$

onde \vec{n} é o versor perpendicular ao elemento de área dS. Usando

o teorema de Stokes, temos $\oint_C \vec{k} \cdot d\vec{l} = 0$ para qualquer contorno

fechado C em S, com elemento de comprimento dl. Se isso ocorre

podemos dizer que a integral acima para quaisquer dois pontos

pontos $P_1(\vec{r}_1)$ e $P_2(\vec{r}_2)$ independe da trajetória, ou seja:

$$\delta \int_{P_1}^{P_2} \vec{k}_0 \cdot d\vec{r} = 0 ; \forall C$$

sendo \vec{k}_0 o versor na direção de \vec{k} e $\vec{dr} = \vec{dl}$.

Esta integral nada mais é que o caminho ótico entre os pontos P_1 e P_2 e a variação δ nula indica que se trata de um extremo. Esta equação estabelece o "Princípio de Fermat" da ótica geométrica e sua consequência imediata é a determinação de superfícies óticas livres de aberração.

No caso de um espelho com focos em pontos P_1 (objeto) e P_2 (imagem), a superfície ótica ideal tem a forma de um elipsóide, pois o caminho ótico entre os focos e um ponto P qualquer do espelho, deve ser constante. Em qualquer outro tipo de superfície refletora, essa condição não é satisfeita e então podemos esperar que se formem frentes de onda que irão convergir em pontos diferentes de P_2 , ou seja, haverá aberração.

Da equação $\delta(P_1 \ P \ P_2) = \text{constante}$, obtemos uma "superfície" de espalhadores pontuais separados por distâncias que sejam múltiplos inteiros de λ ; condição necessária para haver interferência construtiva em P_2 . Este

resultado não corresponde a uma superfície de forma definida.

Uma rede de difração de forma qualquer satisfaz o princípio de Fermat, em parte. Podemos então, sempre esperar aberração no plano imagem da rede.

O método para se determinar expressões analíticas das aberrações consiste em expandir em série a diferença entre os caminhos óticos das frentes de onda ideal (gaussiana) e "aberrada".

Olhemos para a figura 7 . Um raio de luz (P_1M) parte do objeto, atravessa o sistema ótico (MP) e atinge o plano imagem em $P_2(x,y)$. Este ponto é a imagem gaussiana do objeto e seria o ponto final da trajetória do raio, se não fossem as aberrações do sistema. Nesta situação, a frente de onda produzida pelo sistema seria uma frente de onda esférica S com centro em $P_2(x,y)$.

Considerando as aberrações, a frente de onda emergente é uma frente de onda Σ que converge para o ponto $P_2'(x',y')$.

Pela figura, o raio $\overline{PP_2'}$ corta a superfície Σ no ponto

Q' é a superfície S no ponto Q.

O desvio $\overline{P_2'P_2}$ define a "aberração do raio" e está relacionado à diferença entre caminhos óticos $\overline{Q'Q} = \Phi(r)$, por (12);

$$\Delta x = (x-x') = \frac{R'}{n_1} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \qquad \Delta y = (y-y') = \frac{R'}{n_1} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \qquad (2)$$

onde R' é a distância $\overline{QP_2}$ e n_1 o índice de refração do meio onde está a imagem (no nosso caso, objeto e imagem estão no vácuo, $n_1 = 1$).

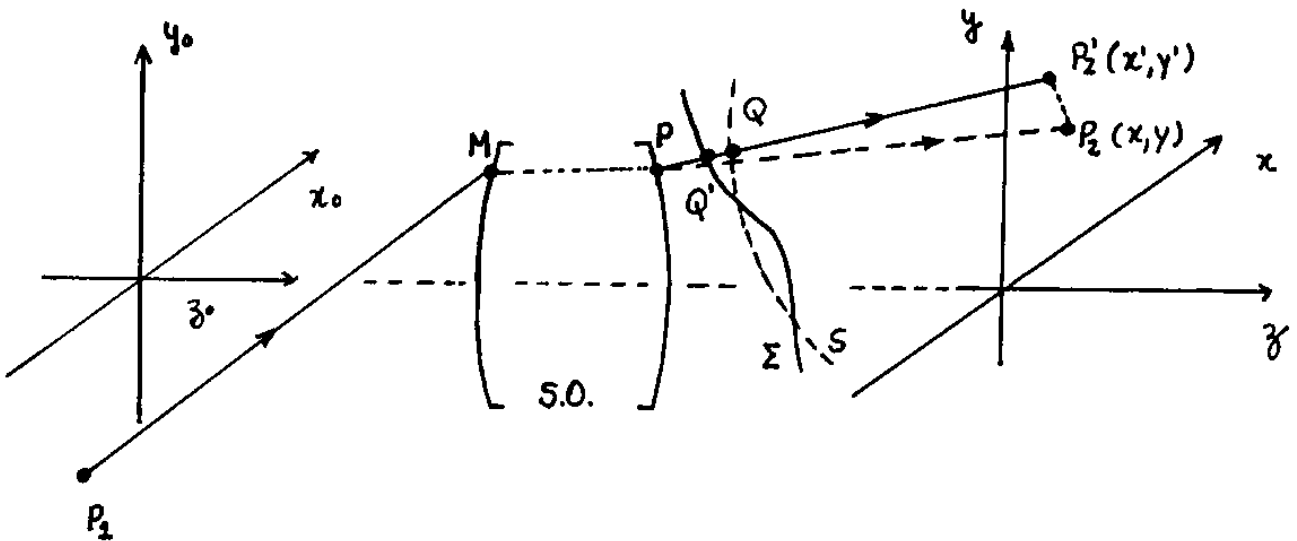


Figura 7 - Teoria de aberrações (ref.12)

A função $\bar{\Phi}(r)$ só depende das coordenadas do objeto (x_0, y_0) e do ponto P (x, y) e se supomos que ela é simétrica ao redor do eixo z, podemos expressá-la como uma série de potências da seguinte forma⁽¹¹⁾:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(x, y, x_0, y_0) = & a_1 (x_0^2 + y_0^2) + b_1 (x^2 + y^2)^2 + b_2 (x_0 x + y_0 y) \\ & (x^2 + y^2) + b_3 (x_0 x + y_0 y)^2 + b_4 (x_0^2 x^2 + y_0^2 y^2) (x^2 + y^2) + \\ & + b_5 (x_0 x + y_0 y) (x_0^2 + y_0^2) + b_6 (x_0^2 + y_0^2)^2 + \dots \end{aligned}$$

O termo a_1 corresponde à teoria gaussiana da formação de imagens. É válida para raios muito próximos do eixo ótico denominados "paraxiais" que resultam na imagem ideal do sistema. Os outros termos se devem às aberrações e em especial, os termos b_1, \dots, b_6 são chamados de "aberrações de Seidel".

Os cálculos dos coeficientes são muito extensos, e podem ser feitos de várias maneiras⁽¹²⁾. Em geral, costuma-se calcular até os termos das aberrações de Seidel e completar o estudo com o uso da técnica de traçado de raios.

a) Cálculos Analíticos

Os coeficientes b_i que em geral são utilizados para determinar as aberrações de um monocromador, resultam do tratamento sobre formação de imagens por redes, desenvolvido por Seya e Namioka⁽¹⁹⁾. A figura 8 mostra a geometria utilizada e a expansão em série obtida.

A superfície foi considerada toroidal, com simetria em relação ao plano de incidência e ao plano perpendicular a este, e com os raios R (maior) e ρ (menor) medidos no centro $(0,0,0)$ da rede. Conforme a figura, ao ponto objeto A_0 corresponde o ponto imagem B_0 , que é sua imagem gaussiana (ideal). As distâncias r, r' são as distâncias focais medidas no centro da rede. Os raios de luz difratados em pontos $P(x,w,l)$ diferentes de $(0,0,0)$ correspondem a frentes de onda "aberradas" e são desviados da trajetória \overline{OB} . Expandindo o caminho ótico F entre os pontos A e B nas coordenadas do ponto P , podemos identificar no caso de um objeto puntual ($A=A_0$), os coeficientes F_{ijk} da série como os vários "tipos"

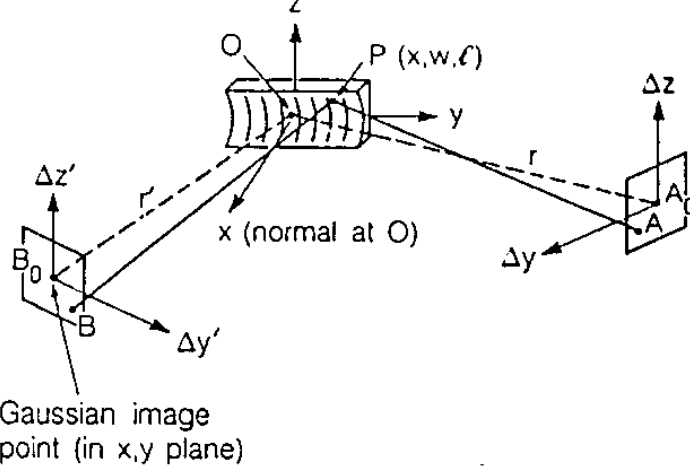
de aberração do sistema ótico.

Na figura 8, estes coeficientes estão dados em termos das coordenadas polares (r, α) e da dimensão Δz do objeto. A somatória Σ indica que um fator idêntico, em termos das coordenadas (r', β) e da dimensão $\Delta z'$ da imagem, deve ser acrescentado.

Usando a expressão (2), os coeficientes F_{ijk} ficam relacionados aos desvios Δy e Δz no plano imagem por:

$$\Delta y_{ijk} = \frac{r'}{\cos \beta} \frac{d (w^i l^j F_{ijk})}{d w} \quad \Delta z_{ijk} = r' \frac{d (w^i l^j F_{ijk})}{d l}$$

Com o princípio de Fermat, os termos F_{100} (equação da rede) e F_{011} (equação do aumento relativo) são necessariamente nulos, porque o caminho ótico é um extremo. Dos termos seguintes, queremos anular o F_{200} (desfocalização) e podemos fazê-lo para dois comprimentos de onda por exemplo. Nenhum outro termo pode ser anulado, por falta de parâmetros.



$$F = F_{000} + wF_{100} + lF_{011} + wlF_{111} + \frac{1}{2}wF_{102} + \frac{1}{2}w^2F_{200} + \frac{1}{2}l^2F_{020} + \frac{1}{2}wl^2F_{120} + \frac{1}{2}w^3F_{300} + \frac{1}{8}w^4F_{400} + \dots w^{\frac{1}{2}}l^{\frac{1}{2}}F_{11k}(\Delta z^k) + \dots$$

$F_{000} = \sum r$	Constant term
$F_{100} = \frac{m\lambda}{d} - \sum \sin\alpha$	Grating equation
$F_{011} = - \sum \frac{\Delta z}{r}$	Magnification
$F_{111} = - \sum \frac{\Delta z \cdot \sin\alpha}{r^2}$	Line shape
$F_{102} = \sum \frac{\Delta z^2 \cdot \sin\alpha}{r^2}$	Line shape
$F_{200} = \sum T$	Defocus
$F_{020} = \sum S$	Astigmatism
$F_{120} = \sum \frac{S \cdot \sin\alpha}{r}$	Astigmatic coma
$F_{300} = \sum \frac{T \sin\alpha}{r}$	Primary coma
$F_{400} = \sum \left(\frac{4T \sin^2\alpha}{r^2} - \frac{T^2}{r} + \frac{S}{R^2} \right)$	Spherical Aberration
with $T = \frac{\cos^2\alpha}{r} - \frac{\cos\alpha}{R}$, $S = \frac{1}{r} - \frac{\cos\alpha}{\rho}$	

Fig. 8 - Expansão do caminho ótico em série de potências (ref. 7)

Com uma montagem ótica particular, chamada "círculo de Rowland" (figura 9) onde pontos objeto e imagem se localizam num círculo de raio duas vezes menor que o raio R da rede, é possível anular os termos F_{300} e F_{300} (coma primário) para um dado λ .

