

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Física Gleb Wataghin

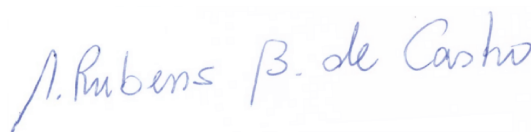
Dissertação de Mestrado

**Projeto ótico de linha de luz de raios-X
duros para cristalografia de proteínas**

Walan Cesar Grizolli

Orientador: Prof. Dr. Antônio Rubens Brito
de Castro

Este exemplar corresponde à redação final
da Dissertação de Mestrado defendida pelo
aluno Walan Cesar Grizolli e aprovada pela
Comissão Julgadora.



Campinas, 14 de Julho de 2010

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

G889p	Grizolli, Walan Cesar Projeto ótico de linha de luz de raios-X duros para cristalografia de proteínas / Walan Cesar Grizolli. Campinas, SP : [s.n.], 2010. Orientador: Antônio Rubens Britto de Castro. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”.
1 2 3 4 5 6	1. Linhas de luz para raios-X duros. 2. Radiação sincrotrônica. 3. Simulação de traçamento de raios. I. Castro, Antonio Rubens Britto de. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física “Gleb Wataghin”. III. Título. (vsv/ifgw)

Título em Inglês:	Optical design of a hard X-ray beamline to protein crystallography
Palavras-chave em Inglês:	<i>Hard X-ray Beamline, Synchrotron Radiation, Raytracing Simulation.</i>
Área de concentração:	Física
Titulação:	Mestre em Física
Banca Examinadora:	Ângelo Malachias de Souza e Carlos Manuel Giles Antúnez de Mayolo
Data da defesa:	14/07/2010



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **WALLAN CESAR GRIZOLLI – RA 017582** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 14 / 07 / 2010.

COMISSÃO JULGADORA:

Profa. Dra. Iris Concepción Linares de Torriani
Presidenta da Banca
DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Angelo Malachias de Souza – LNLS

Prof. Dr. Carlos Manuel Giles Antúnez de Mayolo
DFMC/IFGW/UNICAMP

Resumo

Diversas áreas da ciência moderna têm sido beneficiadas pelo uso da radiação síncrotron. As técnicas disponíveis em laboratórios deste tipo abrangem pesquisas em ciências básicas como Física, Química e Biologia bem como em áreas como engenharia de materiais e farmacologia. Em particular, o uso do espectro de raios-x duros (8 – 20keV) das fontes síncrotron atuais é crucial para técnicas estruturais como difração e cristalografia. Estas técnicas estão disponíveis para a comunidade científica brasileira no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), cujas linhas de luz estão abertas a usuários externos desde 1997. As instalações do LNLS vem sendo constantemente aperfeiçoadas, permitindo o estudo de novos casos científicos como consequência destas melhorias. Neste trabalho estudamos as propriedades da fonte de radiação síncrotron do LNLS e realizamos um projeto óptico para uma linha de luz direcionada a cristalografia de proteínas. Com uso de simulações computacionais propomos opções para melhoria do fluxo de fótons nas linhas de cristalografia de proteínas já existentes. Nossos estudos apontam para a viabilidade de construção de uma linha lateral à linha de luz MX2, utilizando a mesma fonte Wiggler já instalada, com fluxo proporcional à linha central.

Palavras-chave: *Linhas de Luz pra Raios-X Duros, Radiação Síncrotron, Simulação de Traçamento de Raios.*

Abstract

Distinct research fields in modern science have taken advantage of synchrotron radiation. The techniques that are available in such laboratories have a very broad scope, ranging from basic sciences such as Physics, Chemistry and Biology, to applied fields as engineering and pharmacology. In particular, the use of hard x-ray spectrum (8 – 20keV) from modern synchrotron sources is crucial for structural techniques such as diffraction and crystallography. These techniques have been available to the Brazilian scientific community since 1997, when the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS) facilities were opened to external users. The LNLS beamlines have constantly evolved , allowing the users to perform novel experiments as a consequence of instrumental improvements. In this work we study the properties of the LNLS sources and propose solutions for the optics of a beamline dedicated to protein crystallography. By using computer simulations we propose options to enhance the photon flux in the pre-existing protein crystallography beamlines. Our results point out to the feasibility of a lateral beamline using the MX2 wiggler source, with similar flux to the central beamline.

Keywords: *Hard X-ray Beamline, Synchrotron Radiation, Raytracing Simulation.*

Agradecimentos

Em toda a minha vida profissional tenho tido a oportunidade de trabalhar com excelentes profissionais, vários dos quais tenho como amigos. Todos tiveram influência sobre minha carreira e contribuíram com meu desenvolvimento profissional, de forma que todos auxiliaram de forma indireta na realização deste trabalho.

Citar algum nome certamente seria uma injustiça com os demais, e apesar de minha imensa gratidão para com eles irei restringir meus agradecimentos àqueles diretamente envolvidos com este trabalho.

É incomensurável a gratidão que tenho ao Prof. Dr. Antônio Rubens Brito de Castro e ao Dr. Ângelo Malachias por terem me ajudado com a realização deste trabalho. Fico em dívida com ambos pelo auxílio e orientação nesta realização.

Agradeço ao Professor Dr. José Antônio Brum, que foi o idealizador e tornou possível a realização deste projeto, e à Professora Íris Concepcion Linares de Torriani, que gentilmente aceitou presidir a banca de defesa.

Agradeço ao Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) e ao Laboratório Nacional de Biociências (LNBio), que representados por diferentes pessoas possibilitaram a minha participação neste projeto.

*Aos meus pais,
À minha família,
Aos meus amigos.*

“The aim of science is not to open
the door to infinite wisdom, but to
set a limit to infinite error.”

Bertolt Brecht

Peça, The Life of Galileo

Sumário

Introdução	1
1 Produção de Radiação Síncrotron	7
1.1 Processo de Emissão de Radiação Síncrotron	7
1.2 Dipolos Defletores	9
1.2.1 Raio de Curvatura e Campo Magnético	9
1.2.2 Distribuição Espacial de Potência	10
1.2.3 Distribuição Espacial e Espectral	14
1.3 Dispositivos de Inserção	16
1.3.1 Movimento de cargas em campo magnético senoidal . . .	18
1.3.2 Distribuição Espacial de Potência	21
1.3.3 Distribuição Espacial e Espectral	22
2 Interação de Raios-X com a matéria	25
2.1 Absorção	28
2.2 Espalhamento	33
2.2.1 Espalhamento Elástico	34
2.2.2 Espalhamento Inelástico	40
2.2.3 Distribuição de cargas	43
2.3 Difração	45
2.3.1 Teoria Cinemática	46
2.3.2 Teoria Dinâmica	54
2.4 Reflexão e Refração	61
3 Dispositivos Ópticos para Raios-X	71
3.1 Espelhos de Raios-X	71
3.1.1 Dependência com o ângulo de incidência	72
3.1.2 Dependência com a energia da radiação	73
3.1.3 Propriedades Ópticas	73
3.2 Monocromadores	82
3.2.1 Monocromadores de cristal espesso	85
3.2.2 Resolução de Energia	86
3.2.3 Focalização longitudinal	88
3.2.4 Focalização Sagital	91

3.3	Espelhos Multicamadas	91
4	Projeto Óptico da linha de luz	97
4.1	Simulações de traçamento de raios	101
4.2	Linha Lateral	102
4.2.1	Tamanho Aparente da Fonte	102
4.2.2	Determinação da óptica da linha lateral	108
4.3	Substituição do Cristal do Monocromador da MX1 por um Es- pelho Multicamadas	116
4.4	Comparação de desempenho entre os projetos	116
4.5	Discussão dos resultados	117
5	Conclusão	125
	Referências Bibliográficas	127
	Apêndices	131
A	Estimativa do limite de detecção da difração	131
B	Códigos para o <i>Wolfram Mathematica</i>[®]	143

Introdução

Radiação Síncrotron

A radiação síncrotron é a radiação eletromagnética gerada quando cargas elétricas com velocidades relativísticas são aceleradas. Esse efeito é mais intenso quanto mais alta a energia das cargas e maior a aceleração sofrida por elas.

