

Este exemplar corresponde à redação final da tese de Mestrado defendida pelo aluno Luís Artur Bernardes e aprovada pela comissão julgadora.

Antonio
13/09/96

**Projeto de Estação Experimental
para Espalhamento de Raios X a
Baixos Ângulos usando Radiação
Síncrotron**

Luís Artur Bernardes

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Iris C. L. de Tortoli.

Dissertação apresentada no Instituto
de Física "Gleb Wataghin" da Unicamp
para a obtenção do título de Mestre
em Física.

À minha querida mãe pelo apoio irrestrito que sempre me dedicou e sem o qual nada teria sido possível.

Agradecimentos

Inútil seria tentar listar todas as pessoas que direta ou indiretamente me ajudaram a realizar esse trabalho. Entretanto gostaria de agradecer aos colegas dos diversos grupos de trabalho do LNLS pelo companheirismo com que me auxiliaram durante todo o período de desenvolvimento desta tese. Também gostaria de agradecer de uma maneira especial a Prof^a. Íris Torriani pela amizade e imensa paciência com que me orientou por todos esses anos em que trabalhamos juntos. Por toda sua dedicação meu mais sincero obrigado.

Abstract

The main objective of this dissertation was the development of a project for the construction of a small angle X-ray scattering workstation for the UVX2 electron ring of the Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. Part of the instrumentation described in the project was built and tested, proving the viability of the project. The characterization of this instrumentation was performed using a conventional X-ray source. Preliminary results of the focusing properties of the monochromator and the mechanical stability of the optical bench were quite satisfactory. Theoretical calculations using a ray tracing program lead to an estimation of the thermal load on the optical elements of the beamline. Besides the construction of the prototypes for the monochromator, automated slit sets and the rotating optical bench, the outcome of this work includes the information obtained in the experimental tests. This information will be valuable in future improvements of the instrumentation of the SAXS beamline.

RESUMO

O principal objetivo deste trabalho de tese foi o desenvolvimento do projeto conceitual de uma estação experimental para realização de experiências de espalhamento de raios X a baixos ângulos que utiliza como fonte o anel de elétrons UVX2 do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. Parte da instrumentação descrita aqui foi construída e testada mostrando-se adequada aos seus objetivos. A caracterização desta instrumentação foi feita utilizando-se uma fonte convencional de raios X. Os resultados obtidos referentes as propriedades de focalização do monocromador e a estabilidade mecânica da estação experimental mostraram-se bastante satisfatórios. Foram realizadas ainda simulações numéricas com o uso do programa de traçado de raios SHADOW estudando-se a absorção da carga térmica pelos vários elementos ópticos e as propriedades de focalização da estação experimental. Portanto além da construção do protótipo do monocromador, dos módulos de fendas e do banco óptico foram obtidas importantes informações que servirão para aperfeiçoar a instrumentação da linha de SAXS.

Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron sob o apoio do CnPq e faz parte do projeto temático FAPESP nº 92/0685-5

Conteúdo

I. Objetivos	1
II. Introdução	2
II.1) Descrição da técnica experimental	
II.2) Instrumentação Relacionada	
III. Descrição do Projeto	8
III.1. Fontes Síncrotron	
III.2. Anel UVX2	
III.3. Aspectos Práticos	
III.4. Linha de SAXS	
III.4.a. Espelhos para Raios X	
III.4.b. Monocromadores	
III.5. Descrição da Óptica.	
IV. Componentes Ópticos	36
IV.1. Monocromador de Cristal Curvo	
IV.2. Módulo de Fendas de Entrada	
IV.3. Mesa Móvel para Estação de SAXS	
V. Simulações Numéricas da óptica da Estação Experimental	42
VI. Caracterização da Estação de SAXS utilizando fonte convencional de Raios-X	49
VII. Conclusões	61

I. Objetivos

Este trabalho teve como objetivo principal a formulação de um projeto conceitual de uma estação experimental para realização de experimentos de espalhamento de raios X a baixos ângulos utilizando como fonte o anel síncrotron UVX2 do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. A construção e caracterização de parte da instrumentação relacionada a esse projeto também fez parte deste trabalho. Esta dissertação está organizada da seguinte forma:

No capítulo II é feito um sumário da técnica experimental de SAXS.

O capítulo III contém uma descrição geral de fontes de radiação e, em particular, do anel UVX2 do LNLS. Também neste capítulo descrevemos a óptica escolhida para a estação experimental, detalhando os aspectos teóricos relacionados aos seus principais elementos ópticos.

No capítulo IV apresentamos os protótipos dos componentes cuja construção foi completada como parte desta tese.

No capítulo V são mostrados os resultados obtidos em simulações teóricas realizadas através do programa de traçado de raios SHADOW.

O trabalho segue no capítulo VI apresentando os resultados de experimentos realizados para a caracterização da linha de SAXS utilizando-se um gerador de raios X convencional.

Finalmente o capítulo VII apresenta um resumo do trabalho executado e as conclusões obtidas.

II. Introdução

II.1. Descrição da técnica experimental

O espalhamento de raios X a baixos ângulos (SAXS) é uma técnica experimental amplamente utilizada no estudo de heterogeneidades em ~~MATERIA~~ ~~CONDENSADA~~ em uma escala de 10 a 1000 Å. Define-se como espalhamento a baixos ângulos aquele observado em valores muito pequenos do vetor de espalhamento \bar{q} definido como $\bar{q} = \bar{K} - \bar{K}_0$, sendo \bar{K} e \bar{K}_0 os vetores das ondas espalhada e incidente respectivamente. Para o caso de espalhamento elástico podemos escrever $|\bar{q}| = \left(\frac{4\pi}{\lambda}\right) \sin \theta$ onde θ é metade do ângulo entre os vetores \bar{K} e \bar{K}_0 e λ é o comprimento de onda da radiação incidente.

A figura 1 mostra o esquema básico de um experimento de SAXS.

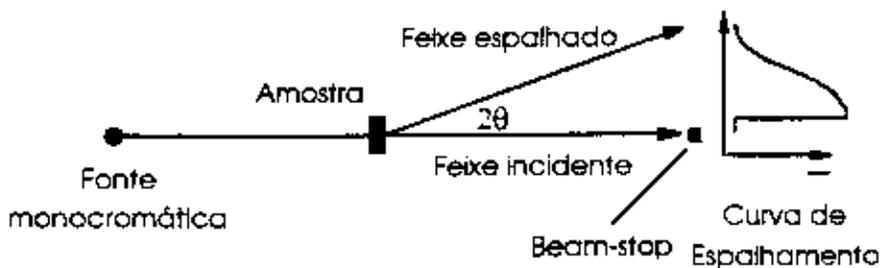


figura 1. Esquema de um experimento de SAXS

Através da análise da curva de espalhamento são obtidas informações estruturais de baixa resolução em sistemas tais como partículas em suspensão, macromoléculas em solução, poros e microregiões heterogêneas em materiais amorfos e policristalinos. Amostras como essas originam um espectro de espalhamento contínuo para valores pequenos de $|\bar{q}| \leq 0.2 \text{ \AA}^{-1}$, dependendo do tipo de amostra). Também são estudados materiais cristalinos ou altamente ordenados com

periodicidade entre de 10 e 600 Å. Esses materiais produzem reflexões de Bragg correspondentes a pequenos ângulos de difração.

Os primeiros experimentos de SAXS foram realizados no final dos anos 30 utilizando-se tubos de raios X convencionais (selados ou do tipo anodo rotatório). A partir dos anos 70 uma nova fonte de radiação passou a ser cada vez mais utilizada na realização desse tipo de experimento : Fontes síncrotron.

São três os fatores responsáveis pela escolha das fontes síncrotron como mais adequadas aos experimentos de SAXS. O primeiro deles é a intensidade. Em um tubo de anodo rotatório são obtidas intensidades da ordem de 10^6 fótons/seg.mrad no comprimento de onda correspondente a linha característica do alvo utilizado. Já os anéis síncrotron fornecem em média intensidades da ordem de 10^{11} fótons/seg.mrad, ou seja, várias ordens de grandeza maior. Essa vantagem permite que sistemas pouco espalhadores que anteriormente não podiam ser estudados pela técnica de SAXS possam ser explorados de maneira adequada. É o caso do estudo de macromoléculas em solução. Para que se obtenha uma boa curva de espalhamento nesse tipo de sistema são necessárias exposições de 20 a 40 horas em uma instalação que utilize como fonte um anodo rotatório. Porém no caso de uma fonte síncrotron o mesmo registro pode ser obtido em minutos ou até segundos conforme a concentração da solução (Tardieu, 1982). Tempos de aquisição como esse permitem que sejam realizados estudos da *CINÉTICA* de sistemas que evoluem no tempo o que abre novas fronteiras para a técnica de SAXS. Além disso novos métodos foram implementados incrementando ainda mais a variedade de informações que podem ser obtidas. É o caso do método de variação de contraste. Esse método baseia-se na dependência da intensidade espalhada em relação ao contraste de densidade eletrônica entre o soluto e o solvente no caso de macromoléculas em solução (Sturhmann, 1965). O poder espalhador do solvente pode ser variado adicionando-se um composto de alta densidade eletrônica e baixo peso molecular (NaBr, sacarose, etc.). A análise de várias curvas registradas para diferentes contrastes entre soluto e solvente permite que toda informação estrutural disponível pela técnica da SAXS seja avaliada.

A segunda característica das fontes síncrotron favorável à sua utilização em experiências de SAXS é o espectro contínuo de emissão. Os tubos convencionais limitam a escolha da energia a ser utilizada a determinadas linhas características dos alvos disponíveis no mercado. Já as fontes síncrotron fornecem uma vasta gama de escolha para a energia da radiação incidente o que permite ,por exemplo, o estudo de efeitos envolvendo espalhamento anômalo (Sturhmann, 1980). Com a apropriada

escolha do comprimento de onda da radiação incidente é possível que se analise o espalhamento da amostra de maneira seletiva, identificando contribuições individuais em sistemas compostos.

Finalmente a terceira característica importante nesse tipo de fonte com relação a experimentos de SAXS é o fato da divergência da radiação emitida ser bastante reduzida na direção vertical, da ordem de 0.5 mrad. Isso permite a construção de câmeras de SAXS com colimação pontual evitando correções posteriores dos dados experimentais para a eliminação de aberrações devidas ao formato do feixe incidente e consequentemente facilitando o processo de interpretação dos dados experimentais.

II.2. Instrumentação Relacionada

Para realização de experimentos de SAXS é necessário o uso de radiação monocromática na faixa entre 6 e 20 Kev com resolução em energia $\frac{\Delta E}{E}$ entre 10^{-2} e 10^{-4} . Além disso, a instrumentação utilizada deve permitir o registro da curva de espalhamento em valores de \bar{q} nos quais o feixe espalhado esteja o mais próximo possível do feixe direto.

Um esquema da instrumentação básica necessária à uma câmera de SAXS é apresentada na figura 2.

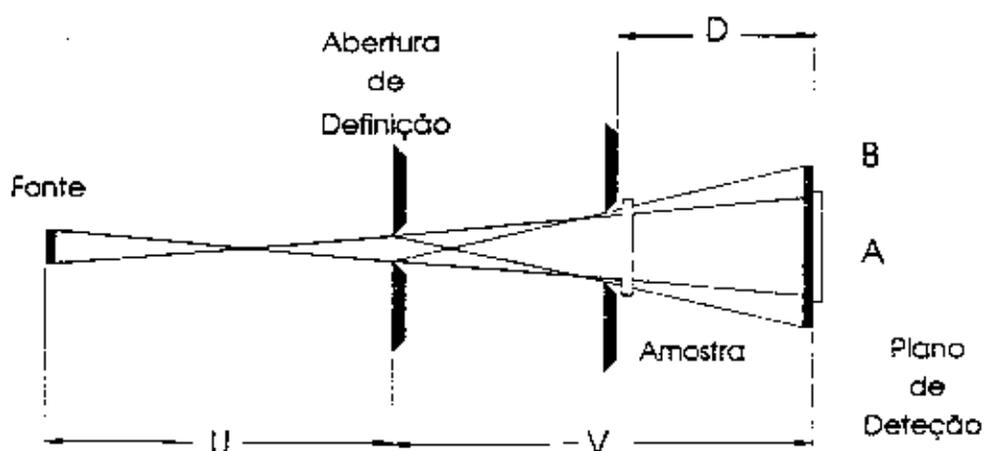


Figura 2. Diagrama mostrando o esquema básico de uma câmera de colimação pontual.

Essa câmara é constituída por um conjunto de fendas alinhadas sobre um banco óptico. As dimensões das aberturas assim como as distâncias entre elas devem ser escolhidas de forma a se cumprir as necessidades experimentais da maneira mais eficiente possível. Na figura 2 a resolução angular é dada pelo diâmetro (A) do feixe colimado no plano de detecção. O menor ângulo de observação está determinado pelo diâmetro (B) da penumbra produzida pela fenda de definição e limitada pela fenda de guarda (anti-parasítica). Esta fenda é colocada na posição logo a frente da amostra. As distâncias U, V e D são determinadas de forma a se otimizar a intensidade sobre a amostra para cada caso em particular.

As implicações técnicas decorrentes da instalação de uma estação experimental para experimentos de SAXS em um anel síncrotron diferem totalmente daquelas que se apresentam quando se utiliza uma fonte convencional de raios X. As distâncias envolvidas, a carga térmica depositada sobre os elementos ópticos e problemas referentes a estabilidade espacial do feixe de fótons fazem com que vários cuidados adicionais tenham de ser adotados ao se projetar esses instrumentos. Um resumo bastante completo sobre o assunto é apresentado por Koch (Koch, 1988) no qual o autor explora de maneira abrangente os problemas práticos relacionados a construção de estações de SAXS para radiação síncrotron.

São vários os arranjos utilizados para a implementação de estações experimentais de SAXS. A tabela I descreve algumas das estações já existentes resumizando suas principais características. Nessa tabela a óptica utilizada em cada estação é descrita usando-se a seguinte nomenclatura: M : espelho, Mo : monocromador de um cristal, DMo : monocromador de cristal duplo, (H) : focalização na direção horizontal, (V) : focalização na direção vertical, (H/V) : dupla focalização. Estas informações estão baseadas em uma pesquisa realizada em 1988 (Koch, 1988) entre os vários laboratórios de pesquisa. Atualmente o número de estações experimentais para SAXS aumentou ainda mais com relação aos dados colhidos naquela ocasião.

Local	óptica	faixa (Å)	$\Delta\lambda/\lambda$	Fluxo (f/s)
Brookhaven (NLS) X12C	M-DMo-M (H/V)	0,6 - 3	$1 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{12}$
Daresbury (SRS)	Mo(H)-M(V)	1.5	$1 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{11}$
Frascati	Mo	1 - 3	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^8$
Hamburgo(HASYLAB)				
A1	M(H/V) - M - Mo	0,8 - 0,7	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{11}$
A2	Mo(H) - M(V)	1.5	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{11}$
B1	DMo	0,4 - 2,5	$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^9$
(EMBL) D1	Mo(H) - M(V)	1.5	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{12}$
Orsay (LURE)				
D24	Mo(H)	0,9 - 2	$2 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{12}$
D22	DMo	0,8 - 3	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^9$
Stanford (SSRL)				
I - IV	M(V) - Mo(H)	1 - 2	$6 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{10}$
Ōsukuba(Photon Fac.)				
	M(V) - Mo(H)	1 - 2,2	$3 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{11}$

Tabela 1. Estações experimentais para SAXS em alguns dos principais laboratórios síncrotron do mundo.