O astigmatismo (F_{020}) pode ser anulado num dado λ , para uma superfície toroidal. A curvatura ($F_{120}, F_{111}, F_{102}$) é nula para superfícies cilíndricas.

Estes exemplos mostram que a escolha do "design" ótico fica bastante limitada pelo "tipo" de aberração que desejamos eliminar. Em geral o preço é que alguma outra aberração aumenta.

No nosso caso, estamos interessados em reduzir as aberrações que afetam a resolução do sistema. De acordo com a figura 8, essas aberrações são as que provocam os desvios Δy dos raios.

Com exceção do astigmatismo, todas contribuem. Reunindo os termos $F_{111}, F_{102}, F_{120}$, temos para um dado λ uma

contribuição $\Delta y_c'$ no desvio dos raios dada por⁽⁷⁾:

$$\Delta y_c' = \frac{\Delta z'^2}{2(\Sigma(S))^2 r' \cos \beta} \left[\Sigma \left(\frac{S \operatorname{sen} \alpha}{r} \right) - \frac{2 \operatorname{sen} \beta \Sigma(S)}{r'} - \operatorname{sen} \beta (\Sigma(S))^2 \right]$$

Para uma fonte policromática, a imagem final é composta por uma família de parábolas, assumindo portanto uma forma não condizente com a forma de fendas retangulares.

Então para que Δy_c seja nulo, precisamos zerar o termo entre parêntesis. Isto ocorre para ρ infinito, ou seja, para superfícies cilíndricas.

$$\rho = \infty \Rightarrow F_{\text{ozo}} = (1/r + 1/r') = \Sigma(S)$$

$$\Delta y' = \frac{(\Delta z')^2}{2(\Sigma(S))^2 r' \cos \beta} \frac{\operatorname{sen} \alpha + \operatorname{sen} \beta}{r^2} \cong 0$$

onde levamos em conta que os ângulos α, β são rasantes. No caso de espelhos, $||\alpha|| = ||\beta||$ e a curvatura de campo é nula e portanto o padrão de imagens é retangular. Podemos obter aproximadamente o mesmo resultado para superfícies esféricas com R grande.

Quanto ao coma primário F_{ao} , vemos que ele independe de

ρ , e portanto não sofre alteração. A aberração esférica, F_{400} , aumenta por causa do fator S , que vem do astigmatismo. Entretanto, como este termo corresponde à quarta potência da coordenada w , podemos esperar que seu efeito seja mínimo.

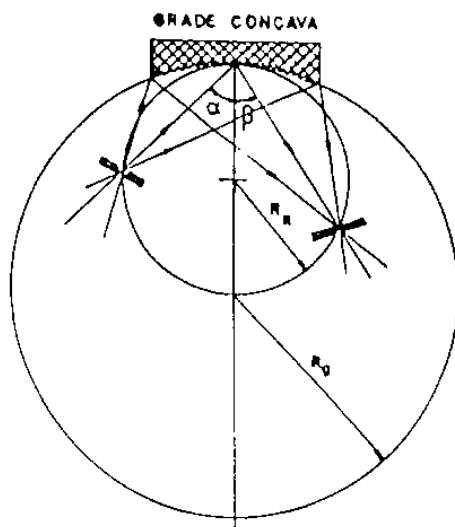


Fig. 9 - Círculo de Rowland

b) Traçado de Raios

Esta técnica consiste em definir para uma dada fonte, um feixe de raios com posições r_i e θ_i iniciais, relativas à fonte e calcular a trajetória de cada raio através do sistema ótico. Os raios sofrem reflexão, difração ou espalhamento e convergem espacialmente, definindo a imagem da fonte. Da largura da mancha no plano imagem podemos obter a resolução espectral. Os cálculos necessários envolvem mudanças de referencial do laboratório (fonte) para os elementos óticos, num processo repetitivo até que possamos obter o ângulo e a posição de intersecção de cada raio no plano imagem. Além disso, é preciso um número significativo de raios (500 por exemplo) para obter manchas de dimensões bem definidas. Este procedimento só pode ser feito com o uso de computador. Neste projeto, utilizamos o programa "Shadow", desenvolvido por F. Cerrina⁽¹⁴⁾. Descrevemos adiante alguns aspectos do traçado de raios obtido com este "software".

III.5) Tipos de Monocromadores

Existem diversos tipos de monocromadores, cada um por sua vez mais adequado a uma ou outra aplicação. Apresentamos aqui, alguns exemplos .

a) Monocromadores cristalinos

*Monocromador de cristal único : De acordo com a tabela é o tipo mais adequado para $\lambda < 4 \text{ \AA}$ (raios X duros). Da equação de Bragg, derivamos para a banda passante relativa :

$(\Delta\lambda/\lambda) = \Delta\theta \text{ ctg } \theta$, onde $\Delta\theta$ é a largura da curva de refletividade do cristal. A figura 10 mostra uma curva de refletividade no caso de um cristal de Si para $\lambda = 1.38\text{\AA}$ ⁽²⁾.

Pela figura, $\Delta\theta$ é da ordem de 10^{-5} rad, o que propicia poder resolutivo alto, da ordem de 10^4 ou mais ⁽²⁾.

Este valor $\Delta\theta$ representa 10% da divergência angular vertical de um feixe síncrotron, ou seja, temos muito pouca radiação útil. Com o agravante da deformação térmica, torna-se necessário o uso de cristais artificiais,

de constantes de rede maiores. Existem as chamadas "estruturas estratificadas sintéticas" que se constituem de camadas alternadas de materiais como W e C⁽¹⁵⁾. A banda passante relativa é da ordem de 10 apenas, e portanto estes dispositivos atuam como pré-monocromadores, servindo de proteção térmica para o monocromador cristalino.

*Monocromador de dois cristais : É um sistema composto por dois cristais planos paralelos dispostos conforme a figura 11 . Dotados de um movimento conjunto de rotação e translação, os cristais mantêm fixa a direção do feixe de luz, durante a varredura de λ .

A figura 11 mostra o esquema do monocromador "Jumbo"⁽¹⁶⁾ do anel de armazenamento SPEAR. Um espelho toroidal coleta a radiação e a retransmite para o cristal. Dependendo do cristal utilizado, este monocromador possibilita fluxos de até 10^{11} fótons/s (2% do fluxo em $E_c = 2000\text{eV}$) com banda passante ΔE (no caso de um par de cristais de Ge) da ordem de 1 a 2 eV para a faixa de operação de 800 a 4000 eV.

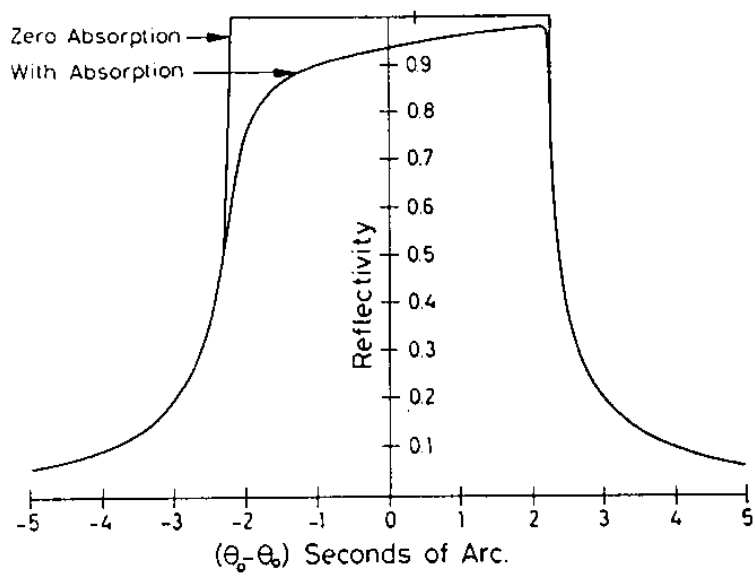
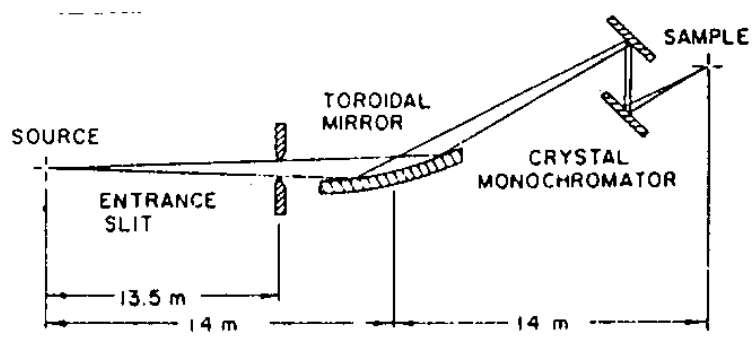


Fig.10 - Curva de refletividade de cristal de Si (220) para $\lambda = 1.38 \text{ \AA}$ (ref.2)



(b) CRYSTAL MONOCHROMATOR (SIDE VIEW)

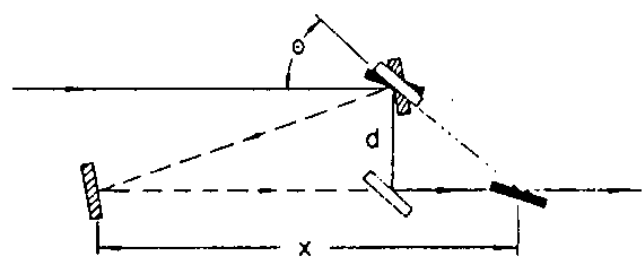


Fig.11 - Sistema óptico do monocromador "Jumbo" de uma linha de luz do anel SPEAR (ref.16)

b) Monocromadores de rede de difração

* "Grasshopper" (gafanhoto): É um dos "designs" mais antigos de monocromadores de incidência rasante. Recebe este nome porque possui um braço articulável que ajusta a posição dos componentes óticos de modo a manter a focalização, ao longo da varredura de λ . Este movimento combinado da rede e espelhos mantém sempre a fenda de saída na posição do foco imagem do "círculo de Rowland".

A figura 12⁽¹⁶⁾ mostra o esquema de um monocromador desse tipo utilizado no laboratório de Stanford, que apresenta as seguintes características operacionais: fluxo de saída de $5 \cdot 10^{10}$ fótons/s Å, resolução de 0.25eV na faixa de 25 - 600 eV.

*Monocromador de rede plana (PGMD): Com esse monocromador é possível eliminar a contribuição da rede para a aberração total do sistema. Na montagem da figura 13⁽¹⁷⁾ um espelho parabólico colima o feixe que incide sobre a rede e um segundo espelho, também parabólico, coleta o feixe difratado refocalizando-o num dado ponto. Desta maneira, os

coeficientes de aberração da rede são todos nulos (porque os pontos objeto e imagem estão no infinito) e o poder resolutivo fica limitado pela aberração dos espelhos. É claro que este não é um resultado muito interessante do ponto de vista prático, porque a dificuldade passa a ser a obtenção de superfícies parabólicas suficientemente precisas. Além disso, é preciso notar que sem o uso de fendas, o poder resolutivo fica limitado pelo tamanho da fonte. No caso de "bending magnets" isto pode representar uma desvantagem para o PGM; já para "wigglers" e onduladores este efeito fica bastante reduzido. Em Brookhaven, um monocromador deste tipo apresenta uma banda passante relativa na faixa $0.03 < \Delta E/E < 0.5$ para $124 \text{ eV} < E < 500 \text{ eV}$.