O advento de aceleradores síncrotrons [Wiedemann, 2003] tornaram possível gerar e armazenar cargas elétricas de altas energias possibilitando utilizar a radiação síncrotron de forma controlada. As principais características da radiação síncrotron gerada por um acelerador síncrotron são:

- *alta intensidade*, principalmente raios-X onde a intensidade é algumas ordens de grandeza maior que as fontes convencionais;
- *alto brilho*, *i. e.* alta densidade de fótons (fótons por unidade de área);
- *baixa emitância*, *i. e.* produto do tamanho da fonte pela sua divergência é pequeno (fonte pequena e com baixa divergência);
- *amplo intervalo de energia*, desde o infravermelho até raios-X duros;

As características específicas da radiação emitida em um acelerador síncrotron possibilitaram que fossem utilizadas em uma grande variedade de experimentos de interação radiação-matéria, sendo as principais as técnicas de espectroscopia atômica e molecular, difração e absorção de raios-X, cristalografia, litografia e microscopia.

Instrumentação para Radiação Síncrotron

Para produzir e condicionar radiação síncrotron é necessário instrumentação específica, cujo os dois principais componentes são o *anel de armazenamento* e as *linhas de luz* (Figura 1). Cada um desses componentes engloba uma série de elementos que envolvem a aplicação de vários fenômenos físicos distintos.

O anel de armazenamento mantém as partículas carregadas em uma órbita fechada com velocidades relativísticas. Essa órbita tem o formato de um polígono com os vértices arredondados. Nos vértices estão localizados dipolos magnéticos

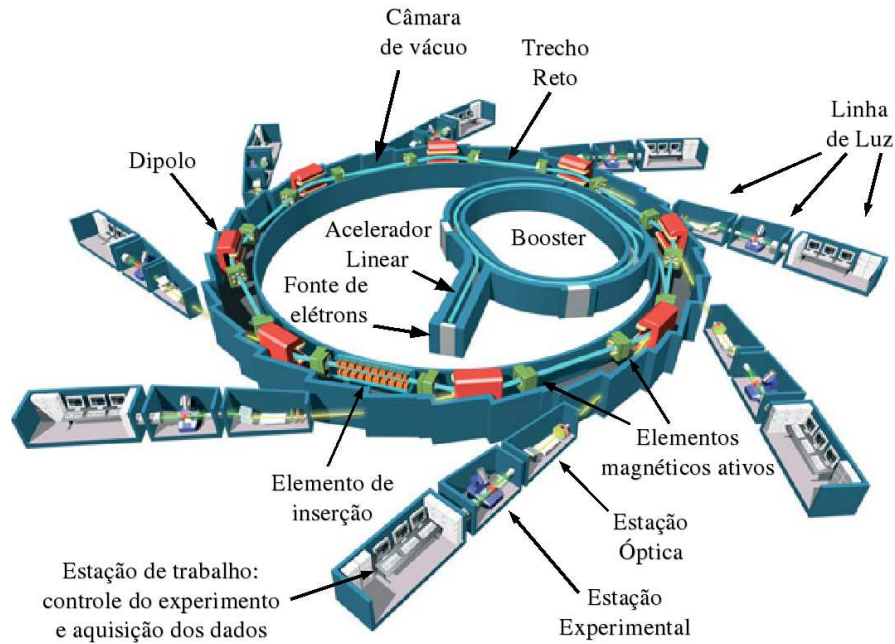


Figura 1: Diagrama de um anel de armazenamento e das linhas de luz. Cortesia Soleil.

(eletro-ímãs) que, pela ação da força de Lorentz, causam uma aceleração centrípeta à carga alterando sua órbita e fazendo com que ela emita radiação síncrotron.

Em um anel são mantidos várias cargas elétricas simultaneamente para aumentar o número de fontes. Essas cargas estão aglomeradas em “pacotes” com aproximadamente a mesma quantidade de cargas e as mesmas dimensões.

De forma genérica, o conjunto de um acelerador síncrotron é composto pelos seguintes itens[Margaritondo, 1988]:

- *sistema de injeção linear*: produz e acelera os elétrons até a energia de operação do anel de armazenamento. A produção é feita aquecendo um filamento que, por efeito termoiônico, emite elétrons. Estes são acelerados por campos eletromagnéticos e levados até o anel de armazenamento.
- *câmaras de vácuo*: se um elétron se chocar com alguma molécula durante sua órbita ele é absorvido. Logo, para manter os elétrons circulando pelo maior tempo possível, é necessário que ao longo da órbita o elétron tenha um livre caminho médio muito maior do que qualquer molécula. Portanto é necessário que sua órbita seja por um caminho livre de qualquer molécula, ou seja, no vácuo. Pressões típicas de operação dos anéis ficam em torno de 10^{-10} Torr.

- *anel de armazenamento de elétrons*: câmaras de vácuo em formato quase-circular, por onde circulam os elétrons que irão produzir a radiação síncrotron. São acoplados ao anel de armazenamento diversos itens (descritos abaixo) que mantêm os elétrons em sua trajetória e repõem a energia perdida em forma de radiação.
- *acelerador circular*: dependendo da energia dos elétrons geradas pelo sistema de injeção linear e da energia de operação do anel de armazenamento, há necessidade de um estágio intermediário de aceleração. Isto é feito em geral por um acelerador circular, denominado *Booster*.
- *cavidade de radiofrequência*: cavidade onde se gera uma onda eletromagnética ressonante da ordem de 500MHz que atua sobre os elétrons repondo a energia perdida na forma de radiação. A frequência ressonante deve ser tal que quando a carga passar pela cavidade o campo esteja orientado na direção que acelera o pacote de cargas. Isso gera a limitação de que a distância entre os pacotes têm de ser um múltiplo inteiro do comprimento de onda da onda ressonante [Wiedemann, 2003].
- *dipolos defletores*: dipolos magnéticos que forçam os elétrons à executarem parte da órbita de forma circular, fechando a órbita e emitindo radiação.
- *elementos magnéticos ativos*: são utilizados elementos como quadrupolos e sextupolos magnéticos, posicionados nos trechos retos entre os dipolos, a fim de atuar sobre a órbita dos elétrons. Os quadrupolos atuam sobre o feixe de partículas de forma análoga à lentes convergentes, focalizando-o. Os sextupolos corrigem a aberração cromática que, analogamente às lentes, é o erro na focalização causada pela diferença de energia entre as cargas. Por esses efeitos análogos às lentes, a dinâmica das cargas denomina-se frequentemente de óptica das cargas.
- *elementos de inserção*: sequência de dipolos periódicos que atuam sobre a órbita nos trechos retos forçando os elétrons à oscilarem em uma órbita aproximadamente senoidal. O campo total sentido pela carga após passar por um desses elementos deve ser zero de forma que ao deixar o elemento a carga retome a sua órbita original.
- *sistemas de diagnóstico do feixe de elétrons*: instrumentação para medir e monitorar a órbita, de forma à fornecer informações para a atuação dos elementos magnéticos ativos na correção dinâmica da trajetória dos elétrons.

A radiação gerada pelos dipolos e pelos elementos de inserção, no estágio de produção, não é adequada à maioria dos experimentos com radiação síncrotron devido seu amplo espectro de energia e à sua divergência. Por isso é necessário processá-la apropriadamente para adequá-la à cada tipo de experimento selecionando a energia (ou faixa de energia) desejada, colimando ou focalizando o feixe.

Dessa forma, associado ao anel de armazenamento utiliza-se estações com ótica e instrumentação adequada onde o feixe é condicionado e interage com o experimento. À essas estações dá-se o nome de linhas de luz. Dada a grande variedade de técnicas possíveis, um anel de armazenamento tem associado vários tipos de linhas de luz, que em geral são compostas por:

- *monocromador*: seleciona a energia desejada da radiação branca¹.
- *câmaras de vácuo*: é necessário operar em vácuo para evitar as perdas da radiação por absorção e evitar a contaminação e deterioramento dos elementos ópticos.
- *espelhos*: atuam sobre o feixe de radiação alterando as características do feixe como divergência, tamanho, foco e faixa de energia, geralmente funcionando como um filtro *passa-baixa* em energia.
- *sistemas de diagnósticos do feixe de fótons*: detectores de radiação dispostos ao longo da linha com o objetivo de caracterizar o feixe e alinhar a ótica, como monitores de intensidade, de posição e de perfil do feixe.
- *estação experimental*: instrumentação que expõe as amostras à serem estudadas à radiação proveniente dos elementos ópticos. Nesta estação, equipamentos específicos controlam as variáveis da amostra (temperatura, pressão, posição, etc) e detectam radiação, elétrons e íons proveniente da interação amostra-feixe.