Em geral (Craievich, 1988) as estações experimentais de SAXS são formadas por a) um conjunto de fendas de entrada que define o feixe vindo da fonte, b) um espelho para raios X, c) um monocromador, d) caminhos de vácuo para o feixe incidente e para o feixe espalhado, e) um conjunto de fendas anti-parasíticas, f) um porta amostras, g) e um detetor de raios X do tipo sensível a posição. As figuras 3 e 4 mostram de forma esquemática duas das configurações mais comuns na implementação desse tipo de instrumentação.

A figura 3 representa uma estação que utiliza um monocromador de dois cristais (Stuhmann, 1983). Esse tipo de monocromador fornece um feixe cuja posição de saída permanece fixa durante varreduras em energia. Esse arranjo é utilizado quando os experimentos exigem alta resolução em energia, da ordem de $\frac{\Delta E}{E} = 10^{-4}$.

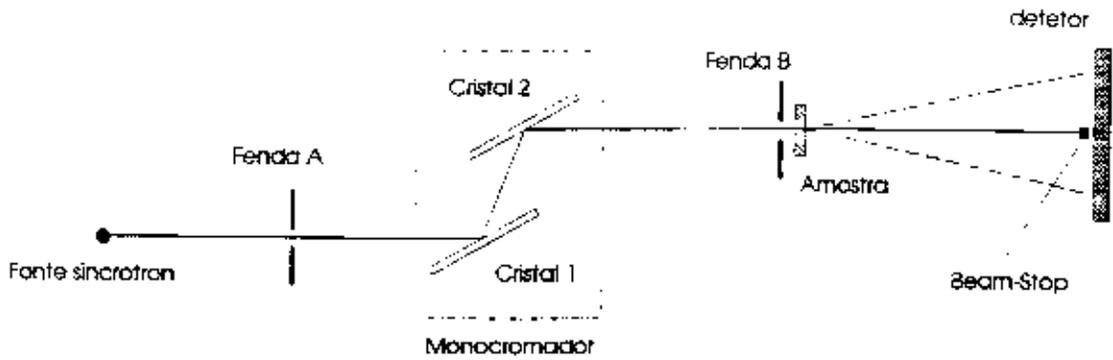


figura 3. Arranjo experimental para estação de SAXS utilizando um monocromador de duplo cristal.

A estação mostrada na figura 4 utiliza um espelho cilíndrico e um monocromador de cristal curvo. O espelho realiza a focalização no plano vertical enquanto o cristal do monocromador, curvado elasticamente, focaliza o feixe no plano horizontal (Hendrix, 1979). Este tipo de estação é utilizada geralmente em aplicações que exigem um alto fluxo de fótons em um único comprimento de onda com moderada resolução em energia ($\Delta E/E = 10^{-3}$).

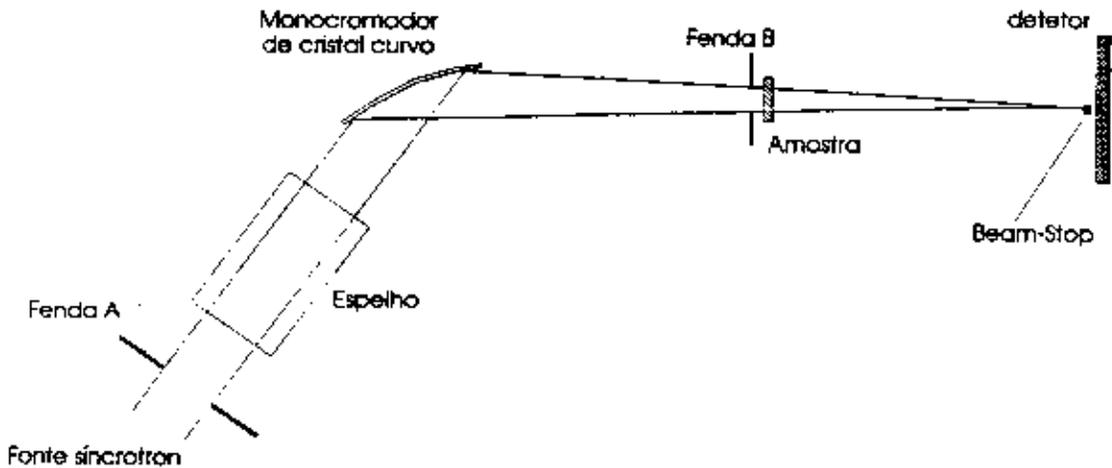


figura 4. Arranjo experimental para estação de SAXS utilizando um monocromador de cristal curvo e um espelho para raios X.

Em ambas as estações o caminho percorrido pela radiação é mantido sobre vácuo de forma a minimizar a atenuação do feixe por efeitos de absorção, reduzir o espalhamento parasita e proteger os elementos ópticos. Toda a estação é montada dentro de uma blindagem que protege o usuário contra os efeitos nocivos da radiação durante os experimentos. Por essa razão os movimentos do monocromador, fendas, porta-amostras, beam-stop, etc são necessariamente ativados através de acionadores controlados externamente.

III. Descrição do Projeto

Como evidenciado no capítulo anterior o uso de fontes de radiação síncrotron é bastante conveniente quando se trata de experimentos de espalhamento a baixos ângulos. O objetivo deste capítulo é descrever de forma sucinta as características dessa fonte e discutir a óptica necessária para o caso de uma linha de SAXS que utilize como fonte o anel UVX2, atualmente em construção no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron.

III. 1) Fontes Síncrotron

Radiação síncrotron é a radiação eletromagnética emitida por partículas carregadas que viajam a velocidades relativísticas ao executarem um movimento circular (Jackson, 1945). Esse tipo de radiação possui algumas características bem particulares. São elas:

- Espectro contínuo: Ao se analisar as componentes espectrais da radiação emitida observa-se uma distribuição contínua de comprimentos de onda dentro de uma faixa que vai do infravermelho aos raios X.
- Colimação natural: A radiação síncrotron é emitida na direção instantânea do movimento da partícula dentro de um cone cuja abertura angular está relacionada a energia da partícula (E) e sua massa (m). Essa abertura angular é dada por $1/\gamma$ onde $\gamma = E/mc^2$.

A figura 5 mostra o espectro e a forma do feixe de luz síncrotron.

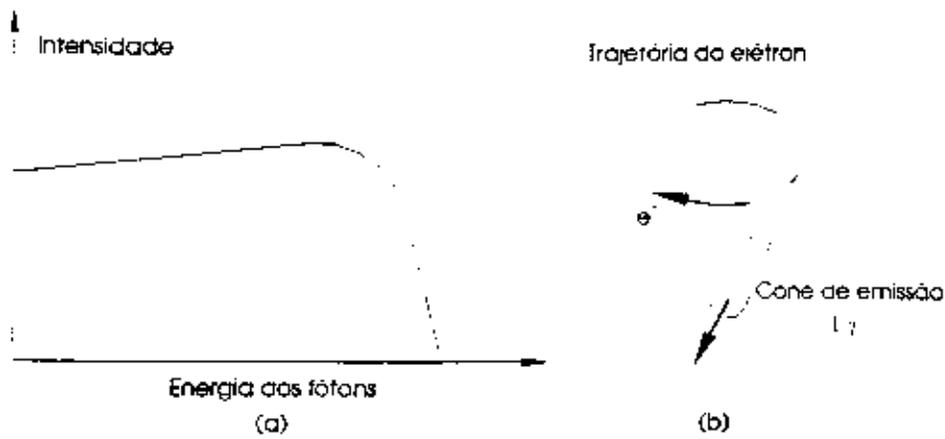


Figura 5. (a) espectro de emissão da radiação. Em geral nesse tipo de representação para o espectro síncrotron a intensidade é dada em fótons/seg por mrad de divergência horizontal para uma banda passante de 0.1% (b) distribuição espacial da radiação.

Na prática esse tipo de radiação é obtida dos chamados anéis síncrotron. Esses equipamentos foram desenvolvidos a partir de anéis aceleradores de partículas utilizados em pesquisas de altas energias. A teoria da radiação síncrotron emitida por aceleradores circulares foi desenvolvida primeiramente por Ivanenko and Pomeranchuk (Ivanenko and Pomeranchuk, 1944) e Schwinger (Schwinger, 1946). O princípio de funcionamento desses aceleradores é o seguinte: um feixe de partículas carregadas (positrons ou elétrons) viaja com velocidade relativística por uma câmara circular mantida sob vácuo. A órbita é obtida através da utilização de magnetos que defletem o feixe de maneira adequada. Ao executarem esse movimento circular as partículas emitem radiação na direção tangente a sua trajetória. A energia dissipada é restaurada mediante o uso de dispositivos de rádio frequência (klystrons). Com isso, dentro do plano da órbita, os cones de radiação originados em cada segmento da trajetória se superpõem formando um leque. Já no plano perpendicular a órbita a divergência é determinada pela própria divergência angular "natural" da radiação emitida pelas partículas. A figura 6 mostra a a forma que adota o feixe de luz emitido.

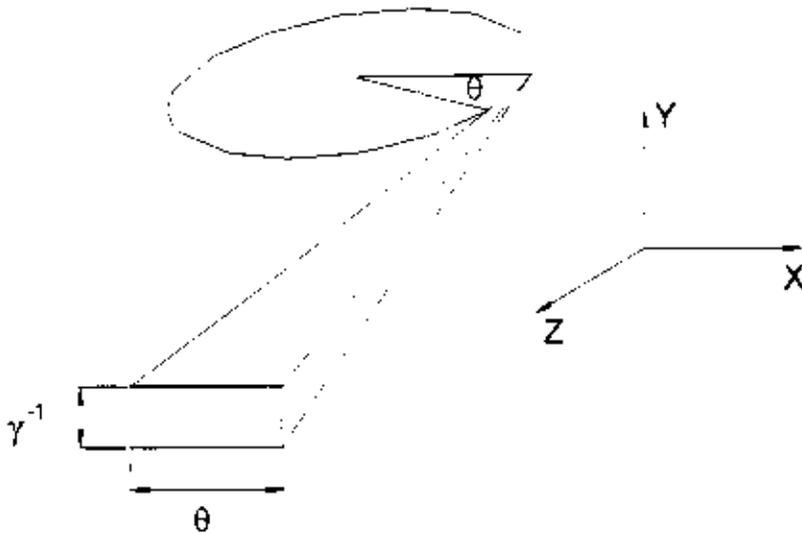


Figura 6. Geometria da emissão de radiação síncrotron.

A teoria eletromagnética permite que se obtenham todas as informações referentes a radiação emitida relacionando-as aos chamados "parâmetros de máquina". Esses parâmetros representam as características do acelerador de partículas em questão. Dessa forma quantidades como fluxo de fótons emitidos, distribuição espectral, tamanho da fonte, divergência da radiação emitida, etc; serão expressos em termos da energia das partículas dentro do feixe, do raio de curvatura da trajetória, do campo magnético que deflete o feixe e da quantidade de partículas que circula dentro do anel.

Na prática os anéis síncrotron não são constituídos por uma só câmara circular mas na verdade por segmentos de arco interligados por seções retas. A cada segmento de arco é associado um magneto, conhecido como dipolo, que deflete o feixe para que este descreva a trajetória correta. A radiação gerada nessas seções curvas do anel é conhecida como radiação de dipolo. Além dos dipolos existem os chamados elementos de inserção. Estes componentes são montados nas seções retas do anel e são capazes de gerar, para um determinado conjunto de parâmetros de máquina, feixes de radiação síncrotron com características distintas das da radiação emitida na região dos dipolos. Na prática esses elementos são constituídos por conjuntos de magnetos, permanentes ou não, que defletem o feixe quando da sua passagem pelas seções retas. A radiação emitida por esses dispositivos sai do anel através da câmara de dipolo, por uma saída colocada na sequência da seção reta. A figura 7 mostra o esquema básico de um elementos de inserção.

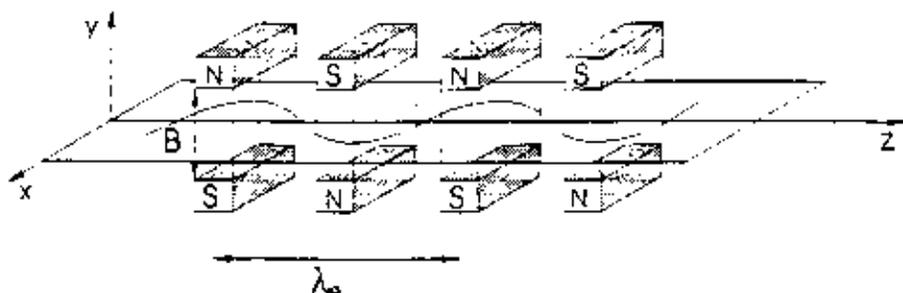


Figura 7. Esquema básico de um wiggler multipolar.

Em muitos casos a necessidade de um elemento de inserção como fonte de radiação é absolutamente necessária, dadas as características da técnica experimental em questão. O quadro abaixo mostra características da radiação emitida pelos diversos dispositivos.

Fonte	Divergência Horizontal	Espectro característico (valores típicos)
Dipolo		
Wiggler		
Ondulado		

Os elementos de inserção são classificados em wigglers e onduladores. Não serão explorados os detalhes teóricos a respeito do funcionamento dos vários

dispositivos anteriormente citados. Porém é interessante lembrar que as características da radiação oriunda desses dispositivos podem também ser expressas em termos de parâmetros de máquina. A obtenção dessas relações é ligada a uma análise mais profunda da teoria envolvida na construção de anéis síncrotron, o que, como destacado anteriormente, não é o objetivo deste trabalho. O leitor interessado é referenciado a algum dos inúmeros trabalhos que abordam o assunto. Para o caso de elementos de inserção cito como exemplo o resumo apresentado por Brown et al. (Brown, 1983).

III.2) Anel UVX2

Definidas as características genéricas dos anéis síncrotron, passemos a análise da fonte que será efetivamente utilizada no desenvolvimento do projeto descrito nesse trabalho. O anel para aceleração de elétrons UVX2 vem sendo desenvolvido no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron com o apoio do CnPq desde 1986. As informações técnicas pertinentes a esse projeto são descritas por Lin et al. (Lin, 1992). A tabela abaixo destaca os parâmetros relevantes do projeto da estação de SAXS.

Parâmetro	Descrição	valor	
E	Energia das partículas do feixe de elétrons	1.15	GeV
B	Campo magnético nos dipoles	1.4	Tesla
I	Corrente de operação do anel	100	mA
R	Raio de curvatura do bending magnet	2.735	m
σ_x	Tamanho do feixe de elétrons na horizontal (*)	.94	mm
σ_y	Tamanho do feixe de elétrons na vertical (*)	.27	mm
σ_x	Divergência horizontal do feixe de elétrons (*)	80	10^{-6} rad
σ_y	Divergência vertical do feixe de elétrons (*)	20	10^{-6} rad
ξ_x	Emitância horizontal do feixe de elétrons	65.1	10^{-9} m.rad
ξ_y	Emitância vertical do feixe de elétrons	6.51	10^{-9} m.rad

Tabela 2. Parâmetros de máquina para o anel UVX2.

(*) Os parâmetros tamanho e divergência do feixe na vertical e horizontal variam para diferentes posições dentro do anel. Os valores fornecidos acima dizem respeito ao centro das seções retas.

Definidos os parâmetros do anel UVX2 podemos calcular o espectro emitido na região dos dipolos. O gráfico da figura 8 mostra o resultado desse cálculo.