Um outro exemplo de PGM, é o monocromador "Flipper"⁽¹⁸⁾ que tem a propriedade adicional de eliminar harmônicos. Este monocromador constitui-se de vários espelhos pré-focalizadores que cortam o espectro acima de uma certa frequência conforme o ângulo de incidência (seção III.2). A

faixa de operação vai de 20 a 500 eV, observando-se fluxos da ordem de 10^{14} fótons/s no centro da faixa, para uma banda passante de 0.9eV (fig.14).

*Monocromador de rede toroidal (TGM): Tem sido o tipo de monocromador mais utilizado na faixa de VUV e raios X moles. Nesta montagem, a varredura de λ se faz através da rotação da rede somente e a translação das fendas permite o ajuste focal. É comum também operar o TGM mantendo as fendas fixas, numa situação de focalização média para a faixa espectral considerada. Neste caso, é necessário o uso de redes holográficas pois a desfocalização é muito grande em sistemas óticos com redes toroidais clássicas (espaçamento constante), como veremos adiante. Com rede toroidal holográfica, em geral obtém-se uma banda passante de cerca de 0.1 eV em 100 eV. Outra característica deste monocromador, mencionada antes, é que o raio ρ da rede é determinado de modo a anular o astigmatismo. A figura 15 mostra o sistema ótico de um TGM.

O LNLS está construindo um monocromador desse tipo para

operar na faixa de 12eV a 310eV, com poder resolutivo variando entre 10^2 e 10^9 (19).

*Monocromador de rede cilíndrica (CEMD): É um "design" mais recente, que se constitui de dois espelhos de pré-focalização, fendas e rede de difração. Neste monocromador, as focalizações sagital e tangencial estão desacopladas, a curvatura de campo é nula e o astigmatismo é a aberração predominante. Como resultado, a imagem produzida pelo sistema no caso de uma fonte puntual monocromática é uma linha estreita na direção de $\Delta z'$ (fig.8, seção III.4).

O grande inconveniente, assim como para qualquer outro sistema ótico com elementos não esféricos, é a confecção das superfícies. Atualmente as superfícies esféricas apresentam tolerâncias na forma da ordem de 0.5 sec.arc., que é um valor bastante pequeno comparado ao valor que se obtém para as não-esféricas, cerca de 5 sec.arc. (7) Essas tolerâncias afetam o poder resolutivo e seu efeito é maior quando operamos em incidência rasante, tornando assim as

superfícies esféricas mais atraentes.

Para elementos esféricos, entretanto a curvatura de campo não é nula e as focalizações não estão completamente desacopladas. Mesmo assim, é possível⁽¹⁰⁾ substituir os elementos cilíndricos por esféricos. Verifica-se através de traçado de raios que a imagem final neste caso, tem uma forma retangular (linha mais larga). Um exemplo de monocromador SEM é o monocromador da linha de luz "Dragon"⁽²⁰⁾ (NSLS, EUA) utilizado em espectroscopia de níveis de caroço ("core level spectroscopy"). Neste sistema, a fenda de saída é móvel (satisfazendo $F_{200} = 0$ para todo λ da faixa de operação) e a aberração "limitante" fica sendo o coma da rede. Desta forma, o monocromador apresenta alto poder resolutivo, da ordem de 10^4 para energia de 400 eV (experimental).

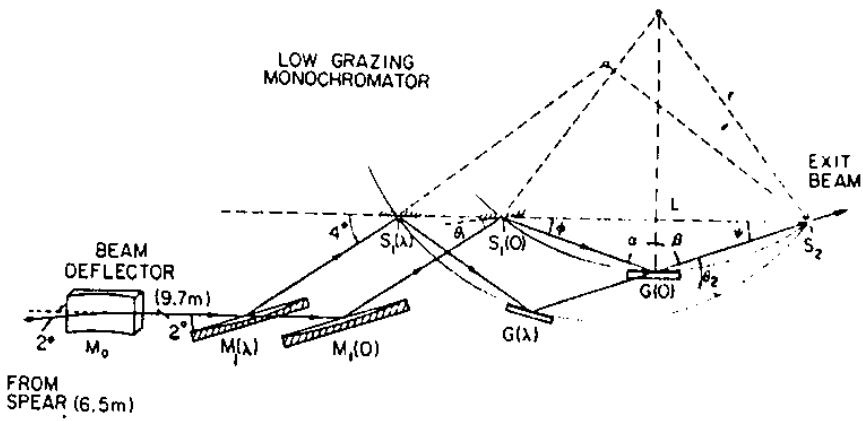


Fig.12 - Monocromador "Grasshopper" (ref.16)

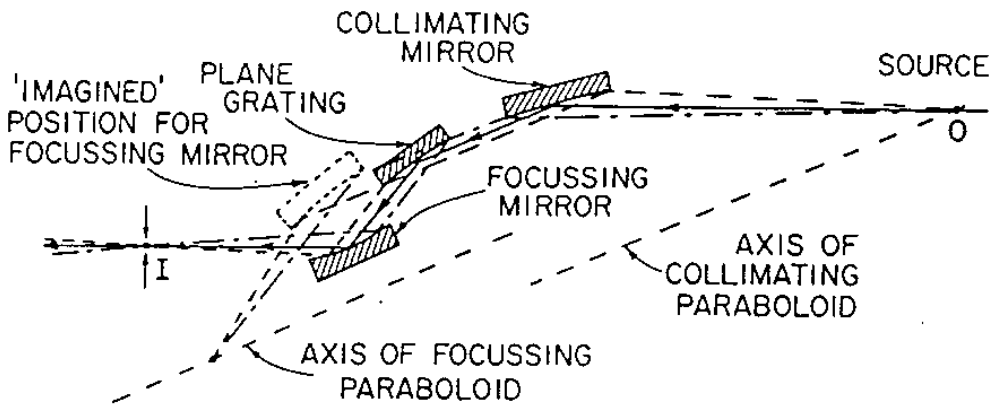


Fig.13 - PGM de espelhos parabólicos (ref.17)

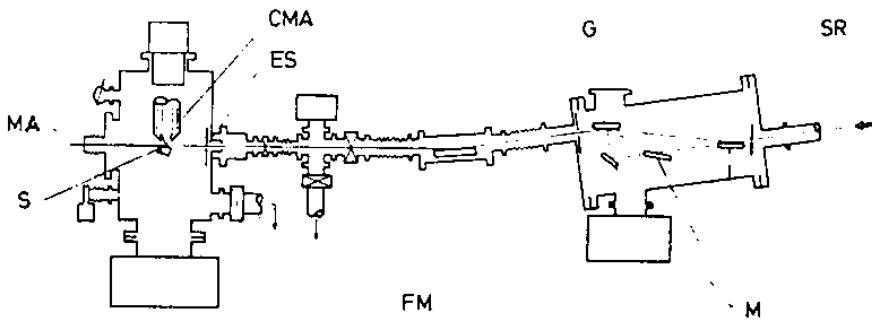


Fig.14 - Monocromador "Flipper" (ref.18)

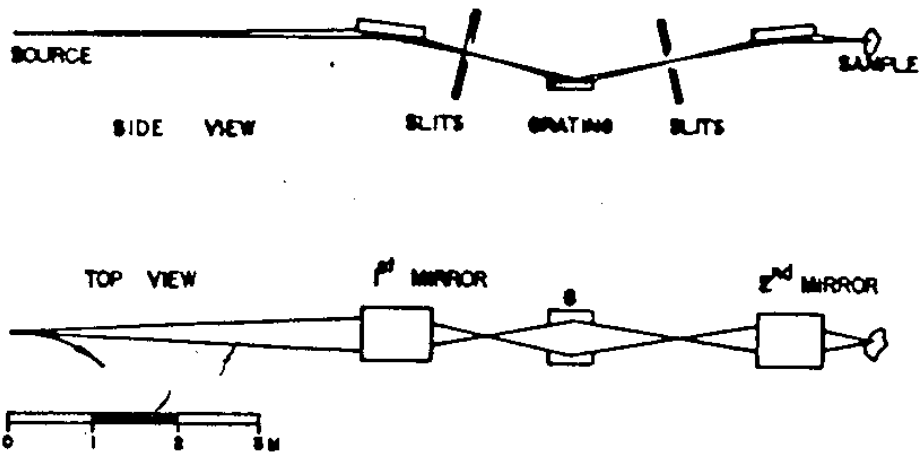


Fig.15 - Monocromador de rede toroidal-TGM (ref.19)

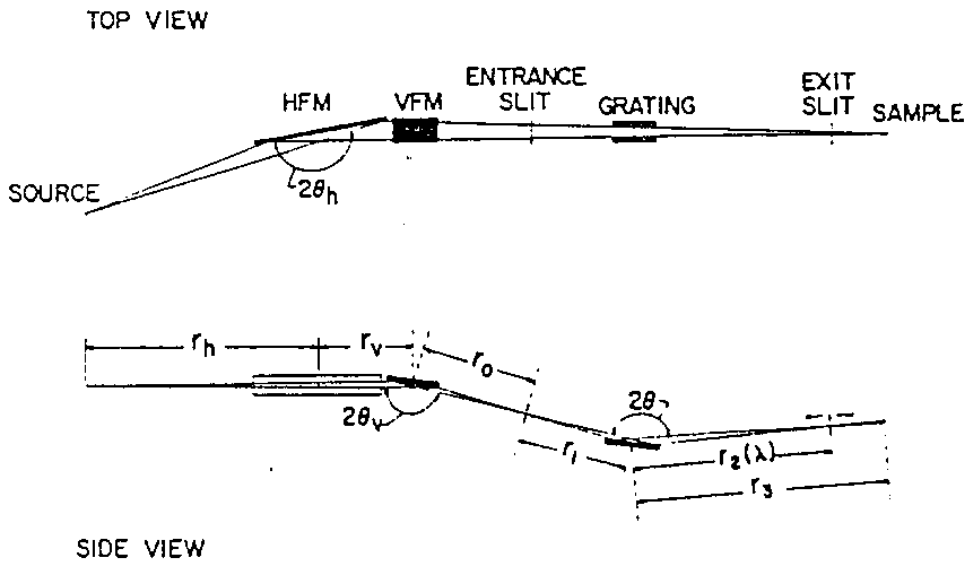


Fig.16 - Monocromador de rede cilíndrica/esférica -CEM/SEM (ref.20)