Os itens que compõem uma linha de luz serão discutidos no decorrer do trabalho, que tem como objetivo desenvolver um projeto óptico de uma linha de luz de raios-X duros para o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. No presente caso será estudado o caso da linhas de luz de cristalografia de proteínas[Als-Nielsen and McMorro, 2001].

O objetivo dessa dissertação é de inicialmente estudar os fenômenos físicos relevantes para uma linha de luz de raios-X duros, de forma a ser capaz de projetar a sua ótica.

A proposta é de inicialmente estudar os fenômenos físicos relevantes para uma linha de luz raios-X duros: propriedades de emissão da radiação em aceleradores síncrotron, interações entre raios-X e a matéria, e propriedades de elementos ópticos para raios-X duros.

De posse destes conceitos e utilizando métodos de simulação computacional, será avaliado e otimizado algumas configurações ópticas de forma à obter um projeto de desempenho superior aos das linhas de luz disponíveis atualmente para a técnica de cristalografia de proteínas.

O trabalho se inicia pela descrição do fenômeno de produção de radiação síncrotron e das fontes utilizadas: os dipolos e os elementos de inserção. No Capítulo 2 serão tratados os fenômenos de interação da radiação com a matéria que são relevantes no funcionamento de uma linha de luz: absorção fotoelétrica,

¹Na verdade uma faixa de energia, dada pela banda passante do monocromador.

espalhamento elástico e inelástico, difração de raios-X pela abordagem cinemática e dinâmica, reflexão e refração.

O Capítulo 3 trata das propriedades dos principais elementos ópticos de uma linha de luz de raios-X: espelhos de reflexão total, espelhos multicamadas e monocromadores de cristais.

Com base nos conceitos abordados nos Capítulos 1, 2 e 3, no Capítulo 4 descreve-se um projeto óptico para uma linha de luz, sendo as conclusões e perspectivas apresentadas no Capítulo 5.

Capítulo 1

Produção de Radiação Síncrotron

Neste capítulo será tratado as propriedades das fontes de radiação em um anel de armazenamento. Para tanto, inicia-se pelo estudo do processo de emissão por cargas aceleradas e à seguir aplica-se as propriedades do processo à dipolos e elementos de inserção.

1.1 Processo de Emissão de Radiação Síncrotron

A radiação síncrotron é a radiação eletromagnética emitida quando uma carga elétrica com velocidade relativística sofre uma aceleração centrípeta. Isso é feito fazendo com que essas cargas atravessem campos magnéticos que, pela ação da força de Lorentz, exercem a força centrípeta em questão.

O fenômeno de emissão pode ser descrito pela eletrodinâmica clássica e pela mecânica relativística [Jackson, 1997][Wiedemann, 2003]. Calcular a intensidade de radiação emitida exige primeiramente calcular os campos eletromagnéticos gerados pelas cargas em movimentos. Por se tratar de um movimento relativístico, deve-se considerar os campos retardados na descrição desse fenômeno.

Os campos retardados emitidos por uma carga q em movimento com velocidade $\vec{\beta} = \frac{\vec{v}}{c}$ e com uma trajetória conhecida são conhecidos como *Campos de Liénard-Wiechert*, resumidas nas equações

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(1 - \vec{\beta} \cdot \hat{\mu})^3} \left\{ \frac{1}{R^2\gamma^2} (\hat{\mu} - \vec{\beta}) + \frac{\hat{\mu}}{cR} \times [(\hat{\mu} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}] \right\} \bigg|_{t_r}, \quad (1.1)$$

$$\vec{B} = \frac{-q}{4\pi\epsilon_o} \frac{1}{(1 - \vec{\beta} \cdot \hat{\mu})^3} \left\{ \frac{(\hat{\mu} \times \dot{\vec{\beta}})}{Rc} (1 - \vec{\beta} \cdot \hat{\mu}) - (\hat{\mu} \times \vec{\beta}) \left(\frac{1}{R^2\gamma^2} + \frac{\hat{\mu} \cdot \dot{\vec{\beta}}}{Rc} \right) \right\} \Big|_{t_r}, \quad (1.2)$$

que fornecem os campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$ detectado por um observador à uma distância $R(t_r)$ de uma carga q no momento t_r em que a carga emitiu radiação. γ é o fator de Lorentz dado por $(1 - \beta^2)^{-1/2}$, c a velocidade da luz e ϵ_o a permissividade elétrica do vácuo. O versor $\hat{\mu}$ é chamado versor de observação e é definido por

$$\hat{\mu} = \frac{\vec{R}(t_r)}{R(t_r)}. \quad (1.3)$$

O cuidado em diferenciar $R(t)$, a posição da carga no momento t em que a radiação é observada da posição, de $R(t_r)$, a posição da carga no momento t_r em que ela irradia, se faz necessário pois para cargas com velocidades relativísticas a posição no momento de emissão é muito diferente da posição no momento de observação.

Observa-se nas equações 1.1 e 1.2 duas componentes: uma que depende do inverso da distância (dependência R^{-1}) e outra que depende do inverso do quadrado da distância (dependência R^{-2}). Os campos ditos radiantes são aqueles cujo valor tende à zero com dependência R^{-1} quando a distância entre o observador e a fonte tende ao infinito ($R \rightarrow \infty$). Resumindo, o cálculo dos campos de uma carga em movimento revelam a presença de campos radiantes devido à presença da componente R^{-1} .

Concentrando agora nos termos radiantes dos campos de Liénard-Wiechert, observa-se uma dependência direta com a aceleração da fonte. Como consequência, só haverá radiação se a fonte for acelerada.

Dividindo a aceleração de forma apropriada, obtém-se algumas informações interessantes quanto à radiação emitida. Separa-se a aceleração em duas componentes: uma na direção do movimento $\dot{\vec{\beta}}_{||}$ (*longitudinal*) e outra perpendicular ao movimento $\dot{\vec{\beta}}_{\perp}$ (*radial*). Calculando a potência irradiada nesses dois casos obtém-se [Wiedemann, 2003]

$$P_{||} = \frac{2}{3} \frac{q^2}{4\pi c} \frac{1}{m^2 c^2} \left(\frac{d\vec{p}_{||}}{dt} \right)^2 \quad (1.4)$$

e

$$P_{\perp} = \frac{2}{3} \frac{q^2}{4\pi c} \frac{\gamma^2}{m^2 c^2} \left(\frac{d\vec{p}_{\perp}}{dt} \right)^2, \quad (1.5)$$

sendo $\frac{d\vec{p}}{dt}$ a força aceleradora e m a massa das cargas.

Supondo agora que se aplique uma força de mesma intensidade na direção paralela e perpendicular ao movimento ($F_{||} = F_{\perp}$) percebe-se que

$$\boxed{P_{\perp} = \gamma^2 P_{||}}. \quad (1.6)$$

Ou seja, a radiação emitida por uma carga em órbita circular é γ^2 vezes maior que a radiação emitida em trajetória linear. Esse efeito ocorre pois, para casos relativísticos, uma força aplicada perpendicularmente causa uma aceleração maior do que uma força aplicada na direção do movimento.

Outra característica importante é a dependência com o inverso do quadrado da massa da partícula. Isso quer dizer que partículas carregadas mais leves emitem maior quantidade de radiação.

Por esses motivos, fontes de radiação baseadas em cargas aceleradas se utilizam de elétrons relativísticos em trajetórias circulares (ou quase-circulares) em anéis de armazenamento. Essas trajetórias são obtidas com dipolos magnéticos que, pela ação da força de Lorentz, criam uma força centrípeta sobre os elétrons.

Há duas formas de extrair radiação síncrotron destes anéis: coletando a radiação síncrotron emitida nos dipolos defletores ou inserindo imãs nos trechos retos. Os elementos dos trechos retos denominam-se *Dispositivos de Inserção* e possuem características específicas, apesar de fundamentalmente ocorrer o mesmo fenômeno de emissão de radiação que nos dipolos defletores. Nos capítulos 1.2 e 1.3 discutem-se as características da radiação produzida nesses dois tipos de dispositivos.

1.2 Dipolos Defletores

As características da radiação síncrotron emitida em um dipolo defletor são calculados tomando uma trajetória circular tal que a velocidade da carga $\vec{\beta}$ seja perpendicular ao campo magnético $\vec{B}$ do dipolo, desconsiderando a perda de energia por radiação (ou seja, assumindo que $\frac{d\gamma}{dt} = 0$).