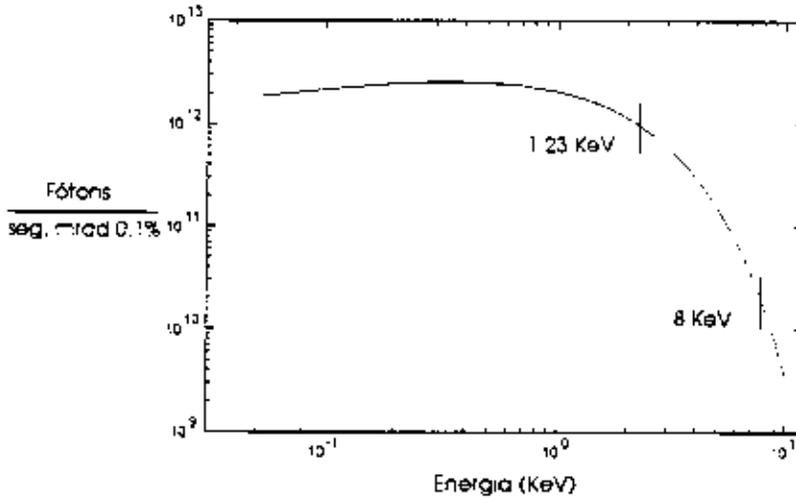


Figura 8. Espectro em energia da fonte UVX2 para um dipolo.

O parâmetro que caracteriza o espectro em energia é a chamada energia crítica, definida como $E_c \text{ (KeV)} = 0.665 E^2 \text{ (GeV)} B \text{ (T)}$ (obs: parâmetros dados na tabela 2). Para o caso da radiação emitida pelos dipolos do anel UVX2 $E_c = 1.23 \text{ KeV}$. Pela análise do espectro nota-se que na região entre 8 e 12 KeV temos uma intensidade bem reduzida quando comparada ao fluxo correspondente a energia crítica. Para fótons com energias de 10 KeV teremos um fluxo de $3.5 \cdot 10^9$ fótons/seg. mrad .1%.

A tabela abaixo mostra os parâmetros de um wiggler projetado para servir como fonte de radiação no anel UVX2 e que será montado em uma de suas seções retas.

Parâmetro	Descrição	valor	
B	Campo magnético (max)	1.95	Tesla
n	número de períodos	5	
λ_0	Comprimento de cada período	.25	m
K	$0.934 \times B \times \lambda_0$	45.53	Tesla . m

Tabela 3. Parâmetros característicos do Wiggler a ser construído para o anel UVX2.

A partir desses dados podemos calcular o espectro da radiação emitida pelo wiggler mostrado na figura 9.

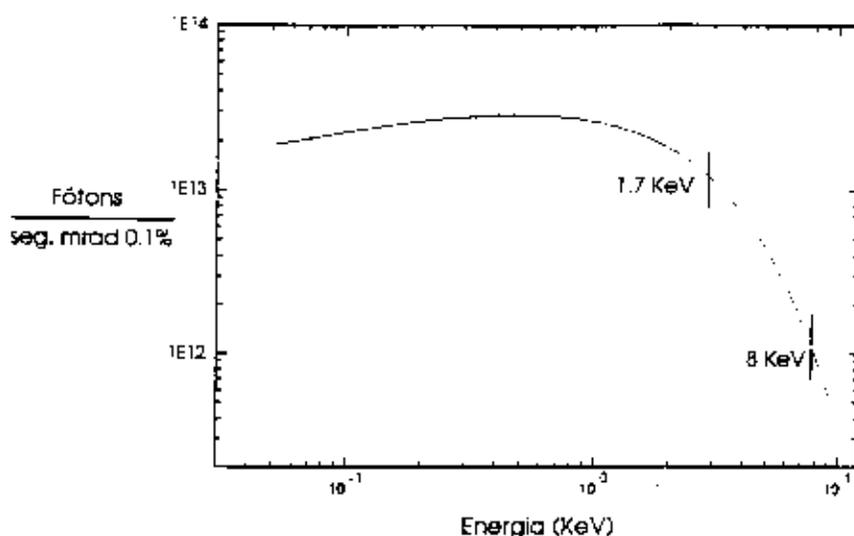


Figura 9. Espectro em energia da fonte UVX2 para o wiggler cujos parâmetros são listados na tabela 3.

Nota-se um deslocamento da energia crítica para um valor de 1.7 KeV. Com isso o fluxo de fótons na região de interesse do espectro para a realização de experiências de SAXS aumenta substancialmente. Para o caso de fótons com energia de 10 KeV teremos um fluxo agora de $2.5 \cdot 10^{11}$ fótons/seg. mrad .1% o que significa um aumento equivalente a duas ordens de grandeza. Portanto a utilização de um wiggler para a realização de experiências de SAXS se faz necessária visto que nesse tipo de experimento o fluxo de fótons incidente sobre a amostra é um parâmetro de grande importância.

Toda a radiação proveniente desse elemento de inserção está confinada em um cone cuja abertura angular horizontal é dada por $K/\gamma = 21,6$ mrad e a abertura angular vertical por $1/\gamma = 0,44$ mrad . Porém por limitações de construção somente a parte central da divergência horizontal será efetivamente utilizada na realização de experimentos. Isso ocorre pois, como comentado anteriormente, a radiação gerada pelo wiggler sairá do anel por uma flange na câmara de dipolo, localizada a 5.56 m do centro do wiggler no caso do anel UVX2. Por limitações estruturais dessa câmara a flange não pode ter mais de 100 mm de diâmetro, o que já limitaria a divergência horizontal. Outro aspecto prático determinará qual a divergência horizontal do feixe destinado a linha de SAXS. Para melhor aproveitamento da fonte wiggler foi determinado que esta deveria servir a mais de uma estação experimental simultaneamente. A figura 10 mostra o "layout" da distribuição das linhas de luz previstas para o anel UVX2, onde destaca-se a colocação de mais três estações experimentais (l, j, k) na mesma saída que será utilizada para a linha de SAXS (m).

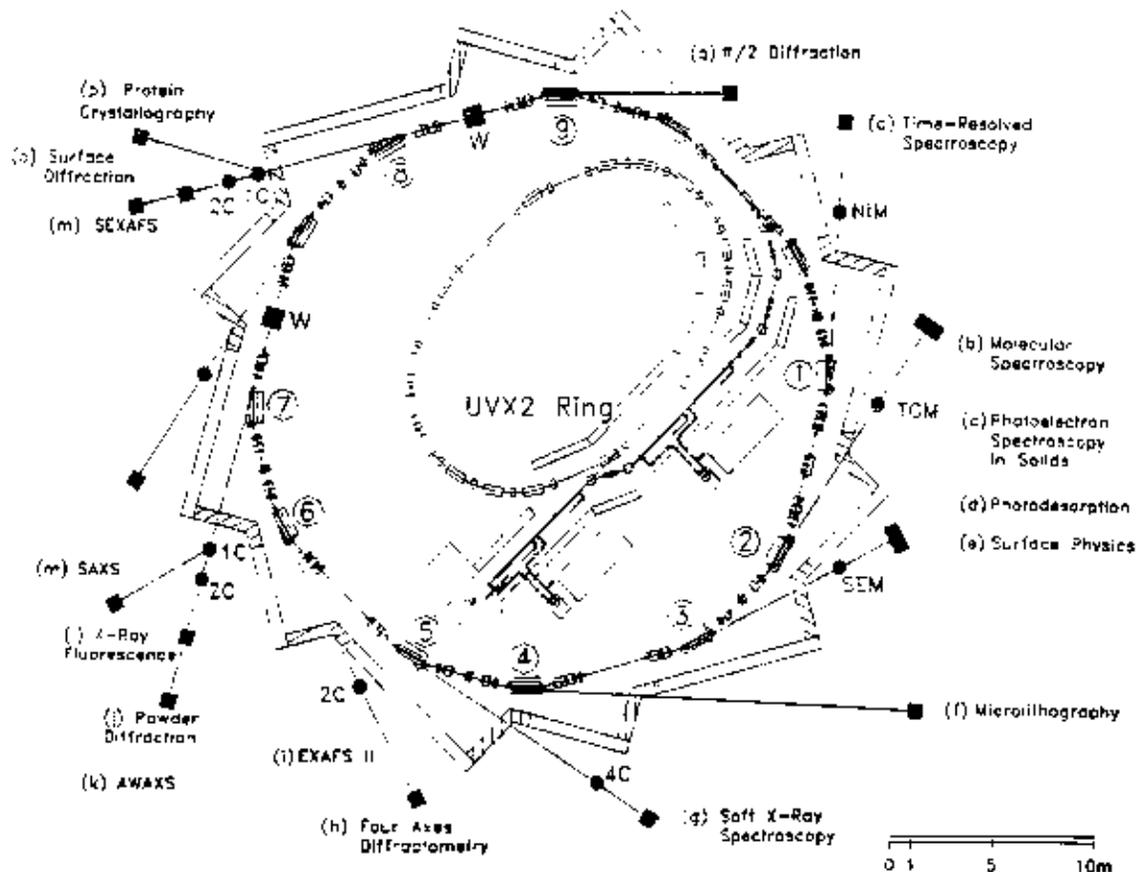


Figura 10. Layout da distribuição das linhas de luz previstas para o anel UjVX2.

Para o uso compartilhado da fonte wiggler será utilizada uma máscara refrigerada a ser montada na saída da câmara de dipolo. Essa máscara dividirá o feixe na direção horizontal em duas partes, destinando 5 mrad a estação de SAXS e 5 mrad as outras estações experimentais que irão compartilhar a mesma saída. Dessa forma teremos para a estação experimental de SAXS uma divergência horizontal do feixe de fótons $\sigma'_{xf} = 5$ mrad. Já na direção vertical a teoria prevê que a divergência σ'_{yf} (fótons) depende da energia dos fótons e é dada por :

$$\sigma'_{yf} = \left(\sigma_y'^2 + \sigma_R^2 \right)^{1/2} \quad (3.1)$$

Onde σ_y' é a divergência do feixe de elétrons no meio da seção reta e σ_R é dado por:

$$\sigma_R = \frac{565}{\gamma} \left(\frac{E_c}{E} \right)^{0.425} \quad (3.2)$$

Da mesma forma temos expressões para o tamanho efetivo da fonte na direções horizontal e vertical.

$$\sigma_{yf} = \left(\sigma_y^2 + \frac{L^2 \sigma_R^2}{12} \right)^{1/2} \quad (3.3)$$

$$\sigma_{xf} = \left(\sigma_x^2 + \frac{L^2 \sigma_x'^2}{12} + \frac{L^2 \sigma_{xf}'^2}{36} + a^2 \right)^{1/2} \quad (3.4)$$

Nas expressões anteriores σ_x e σ_y representam o tamanho do feixe de elétrons nas direções horizontal e vertical respectivamente e σ_x' e σ_y' são as divergências horizontal e vertical do feixe de elétrons. L é o comprimento total do wiggler e a é a amplitude da trajetória do elétron na horizontal expressa por:

$$a = \frac{K \lambda_0}{\gamma 2\pi} \quad (3.5)$$

onde λ_0 é o comprimento de cada período do wiggler. A tabela abaixo sumariza os valores desses parâmetros para a faixa de energia de interesse.

energia (KeV)	σ_{xf} (mrad)	σ_{yf} (mrad)	σ_{yf} (mm)	σ_{xf} (mm)
8	5	0.131	0.275	8.69
10	5	0.120	0.274	8.69
12	5	0.111	0.273	8.69

Tabela 4. Parâmetros da radiação emitida pelo wiggler na faixa de interesse de energia para a realização de experimentos de SAXS.

Podemos calcular também a potência irradiada pelo wiggler. As expressões abaixo fornecem o valor da potência total e da potência por unidade de divergência horizontal (integrada na direção vertical) do feixe de luz.

$$P_{\text{tot}} [\text{Watts}] = 633 E^2 (\text{GeV}) B^2 (\text{T}) N \lambda_0 (\text{m}) I (\text{A}) \quad (3.6)$$

$$\frac{dP}{d\theta} \left[\frac{\text{Watts}}{\text{mrad}} \right] = 8.54 E^3 (\text{GeV}) B(\text{T}) N I(\text{A}) \quad (3.7)$$

Nessas expressões E representa a energia do partículas dentro do anel. B é o valor do campo magnético gerado pelos ímãs do wiggler. I é a corrente do anel e N é o número de períodos magnéticos do wiggler. Como veremos mais adiante este aspecto é muito importante na avaliação da carga térmica dissipada pelos elementos ópticos da linha de SAXS. Para o caso do wiggler apresentado teremos $\frac{dP}{d\theta} = 13.93 \text{ Watts/mrad}$ e $P_{\text{tot}} = 437.7 \text{ Watts}$.

III.3) Aspectos Práticos

Existe uma distância mínima entre a fonte e a instrumentação destinada a um experimento quando se utiliza radiação síncrotron. Essa distância é determinada pela existência de sistemas de proteção para o vácuo do anel, de vital importância nesse tipo de equipamento. Esses sistemas de proteção são montados em cada uma das saídas das câmaras de dipolo. Para o caso do anel UVX2 essa distância mínima é da ordem de 10 metros. Para o caso específico da linha de SAXS aspectos estruturais relativos ao tamanho dos elementos ópticos levarão a distância mínima de montagem a algo em torno de 20 metros. Isso ocorre pois essa linha de luz terá a seu lado outras estações experimentais que deverão utilizar a mesma saída de radiação. Com isso é necessário que a distância em relação a fonte seja tal que a secção transversal do feixe permita a montagem, lado a lado, das câmaras e suportes dos vários elementos ópticos pertencentes a cada estação experimental. A 20 metros da fonte o tamanho do feixe destinado a linha de SAXS será de 100 mm x 4 mm. O tamanho do feixe utilizado em um experimento de SAXS esta diretamente relacionado ao tamanho médio das amostras que é da ordem de 1 mm². Dessa forma para o uso do feixe síncrotron é necessária uma óptica com fendas que limitem o tamanho do feixe sobre a amostra em detrimento do fluxo de fótons sobre a mesma. Para compensar essa perda de intensidade é preciso que se utilizem elementos focalizantes nas direções vertical e horizontal que concentrem todo o fluxo de fótons incidente em uma área compatível com as necessidades experimentais. A seguir descreveremos a óptica escolhida para a estação experimental a ser instalada no anel UVX2.

III.4) Linha de SAXS

Para determinação das características desejadas a estação de SAXS do LNLS foi realizada uma pesquisa junto aos potenciais usuários dessa estação experimental. Como resultado dessa pesquisa definiram-se alguns dos quesitos básicos a serem

satisfeitos de forma a permitir uma ampla gama de utilização dentro das áreas de interesse dessa técnica experimental. Assim determinou-se que a estação de SAXS deveria operar numa faixa de energia de 8 a 12 KeV e permitir acesso a valores do vetor de espalhamento próximos de $|q| = 0.002 \text{ \AA}^{-1}$.

Para uma perfeita adaptação da estação experimental à fonte wiggler optou-se pelo uso de uma óptica de dupla focalização utilizando como elementos focalizantes um espelho para raio x e um monocromador de cristal curvo. O espelho seria responsável pela focalização na direção vertical enquanto que o cristal se encarregaria de fazer a focalização do feixe de raios x na direção horizontal. A figura 11 mostra a geometria da óptica escolhida.

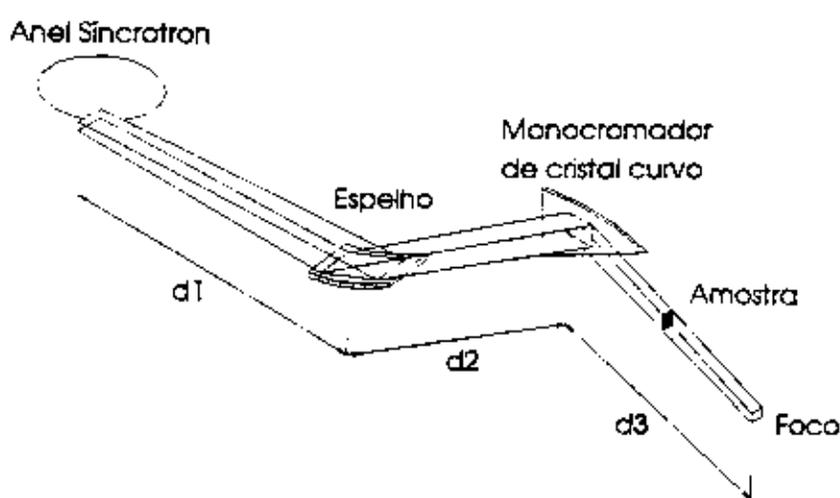


Figura 11. Geometria da óptica a ser utilizada na estação de SAXS do LNLS.