IV) Projeto Ótico

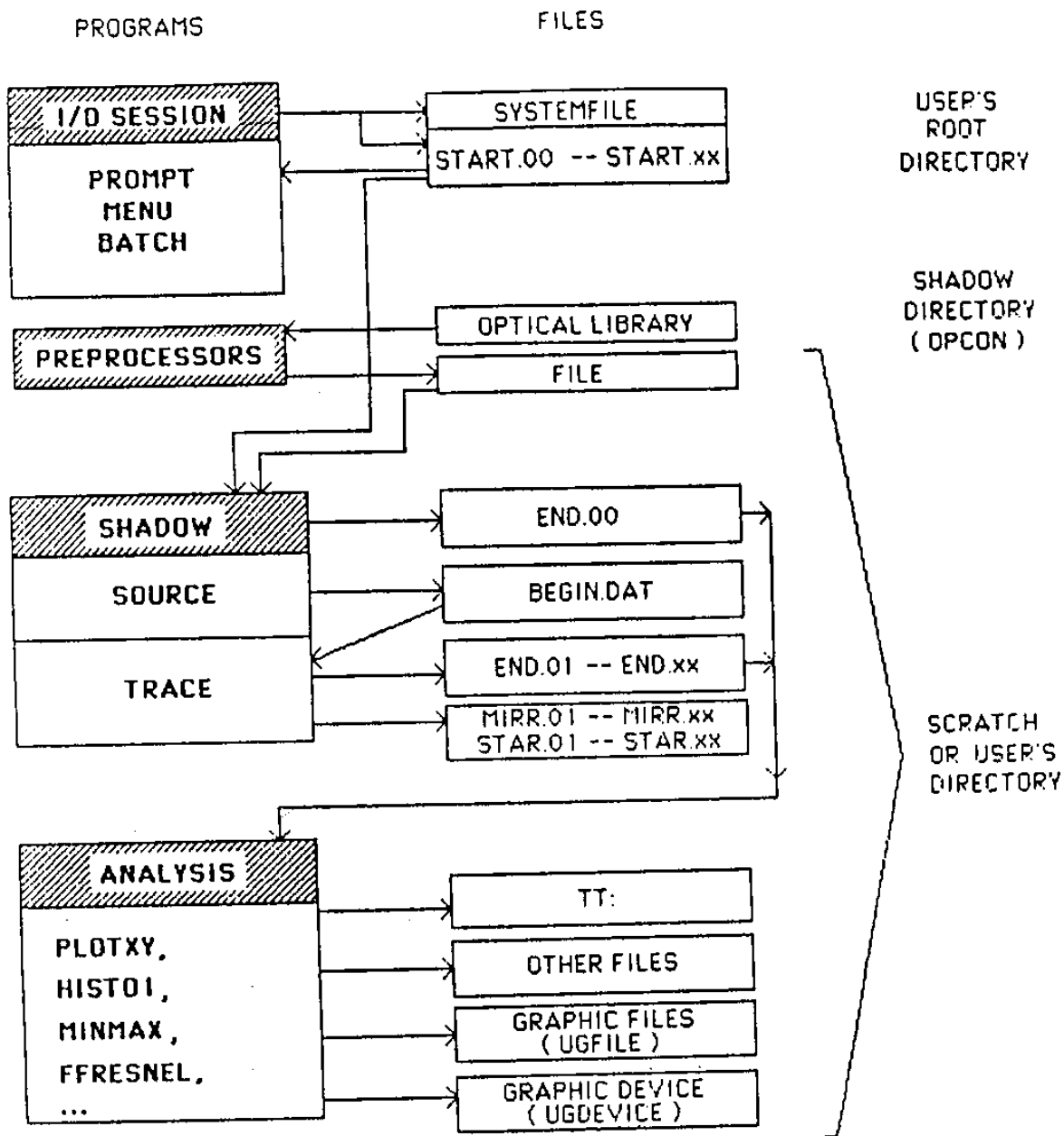
IV.1) Uso do Programa "Shadow"

O programa de traçado de raios "Shadow" foi desenvolvido por B.Lai e F.Cerrina⁽⁴⁴⁾, especialmente para o trabalho em instrumentação síncrotron.

Sua estrutura geral é mostrada no quadro I, com os tipos de arquivos gerados em cada seção e os programas utilitários.

Na seção de entrada de dados, definimos a fonte e os elementos óticos . Informações como tipo de fonte (puntual,síncrotron,etc.), suas divergências vertical e horizontal, números de raios, os parâmetros geométricos e forma da superfície dos elementos óticos, entre outras, são solicitadas pelo programa e armazenadas em arquivos START.

Definida a fonte, o sub-programa SOURCE gera o arquivo binário BEGIN.DAT que será utilizado durante o traçado.



Quadro I - Estrutura do programa "Shadow"

O traçado é feito pelo sub-programa TRACE e gera na saída, outros arquivos binários (STAR, MIRR, etc.) que representam seções transversais do feixe em posições pré-estabelecidas pelo programa ou pelo usuário.

O programa utiliza sistemas de eixos cartesianos, conforme a figura 17. Os raios são traçados da fonte ao elemento ótico e deste ao "plano de continuação" ("continuation plane"). O plano de continuação pode coincidir ou não com o plano imagem do elemento ótico e serve como "fonte" para o elemento ótico seguinte. Podemos definir até 20 elementos num sistema.

Dos programas para análise do sistema, o de maior utilidade é o PLOTXY. Este programa desenha gráficos na tela a partir dos arquivos binários gerados na seção TRACE. Escolhendo as coordenadas x,z para serem graficadas, podemos observar as dimensões da mancha luminosa nos planos objeto e imagem, na superfície dos elementos óticos e nas posições

onde forem definidos os planos de continuação. O programa também desenha histogramas e no caso do par x,z podemos utilizá-los para estudar a transmissão do sistema.

Na seção sobre o projeto, apresentamos alguns gráficos obtidos com o PLOTXY.

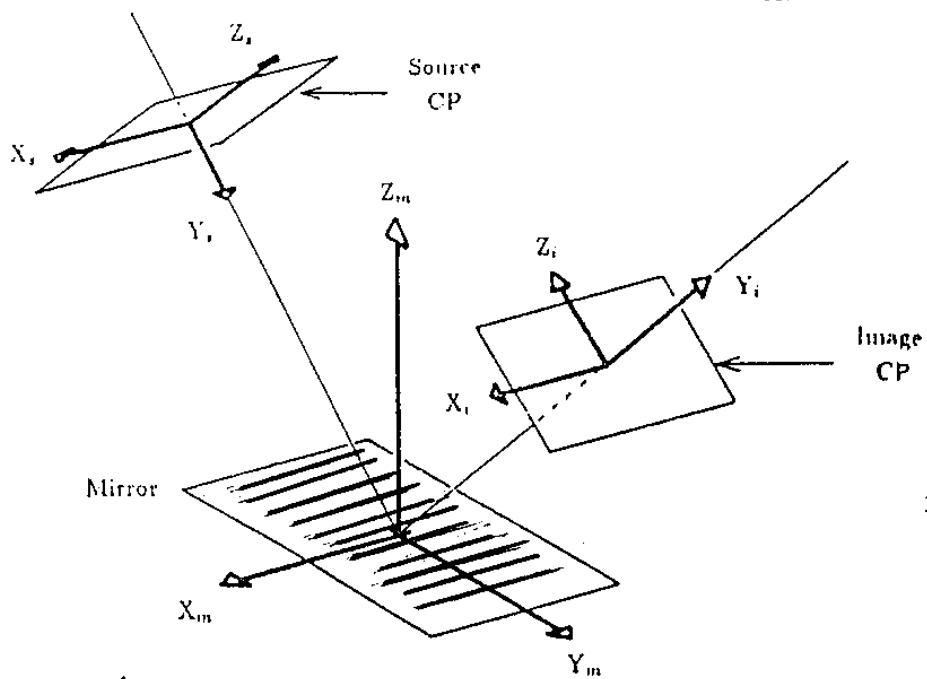


Fig.17 - Geometria do elemento ótico adotada pelo programa "Shadow"

IV.2) Projeto

Parte I : Comparação de sistemas TGM e SGM em termos do poder resolutivo

O objetivo inicial deste trabalho foi comparar o poder resolutivo de um sistema ótico com rede toroidal e de um sistema de rede esférica, já que:

a) a grade esférica é potencialmente mais barata que a toroidal

b) talvez fosse possível obter resolução espectral comparável ou melhor que a da rede toroidal, com modificações simples do sistema ótico

Projetamos o sistema de rede esférica a partir dos parâmetros geométricos do monocromador TGM construído no LNLS⁽²⁰⁾. Este monocromador TGM tem fendas de entrada e saída fixas e foi projetado para operar com redes holográficas que corrigem a desfocalização ($F_{200} = 0$) ao longo da faixa de λ . A faixa de operação do monocromador vai de 40 a 1000 Å (310 a 12 eV) com o uso de três redes de difração. Como as condições

angulares são as mesmas, fizemos os cálculos para uma das redes ($d = 1800 \text{ l/mm}$; $40\text{\AA} \leq \lambda \leq 120\text{\AA}$).

Nos nossos cálculos, consideramos redes toroidal e esférica clássicas (densidade de linhas constante). No TGM de rede clássica, conservamos as distâncias focais e escolhemos o raio R de modo a obter $F_{z00} = 0$ no centro da faixa de operação.

Os parâmetros geométricos de cada monocromador são dados na página seguinte e a figura 18 mostra os respectivos sistemas óticos. O "design" do SGM é o mesmo proposto por C. T. Chen⁽¹⁰⁾.

Tabela 2 - Parâmetros geométricos

monocromador	TGM	TGM	SGM
rede	holog.	clas.	clas.
raio da rede (mm)	R=7977 $\rho=182.28$	R=6405 $\rho=182.80$	R=8767
ângulo de desvio	162°	162°	162°
densidade(l/mm)	1800	1800	1800
aceitância angular máx.	30mrad(H) 14mrad(V)	30mrad(H) 14mrad(V)	30mrad(H) 7.8mrad(V)
faixa de operação	40-120 Å 310-103 eV	40-120 Å 310-103 eV	30-120 Å 413-103 eV
aberração	curvatura coma	desfocal. curvatura	desfocal. coma astigmatismo

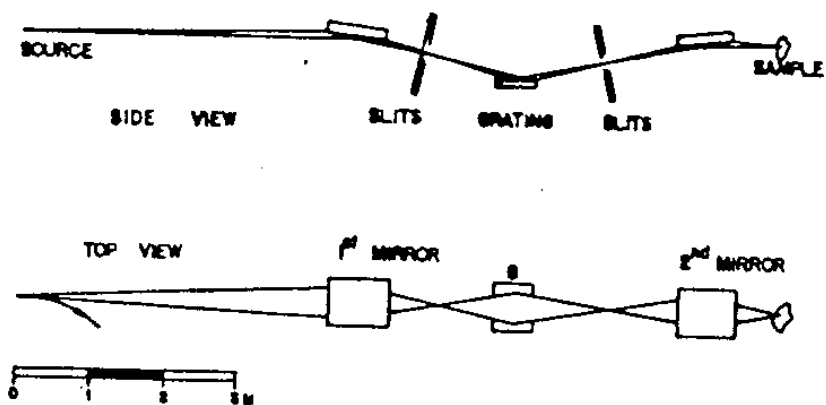


Fig.18a - Esquema do monocromador TGM

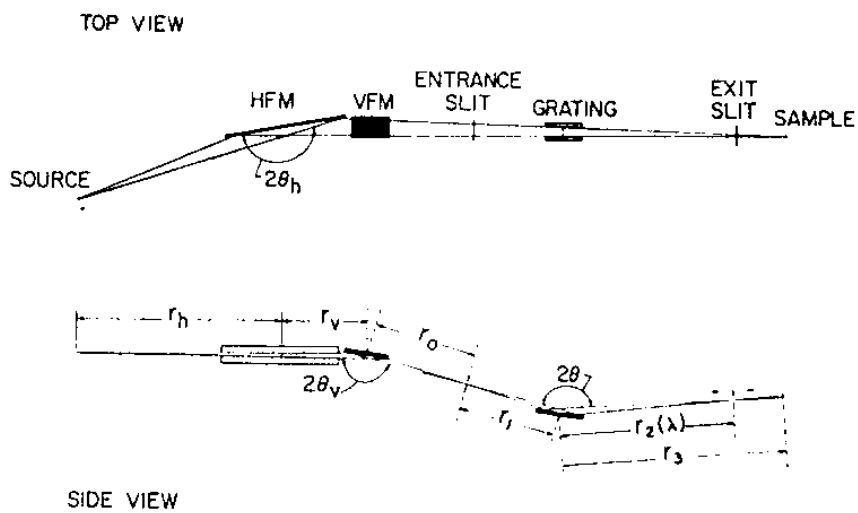


Fig.18b - Esquema do monocromador SGM

Descrição do trabalho

a) Rede

Para o SGM resolvemos a equação de foco $F_{200} = 0$ em dois comprimentos de onda $\lambda_1 = 90.97 \text{ \AA}$ (136.29 eV) e $\lambda_2 = 60.66 \text{ \AA}$ (204.42 eV) correspondentes a ângulos α, β de $84^\circ, 78^\circ$ e $83^\circ, 79^\circ$. Desta forma, a curva de desfocalização do SGM fica centralizada na faixa de operação do sistema TGM. Obtemos as soluções⁽²¹⁾:

$$(R/r) = \frac{(\cos\alpha_1 + \cos\beta_1) \cos^2\beta_2 - (\cos\alpha_2 + \cos\beta_2) \cos^2\beta_1}{\cos^2\alpha_1 \cos^2\beta_2 - \cos^2\alpha_2 \cos^2\beta_1}$$

$$(R/r') = \frac{(\cos\alpha_2 + \cos\beta_2) \cos^2\alpha_1 - (\cos\alpha_1 + \cos\beta_1) \cos^2\alpha_2}{\cos^2\alpha_1 \cos^2\beta_2 - \cos^2\alpha_2 \cos^2\beta_1}$$