As equações 1.1 e 1.2 mostram os campos retardados para uma trajetória genérica, de forma que para obter as propriedades da radiação síncrotron emitida em dipolo magnético basta aplicar essas equações à uma órbita circular. Para tanto, considera-se um sistema de coordenada onde a carga encontra-se no centro executando movimento instantaneamente circular (Figura 1.1).

Serão apresentados agora os principais resultados e características deste tipo de fonte.

1.2.1 Raio de Curvatura e Campo Magnético

Em anéis de armazenamento os dipolos magnéticos tem de ser projetados de forma a definir uma órbita fechada de acordo com a energia dos elétrons e com a faixa de energia da radiação desejada. O raio de circunferência da trajetória circular nos dipolos pode ser calculado diretamente pela força de Lorentz

$$\vec{F} = ec\vec{\beta} \times \vec{B} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d}{dt}(\gamma m \vec{v}), \quad (1.7)$$

sendo $\vec{F}$ a força de Lorentz, e a carga elementar do elétron e $\vec{p}$ o momento linear dos elétrons.

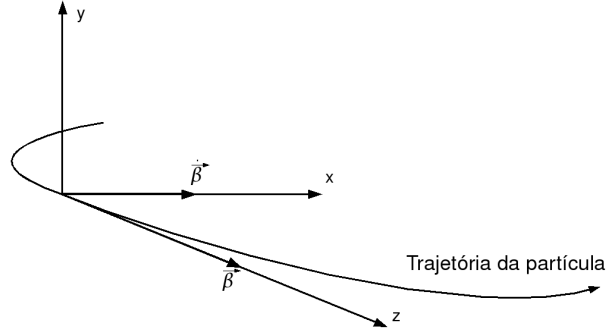


Figura 1.1: Sistema de coordenadas utilizado para o cálculo da distribuição angular de frequência. A partícula está momentaneamente na origem com velocidade na direção $\hat{z}$ e aceleração na direção $\hat{x}$.

Para a órbita circular temos que $\vec{\beta} \perp \vec{B}$ e $\frac{d\gamma}{dt} = 0$, uma vez que uma força centrípeta altera apenas a direção, e não o módulo da velocidade (desprezando a perda de energia por radiação). Tomando ainda que $|\vec{v}| \approx c$ chegamos à

$$\begin{aligned} ec\beta B &= \gamma m \frac{d\vec{v}}{dt} \\ ec\beta B &= \gamma m \frac{v^2}{\rho} \approx \frac{E}{mc^2} m \frac{c^2}{\rho}, \end{aligned}$$

de formam que isolando ρ temos:

$$\boxed{\rho \approx \frac{E}{ec\beta B}}, \quad (1.8)$$

sendo ρ o raio de curvatura e E a energia dos elétrons no anel de armazenamento.

1.2.2 Distribuição Espacial de Potência

A distribuição angular da potência emitida em um dipolo magnético depende da dispersão geométrica dos elétrons quando atravessam o campo do dipolo e das características geométricas do processo de emissão.

A potência emitida por um único elétron nas condições padrões, *i.e.*, elétron relativístico na origem do sistema de coordenadas (Fig. 1.1) em movimento circular uniforme com velocidade instantânea $\vec{\beta} \approx (0, 0, \beta)$ e aceleração $\vec{\dot{\beta}} = \left(\frac{\beta^2}{\rho}, 0, 0\right)$, é dada por Ref. [Jackson, 1997], que fornece a distribuição angular da potência emitida:

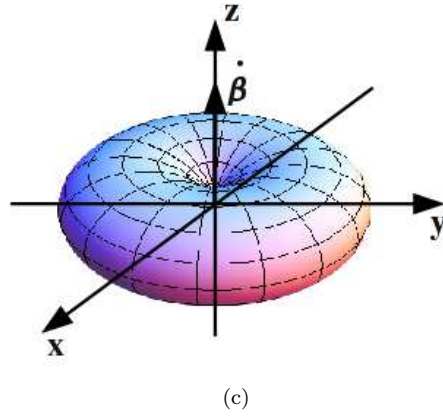
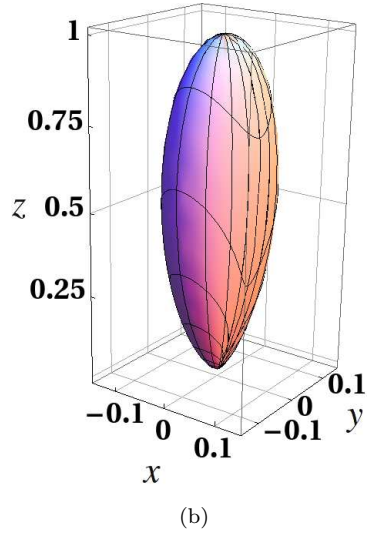
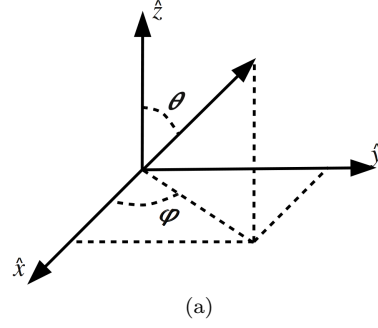


Figura 1.2: (a) Sistema de coordenadas utilizado. (b) Distribuição angular da potência irradiada por uma carga em movimento circular com $\beta = 0,9$ e (c) para o caso não-relativístico ($\beta \ll 1$). Nesses gráficos a intensidade foi normalizada para a intensidade máxima à θ e $\phi = 0$. As superfícies são definidas por vetores $(r, \theta, \phi) = (\frac{dP(\theta, \phi)}{d\Omega}, \theta, \phi)$.

$$\frac{dP(t_r)}{d\Omega} = \left(\frac{e}{4\pi}\right)^2 \sqrt{\frac{\mu_o}{\epsilon_o}} \frac{\beta^4 (1 - \beta \cos \theta)^2 - (1 - \beta^2) \sin^2 \theta \cos^2 \phi}{(1 - \beta \cos \theta)^5} \quad (1.9)$$

sendo μ_o a permeabilidade do vácuo, e Ω o ângulo sólido definido pelas coordenadas polares θ e ϕ . A distribuição dada em Eq. 1.9 pode ser vista em Fig. 1.2b para um valor fixo de β , onde observa-se que, para θ e β fixos, a potência irradiada tem um mínimo quando $\phi = 0$ e $\phi = \pi$ e um máximo para $\phi = \frac{\pm\pi}{2}$. Dessa forma, instantaneamente há mais radiação emitida na direção perpendicular ao plano da órbita ($\phi = \frac{\pm\pi}{2}$) do que na direção paralela ($\phi = 0, \phi = \pi$) ao plano da órbita. Deve-se enfatizar o carácter instantâneo dessa solução, pois a abertura angular no plano da órbita será determinada pelo comprimento do caminho em que a carga sofre aceleração.

É interessante comparar a emissão de radiação em trajetória circular relativística com o caso não relativístico. Para valores de $\beta \ll 1$ temos que a equação 1.1 se reduz para

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hat{\mu} \times (\hat{\mu} \times \dot{\vec{\beta}})}{cR} \quad (1.10)$$

de forma que a distribuição espacial da radiação é dada pela *Fórmula de Larmor* [Jackson, 1997]:

$$\boxed{\frac{dP(t_r)}{d\Omega} = \left(\frac{e}{4\pi}\right)^2 \sqrt{\frac{\mu_o}{\epsilon_o}} |\dot{\vec{\beta}}(t_r)|^2 \sin^2 \vartheta} \quad (1.11)$$

onde utiliza-se o ângulo ϑ como o ângulo entre os vetores de observação $\hat{\mu}$ e de aceleração $\dot{\vec{\beta}}$ no instante t_r .

A função é mostrada na Figura 1.2c, onde observa-se uma direção preferencial no plano xy e uma distribuição isotrópica em relação ao ângulo polar ϕ , fato que não ocorre no caso relativístico.

Outra propriedade interessante pode ser visualizada quando se estuda o comportamento da potência irradiada em função do fator de Lorentz γ e do ângulo θ de emissão para energias relativísticas. A Figura 1.3 mostra a dependência da potência irradiada (normalizada para 1 quando $\theta = 0$) com o ângulo θ em unidades de $1/\gamma$. A curva mostra que a maior parte da radiação está concentrada em valores de $\theta\gamma$ menores do que 1 para uma ampla faixa de energia, de forma que normalmente se diz que a radiação emitida está concentrada em um cone de ângulo

$$\boxed{\theta = \gamma^{-1}}. \quad (1.12)$$

Na prática, para o limite $\gamma \gg 1$ e $\theta \rightarrow 0$, a potência à $\theta = \gamma^{-1}$ é de $1/8$ a potência à $\theta = 0$ [Notas Pessoais].