Antes de continuarmos nossa descrição da estação de SAXS é conveniente uma abordagem mais detalhada dos aspectos teóricos relacionados ao espelho e ao monocromador de cristal curvo, componentes de vital importância na montagem dessa estação.

III.4.a) Espelho para Raios X

O princípio de funcionamento dos espelhos para raios X baseia-se no fenômeno de reflexão total da radiação por superfícies. Para melhor entendermos esse processo devemos considerar a interação entre um feixe de raios X e uma superfície genérica. Essa interação pode ser descrita em termos da constante dielétrica complexa do material refletor dada por:

$$\tilde{\xi} = 1 - 2\delta - 2i\beta \quad (3.8)$$

δ e β são quantidades dependentes do comprimento de onda da radiação incidente e relacionam-se as propriedades dispersivas e de absorção do material respectivamente. Para comprimentos de onda na faixa dos raios X e longe das bordas de absorção do material δ e β podem ser expressos por:

$$\delta = \frac{r_0}{2\pi} N \lambda^{-2} \quad (3.9)$$

$$\beta = \frac{\mu}{4\pi} \lambda \quad (3.10)$$

Onde $r_0 = 2.818 \cdot 10^{-15}$ m é o raio clássico do elétron, λ é o comprimento de onda, μ é o coeficiente linear de absorção do material e N o número de elétrons por unidade de volume. A partir de $\bar{\xi}$ define-se como índice de refração \hat{n} a quantidade

$$\hat{n} = \sqrt{\bar{\xi}} \approx 1 - \delta - i\beta \quad (3.11)$$

Desconsiderando-se efeitos de absorção ($\beta=0$) obtemos $n \approx 1 - \delta$. Podemos investigar através da lei de Snell o ângulo para o qual uma determinada radiação incidente será totalmente refletida pela superfície denominado ângulo crítico θ_c . Assim temos que:

$$\cos \theta_c = n = 1 - \delta \quad (3.12)$$

Dado que δ é da ordem de 10^{-5} podemos escrever $\cos \theta_c = 1 - \frac{1}{2} \theta_c^2$ e assim obter:

$$\theta_c = \sqrt{2\delta} = 2.34 \cdot 10^{-3} \sqrt{\frac{Z\rho}{A}} \lambda \quad (3.13)$$

Na última equação expressamos θ_c em função do número atômico Z , da massa atômica A e da densidade de massa ρ expressa em unidades CGS. A refletividade é 1 para $\theta < \theta_c$ e zero para $\theta > \theta_c$. A tabela abaixo ilustra o valor de θ_c para alguns dos materiais utilizados na fabricação de espelhos para raios x.

Material	θ_c (m rad)
quartzo	5.1
vidro	4.1
Ni	7.42
Au	10
Pt	10.5

Tabela 5. Valores dos ângulos críticos para alguns dos materiais mais comumente utilizados na fabricação de espelhos para raios X obtidos para um comprimento de onda $\lambda=1.54 \text{ \AA}$ (Witz, 1969).

Na verdade se incluímos os efeitos de absorção na análise da refletividade notamos que sua variação em torno do valor de θ_c não é tão abrupto como a apontada pela lei de Snell mas sim gradativa. Para um correto equacionamento do problema é necessário considerar os coeficientes de reflexão complexos como função do ângulo de incidência definidos pelas equações de Fresnel (Compton and Allison, 1963).

$$\tilde{r}_\sigma = \frac{\tilde{\xi} \sin \theta - \sqrt{\tilde{\xi}^2 - \cos^2 \theta}}{\tilde{\xi} \sin \theta + \sqrt{\tilde{\xi}^2 - \cos^2 \theta}} \quad (3.14)$$

$$\tilde{r}_\pi = \frac{\sin \theta - \sqrt{\tilde{\xi}^2 - \cos^2 \theta}}{\sin \theta + \sqrt{\tilde{\xi}^2 - \cos^2 \theta}} \quad (3.15)$$

Aqui os sufixos σ e π dizem respeito aos estados de polarização da radiação incidente. O sufixo σ indica o caso em que o vetor campo elétrico dessa radiação se encontra paralelo ao plano de incidência enquanto que o sufixo π corresponde ao caso em que esse vetor se encontra orientado perpendicularmente ao plano de incidência. As refletividades correspondentes podem ser calculadas da seguinte forma:

$$R_\pi = \tilde{r}_\pi \tilde{r}_\pi^* = |\tilde{r}_\pi|^2 \quad (3.16)$$

$$R_\sigma = \tilde{r}_\sigma \tilde{r}_\sigma^* = |\tilde{r}_\sigma|^2 \quad (3.17)$$

Como observado anteriormente o valor de θ_c na faixa de comprimentos de onda de raios X é da ordem de alguns mrad. Nessa condição a dependência da

refletividade com relação a polarização é praticamente desprezível (Parrat, 1954). Para esse caso pode-se obter uma expressão única para a refletividade dada por:

$$R = \frac{h - (\theta/\theta_c) \sqrt{2(h-1)}}{h + (\theta/\theta_c) \sqrt{2(h-1)}} \quad (3.18)$$

onde :

$$h = (\theta/\theta_c)^2 + \sqrt{[(\theta/\theta_c)^2 - 1]^2 + (\beta/\delta)^2} \quad (3.19)$$

A equação anterior é válida para o caso de espelhos com uma superfície perfeitamente lisa e comprimentos de onda menores que 10 Å. Para comprimentos de onda mais longos a dependência com relação a polarização passa a ser mais significativa devendo assim ser considerada. A figura 12 mostra curvas de refletividade em função do ângulo de incidência para o quartzo. Em uma delas a superfície do quartzo foi recoberta por uma camada de ouro.

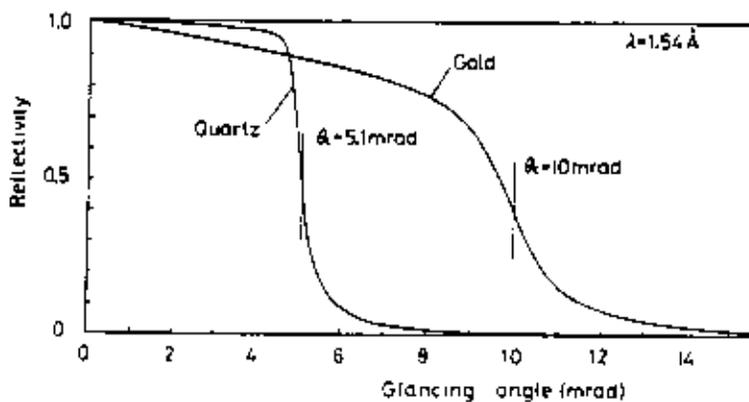


Figura 12. Refletividade como função do ângulo de espelhos de quartzo cobertos ou não por uma camada de ouro para $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$. São destacados os valores de θ_c correspondentes.

Nota-se que, com a cobertura de ouro obtemos um aumento do ângulo crítico: dado que este é proporcional a densidade eletrônica do material refletor $\left(\theta_c \propto N = \left\{ \frac{Z\rho}{A} \right\} \right)$. Porém a variação da curva de refletividade em torno de θ_c se torna bem mais suave do que no caso de materiais com densidade eletrônica menor.

A figura 13 grafica a refletividade de lâminas de quartzo e quartzo+ouro em função do comprimento de onda para um ângulo de incidência de 3.8 mrad.

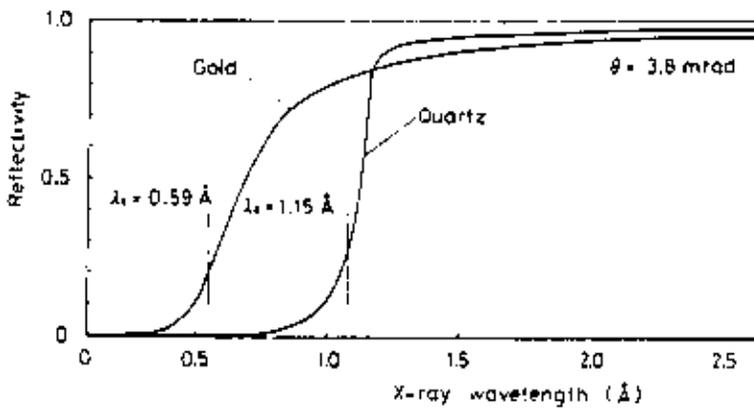


Figura 13. Refletividade como função do comprimento de onda de espelhos de quartzo cobertos ou não por uma camada de ouro para $\theta=3.8$ mrad.

Apenas comprimentos de onda com valores abaixo de λ_c serão refletidos eficientemente. O comprimento de onda crítico λ_c será dado por:

$$\lambda_c = \theta \sqrt{\frac{\pi}{r_0 N}} \quad (3.20)$$

onde r_0 é o raio de Bohr.

O comportamento da curva de refletividade com relação aos diferentes materiais disponíveis para a fabricação de espelhos é utilizado de acordo com a conveniência. No caso mais específico de aplicações com radiação síncrotron temos que, para funções de focalização, é interessante que se tenham ângulos críticos maiores. Apenas como exemplo observemos o caso de um espelho cuja refletividade é descrita pela figura 12 que focaliza verticalmente o feixe incidente estando colocado a 20 m da fonte. Para que este seja capaz de abranger toda a divergência vertical ($\sigma'_{yf} = 0.5$ mrad) seria necessária uma lâmina de comprimento $L = 1960$ mm para o caso do quartzo sem cobertura de ouro. Porém, para o mesmo comprimento de onda de corte, necessitaríamos de uma lâmina comprimento $L = 1000$ mm se esta possui-se uma cobertura de ouro. Obviamente a diminuição do tamanho total da lâmina do espelho facilita a fabricação e conseqüentemente diminui os custos.

No caso do uso de espelhos como filtros nem sempre é desejável a existência de cobertura em sua superfície. Em geral nesse tipo de aplicação é conveniente que a rejeição de radiações com comprimentos de onda menores ocorra de maneira abrupta, como acontece no caso de superfícies com materiais mais leves.

Para o uso em fontes síncrotron os espelhos são amplamente utilizados nos dois modos de trabalho e a decisão da existência da cobertura ou não surge de uma avaliação da relação custo/benefício de cada aplicação em particular.

As expressões obtidas anteriormente para a refletividade desconsideram qualquer efeito da qualidade da superfície do espelho. Na verdade essa qualidade é de extrema importância na performance deste tipo de elemento óptico. São dois os tipos de deformações que ocorrem nas superfícies dos espelhos. A primeira, de frequência espacial bem menor que o comprimento de onda da radiação incidente é chamada de 'slope error'. Esse tipo de deformação é responsável pelo aumento do tamanho do foco devido a desvios ocorridos nos raios de luz quando de sua reflexão pela superfície óptica defeituosa. O segundo tipo de deformação é conhecido como rugosidade e possui uma frequência espacial da ordem do comprimento de onda. A rugosidade produz espalhamento da radiação incidente e conseqüente diminuição da refletividade do espelho. Outro efeito responsável pela diminuição da eficiência de espelhos para raios X é a existência de comportamentos oscilatórios devido a espessura da camada de cobertura. Bilderback (Bilderback, 1981) faz um pequeno resumo em seu trabalho sobre as teorias que tentam quantificar, de forma aproximada, a diminuição na refletividade dos espelhos em função dos efeitos acima descritos. Algumas dessas teorias se aproximam muito bem dos resultados experimentais. Porém continua sendo grande a dificuldade de se prever teoricamente a refletividade de uma superfície. Desta forma a medida experimental ainda é o melhor método de determinação da qualidade de um espelho para raios X.

Como enfatizado anteriormente, a presença de materiais mais leves na superfície diminui a refletividade de espelhos para o caso de comprimentos de onda menores. Por esse motivo o efeito de contaminação de superfícies por hidrocarbonetos é um problema que afeta com bastante frequência os usuários de radiação síncrotron. Essa contaminação não está ligada somente aos gradientes de temperatura aos quais esses espelhos estão submetidos mas também aos próprios efeitos da radiação sobre o material. Um estudo mais detalhado sobre o assunto foi feito por Takacs (Takacs, 1986). Uma solução para o problema está em se manter o

espelho sob pressões da ordem de 10^{-8} mbar. Estudos mostram (Helliwell et al., 1982) que espelhos com cobertura de platina não demonstraram mudanças apreciáveis em sua refletividade mesmo após 1 ano de exposição contínua à radiação síncrotron.

Óptica para espelhos

Os espelhos para raios X são utilizados como elementos focalizantes através da adequada curvatura de sua superfície refletora. Essa curvatura deve satisfazer a chamada equação de focalização expressa por:

$$\frac{2}{R} = \frac{\sin\theta}{p} + \frac{\sin\theta}{q} \quad (3.21)$$

Nesta equação R representa o raio da curvatura da superfície do espelho e p e q as distâncias fonte-espelho e espelho-foco respectivamente. Para uma magnificação $M = p/q = 1$ temos $R = p/\sin\theta$. Para se obter uma focalização perfeita do ponto de vista geométrico teríamos que utilizar uma superfície com o formato de um elipsóide. Para diferentes formatos teremos sempre deformações da imagem. Essas deformações são conhecidas como aberrações.

Formas com dupla focalização (toróides ou elipsóides de revolução) permitem focalizações pontuais mas são extremamente difíceis de se obter dentro da qualidade exigida pelas aplicações. Porém para o caso de espelhos para raios X utilizados com radiação síncrotron pequenas variações no formato da superfície em pouco influenciam o resultado da focalização dado o tamanho das distâncias envolvidas e o enorme raio de curvatura exigido (4 a 5 km). Assim curvaturas cilíndricas são amplamente utilizadas. Nesse caso a equação que relaciona a deflexão δ no centro de um espelho de comprimento L e o raio de curvatura R é expresso por (Helliwell, 1984),

$$\delta = \frac{L^2}{8R} \quad (3.22)$$

Por exemplo, para um espelho de 1 m e um raio de curvatura de 4 km $\delta = 25$ μm . Esse deslocamento pode ser obtido simplesmente pelo próprio peso do espelho ao ser apoiado nos extremos. Esse método de curvatura está sendo utilizado em um espelho para raios X atualmente em construção no LNLS e que formará parte da estação de SAXS.