Com os valores numéricos dos ângulos e tomando $r = 1000 \text{ mm}$

(como no caso do TGM), temos : $R = 8767 \text{ mm}$ e $r = 1740 \text{ mm}$.

b) Espelhos

As distâncias focais dos espelhos, indicadas na figura 18.b têm os seguintes valores numéricos: $r_h = 2200 \text{ mm}$, $r_v = 650 \text{ mm}$, $r_o = 3050 \text{ mm}$. Com estes valores a equação de foco tangencial

$F_{zoo} = 0$ é satisfeita para raios $R_h = 43138\text{mm}$ e $R_v = 38874\text{ mm}$ dos espelhos HFM (focalização horizontal) e VFM (focalização vertical).

A rede e os espelhos foram tomados inicialmente como sendo de forma cilíndrica e então cada elemento ótico focaliza em uma determinada direção, sem interferir na focalização de outro elemento.

Ao substituírmos os elementos cilíndricos por esféricos foi necessário o uso de fórmulas de correção dos raios dos espelhos porque suas "focalizações" horizontal e vertical deixaram de ser independentes: o raio vertical (horizontal) do HFM interfere na formação do foco vertical (horizontal) do VFM e vice-versa. As fórmulas de correção são dadas a seguir⁽¹⁰⁾, onde R_g é o raio da rede, θ_v e θ_h são os ângulos de incidência nos espelhos VFM e HFM e n a ordem da iteração. Assim, calculamos os novos raios dos espelhos e as novas distâncias focais, cujos valores em mm são os seguintes:

$$R_h = 42537.6 \quad r_h = 2200 \quad r_v = 360$$

$$R_v = 38989.0 \quad r_o = 3800$$

Fórmulas de correção dos raios:

$$R_h^{(n)} = \frac{2}{\cos \theta_h} \left\{ \frac{1}{r_h} + \frac{1}{r_v + \left[\frac{1}{r_o + r_1 + \left(\frac{1}{r_3} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta}{R_s} \right)^{-1}} - \frac{2 \cos \theta_v}{R_v^{(n-1)}} \right]^{-1}} \right\}^{-1}$$

$$R_v^{(n)} = \frac{2}{\cos \theta_v} \left\{ \frac{1}{r_o} + \frac{1}{r_h + \left(\frac{1}{r_h} - \frac{2 \cos \theta_h}{R_h^{(n-1)}} \right)^{-1}} \right\}^{-1}$$

c) Aberrações e traçado de raios

Com os valores dos raios (R, ρ) e das distâncias focais calculamos a desfocalização Δy_{zoo} das redes toroidal e esférica (clássicas), ao longo da faixa de λ . As curvas obtidas são dadas na figura 19a. Construímos também o gráfico da figura 19b, que mostra os valores máximos de aberração da rede toroidal holográfica (fornecidos pelo fabricante), e da rede esférica clássica (calculados para a rede esférica operando nas mesmas condições de iluminação da rede toroidal holográfica).

Calculamos o poder resolutivo dos sistemas óticos de redes clássicas, supondo fendas de $20 \mu\text{m}$ no SGM e de $200 \mu\text{m}$ no TGM (larguras definidas de acordo com o traçado de raios) e erros de forma de 0.5 (sec. arc) e 5 (sec. arc.) respectivamente. No extremo superior da faixa ($\lambda=120 \text{ \AA}$) encontramos um poder resolutivo de 360 para o TGM e 1300 para o SGM; no extremo inferior ($\lambda=30 \text{ \AA}$) obtivemos 700 (SGM) e 100 (TGM). Nas posições de foco, obtivemos 3800 (SGM) e 900

CTGMD. Com estes resultados vemos que o uso de fendas fixas é um vínculo muito forte para o TGM projetado com os parâmetros da tabela.

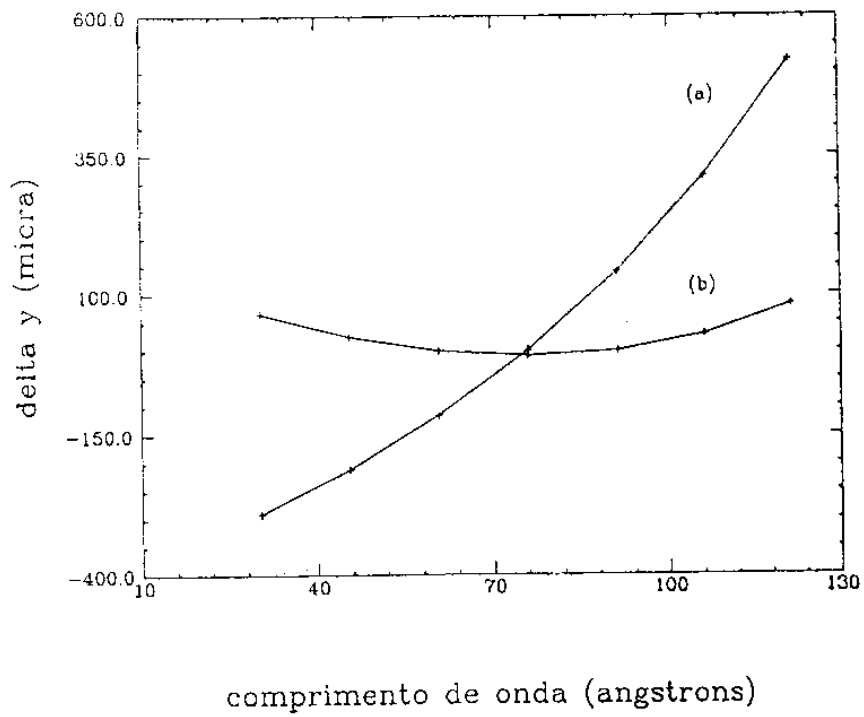


Fig.19a - Aberração das redes toroidal (a) e esférica (b) clássicas

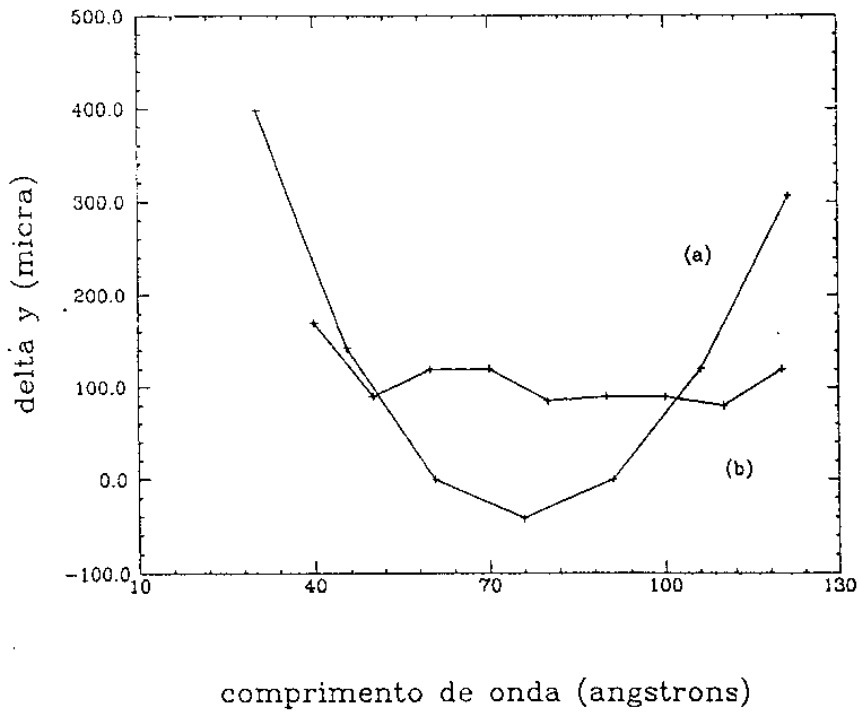


Fig.19b - Aberração da rede esférica clássica (a) e da toroidal holográfica (b)

Pelo gráfico da fig.19b podemos observar que a aberração da rede esférica é comparável à da rede toroidal holográfica, que tem uma resolução de 0.1 \AA ao longo da faixa de operação (dado fornecido pelo fabricante). Calculando o poder resolutivo da rede esférica, encontramos os seguintes valores: 140 (30 \AA) e 500 (120 \AA). Apenas em pequenas regiões ao redor dos pontos focais (quando a aberração é causada apenas pelo coma da rede) o poder resolutivo assume valores significativos, da ordem de 3000.

Fizemos o traçado de raios para o TGM e o SGM de redes clássicas na situação em que $f_{200}=0$. A fonte é puntual, monocromática, com divergências de $2\text{mrad}(V) \times 14\text{mrad}(H)$. Repetimos o traçado algumas vezes, variando o λ da fonte. As figuras a seguir mostram as imagens obtidas nas posições das fendas de entrada e saída para cada sistema (as escalas estão em mm). Estas imagens correspondem aos coeficientes de aberração de coma no caso do SGM e de curvatura de campo no caso do TGM. Por isso a dimensão vertical da imagem é bem

menor no primeiro sistema (20 μm) do que no segundo (200 μm).
Verificamos também com maior clareza o efeito da curvatura de campo num monocromador TGM e o grande astigmatismo dos elementos esféricos (13 mm e 3mm nas fendas de entrada e saída do SGM).