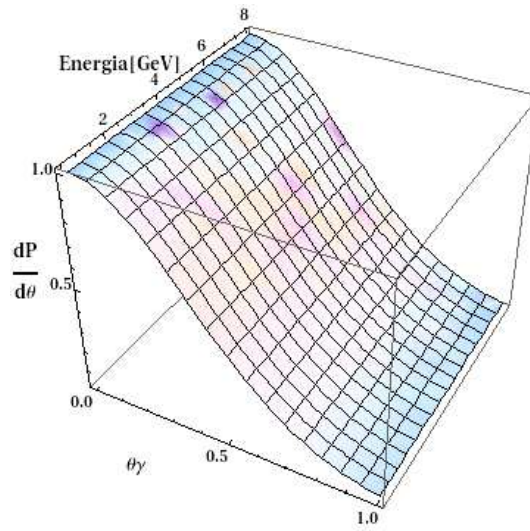


Figura 1.3: Distribuição da potência irradiada por uma carga em movimento circular em função de $\theta\gamma$ e da energia dos elétrons ($E > 100MeV$ e $\gamma > 190$), mostrando que a maior parte da potência irradiada se concentra em um intervalo menor que $\theta\gamma=1$ dentro de uma ampla faixa de energia. Intensidade normalizada para 1 na direção frontal $\theta = 0$

1.2.3 Distribuição Espacial e Espectral

O estudo da emissão de radiação síncrotron fornece resultados analíticos aproximados para a distribuição espacial e espectral da radiação emitida por um dipolo defletor. As aproximações utilizadas são relacionadas à velocidade relativística da carga, que permitem aproximar $\beta \approx 1$ e $\theta = \gamma^{-1} \ll 1$. Além disso utiliza-se aproximações de região de radiação onde considera-se a distância entre fonte e observador muito maior que o tamanho da fonte.

Fazendo uso dessas aproximações e utilizando um sistema de coordenadas adequado [Jackson, 1997], obtém-se a intensidade para o campo elétrico polarizado nas direções perpendicular e paralela à órbita, respectivamente chamadas de polarização π e polarização σ . A solução obtida para a energia irradiada W é dada em termos das Funções de Bessel Modificadas do Segundo tipo $K_{2/3}$ e $K_{1/3}$ (ver [Jackson, 1997, Cap. 14.6])

$$\frac{d^2W}{d\varepsilon d\Omega} = \frac{3\hbar e^2}{16\pi^3 \varepsilon_0} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_c} \right)^2 \gamma^2 (1 + \gamma^2 \theta^2)^2 \left[K_{2/3}^2(\xi) + \frac{\gamma^2 \theta^2 K_{1/3}^2(\xi)}{1 + \gamma^2 \theta^2} \right] \quad (1.13)$$

onde ε é a energia dos fótons¹ e sendo ξ dado por

$$\xi = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\varepsilon_c} (1 + \gamma^2 \theta^2)^{3/2}. \quad (1.14)$$

ε_c é definido como a energia onde $\xi = 1/2$, o que em unidades práticas resulta em

$$\varepsilon_c = 665 E^2 [GeV] B [T], \quad (1.15)$$

sendo ε_c em eV .

Na equação 1.13 os termos dependentes de $K_{2/3}(\xi)$ correspondem à polarização no plano da órbita (chamada de polarização σ) enquanto o termo que depende de $K_{1/3}(\xi)$ corresponde à polarização perpendicular ao plano da órbita (chamada de polarização π).

Uma vez que o termo da polarização π é zero para $\theta = 0$, têm-se que no plano da órbita ($\theta = 0$) a radiação é linearmente polarizada na direção do plano. Já para valores de $\theta \neq 0$ (fora do plano da órbita) há presença de radiação nas duas polarizações, o que produz radiação elipticamente polarizada (ver Fig.1.4).

No uso de radiação síncrotron, usualmente têm-se interesse pelo fluxo de fótons $\frac{d\dot{N}_f(\varepsilon)}{d\Omega}$ (número de fótons por segundo por unidade de ângulo sólido) emitidos por uma corrente I de partículas de carga q . Além disso, dado que é praticamente impossível monocromatizar um amplo espectro de radiação, utiliza-se o fluxo de fótons em um dado intervalo de energia (ou frequência), tecnicamente chamado de banda passante (*bandwidth*) e definido por $bw = \Delta\varepsilon/\varepsilon$. Em termos

¹Neste capítulo, afim de distinção da notação, usaremos ε para a energia dos fótons e E para a energia das cargas

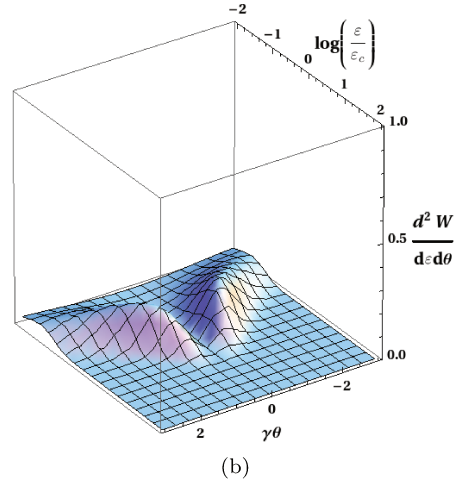
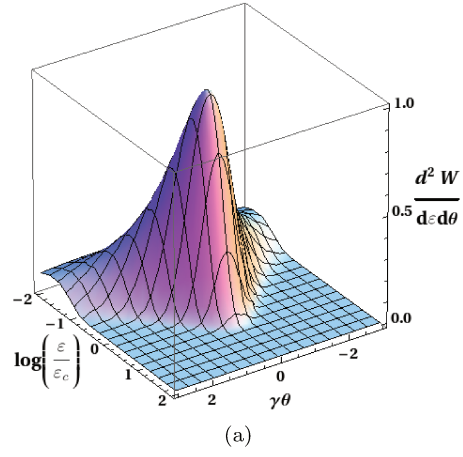
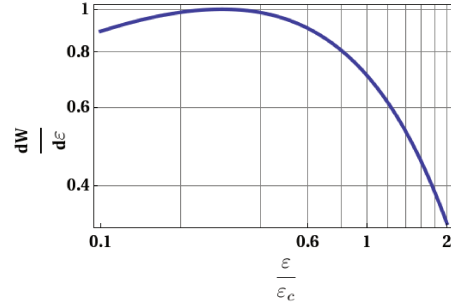
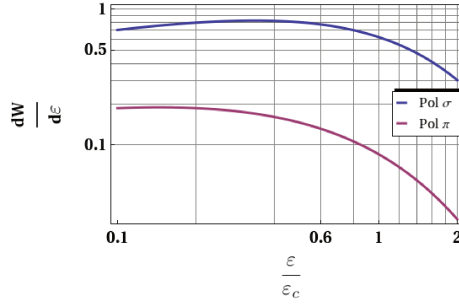


Figura 1.4: Intensidade (a) da polarização σ e (b) da polarização π , normalizadas pela intensidade máxima da polarização paralela ($\theta = 0$ e $\frac{\epsilon}{\epsilon_c} \approx 0,8338$)



(a)



(b)

Figura 1.5: Espectros de emissão (a) total e (b) por polarização, normalizados para intensidade máxima à $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_c} \approx 0,2858$ [Métodos numéricos do mathematica].

práticos, esta razão reflete o quanto a instrumentação da linha de luz será capaz de selecionar uma faixa de energia do feixe de radiação. Esse fluxo de fótons é calculado por [Wiedemann, 2003]:

$$\boxed{\frac{d\dot{N}_f(\varepsilon)}{d\Omega} = \frac{d^2W(\varepsilon)}{d\varepsilon d\Omega} \frac{I}{e} \left(\frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon} \right)}. \quad (1.16)$$

A figura 1.5 mostra a Equação 1.16 integrada em todas as direções por um programa computacional, mostrando a presença de um máximo em $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_c} \approx 0,3$ e uma queda acentuada após este máximo.

1.3 Dispositivos de Inserção

De modo geral, o fluxo obtido em um anel de armazenamento composto apenas de dipolos defletores depende apenas de três parâmetros da máquina: o campo magnético nos dipolos defletores, a corrente e a energia dos elétrons. O aumento

do campo defletor também altera a energia crítica, sendo essa uma forma de aumentar a energia da radiação.