III.4.b) Monocromadores

Monocromadores para raios X têm como principal função selecionar um comprimento de onda da fonte de radiação com uma determinada resolução em energia exigida pelo experimento. Na faixa dos raios X a difração por monocristais é usada como técnica de monocromatização. A condição para que ocorra difração em um cristal é dada pela Lei de Bragg (KATAOKA AND HASEGAWA, 1955)

$$\lambda = 2d \sin \theta_B \quad (3.23)$$

onde d representa o espaçamento entre os planos cristalográficos (hkl) do cristal, λ é o comprimento de onda da radiação incidente e θ_B o ângulo de Bragg correspondente. Por diferenciação dessa lei obtemos a resolução em energia de um cristal difratante, expressa por

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = -\frac{\Delta E}{E} = \Delta\theta \cot \theta_B \quad (3.24)$$

Observa-se que para um determinado ângulo de Bragg a resolução em energia é determinada pela variação angular $\Delta\theta$. Essa variação angular representa na verdade a variação do ângulo de incidência da radiação que chega ao cristal. No caso de uma fonte de tamanho h colocada a uma distância p cuja radiação esteja contida em um cone de divergência β temos que

$$\Delta\theta = \left(\frac{h^2}{p^2} + \beta^2 \right)^{1/2} \quad (3.25)$$

Na verdade um terceiro fator contribui para $\Delta\theta$. Esse fator, conhecido como largura intrínseca de reflexão, advém de um tratamento mais elaborado da difração de radiação por cristais perfeitos feito através da teoria dinâmica (James, 1963). Em termos práticos a largura intrínseca representa a variação angular ao redor de θ_B na qual uma radiação perfeitamente monocromática continua sendo difratada pelo cristal. Isso significa que a difração ocorre não somente no ângulo de Bragg mas sim numa estreita faixa angular distribuída ao seu redor. A largura dessa faixa angular depende do plano (hkl) e das características físicas do próprio cristal. Levando-se em conta essa terceira contribuição podemos escrever a expressão completa para a resolução em energia de cristais difratantes como sendo igual a

$$\frac{\Delta E}{E} = \cot \theta_B \left(W_0^2 + \frac{h^2}{p^2} + \beta^2 \right)^{1/2} \quad (3.26)$$

onde W_0 é a largura intrínseca de reflexão. Alguns outros resultados interessantes da teoria dinâmica dizem respeito as características geométricas do feixe de luz após a interação com o cristal. Para exemplificarmos esses efeitos tomemos o caso de um monocristal no qual incide uma radiação monocromática cuja divergência angular é igual a largura intrínseca de reflexão e o ângulo de incidência corresponde àquele determinado pela lei de Bragg. Nesse caso toda radiação incidente será difratada pelo cristal. Se este for simétrico, ou seja, possuir seus planos cristalográficos paralelos a sua superfície, teremos que a radiação difratada seguirá seu caminho conservando a divergência do feixe incidente, exatamente como no caso da reflexão de luz visível por um espelho plano. Porém no caso de um cristal assimétrico no qual os planos cristalográficos possuem um ângulo α com relação a superfície teremos alguns efeitos que diferem do esperado. A figura 14 mostra um esquema do caso citado

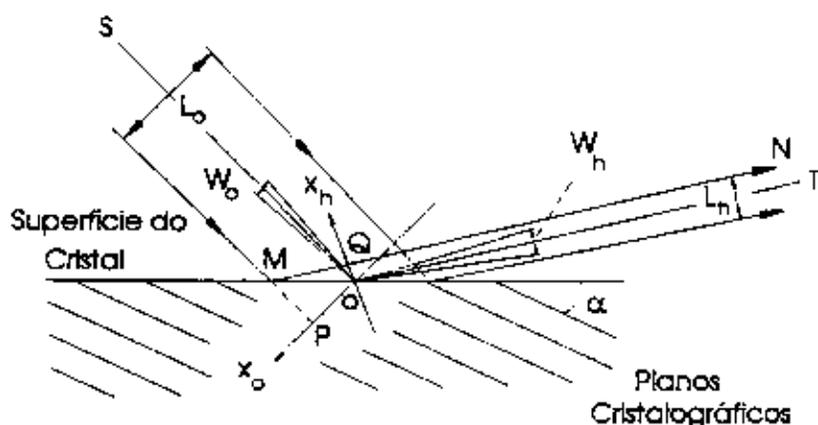


Figura 14. Geometria da difração por cristais perfeitos (Matsushita, 1980).

A teoria mostra que para uma radiação incidente cuja divergência angular seja W_0 teremos um feixe difratado de divergência $W_h = |b|W_0$ onde

$$b = \frac{\sin(\theta_B + \alpha)}{\sin(\theta_B - \alpha)} \quad (3.27)$$

sendo b definido como o fator de assimetria do cristal. Além disso teremos que a largura espacial do feixe difratado se relacionará a largura do feixe incidente da seguinte forma

$$L_h = \left(\frac{1}{|b|} \right) L_0 \quad (3.28)$$

Essas propriedades da difração da radiação por cristais assimétricos são amplamente utilizadas na fabricação de monocromadores pois permitem que se alterem características geométricas do feixe difratado ao mesmo tempo em que se seleciona o comprimento de onda.

Cristais perfeitos não são utilizados única e exclusivamente como elementos monocromatizadores na faixa dos raios X. Ao serem curvados podem atuar também como elementos focalizantes. Os primeiros monocromadores utilizando cristais curvos foram construídos por Johann (Johann, 1931) e Cauchois (Cauchois, 1932). Witz (Witz, 1969) apresenta um interessante "review" a respeito de geometrias focalizantes que utilizam cristais curvados e fontes convencionais de raios X. Analisemos agora o problema de monocristais montados em geometrias focalizantes. A figura 15 mostra um esquema da geometria de focalização por uma superfície curva genérica.

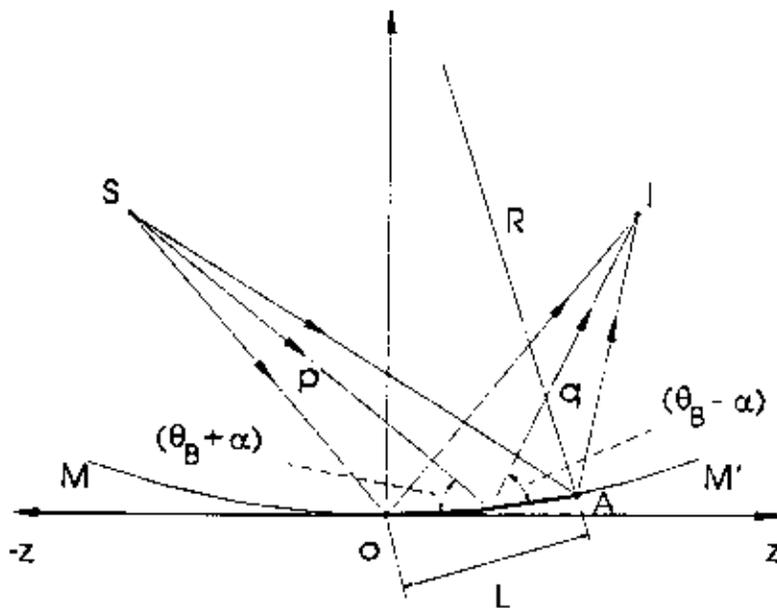


Figura 15. Geometria de focalização: um cristal OA de comprimento L que descreve a curvatura MOM' focaliza no ponto I os raios X providos de uma fonte localizada no ponto S.

Um cristal OA de comprimento L possui uma superfície que descreve uma curvatura MOM'. Os raios que saem da fonte S atingem a superfície do cristal onde são difratados e focalizados no ponto imagem I. Se o cristal possui um corte assimétrico com ângulo α teremos os raios incidentes formando um ângulo $(\theta_B + \alpha)$

com relação a superfície e emergindo após a difração com um ângulo $(\theta_B - \alpha)$. A distância entre a fonte S e um ponto genérico na superfície do cristal será dada por p enquanto que a distância entre esse mesmo ponto e o foco I será expressa por q.

Para o caso em que o raio de curvatura R é muito maior que o tamanho L do cristal teremos que :

$$\frac{2}{R} = \frac{\sin(\theta_B + \alpha)}{p} + \frac{\sin(\theta_B - \alpha)}{q} \quad (3.29)$$

Se a curvatura da superfície do cristal é cilíndrica podemos escrever a variação do ângulo de incidência sobre essa superfície como

$$\Delta\sigma = \frac{L}{2} \left(\frac{\sin(\theta_B - \alpha)}{q} - \frac{\sin(\theta_B + \alpha)}{p} \right) \quad (3.30)$$

Se escolhemos o ângulo de assimetria e as distâncias p e q de maneira que

$$\frac{p}{q} = \frac{\sin(\theta_B + \alpha)}{\sin(\theta_B - \alpha)} \quad (3.31)$$

teremos $\Delta\sigma = 0$. A equação (3.31) corresponde a chamada condição de focalização de Guinier. Para o caso de fontes do tipo síncrotron (fontes brancas) o uso de sistemas dentro da condição de Guinier produzirá focos com um mínimo de aberrações cromáticas. Isso pode ser melhor observado através da análise da expressão (3.26). Se a variação angular $\Delta\sigma$ é zero teremos $\beta = 0$ e portanto um valor mínimo para $\frac{\Delta E}{E}$ obtendo uma melhor resolução em energia.

O tamanho do feixe na posição do foco depende de vários fatores como a largura angular intrínseca da radiação emergente W_γ , o fator de demagnificação da fonte $M = q/p$ e as aberrações geométricas do sistema óptico. A figura 17 mostra duas das geometrias mais utilizadas na implementação de cristais como elementos focalizantes.

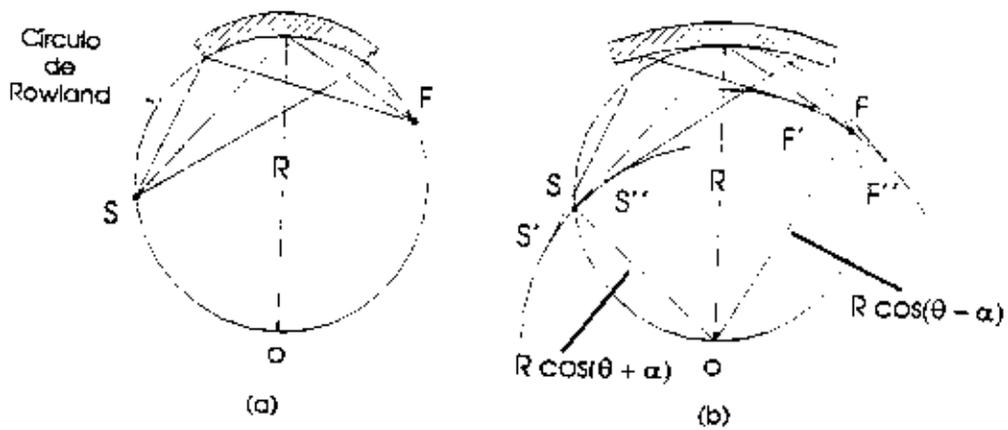


Figura 16. Geometrias de focalização de Johansson (a) e Johann (b).

A figura 16a representa a configuração conhecida, como geometria Johansson. Nesse tipo de geometria um cristal de superfície cilíndrica de raio R é curvado até que essa superfície assuma uma curvatura cujo raio seja $R/2$.

Nessa condição para uma fonte localizada dentro do perímetro do círculo de raio $R/2$ descrito pela superfície do cristal teremos o foco sobre o mesmo perímetro livre de aberrações geométricas. Entretanto sua utilização é comprometida pela dificuldade existente na fabricação de cristais com superfícies curvas. Geometrias do tipo Johann (figura 16b) são amplamente utilizadas por apresentarem grande facilidade de implementação. Nesse tipo de geometria somente um ponto do cristal toca o círculo de melhor focalização (círculo de Rowland) enquanto que os outros pontos da superfície se afastam desse círculo gradativamente, a medida que nos afastamos do ponto de tangência. Isso faz com que pontos localizados sobre o círculo de raio $R \cos(\theta_B + \alpha)$, centrado em "o", sejam focalizados sobre pontos no círculo de raio $R \cos(\theta_B - \alpha)$ também centrado em "o" dando origem a aberrações geométricas que contribuirão para o aumento do tamanho do foco. Matsushita e Hashizume (Matsushita and Hashizume, 1983) fornecem expressões aproximadas para se estimar de forma analítica o tamanho do foco (ΔF) na direção de focalização em sistemas com geometrias do tipo Johann e Johansson. Essas expressões são mostradas a seguir.

$$\Delta F = \left(A^2 + B^2 + (C + D)^2 \right)^{1/2} \quad (3.32)$$

onde:

A	qW_b	Johansson e Johann
B	$\frac{q}{p}$	
C	$\frac{1}{4}L^2 \sin(\theta_B + \alpha) \cos(\theta_B - \alpha) \left(\frac{1}{p} - \frac{1}{p_0} \right)$	
D	0	Johansson
	$\left[\left(q - \frac{q_0}{2} \right) \cos(\theta_B + \alpha) - \frac{q_0}{2} \cos(\theta_B - \alpha) \right] \left[\frac{L \sin(\theta_B + \alpha)}{2p_0} \right]^2$	Johann

Uma focalização pontual pode ser obtida através de um cristal duplamente curvado cuja superfície descreva um elipsóide de revolução. Nesse caso a fonte deverá se encontrar sobre um de seus focos enquanto o ponto imagem será obtido no outro foco. Esse tipo de curvatura é extremamente difícil de ser obtida restando como opções algumas soluções aproximadas (superfícies com formatos esféricos ou toroidais).

III.5) Descrição da Óptica

Resumidos alguns dos principais aspectos relacionados aos elementos ópticos passemos a uma descrição detalhada do projeto da linha de SAXS para o LNLS.

A figura 17 mostra o desenho da montagem da estação de SAXS no anel UVX2.

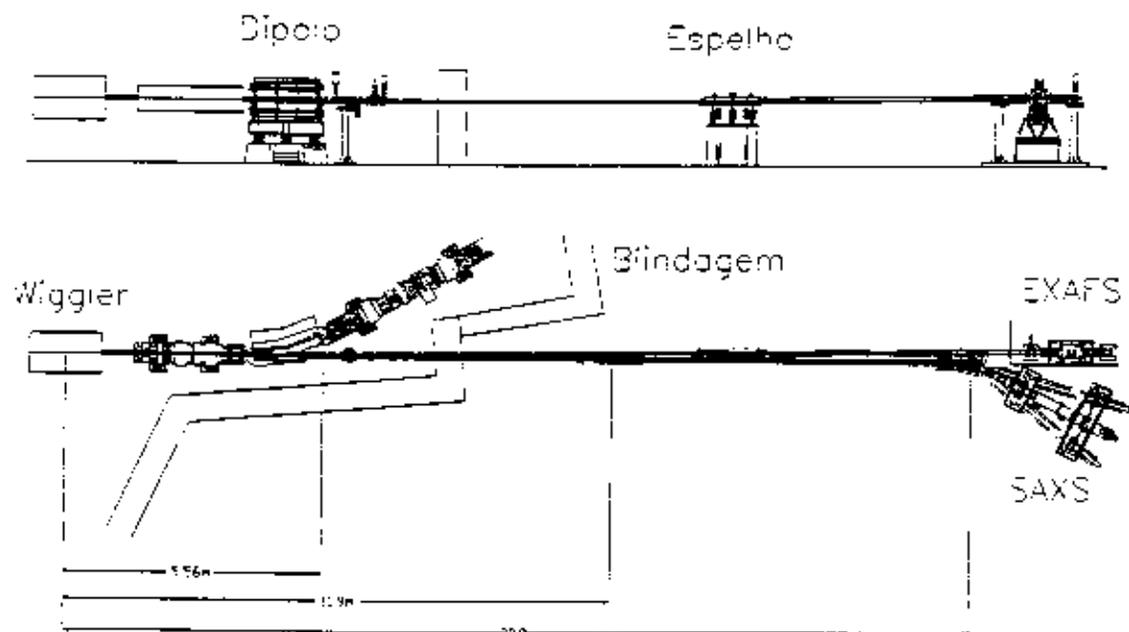


Figura 17. Esquema de montagem da estação de SAXS no anel UVX2. Lateralmente observa-se uma outra linha de luz destinada a experimentos de EXAFS.