DBA1:IEUNICE.TESTE2\STAR.02

20-APR-1991 11:01

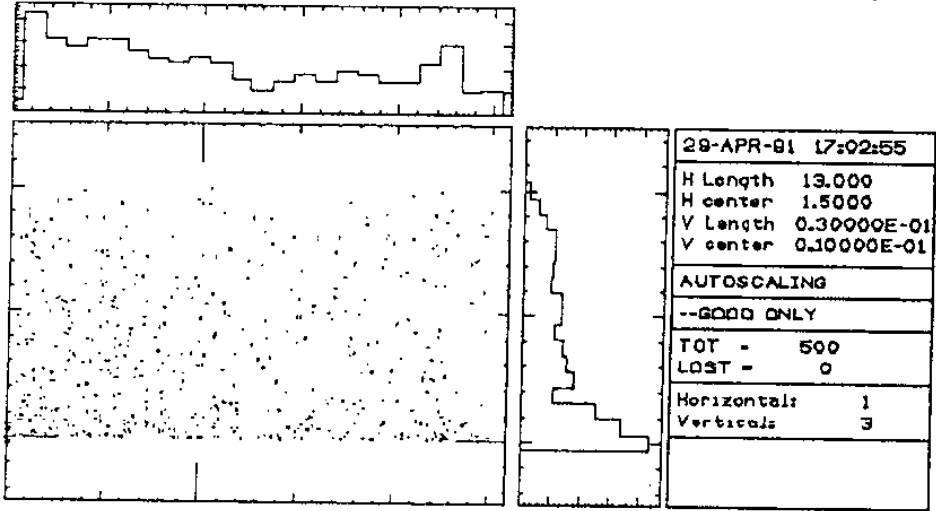


Fig. 20a - SGM : Imagem na fenda de entrada

DBA1:IEUNICE.TESTE2\STAR.03

20-APR-1991 11:01

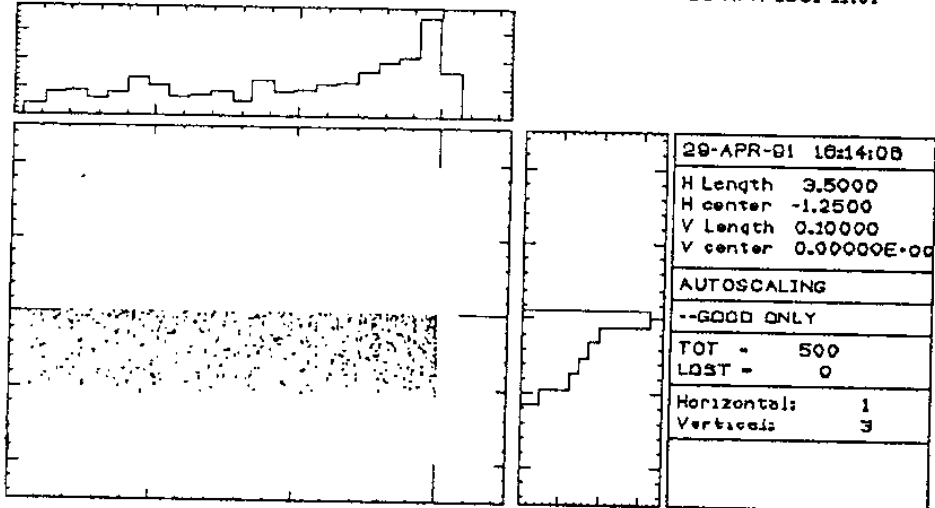


Fig. 20b - SGM : Imagem na fenda de saída

DBA1:REUNICE.TGM1STAR.01

31-MAY-1991 00:30

Fenda de entrada

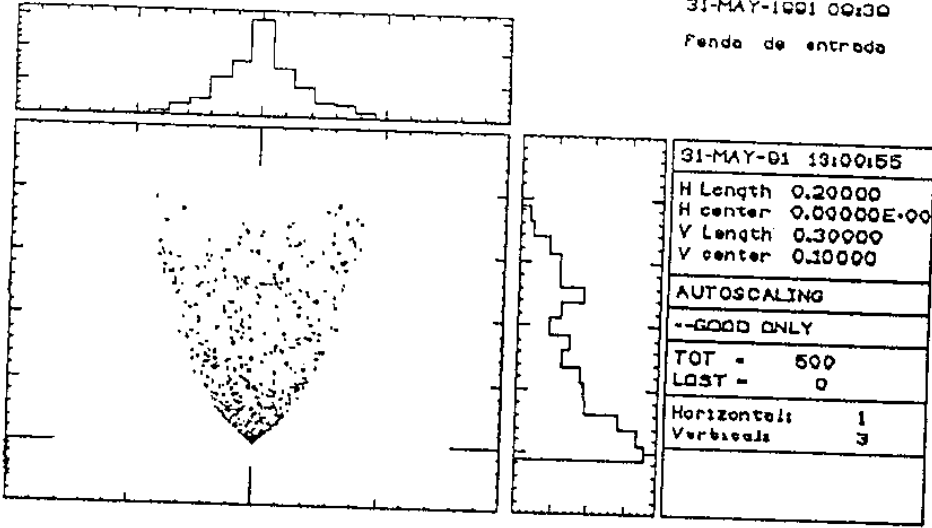


Fig. 21a - TGM : Imagem na fenda de entrada

DBA1:REUNICE.TGM1STAR.02

31-MAY-1991 00:40

Fenda de saída

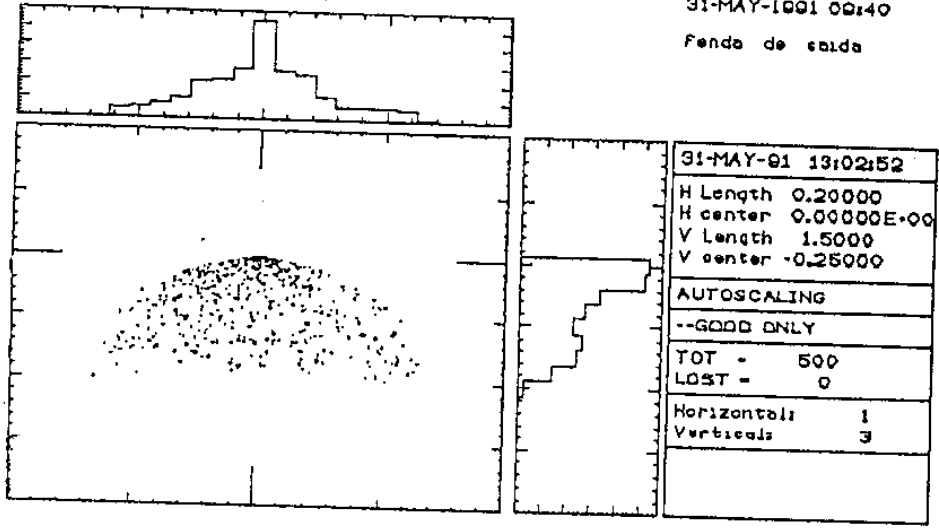


Fig. 21b - TGM : Imagem na fenda de saída

Outra questão importante é o fluxo através dos sistemas. Com o que já vimos, podemos calcular a razão entre os fluxos nos dois monocromadores, calculando a razão entre suas "étendues". Tomamos fendas de área de $10 \mu\text{m} \times 13 \text{ mm}$ no caso do SGM e de $200 \mu\text{m} \times 2 \text{ mm}$ no caso do TGM. Essas dimensões correspondem, em geral, à situação de máximo poder resolutivo que pode ser obtida com estes tipos de monocromador, usando-se uma fonte síncrotron. A perda de intensidade correspondente é da ordem de 60% para os sistemas aqui definidos. Usando a equação III-3.1 obtemos uma "étendue" aproximada de 0.30 (cm.rad)^2 para o SGM e 1.68 (cm.rad)^2 para o TGM. Então para uma mesma fonte (mesma "brightness"), o fluxo no SGM é igual à fração $(0.30/1.68) = 0.18$ do fluxo no TGM.

d) Conclusões

Desta discussão, enumeramos os principais resultados:

- 1) a rede esférica tem a magnitude de aberração comparável à da rede toroidal holográfica, entretanto o poder resolutivo só aumenta de forma significativa na região ao redor dos focos λ_1 , λ_2 onde a aberração é causada pelo coma da rede
- 2) a desfocalização do TGM de rede clássica é muito grande se as posições das fendas são fixas
- 3) o fluxo de fótons é menor num monocromador SGM do que num TGM por causa da "étendue" (área da abertura X ângulo sólido coletado) menor

Parte II - Estudo de sistema ótico de elementos esféricos

a) Descrição

Muitas aplicações na faixa de raios X moles exigem alto poder resolutivo. Em espectroscopia de níveis internos (ou de "caroço"), por exemplo, as larguras de linha variam entre 50 a 300 meV, correspondendo a um R.P. da ordem de 10^4 (20).

Do que foi discutido antes, concluímos que o sistema com fendas móveis e elementos esféricos é o mais adequado para atender à essa exigência.

Foi projetado um sistema desse tipo, idêntico ao da parte I, para cobrir a faixa de 250 a 1000 eV (49.6 a 12.4 Å). Os parâmetros geométricos são dados nas tabelas a seguir e a figura 22 mostra o sistema ótico com maior detalhe (22).

Este sistema opera na região angular entre 88° e 89° e tem a fenda de saída móvel, satisfazendo a condição de foco para todo λ da faixa de operação.

Tabela 2 - Parâmetros geométricos da rede (ref.22)

ângulo de desvio (2θ)	174°
dist.focal de entrada	1.9905 m
dist.focal de saída	
$\alpha = 88^\circ$	3.9749 m
$\alpha = 89^\circ$	4.5156 m
densidade de linhas	7461/mm
	14921/mm
raio	57 m
dimensões	120 X 30 mm ²

Tabela 3 - Parâmetros geométricos dos espelhos (ref.22)

	HFM	VFM
surf.figure error	100 μ rad	10 μ rad
rugosidade	12Å	18Å
ângulo de incid.	87.7°	88.6°
dist.focal de entr.	3.02 m	3.877m
dist.focal de saída	15.590m	4.712 m
raio	121.350 m	174.115 m
dimensões	400 X 20 mm ²	180 X 90 mm ²

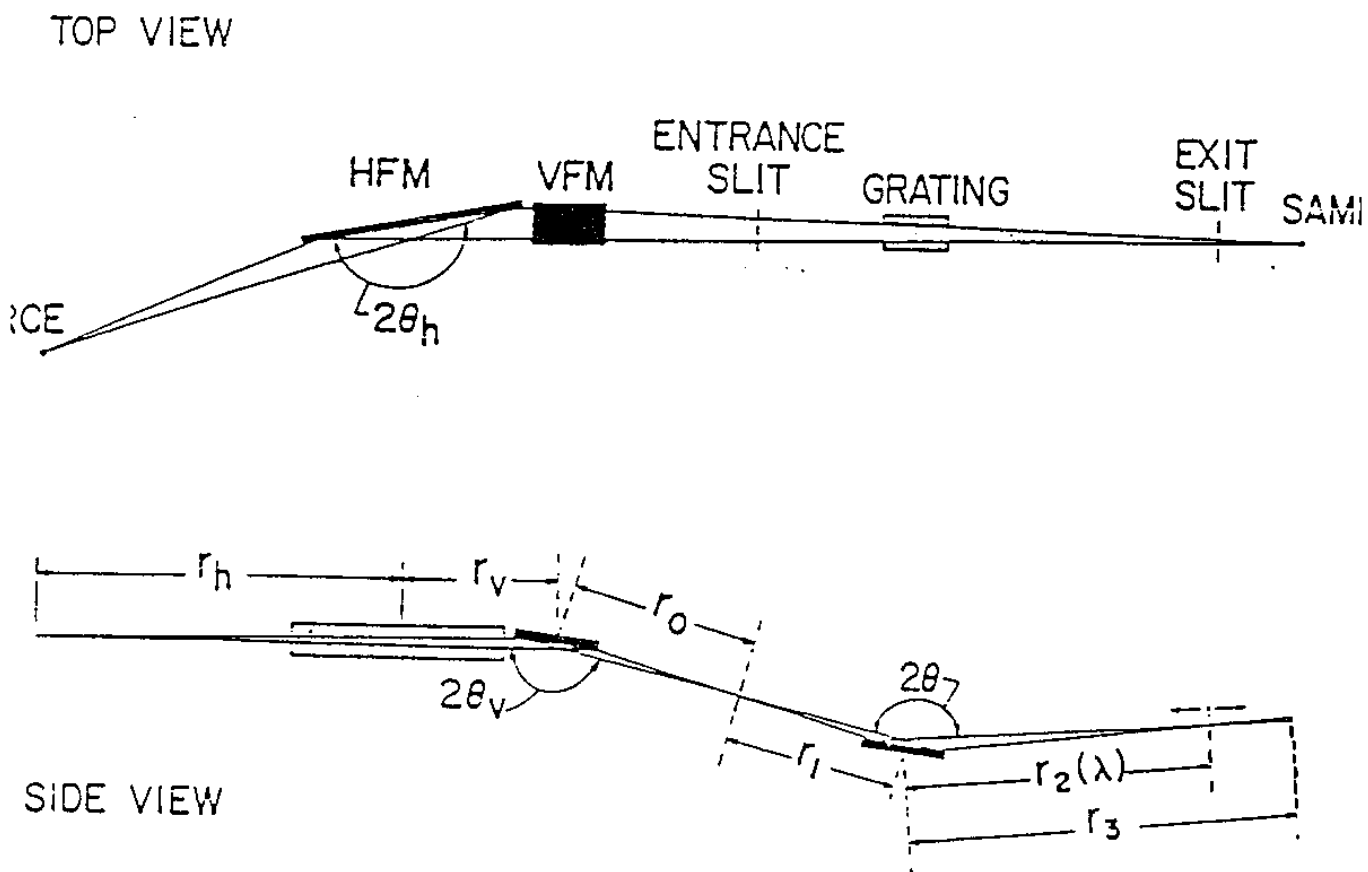


Fig. 22 - Esquema do Monocromador SGM (ref. 22)