Do ponto de vista prático, um anel de armazenamento é projetado para operar em determinada energia e corrente e com campo defletor fixo. Além disso, as características de uma fonte devem contemplar as várias técnicas que fazem uso das diferentes faixas de energias.

A solução imediata para aumentar o fluxo de radiação da fonte seria operar com a maior energia e a maior corrente possíveis. No entanto isso causaria outros problemas, como por exemplo a necessidade de dissipar uma grande potência quando o interesse é utilizar apenas fótons de energias baixas.

Uma alternativa seria operar com energias intermediárias e operar com diferentes campos defletores nos dipolos, otimizando o campo (e a energia crítica) de cada um para as aplicações específicas de cada linha de luz. Porém essa alternativa causa outras dificuldades, uma vez que um anel de armazenamento possui certas simetrias que facilitam sua operação e diferentes deflexões quebrariam essas simetrias [Margaritondo, 1988][Wiedemann, 2003].

Logo, para manter a simetria da máquina, utiliza-se nos trechos retos dipolos extras com campos magnéticos maiores mas com efeito global nulo para a óptica do anel, que permitem operar a máquina com energias intermediárias e obter radiação com energias maiores. À esses dipolos inseridos em trechos retos dos anéis de armazenamento denominam-se *Dispositivos de Inserção (DI)*.

A condição imposta de efeito nulo para a óptica é de que o campo magnético transversal somado ao longo da trajetória das cargas ao atravessar o dispositivo de inserção seja zero, o que é expresso matematicamente por

$$\int_{DI} B_i(z) dz = 0 \quad i = x, y, \quad (1.17)$$

sendo B_i o campo magnético transversal gerado pelos dipolos em questão, z a direção de propagação das cargas, x e y as direções transversais (Fig. 1.6b). *DI* diz que a integração deve ser feita no caminho traçado pelos elétrons sob efeito do campo magnético do dispositivo de inserção.

Uma forma de se obter tal tipo de dispositivo é utilizar dois dipolos magnéticos idênticos colocados em série (um após o outro ao longo da trajetória) mas com polaridades invertidas, de forma à, idealmente, tentar obter um campo da forma

$$\vec{B}(\vec{z}) = \begin{cases} (0, 0, 0) & \text{se } |z| > \frac{\lambda_p}{2} \\ (0, B_0, 0) & \text{se } -\frac{\lambda_p}{2} < z \leq 0 \\ (0, -B_0, 0) & \text{se } 0 < z \leq \frac{\lambda_p}{2} \end{cases} \quad (1.18)$$

onde λ_p é o comprimento de dois dipolos e B_0 o módulo do campo máximo.

Na prática o que se faz é associar vários desses conjuntos de dois dipolos em série obtendo um campo periódico de período λ_p , de forma que um dispositivo com N dipolos emitirá N vezes mais radiação do que um único dipolo.

Em geral aproxima-se o campo periódico desses dispositivos por um campo senoidal da forma

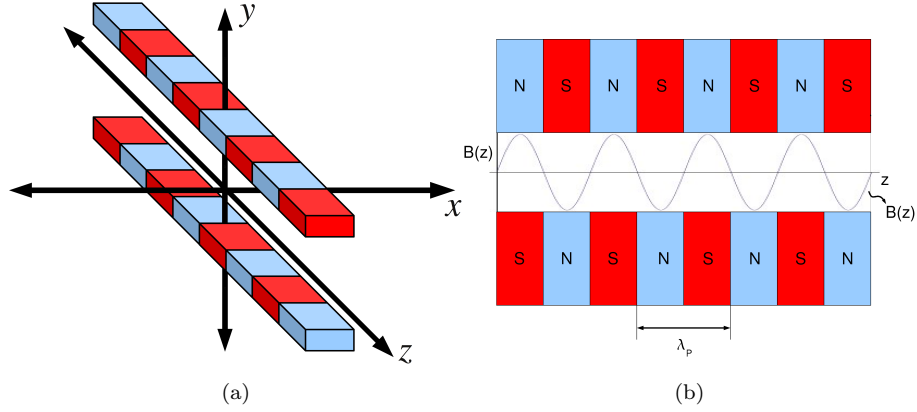


Figura 1.6: (a) Sistema de referências para os dispositivos de inserção. Cada bloco azul (vermelho) representa um polo do norte (sul) do dipolo magnético. (b) Representação do campo magnético gerado no interior do arranjo periódico.

$$\vec{B}(x, y, z) = \left(0, B_0 \cos \frac{2\pi x}{\lambda_p}, 0 \right) = B_y(z) \hat{y}, \quad (1.19)$$

sendo o sistema de coordenadas em relação ao arranjo periódico mostrado na Figura 1.6a. Uma representação do campo pode ser vista na figura 1.6b.

De acordo com o campo magnético gerado por esses dipolos, esses dispositivos são classificados como *Wigglers* ou *Onduladores*. A diferença básica entre eles é que no Wiggler a radiação gerada por um dipolo soma-se incoerentemente com a radiação dos outros dipolos enquanto que no Ondulador há adição coerente causando interferência construtiva para uma dada frequência da radiação e seus harmônicos [Schlueter, 1995][Clark, 2004].

O tratamento matemático para Wiggler e Onduladores parte do cálculo da trajetória de cargas relativísticas em um campo senoidal como o apresentado em 1.19. A seguir, será feita a análise dessa trajetória de forma a determinar os parâmetros que diferenciam o Wiggler do Ondulador. Com esses resultados, será estudado o caso particular da radiação emitida por um Wiggler.

1.3.1 Movimento de cargas em campo magnético senoidal

A trajetória dos elétrons em um campo como o de Eq. 1.19 é obtida considerando uma carga sujeita à força de Lorentz. Considerando a velocidade transversal muito menor do que a longitudinal, obtém-se que o desvio da órbita sofrido pela carga no plano XZ é dado por [Wiedemann, 2003] [Razina and Epp, 1991]:

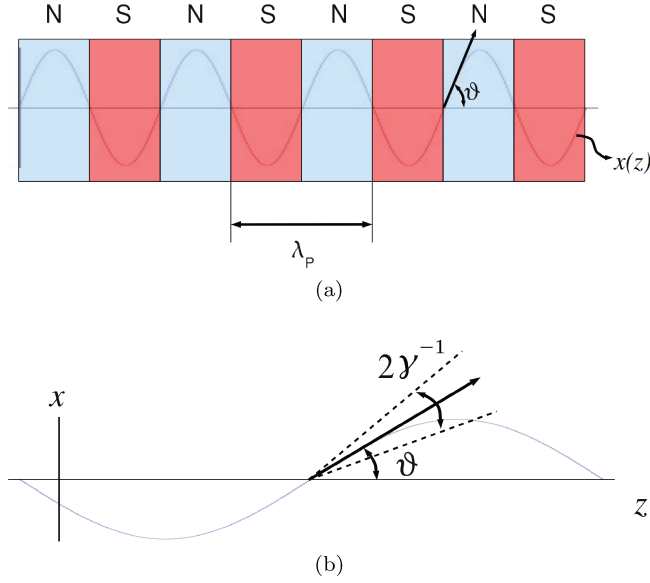


Figura 1.7: (a) Trajetória das cargas no plano xz . (b) Ângulos de desvio da órbita ϑ e do cone de emissão γ^{-1} .

$$x(z) = \frac{ecB_0}{E} \left(\frac{\lambda_p}{2\pi} \right)^2 \cos \frac{2\pi v_{||} t}{\lambda_p} = \frac{ecB_0}{E} \left(\frac{\lambda_p}{2\pi} \right)^2 \cos \frac{2\pi z}{\lambda_p}. \quad (1.20)$$

Sendo assim, a trajetória das cargas também se faz de forma senoidal, com amplitude máxima de

$$x_{max} = \frac{ecB_0 \lambda_p^2}{4\pi^2 E} \quad (1.21)$$

Tratando agora cada ponto da trajetória como um dipolo magnético de campo $\vec{B} = B(z)\hat{y}$, teremos que cada ponto ao longo da trajetória será um dipolo com campo de deflexão distinto emitindo em uma direção com ângulo ϑ da direção frontal $\hat{z}$. Pela figura 1.7 verificamos que o ângulo ϑ é dado por

$$\tan \vartheta = \frac{dx}{dz} \quad (1.22)$$

e que, devido o baixo valor de $\frac{e}{E}$, permite que se escreva $\tan \vartheta \approx \vartheta$ obtendo

$$\vartheta(z) = -\frac{ecB_0 \lambda_p}{2\pi E} \sin \left(\frac{2\pi z}{\lambda_p} \right), \quad (1.23)$$

de onde obtém-se que a máxima deflexão angular será para $x = \pm \frac{\lambda_p}{4}$ e é dada por

$$\vartheta_{max} = \pm \frac{ecB_0\lambda_p}{2\pi E} = \pm \frac{ecB_0\lambda_p}{2\pi mc^2} \frac{1}{\gamma}. \quad (1.24)$$