As distâncias determinadas para a montagem dos componentes ópticos são as seguintes:

Wiggler - espelho = 11.9 m

Espelho - monocromador = 8.1 m

Monocromador - detector = 3.8 m

Também pode-se observar nesta mesma figura a representação da linha de luz destinada a experimentos de EXAFS. Para cada uma das linhas de luz será montada uma proteção blindada em cujo interior ficarão as estações experimentais. Essas proteções, conhecidas como "hutches" experimentais, serão dotadas de sistemas de "interlock" que impossibilitarão a abertura da porta de acesso e/ou a permanência de pessoas na região próxima ao experimento durante sua realização. Após o sistema de proteção padrão (front-end) os dois feixes seguirão por diferentes câmaras chegando até as respectivas estações experimentais. Ambas estações possuem espelhos para focalização vertical. Anteriores a cada espelho serão montadas janelas que isolarão a câmara de vácuo do anel síncrotron das câmaras de vácuo das linhas de luz. Isso é feito porque todo o anel trabalha em condições de UHV (ultra high vacuum, 10^{-11} mbar) e as linhas de luz destinadas a realização de experiências com raios X não necessitam de pressões tão baixas para sua operação. A escolha do material para a confecção dessas janelas é feita levando-se em conta a absorção do material para fótons na faixa de energia acima de 5 KeV. Neste caso o berílio surge como a escolha mais natural. Além de sua baixa absorção nessa faixa de energia suas propriedades mecânicas permitem a construção de janelas apropriadas a vedações de UHV sem grandes complicações tecnológicas. Para o caso dessas estações experimentais serão utilizadas janelas de berílio com espessura de 150 μm .

Na estação de SAXS será utilizado para focalização vertical um espelho de "float glass" com cobertura de ouro. Sua curvatura será obtida através do ação do próprio peso da lâmina de "float glass" ao ser apoiada nos extremos. O ângulo crítico desse espelho foi determinado experimentalmente por Vicentin (Vicentin, 1993) como sendo 5.9 mrad para uma energia de 8 KeV. Esse espelho está sendo construído no LNLS no Grupo de Instrumentação de Raios X e deverá operar sob vácuo a pressões de 10^{-8} mbar.

A figura 18 mostra com detalhes a estação de SAXS.

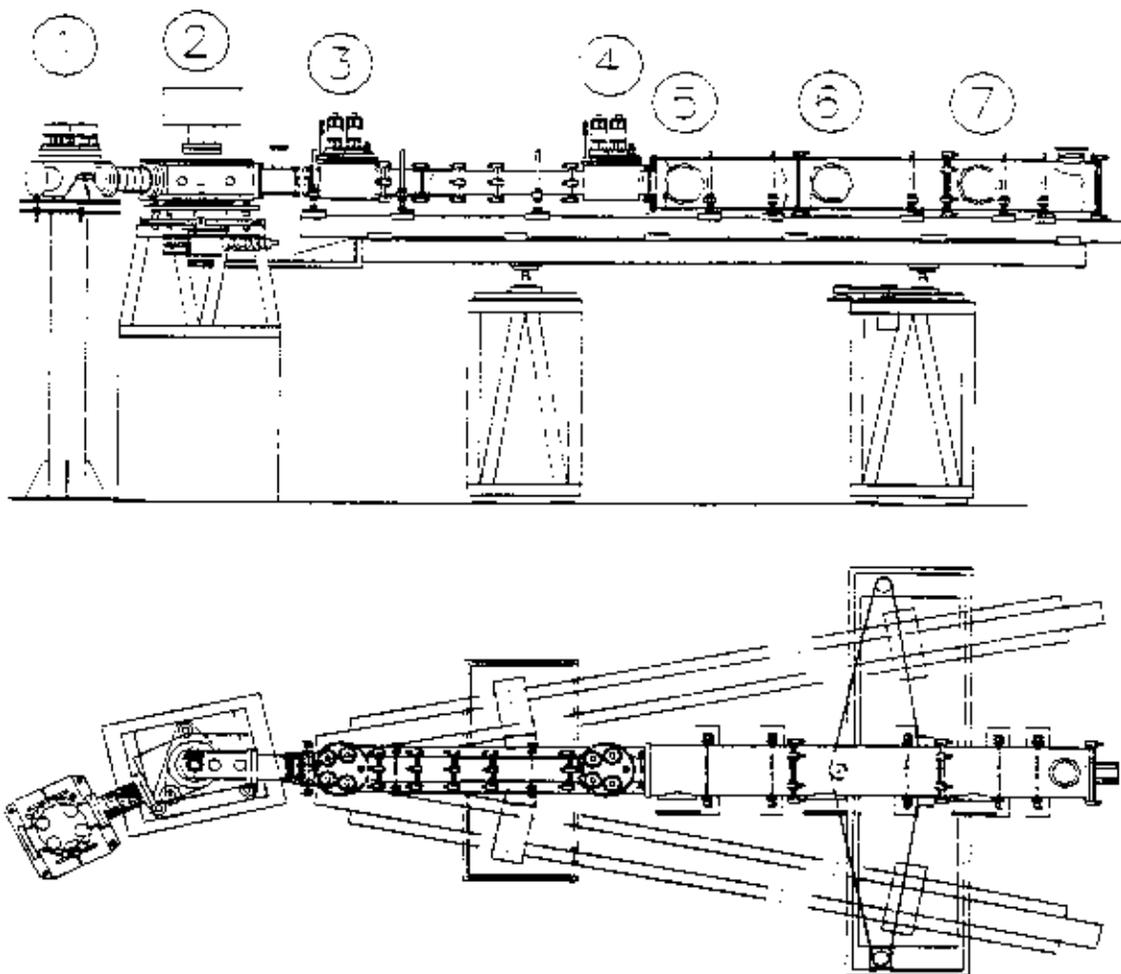


Figura 18. Estação de SAXS do LNL. No desenho são destacados os componentes: 1. Módulo de fendas de entrada, 2. Monocromador de cristal curvo, 3. e 4. Fendas anti-parasíticas, 5., 6. e 7. Locais para montagem da porta amostras. Esse últimos 5 itens estão montados sobre o banco óptico da mesa móvel. Esta mesa possui ainda duas mesas de apoio e um sistema de colchão de ar. Este sistema encontra-se montado entre o banco óptico e as mesas de apoio.

O primeiro elemento (1) corresponde a um módulo de fendas de entrada. Este possui quatro lâminas de tântalo controladas por motores de passo com movimentos independentes que limitam o tamanho do feixe que chega ao monocromador. Apesar da geometria focalizante utilizada na estação de SAXS existem dois casos distintos em que fendas devem limitar o feixe : no caso de amostras muito espathadoras em que o fluxo de fótons espalhado é tão intenso que excede a máxima taxa de contagem do sistema de detecção ou para amostras de secção transversal menor que a do feixe focalizado. Em ambos os casos o módulo de entrada

deverá limitar o feixe, diminuindo seu tamanho espacial e conseqüentemente o fluxo de fótons incidente sobre a amostra. O feixe síncrotron na posição do módulo de fendas possui uma secção transversal de 8 mm x 3 mm. Portanto este componente deve ter dimensões adequadas à manipulação de um feixe deste tamanho. O módulo de fendas de entrada se encontra montado entre o espelho e o monocromador de cristal curvo sem a existência de janelas. Portanto deve ser capaz de operar em condições de HV (high vacuum, 10^{-8} mbar).

Seguindo adiante na linha de luz encontramos o monocromador de cristal curvo (2). Esse componente deve ser capaz de monocromatizar e focalizar na direção horizontal um feixe de 8.5 mm x 3 mm. Além disso deve permitir o ajuste dos ângulos de Bragg para seleção do comprimento de onda desejado e possuir um sistema para variação do raio de curvatura do cristal. Maiores detalhes sobre esse componente serão fornecidos na descrição do protótipo que foi construído para a linha de SAXS.

Um bloqueador de feixe secundário (Shutter secundário) será montado na saída do monocromador. Sua função é interromper o feixe monocromático, permitindo que o usuário modifique as condições experimentais ou proceda qualquer eventual troca de amostras, sem a necessidade de se interromper o fluxo de fótons sobre o monocromador ou o espelho. Isso é de vital importância já que esses componentes recebem o feixe branco diretamente, ficando sujeitos a uma carga térmica que modifica suas características de trabalho. Logo necessitam de tempo para estabelecerem um regime de operação que muitas vezes excede o de uma pequena modificação das condições experimentais.

Toda a estação deve funcionar sob vácuo de forma a diminuir a absorção dos raios X e minimizar a quantidade de radiação espalhada pelo ar. Os primeiros componentes (espelho e monocromador) tem sua performance prejudicada com qualquer contaminação de suas superfícies. Principalmente no caso do espelho (vide III.4.a) esse fator é de grande preocupação. Portanto para minimizar esses efeitos a parte da linha localizada entre a janela de berílio e o monocromador deverá operar em condições de H.V. (10^{-8} mbar). Já o restante da estação não necessita de pressões tão baixas, bastando pressões da ordem de 10^{-3} mbar para reduzir suficientemente a absorção e o espalhamento produzido pelo ar. A separação entre a parte inicial da linha que utilizará bombas de vácuo do tipo iônica e a segunda parte que terá bombas de vácuo mecânicas será feita através de janelas de Kapton.

essas janelas serão montadas logo após o shutter secundário na saída do monocromador e na entrada do módulo de fendas anti-parasíticas (3).

A seleção do comprimento de onda a ser utilizada no experimento é feita através da mudança do ângulo de incidência da radiação sobre o cristal do monocromador. Para cada novo comprimento de onda selecionado teremos o feixe difratado em uma posição diferente do plano horizontal. Dessa forma todo o experimento (amostra mais detetor) deve ser capaz de acompanhar o movimento do feixe monocromatizado que, para uma variação θ do ângulo de incidência, se moverá um ângulo 2θ no plano horizontal. Para isso todo o experimento será montado sobre uma mesa de granito sustentada por colchões de ar. Essa mesa possui como eixo de rotação o mesmo eixo do monocromador e pode girar no plano horizontal de forma a se posicionar no lugar correto. Todos os componentes que ficam após o monocromador na estação experimental são montados sobre um trilho óptico fixo a mesa de granito. São eles: as fendas anti-parasíticas, o porta amostras, o beam stop e o detetector de raios X.

As fendas anti-parasíticas indicadas na figura 18 como (3) e (4) tem como função minimizar a penumbra causada pela radiação espalhada pelo cristal. Estas fendas não tocam o feixe e precisam ser posicionadas o mais próximo possível a este para atuarem de forma satisfatória. Portanto necessitam de grande precisão na movimentação, principalmente no plano vertical onde as medidas de espalhamento são usualmente realizadas.

Os componentes localizados após o monocromador podem ser montados em praticamente toda a extensão do trilho óptico já que o caminho de vácuo foi construído de forma modular. Isso permite que se variem as distâncias monocromador-amostra e amostra-detetor da maneira desejada pelo usuário. Na figura 18 (5), (6) e (7) indicam os locais onde o porta amostra pode ser montado sem a necessidade de grandes mudanças na linha. O porta amostra será um componente modular capaz de sustentar diversos tipos de amostras, desde sólidos até soluções e gases. Além disso deverá permitir o posicionamento dessas amostras nas direções X e Y, para que estas possam ser centralizadas com relação ao feixe na realização dos experimentos. O último componente a ser montado no caminho de vácuo é o "beam stop". Sua função é barrar o feixe direto que passa através da amostra impedindo que este atinja o detetector de raios X. Para o caso de detectores de radiação lineares o beam stop nada mais é que uma tira de aço e chumbo de 3 a 4 mm de largura que se movimenta verticalmente. Seu movimento será controlado

por motores de passo. É de vital importância a precisão e estabilidade da movimentação do "beam stop" pois o feixe direto pode danificar o sistema de detecção. Outro aspecto relevante é que o beam stop deve possuir a menor largura possível de forma a permitir o acesso no diagrama de espalhamento a valores do vetor \vec{q} de pequena amplitude.

Uma janela de kaptan separa o caminho de vácuo do detector de raios X. A estação de SAXS permite o uso dos mais variados tipos de detectores. Porém a idéia inicial seria a utilização de um detector linear do tipo sensível a posição. Esse detector seria montado na posição vertical de forma a registrar os diagramas de espalhamento nesta direção. Finalmente alguns módulos complementares serão incluídos no projeto para auxiliar as experiências de SAXS. Entre eles podemos citar os monitores de intensidade e os filtros atenuadores. Os monitores de intensidade compostos por materiais espalhadores de pequena absorção colocados sobre o feixe monocromático e detectores de radiação do tipo "pin-diode" utilizados para a medida da intensidade espalhada por esses materiais. Essa intensidade é proporcional ao fluxo de fótons do feixe direto. Dessa forma a montagem de módulos deste tipo antes e após a amostra permite a realização de medidas de absorção que são de grande importância em experimentos de SAXS. Já os filtros atenuadores serão utilizados para diminuir o fluxo de fótons que chega ao detector de maneira controlada. Esse tipo de operação é muito útil durante procedimentos de alinhamento do beam stop e na caracterização de amostras de grande poder espalhador.

Toda a estação experimental será controlada através de um microcomputador do tipo PC interligado a um sistema LOCO de controle. O sistema LOCO (Franco, 1990) foi desenvolvido pelo LNLS para controle do anel acelerador e vem sendo utilizado para a automatização de experimentos. Todos os movimentos da estação experimental serão realizados por motores de passo. Os drivers para esses motores foram desenvolvidos pelo grupo de instrumentação de Ultra Violeta do LNLS e podem ser controlados por módulos do sistema LOCO. A estação possuirá um software de controle capaz de automatizar suas principais funções e facilitar a realização de experimentos de SAXS, permitindo ao usuário a variação de parâmetros de sua experiência de maneira automática.

IV. Componentes Ópticos

O objetivo deste capítulo é descrever as principais características dos protótipos já concluídos da estação de SAXS. São eles: o monocromador de cristal curvo, o módulo de fendas e a mesa móvel.

IV.1) Monocromador de cristal curvo

Monocromadores de cristal curvo são utilizados em experimentos onde se necessita de um alto fluxo de fótons monocromáticos com média resolução em energia ($\approx 10^{-3}$). Existem vários experimentos onde monocromadores deste tipo são desejados, principalmente em anéis síncrotron de baixa intensidade. Este é o caso da estação de SAXS a ser instalada no LNLS.

O protótipo do monocromador construído no LNLS baseia-se no método de curvatura desenvolvido por Lemonnier et al. (Lemonnier, 1978). Nesse método uma pressão na extremidade de um cristal cortado na forma triangular faz com que sua superfície assumam uma curvatura cilíndrica. A figura 19 mostra um esquema deste método.

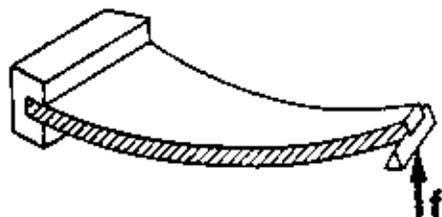


Figura 19. Método de curvatura do cristal do monocromador.

A lâmina de Si(111) está montada sobre uma balança de aço inox. Esta balança possui um suporte no qual a base do cristal é fixa e um excêntrico que ao ser

girado pressiona a extremidade do cristal. O giro deste excêntrico assim como a posição angular da balança com relação ao plano vertical são controlados por transladores lineares. Estes transladores são conectados a balança através de cabos de aço inox. A figura 20 mostra uma foto da parte interna do monocromador onde pode-se identificar o cristal montado sobre a balança.