O espelho HFM ("horizontal focusing mirror") focaliza o feixe de luz na posição da amostra. Sua função principal é a de "protetor térmico" do monocromador, pois ele recebe o feixe de radiação síncrotron e absorve grande parte da potência incidente. Como a dispersão do monocromador está na vertical, as aberrações óticas do HFM não interferem no poder resolutivo. O espelho VFM ("vertical focusing mirror") focaliza o feixe na fenda de entrada e determina a largura vertical da mancha, portanto sua qualidade ótica precisa ser alta ($\sigma = 0.5 \text{ sec. arc}$).

A rugosidade da superfície espalha a radiação incidente em todas as direções, reduzindo a refletividade R_0 dos espelhos. A expressão analítica é dada por⁽²⁹⁾:

$$R = R_0 \exp[-(4\pi z \cos\theta) / \lambda]^2$$

Para uma energia de 1 KeV ($\lambda = 12.4 \text{ \AA}$) o valor tolerável de rugosidade é de 18 \AA , que corresponde a uma refletividade de $0.8 R_0$ de acordo com a fórmula.

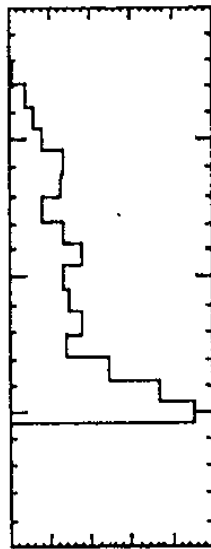
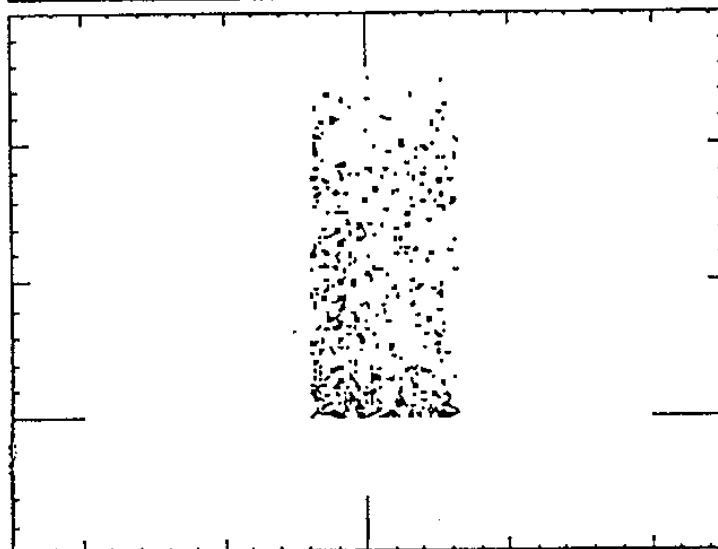
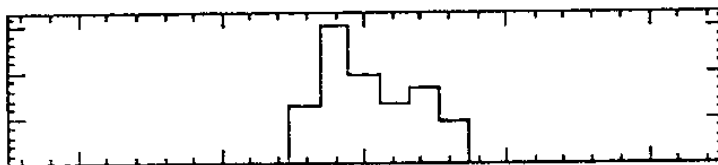
b) Traçado de raios e discussão

Para a execução do traçado de raios, definimos uma fonte puntual de divergência igual à aceitância angular da rede : $1 \text{ mrad(V)} \times 14.4 \text{ mrad(H)}$. A fonte é monocromática, com $\lambda = 12.24 \text{ \AA}$ ($E = 1013 \text{ eV}$). Os elementos óticos são considerados ideais portanto os resultados obtidos se referem somente às aberrações do sistema.

As figuras 23a,b,c mostram que a mancha de luz tem dimensões de $12.5\mu\text{m} \times 24\text{mm}$ na fenda de entrada, $13\mu\text{m} \times 8.4\text{mm}$ na fenda de saída e $450\mu\text{m} \times 7.6\text{mm}$ na posição da amostra. Pelos histogramas, vemos que a distribuição dos raios permite o uso de fendas de $10 \mu\text{m}$ de largura, sem introduzir perdas significativas.

DBA1:IEUNICE.SGMJSTAR.02

29-APR-1991 17:15



29-APR-91 17:20:19	
H Length	100.00
H center	0.00000E+00
V Length	0.20000E-01
V center	0.50000E-02
AUTOSCALING	
--GOOD ONLY	
TOT -	500
LOST -	0
Horizontal:	1
Verticals:	3

Fig. 23a - Imagem na fenda de entrada

3A1:IEUNICE.SGMISCREEN.0301

29-APR-1991 17:18

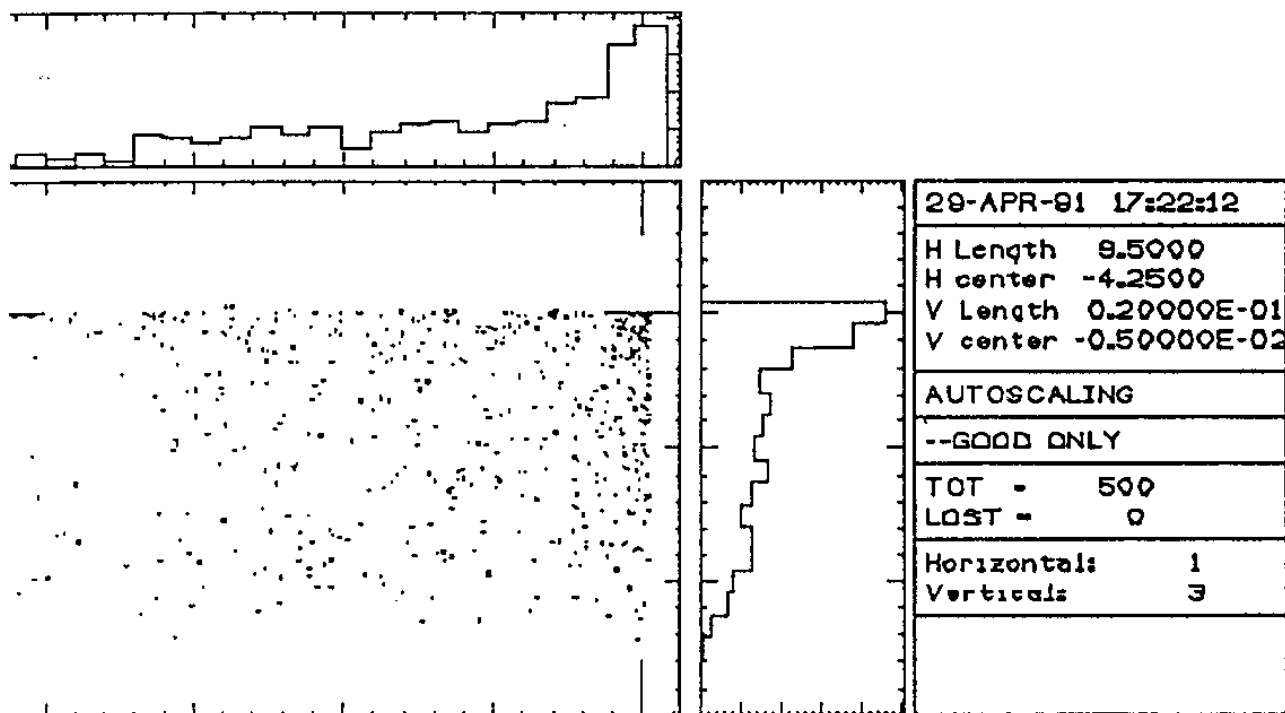


Fig. 23b - Imagem na fenda de saída

DBA1:IEUNICE.SGMJSTAR.03

29-APR-1991 17:18

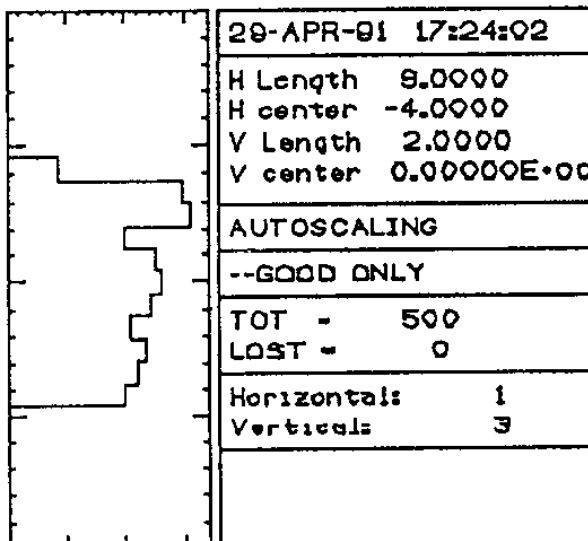
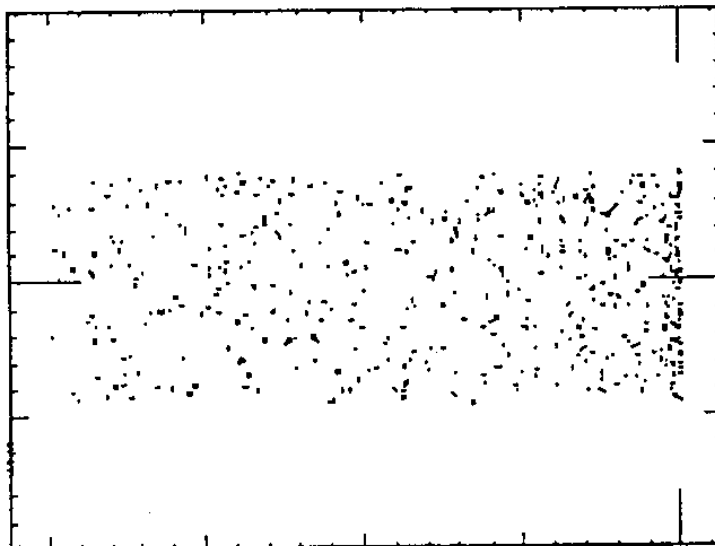
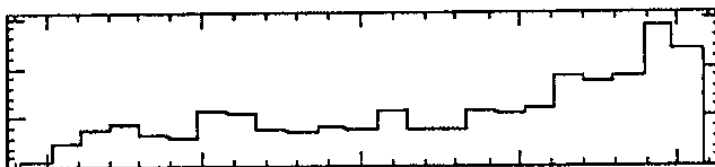


Fig. 23c - Imagem na posição da amostra

Usando as expressões para as bandas passantes relativas de aberração, forma da superfície ($\sigma = 0.5$ sec.arc., ou $2.4\mu\text{rad}$) e das fendas ($10\mu\text{m}$) obtemos para o SGM projetado, um poder resolutivo que varia de 3000 a 6000 em função do ângulo de incidência conforme a figura 24.