No Cap. 1.2.2 foi discutido que uma carga acelerada por uma força transversal emite radiação na sua maioria dentro de um cone com ângulo $\theta = \gamma^{-1}$ (Eq. 1.12). Define-se então um parâmetro adimensional K que dá a relação entre a máxima deflexão angular e a divergência natural da emissão de radiação por uma carga:

$$K = \frac{\vartheta_{max}}{\theta} = \vartheta_{max}\gamma = \frac{eB_0\lambda_p}{2\pi mc}, \quad (1.25)$$

que, em unidades prática torna-se:

$$K = 0,934 B_0[T] \lambda_p[cm]. \quad (1.26)$$

O valor de amplitude máxima na direção x dado em função de K fica:

$$x_{max} = \frac{\lambda_p K}{2\pi\gamma} \quad (1.27)$$

$$x_{max}[\mu m] = 0,8133 \frac{\lambda_p[cm] K}{E[GeV]} \quad (1.28)$$

A diferença básica entre um Ondulador e um Wiggler é que no último a radiação gerada por um dipolo soma-se incoerentemente com a radiação dos outros dipolos enquanto que no Ondulador os campos irradiados se somam coerentemente causando interferência construtiva para uma dada frequência da radiação e seus harmônicos [Schlueter, 1995][Clark, 2004].

Para valores de $K < 1$ a divergência causada pela mudança de trajetória é menor que a divergência natural do processo de emissão de forma que o processo de interferência coerente da radiação emitida é favorecido. Para valores de $K > 1$ o fenômeno de interferência não ocorre, e a radiação se soma incoerentemente [Clark, 2004]. Sendo assim, os caso de $K < 1$ descrevem o comportamento de um Ondulador², enquanto que um Wiggler é caracterizado por $K > 1$.

Como a energia crítica do espectro de radiação síncrotron depende do campo magnético dos dipolos, e como o parâmetro K também depende do campo magnético, então há uma relação entre a energia crítica do espectro de emissão de radiação e o parâmetro K . Substituindo Eq. 1.26 em Eq. 1.15 por B_0 , chegamos à

$$\varepsilon_c = \frac{712 E^2[GeV] K}{\lambda_p[cm]}. \quad (1.29)$$

Utilizando agora esta equação para calcular qual o período de um ondulador de parâmetro $K = 1$ operando no anel de armazenamento do LNLS (energia dos

²Na verdade o valor $K = 1$ não significa ausência de interferência, sendo esse valor um tanto arbitrário uma vez que algumas referências chegam à utilizar o limite em $K = 5$ [Clark, 2004]. Para efeitos práticos usaremos o limite em $K = 1$ mas a melhor distinção entre Wiggler e Onduladores é a presença ou não do fenômeno de interferência coerente.

elétrons de $1,37\text{GeV}$) necessário para gerar radiação com energia crítica acima de 8KeV , chegamos ao valor e $1,76\text{mm}$, com um campo magnético máximo de $6,4\text{T}$ esla.

Com a tecnologia atual de construção de onduladores é inviável construir um dispositivo com tais parâmetros, de forma que no atual anel de armazenamento do LNLS é inviável utilizar um Ondulador para gerar raios-X duros. Assim, aprofundaremos a discussão sobre Wiggler e negligenciaremos a física dos Onduladores, uma vez que o foco deste trabalho são linhas de luz de raios-X duros.

1.3.2 Distribuição Espacial de Potência

Para o caso dos Wiggler usualmente desconsidera-se as propriedades do feixe de cargas que atravessa o dispositivo uma vez que a divergência angular dos elétrons no pacote (o parâmetro que seria mais relevante) é menor do que a divergência natural da radiação (γ^{-1}) [Kim, 1986].

Considerando então elétrons em uma trajetória senoidal como a dada em eq. 1.20, obtém-se uma solução analítica para a potência emitida por um Wiggler [Kim, 1986], expressa por

$$\boxed{\frac{dP}{d\Omega} = P_T \frac{21\gamma^2}{16\pi K} G(K) f_K(\gamma\theta, \gamma\vartheta)} \quad (1.30)$$

onde P_T é a potência total, integrada em todos os ângulos e frequências, e dada por

$$P_T[kW] = 0,633E^2[GeV]B_0^2[T]I[A]N\lambda_p[m] \quad (1.31)$$

sendo E a energia dos elétrons, B_0 o campo magnético máximo, L o comprimento total do Wiggler e I é a corrente de elétrons.

A dependência angular é dada pela função $f_K(\gamma\theta, \gamma\vartheta)$, que depende de K e $G(K)$ por

$$f_K(\gamma\theta, \gamma\vartheta) = \frac{16K}{7\pi G(K)} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \left(\frac{1}{D^3} - \frac{4(\gamma\vartheta - K \cos \alpha)^2}{D^5} \right) \sin^2 \alpha \quad (1.32)$$

sendo D dado por $1 + (\gamma\theta)^2 + (\gamma\vartheta - K \cos \alpha)^2$.

A função $G(K)$ é um fator de normalização que faz com que $f_K(0, 0) = 1$ e é dado por

$$G(K) = K \frac{\left(K^6 + \frac{24}{7}K^4 + 4K^2 + \frac{16}{7}\right)}{(1 + K^2)^{7/2}}. \quad (1.33)$$

A complexidade de tais equações força o uso de métodos numéricos para o cálculo da função f_K ou o uso de casos limite onde as funções são simplificadas. Em Ref. [Kim, 1986] são fornecidas soluções aproximadas para alguns casos, entre eles os casos limites quando $K \rightarrow 0$ e $K \rightarrow \infty$. Neste trabalho optou-se

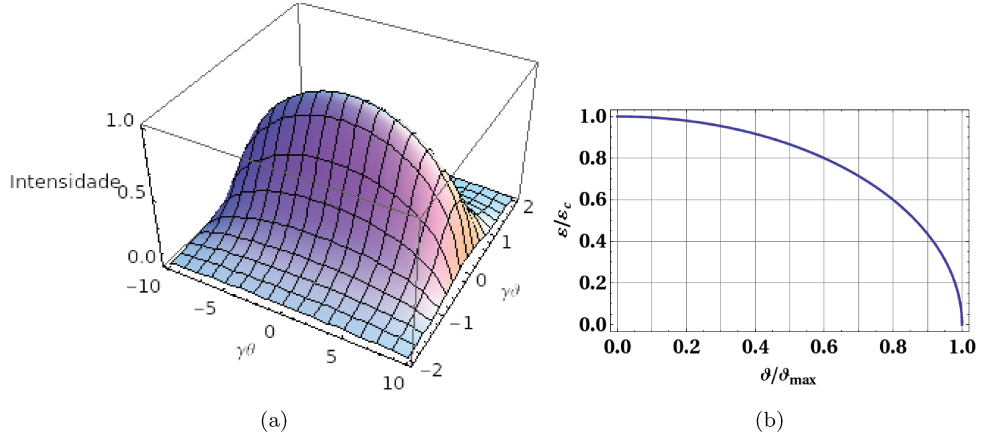


Figura 1.8: (a) Distribuição angular da potência irradiada por um Wiggler com $K = 10$ em função de $\gamma\theta$ e $\gamma\vartheta$, normalizado para o valor máximo em $(\theta, \vartheta) = (0, 0)$. (b) Energia crítica em função do ângulo ϑ .

por utilizar métodos computacionais numéricos³ para resolver a integral da função f_K e obter o comportamento da distribuição de potências da Eq. 1.30 (Fig. 1.8a).

1.3.3 Distribuição Espacial e Espectral

A forma usual de obter as características da radiação de um Wiggler é considerar cada ponto da trajetória como um dipolo com campo defletor $B(z)$ e direção de emissão $\vartheta(z)$ (Equações 1.19 e 1.23) que emite radiação de acordo com as equações 1.9 e 1.13 de radiação do dipolo⁴.