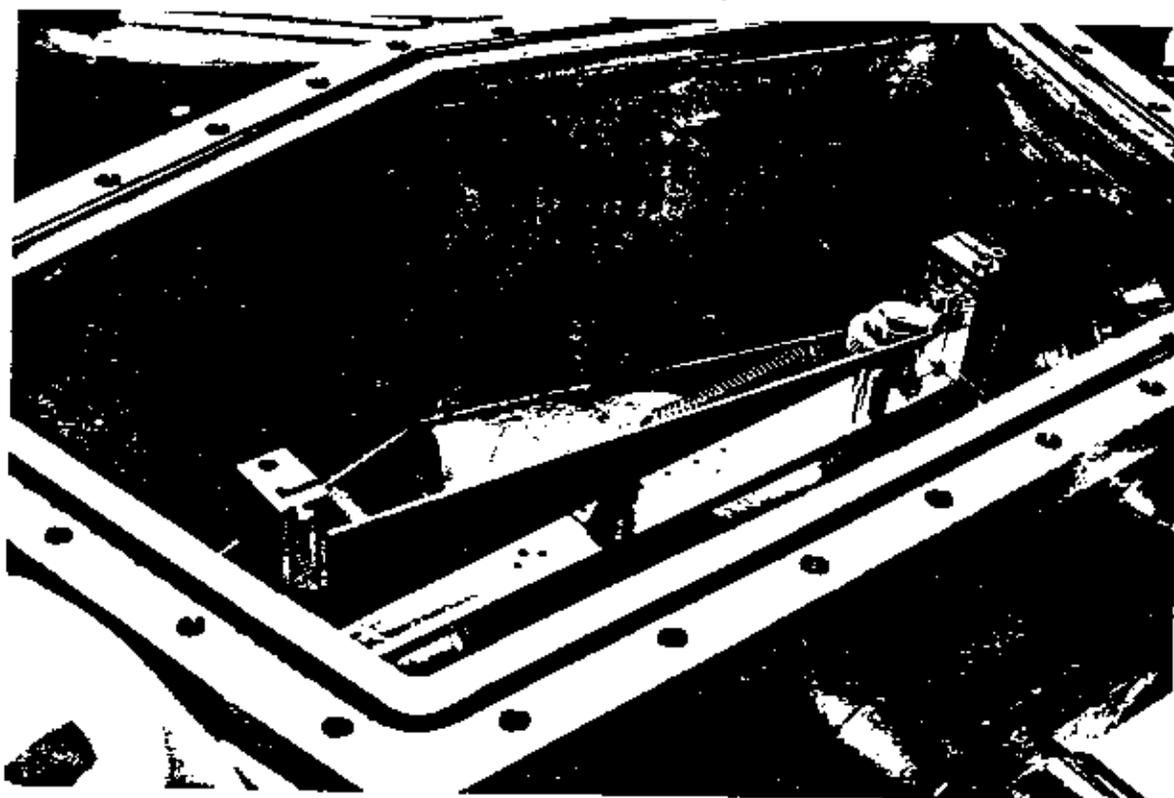


Figura 20. Detalhes da parte interna do monocromador de cristal curvo. Na foto destacam-se o cristal de silício, o excêntrico e a balança onde o cristal está montado.

Uma mola torna pré carregado o movimento do excêntrico eliminando possíveis folgas mecânicas. Nesse monocromador é possível de se obter raios de curvatura até $R_{\min} = 1,76 \text{ m}$.

Toda a estrutura de sustentação e curvatura do cristal encontra-se montada dentro de uma câmara de vácuo. Para seleção do comprimento de onda toda câmara gira de forma a posicionar o cristal no ângulo desejado em relação ao feixe incidente.

A figura 21 mostra um desenho de conjunto do monocromador de cristal curvo.

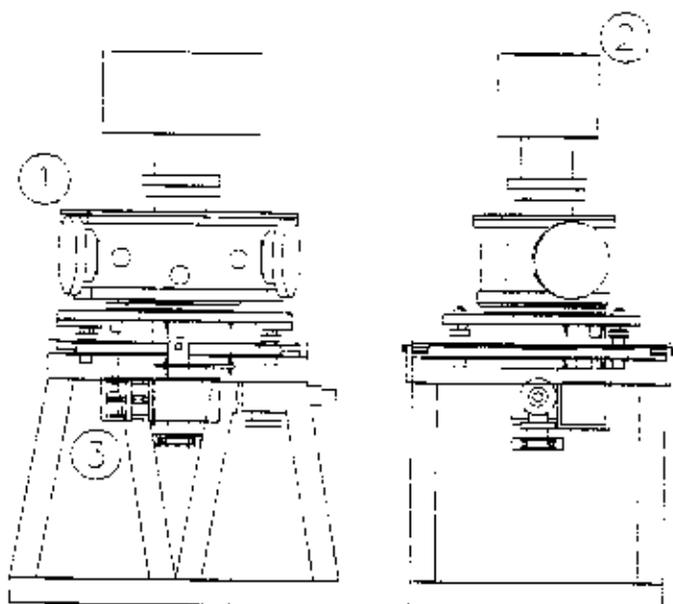


Figura 21. Monocromador de cristal curvo.

Podemos identificar no desenho a câmara de vácuo (1) e a bomba de vácuo do tipo iônica (2) que permitem que este monocromador opere sob pressões da ordem de 10^{-8} mbar. Na parte inferior do conjunto observa-se o suporte do monocromador construído em aço carbono. Neste suporte está montado um goniômetro sobre o qual a câmara do monocromador está fixada. Este goniômetro é constituído por duas polias de diâmetros diferentes interligadas através de uma cinta de aço. A polia menor é conectada ao eixo de um redutor acionado por um motor de passo de 5 fases. A resolução angular do goniômetro é de $2,63 \mu\text{rad}$.

Montado na parte inferior da câmara de vácuo existe um rolamento alinhado com o eixo de rotação do monocromador. Qualquer sistema que deva se mover solidário ou em relação a esse eixo poderá utilizar esse rolamento como guia. É o caso da estação de SAXS na qual a mesa móvel deve girar em relação ao eixo do monocromador.

A câmara do monocromador foi projetada originalmente para alojar cristais de Si (111) com corte simétrico ou com assimetria de 9° , garantindo sua atuação numa faixa de comprimentos de onda entre 1 e 2 Å. Operando dentro da condição de Guinier de focalização a resolução em energia do monocromador é limitada pela largura intrínseca de reflexão do cristal e pelo tamanho da fonte de radiação como mostrado na expressão (3.26). Fora desta condição teremos uma terceira contribuição advinda da variação do ângulo de incidência da radiação sobre a superfície do cristal. Para o caso de um cristal de Si(111) com assimetria 9° montado a

uma distância da fonte $p = 20$ m e focalizando em uma distância $q = 3.8$ m do monocromador, a figura 22 mostra a variação da resolução em energia com relação ao comprimento de onda selecionado.

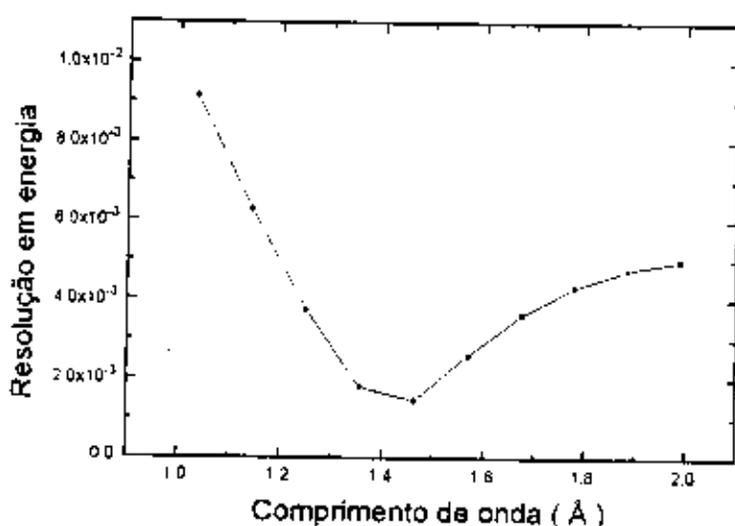


Figura 22. Gráfico da variação da resolução em energia do monocromador de cristal curva assimétrica como função do comprimento de onda.

Além da estação de SAXS este tipo de monocromador deverá servir a qualquer outra estação para a qual suas características de baixa resolução em energia e alto fluxo de fótons sejam necessárias. É o caso da estação de cristalografia de proteínas que será construída no LNLS pelo grupo de Cristalografia de Proteínas da USP de São Carlos.

IV.2) Módulos de fendas

O módulo de fendas desenvolvido para a estação de SAXS é mostrado na figura 23. É formado por um conjunto de 4 fendas de tântalo controladas independentemente por motores de passo externos à câmara de vácuo do módulo. O movimento dos motores é transmitido por meio de passantes de vácuo. O sistema foi desenvolvido para atuar a pressões de 10^{-8} mbar, tendo sido testados a 10^{-7} mbar sem que nenhum processo de "baking" tenha sido realizado.

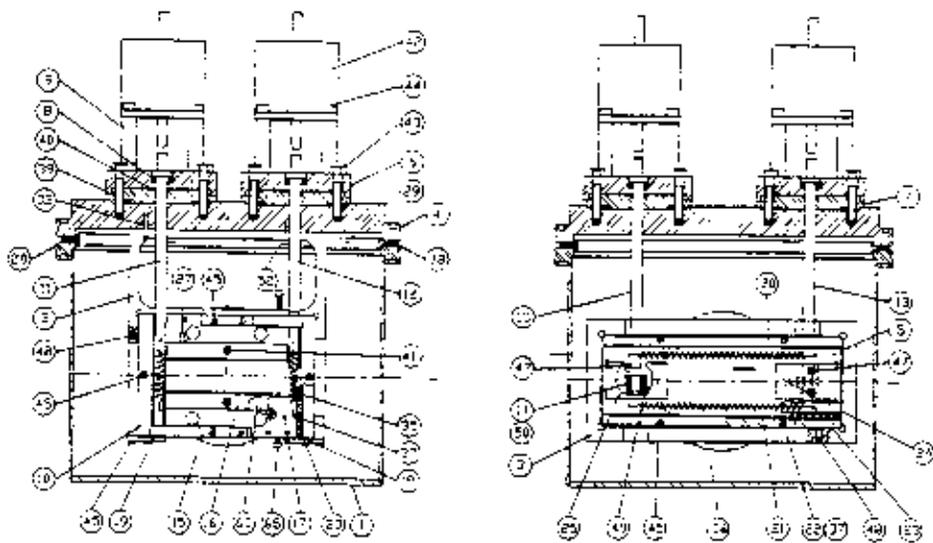


Figura 23. Desenho de conjunto destacando os detalhes das fendas compatíveis com alto vácuo. À esquerda observam-se as fendas verticais e à direita as horizontais.

Na direção vertical as fendas possuem uma abertura total de 22 mm e sua movimentação possui uma resolução de 1,25 μm . Cada uma das lâminas tem 80 mm de comprimento e ao se deslocarem mantêm o paralelismo entre si de maneira bastante precisa. Já na direção horizontal temos uma abertura total de 78 mm com uma resolução no movimento de 125,6 μm .

Todos os movimentos são pré carregados por molas (36 e 35 no desenho) que eliminam folgas mecânicas. Fins de curso montados nas lâminas impedem que estas se toquem ou excedam suas aberturas máximas durante a movimentação.

IV.3) Mesa móvel para a estação de SAXS

O terceiro protótipo já concluído da estação de SAXS é a mesa móvel mostrada na figura 19. Esta mesa é formada por três partes distintas: as mesas de apoio, o sistema de colchão de ar e o banco óptico. Como explicado anteriormente quando se varia o comprimento de onda a parte da estação localizada após o monocromador deve se mover de forma que o feixe monocromático passe pelo centro do caminho de vácuo. Para facilitar esse deslocamento foi desenvolvido um sistema de colchão de ar. Esse sistema é montado entre as mesas de apoio e o banco óptico e funciona da seguinte forma: cada um dos suportes do banco óptico possui uma câmara com entrada para ar comprimido e vários orifícios de saída na face que esta voltada para a mesa de apoio. Ao se acionar o dispositivo o ar que escapa pelos orifícios forma uma camada que eleva o banco óptico levemente. Dessa forma o banco fica "flutuando" sobre as mesas de apoio e o mínimo esforço é capaz de movê-

lo. Para que o banco gire corretamente em torno do eixo do monocromador ambos são conectados por uma viga de alumínio. A figura 18 mostra uma vista superior da estação experimental na qual identifica-se o monocromador e o banco óptico interligados por essa viga. A outra extremidade do banco óptico está apoiada na mesa de apoio maior. Essa mesa possui uma correia sincronizadora ligada a um motor de passos de 5 fases. A correia está presa ao banco óptico de forma que o motor tracione o banco fazendo-o girar em torno de eixo do monocromador. O movimento é bastante suave e repetitivo apesar do peso elevado do conjunto banco óptico+caminho de vácuo (cerca de 350 kg). A resolução angular deste movimento é da ordem de 0,2 mrad.

V. Simulações Numéricas da Estação Experimental (Ray-tracing).

Fontes de radiação síncrotron geram feixes de fótons que possuem uma alta densidade de potência. Para o caso da estação de SAXS somente uma fração da potência incidente será utilizada na realização do experimento. O restante da potência deverá ser distribuída entre todos os elementos ópticos. Para avaliar a forma de distribuição dessa potência foi utilizado o programa de "ray-tracing" SHADOW. Nesse programa as interações entre radiação e elementos ópticos são calculadas por métodos numéricos. Dessa forma não só problemas relativos a distribuição de potência mas também características geométricas do feixe podem ser avaliadas. As condições nas quais a simulação foi realizada representam a linha de SAXS tendo como fonte o wiggler de 11 polos e 1.95 Tesla, uma janela de berílio de 150 μm , o espelho de float glass coberto com ouro montado com um ângulo de 6 mrad em relação ao feixe incidente e o monocromador de cristal curvo utilizando uma lâmina de Si(111) com assimetria 9° sintonizado em 8000 eV. O posicionamento de cada elemento óptico pode ser observado na figura 11. Nesse caso temos $d_1 = 11.9\text{m}$, $d_2 = 8.1\text{m}$, $d_3 = 3.8\text{m}$. O program SHADOW gera relatórios que descrevem de maneira completa os sistemas por ele processados. O apêndice A reproduz esses relatórios de maneira completa.

Nesse sistema a divergência total aceita pelo cristal é de 4.57 mrad no plano horizontal. A simulação foi feita para o caso em que todas as fendas estão abertas e os elementos ópticos recebem todo o "leque" de radiação disponível à estação. Pela expressão (3.7) podemos obter a potência total do feixe que chega a linha de luz como sendo $P_T = 60.07$ Watts. Do programa SHADOW obtiveram-se os arquivos numéricos correspondentes a distribuição espectral dessa potência, assim como as distribuições espectrais de potência após a janela de Berílio e após o espelho. Os gráficos da figura 24 feitos a partir dos arquivos numéricos mostram essas distribuições.