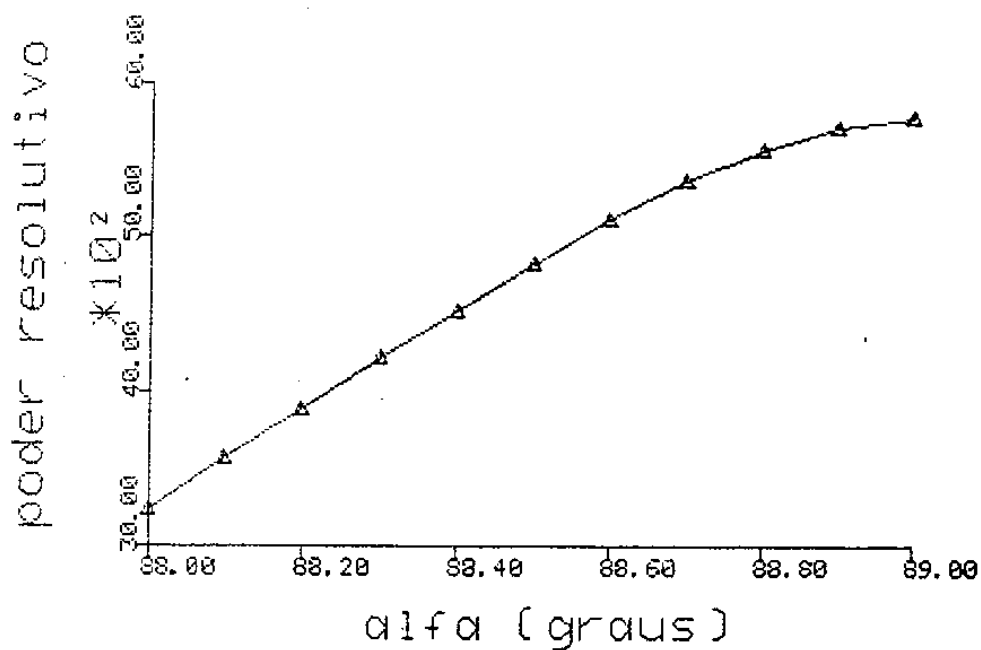


Fig.24 - Poder resolutivo do monocromador

Os valores do gráfico são os valores máximos de poder resolutivo do sistema e correspondem também à situação de menor transmissão, por causa das fendas estreitas.

Fizemos o traçado usando a fonte síncrotron projetada para o LCLS⁽²⁴⁾ e verificamos que o sistema coleta 30% da radiação emitida pela fonte e a intensidade transmitida através da fenda de entrada de $10\mu\text{m}$ é da ordem de 3%. Como as perdas são grandes, é interessante verificar o efeito do aumento da largura das fendas (aumento da transmissão) sobre a resolução do sistema.

Fizemos o cálculo variando a largura das fendas de $10\mu\text{m}$ a $200\mu\text{m}$, para três ângulos na faixa de operação. A figura 25 mostra os resultados obtidos.

Pela figura, podemos ainda obter poder resolutivo razoável (cerca de 2000) para fendas de $30\mu\text{m}$, $60\mu\text{m}$ e $80\mu\text{m}$ nos ângulos de 88° , 88.5° e 89° . Abaixo da largura de $10\mu\text{m}$, a contribuição dominante é o erro na forma, e então as curvas tendem a valores constantes que incluem também os efeitos

menores das aberrações óticas do sistema.

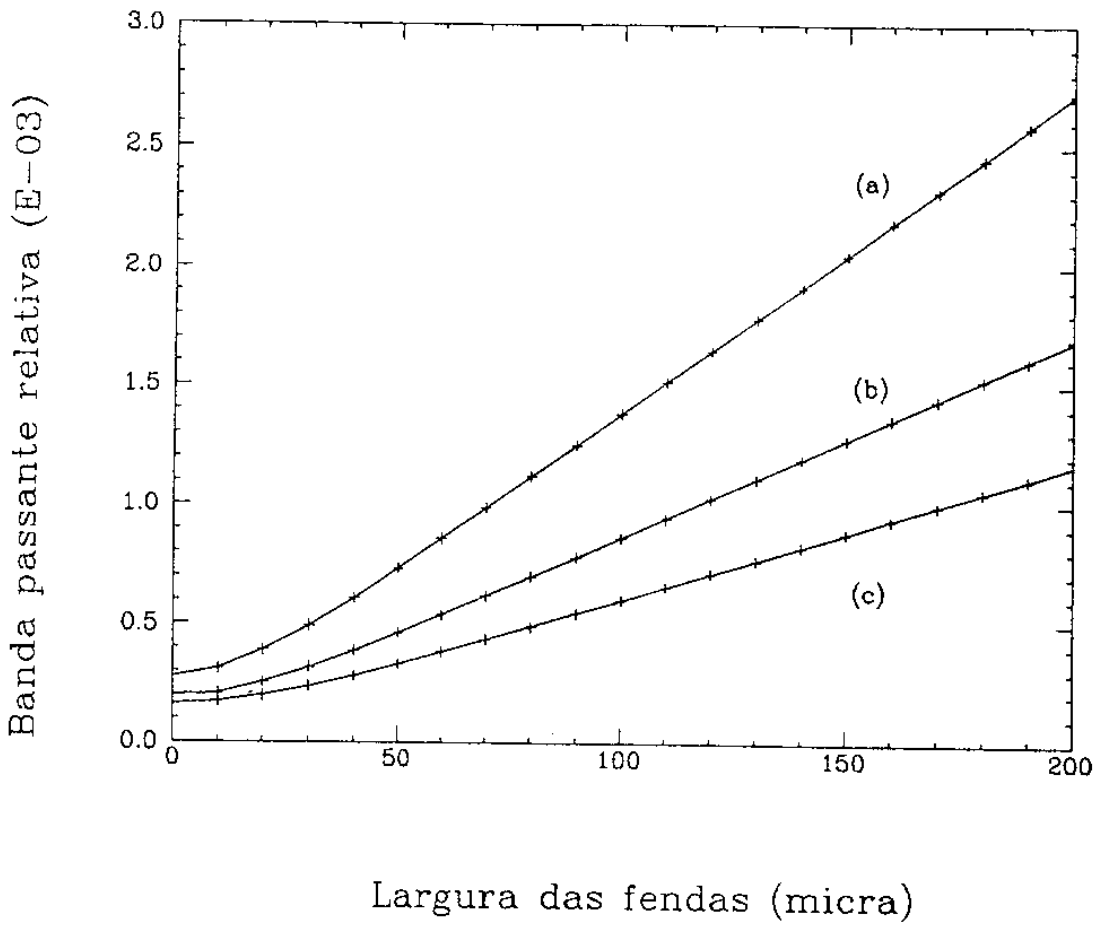


Fig. 25 - Curvas: (a) $\alpha = 88^\circ$; (b) $\alpha = 88.5^\circ$; (c) $\alpha = 89^\circ$

V) Conclusão

Com este estudo pudemos nos familiarizar com os aspectos mais importantes na área de monocromadores para radiação síncrotron na faixa de VUV e raios X moles (100 a 1000 eV).

Abordamos as questões teóricas da emissão de radiação síncrotron, a refletividade na faixa espectral mencionada e a formação de imagens, segundo a teoria da ótica geométrica.

Interessados em obter alto poder resolutivo, concluímos que os elementos óticos de forma esférica são os mais adequados; por causa da aberração tangencial reduzida e por apresentarem a maior precisão possível na forma da superfície.

Foi projetado um sistema ótico de elementos esféricos, similar ao proposto por C.T.Chen (ref.10) e efetuamos o traçado de raios com o programa "Shadow" (ref.14).

Calculamos a banda passante relativa do sistema ótico em função da largura das fendas e verificamos que o monocromador apresenta um poder resolutivo razoável (2000) com boa

transmissão.

.. .. .

Referências

- 1) Elder, F.R. et al, "Radiation from Electrons in a Synchrotron" Physical Review, vol 71 n.11, junho/47
- 2) Kunz, C. "Synchrotron Radiation Techniques and Applications" Topics in Current Physics, vol 10, Springer-Verlag, 1979
- 3) Jackson, J.D. "Classical Eletrodynamics", cap. 14 Ed. John Wiley & Sons , 1975
- 4) Abramovitz, M. e Stegun, I. A. "Handbook of Mathematical Functions" Dover Publications Inc., NY, 1970
- 5) Craievich, A.F. "Scientific Case for the LNL VUV-III Project" Anais do Encontro "Técnicas e Aplicações da Radiação Síncrotron" , Rio de Janeiro, agosto/1983
- 6) Winick, H. et al "Wiggler and Undulator Magnets", Physics Today vol.34, no.5 , maio/1981
- 7) Hogrefe H., et al "Application of Spherical Gratings in Synchrotron Radiation Spectroscopy", SPIE vol 733, 1987
- 8) Castro, J.C. "Instrumentação Ultra-violeta" (mesmo

que ref.5)

9) Castro, A.R.B. "Instrumentação Ótica para Ultra-Violeta de Vácuo e Raios X" em "First Summer School on the Physics of Synchrotron Light Sources.." , Campinas, LCLS, fev/1990

10) Chen,C.T. "Concept and Design Procedure for Cylindrical Element Monochromator for Synchrotron Radiation", NIM A256 (1987)

11) Stroke,G.W. "Diffraction Gratings" Handbuch der Physik, Springer Verlag, 1967

12) Born,M., Wolf,E. "Principles of Optics", cap.4 e 5. Pergamon Press, 1970

13) Noda, H.,Namioka,T. et al "Geometric Theory of the Grating" JOSA vol.64, no.8, 1974

14) Lai,B.,Cerrina,F. "Shadow: a Synchrotron Radiation Ray Tracing Program" NIM A246, 1986

15) Rodrigues, A.R.D. "Instrumentação para raios X : monocromadores e espelhos" (mesmo que ref.5)

- 16) Saile, V., West, J. B. "VUV and Soft X-Ray Monochromators for use with Synchrotron Radiation" NIM vol. 208, 1983
- 17) Howells, M. R. NIM vol. 177, 1980
- 18) Barth, J. et al "Grazing Incidence Monochromator Flipper" NIM vol. 208, 1983
- 19) Castro, A. R. B. "Optics for a VUV Beam Line at LNLS" II Workshop "Synchrotron Radiation: Applications and Related Instrumentation", Campinas, setembro/1989
- 20) Chen, C. T., Sette, F. "Performance of the Dragon Soft X-ray Beam Line"
- 21) Howells, M. R. "Vacuum Ultra Violet Monochromators" NIM vol. 172, 1980
- 22) Castro, A. R. B. "Projeto Conceitual de uma Linha de Luz para Espectroscopia de Alta Resolução com Raios X moles" *
- 23) Nakajima, K., Aoki, S. "Scattering measurements of soft X-ray mirrors" em Proc. Intern. Symposium of X-ray microscopy (Brookhaven 1987), Opt. Sciences Springer Verlag

Series 56, 1987

24) Jahel, L. Lin, L. e Rodrigues, A. R. "A VUV Elettron
Storage Ring for LNLS" (mesmo que ref. 19)

..

* Agosto/1991, não publicado