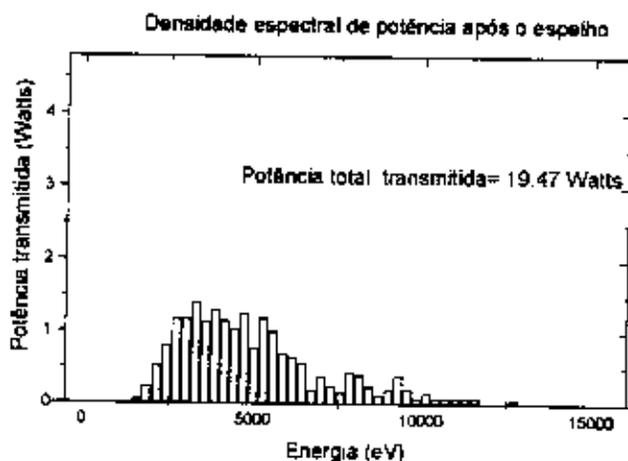
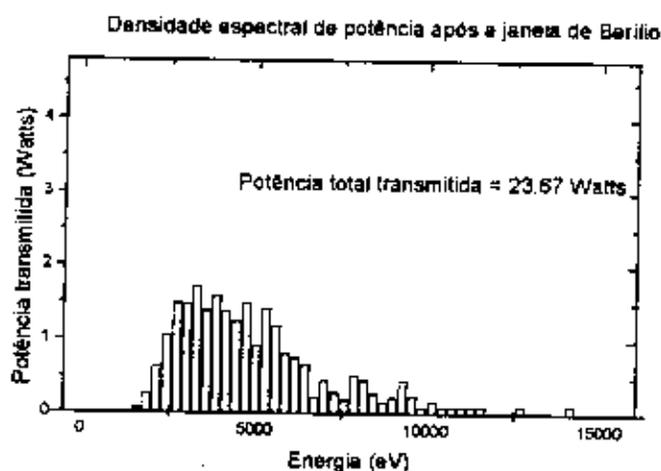
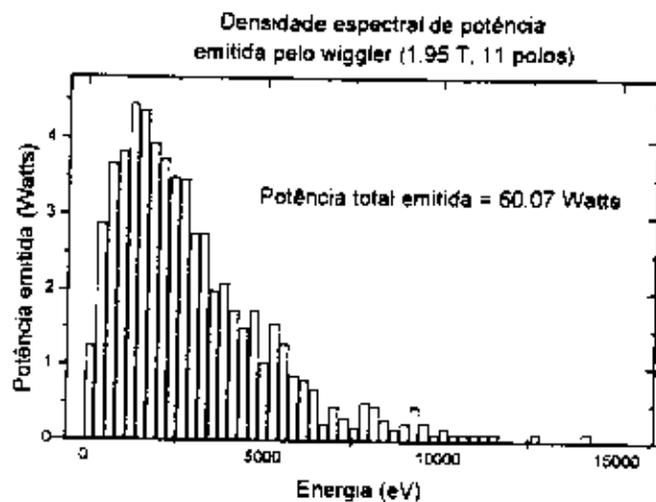


Figura 24. Densidades espectrais de potência calculadas pelo programa SHADOW para o Wiggler, após a janela de Berílio (150 μm) e após o espelho para raios X.

Da mesma forma determinou-se as distribuições espectrais da potência absorvida pela janela de berílio e pelo espelho, mostradas na figura 25.

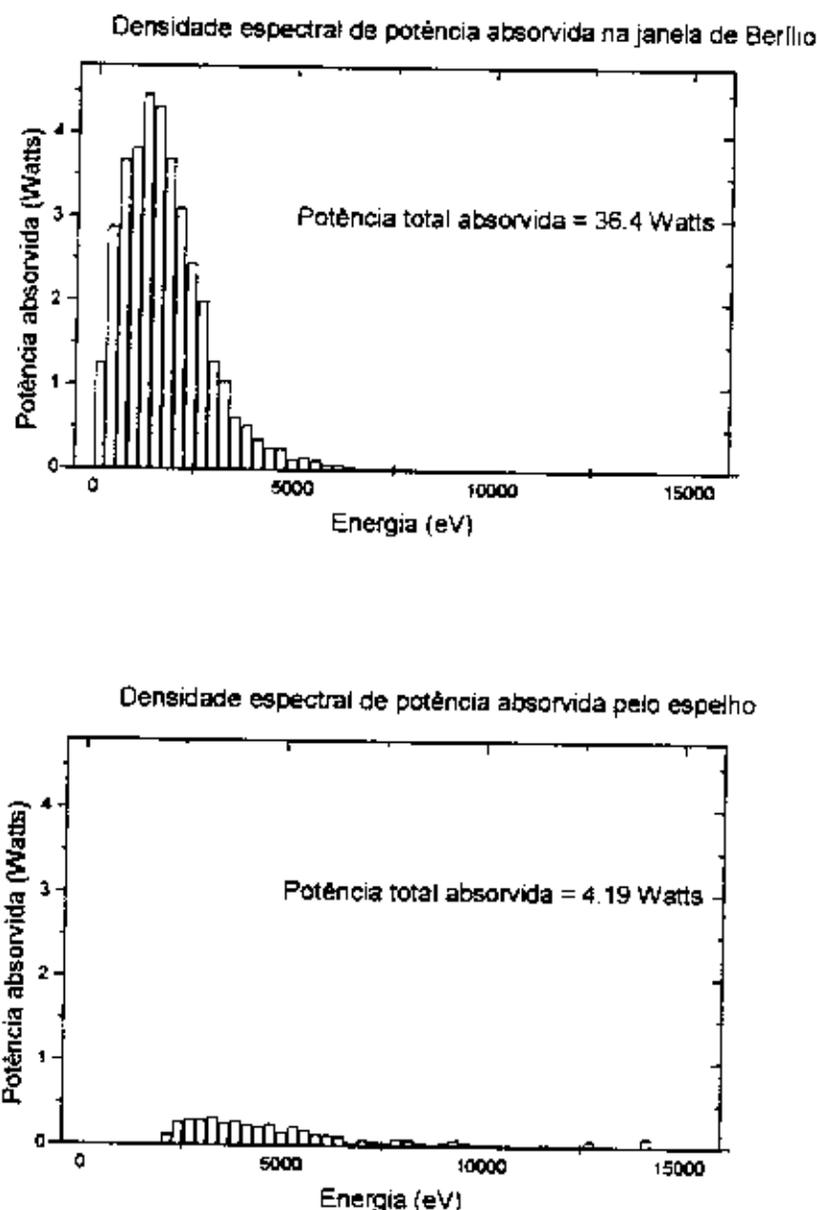


Figura 25. Densidades espectrais de potência absorvida pela janela de Berílio e pelo espelho para raios X calculadas pelo programa SHADOW.

Nota-se claramente que grande parte da potência gerada pelo Wiggler é absorvido pela janela de Berílio. Sendo a janela muito fina (150 μm) e o feixe concentrado em uma área de 28 x 2.5 mm^2 esperam-se altas densidades de potência

nesse elemento óptico. O espelho absorve muito pouco da potência incidente sobre ele além de possuir uma área iluminada bastante grande. Com isso não teremos densidades de potência elevadas em sua extensão. Já o cristal do monocromador recebe um feixe policromático com uma potência total de 19,47 Watts dos quais uma pequena fração será difratada e o restante será absorvido pelo cristal. As figuras 26 e 27 mostram as densidade de potência sobre as superfícies da janela de Berílio e do cristal respectivamente.

Nota-se que a janela de Berílio possui pontos onde a densidade de potência ultrapassa 120 W/cm^2 . Isso evidencia a necessidade de um sistema de refrigeração para esse elemento que auxilie a dissipação da potência absorvida. Já a potência distribuída pelo superfície do cristal do monocromador não exigirá que este seja refrigerado. Porém seria interessante avaliar-se a deformação causada na superfície do cristal por essa distribuição de potência e seus efeitos na qualidade da focalização. O "grid" de potência gerado pelo programa "SHADOW" pode ser utilizado como entrada para um programa de cálculo de elementos finitos no qual as deformações poderiam ser avaliadas de maneira correta. Após esse processo a superfície calculada poderia servir como dado de entrada novamente ao programa de traçado de raios que simularia uma vez mais o processo de focalização tomando em conta as deformações térmicas.

A figura 28 mostra o foco obtido após a interação da radiação com os elementos ópticos da estação de SAXS. Seu tamanho de $2,6 \times 0,65 \text{ mm}^2$ permite que, para amostras colocadas a 1900 mm do plano de detecção, vetores de espalhamento $|q| = 0,0027 \text{ \AA}^{-1}$ possam ser observados na direção vertical (para $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$).

(*) Nesses pontos a temperatura da superfície será de aproximadamente $2100 \text{ }^\circ\text{K}$, ultrapassando a temperatura de fusão do Berílio ($1573 \text{ }^\circ\text{K}$)

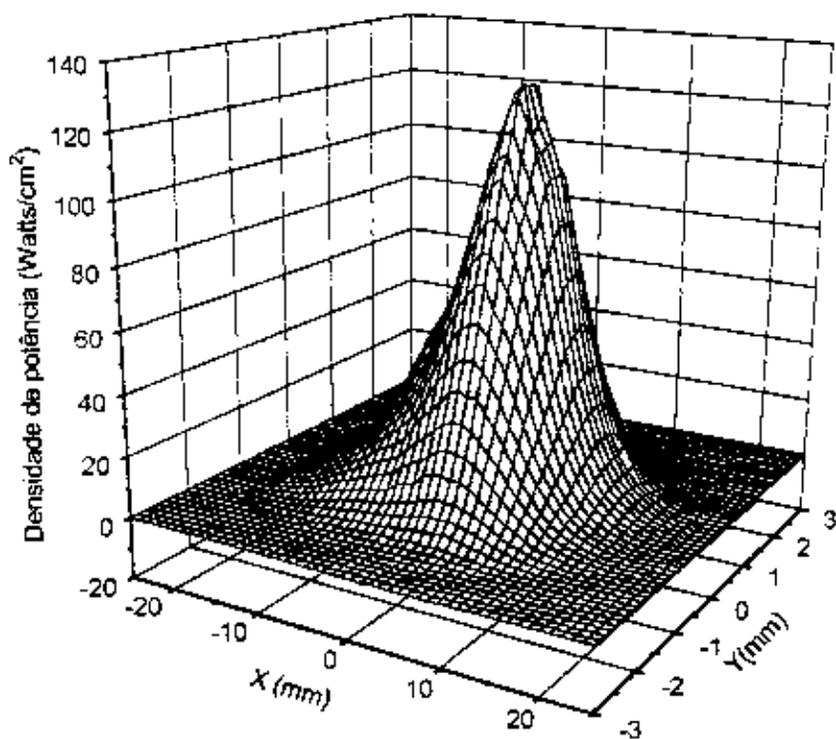


Figura 26. Distribuição de potência absorvida na janela de berílio.

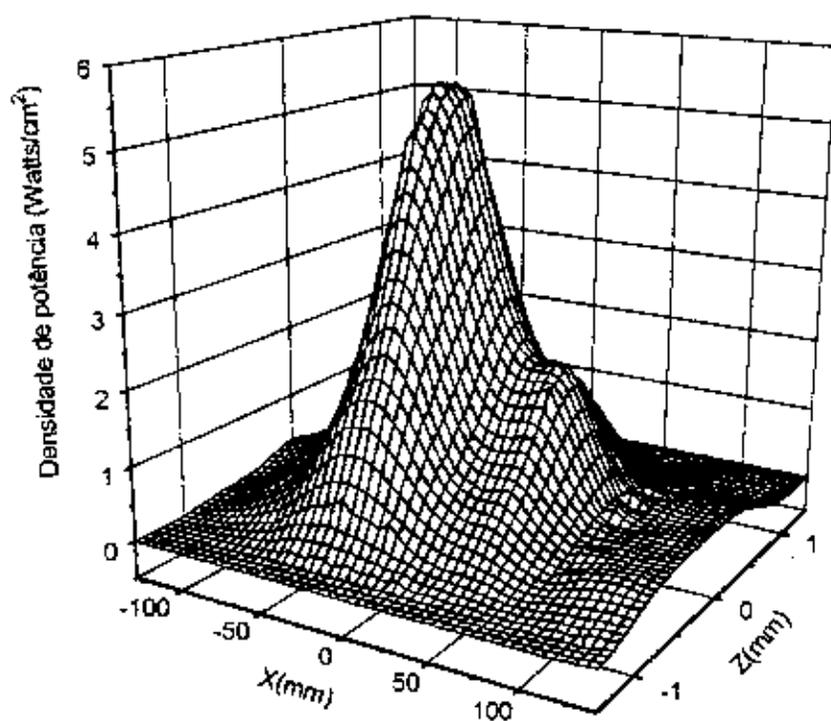


Figura 27. Distribuição de potência sobre a superfície do cristal

As simulações revelam que na posição da amostra o feixe possui dimensões de $7.6 \times 1.1 \text{ mm}^2$. A figura 29 mostra a distribuição de potência dentro dessa área.

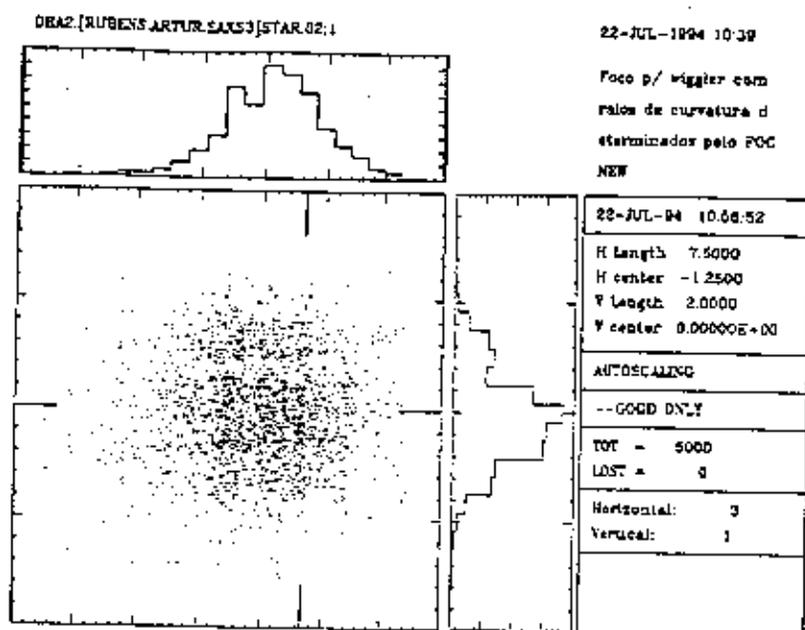


figura 28. Foco calculado pelo SHADOW. O desenho mostra o diagrama de pontos fornecido como saída pelo programa de "ray-tracing". Densidades maiores de pontos representam intensidades maiores.

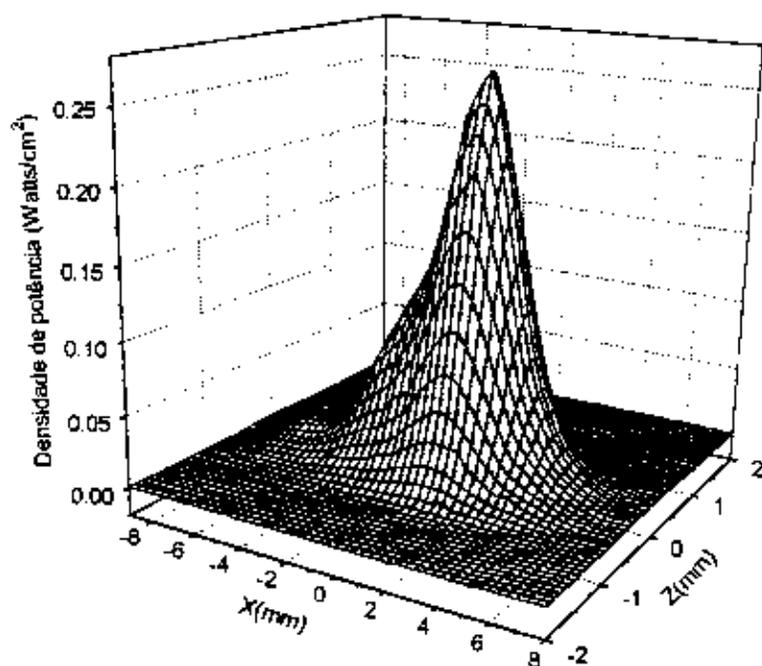


figura 29. Distribuição de potência do feixe monocromático na posição da amostra.