Descrições analíticas do Wiggler com aproximações são apresentada por Ref. [Razina and Epp, 1991], para a distribuição espectral e espacial. Tal resultado pode ser obtido de forma alternativa calculando o campo magnético em função do ângulo de deflexão $B(\vartheta)$ e substituindo no valor do campo do dipolo em 1.13. O valor de $B(\vartheta)$ é obtido manipulando as equações 1.19, 1.20 e 1.23, e leva à

$$B(\vartheta) = B_0 \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma\vartheta}{K}\right)^2}. \quad (1.34)$$

A dependência da distribuição de radiação com o campo magnético ocorre através da energia crítica dada na Eq. 1.15, de forma que a energia crítica da

³Utilizou-se o programa computacional *Wolfram Mathematica* (<http://www.wolfram.com/products/mathematica/index.html>)

⁴Muitos autores (como [Wiedemann, 2003], [Margaritondo, 1988] e [Ciocci et al., 2000]) desconsideram os efeitos da dependência do campo em ϑ e tratam um Wiggler como N dipolos defletores com campo magnético igual ao campo máximo B_0 do Wiggler e com divergência máxima de $\vartheta_{\max}$.

radiação depende da direção de observação e é dada por:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{Wiggler} &= [0,665E^2(GeV)B_0(T)] \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma\vartheta}{K}\right)^2} \\ \varepsilon_{Wiggler} &= \varepsilon_c \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma\vartheta}{K}\right)^2} = \varepsilon_c \sqrt{1 - \left(\frac{\vartheta}{\vartheta_{max}}\right)^2},\end{aligned}\quad (1.35)$$

onde ε_c é a energia crítica calculada para emissão frontal e usada para se referir à energia crítica de um Wiggler. Observa-se que a equação é a mesma para um dipolo cujo campo magnético defletor B tem o mesmo valor de B_0 , o campo magnético máximo de um Wiggler. O comportamento da Eq. 1.35 é vista na Fig. 1.8b.

Sendo a equação de emissão de radiação pelo dipolo defletor uma função da energia dos fótons ε , do ângulo sólido Ω , da energia crítica ε_c e da energia das cargas E , *i.e.*,

$$\frac{d^2W}{d\varepsilon d\Omega} = f(\varepsilon, \Omega, \varepsilon_c, E), \quad (1.36)$$

temos então que a distribuição angular e de energia do Wiggler $\frac{d^2W_w}{d\varepsilon d\Omega}$ pode ser escrita em função da distribuição para o dipolo defletor na forma de

$$\boxed{\frac{d^2W_w}{d\varepsilon d\Omega}(\varepsilon, \Omega, \varepsilon_c, E, N, K) = N \frac{d^2W}{d\varepsilon d\Omega}(\varepsilon, \Omega, \varepsilon_c \sqrt{1 - \alpha^2}, E)}, \quad (1.37)$$

definindo $\alpha = \frac{\gamma\vartheta}{K}$ e lembrando que nessas coordenadas $d\Omega = \sin\theta d\theta d\vartheta$. O comportamento da Eq. 1.37 é mostrado na Fig. 1.9.

Logo, explicitando a Eq. 1.37 para o Wiggler teremos que

$$\boxed{\frac{d\dot{N}_f(\varepsilon)}{d\Omega} = \frac{3Ie}{16\pi^3\epsilon_0} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_c \sqrt{1 - \alpha^2}}\right)^2 \gamma^2 (1 + \gamma^2\theta^2)^2 \left[K_{2/3}^2(\xi) + \frac{\gamma^2\theta^2 K_{1/3}^2(\xi)}{1 + \gamma^2\theta^2} \right] \left(\frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon}\right)} \quad (1.38)$$

e ξ dado por:

$$\boxed{\xi = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\varepsilon_c \sqrt{1 - \alpha^2}} (1 + \gamma^2\theta^2)^{3/2}}. \quad (1.39)$$

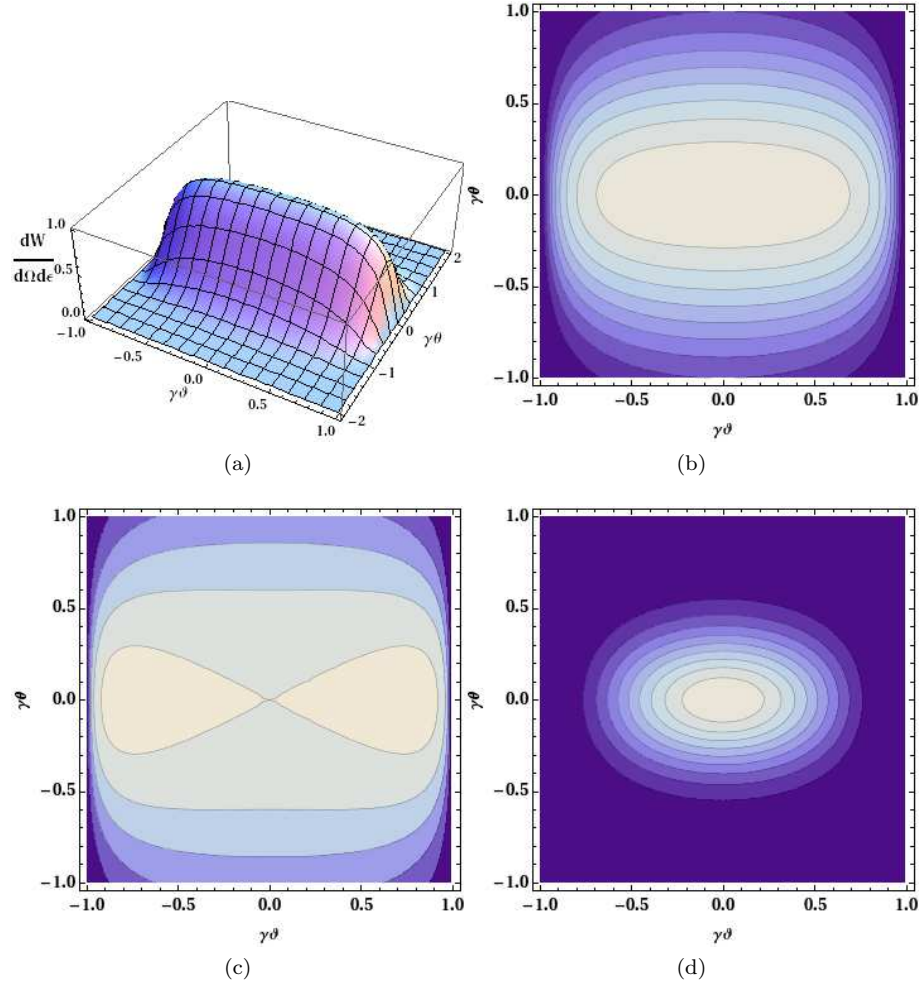


Figura 1.9: Distribuição angular da radiação de um Wiggler para (a) e (b) $\epsilon = \epsilon_c$, (c) $\epsilon = \frac{\epsilon_c}{2}$ e (d) $\epsilon = 2\epsilon_c$.

Capítulo 2

Interação de Raios-X com a matéria

Uma vez conhecidas as características das fontes de radiação síncrotron, iremos tratar as particularidades dos elementos que constituem uma linha de luz. Para tanto, é importante introduzir as propriedades da interação entre a radiação eletromagnética e a matéria para em seguida estudar cada elemento da óptica de uma linha de luz à partir dessas propriedades. Sendo o foco dessa dissertação linhas de luz para raios-X duros (energia entre 2KeV e 30KeV)¹, as interações abordadas serão as que cobrem essa faixa de energia da radiação eletromagnética.

A probabilidade de que uma interação ocorra entre um fóton e um átomo é representada pela grandeza *seção de choque*. Essa grandeza tem unidade de área e depende de propriedades atômicas, como a energia de ligação dos elétrons (que por sua vez depende de vários parâmetros atômicos) e a energia dos fótons. Isso decorre de que os fótons interagem com os átomos como um todo, ou com os elétrons atômicos ou com os núcleos atômicos individualmente a depender de sua energia. No caso dos raios-X a interação se dá entre fótons e elétrons atômicos.

A Figura 2.1 mostra a seção de choque dos fótons para um amplo espectro de energia para dois elementos distintos, o carbono e o chumbo, separados por tipo de interação. Observa-se que para a faixa de energia dos raios-X duros os fenômenos relevantes são o efeito fotoelétrico, o espalhamento Rayleigh (espalhamento elástico) e o espalhamento Compton (espalhamento inelástico). O comportamento desses dois elementos refletem qualitativamente o comportamento dos demais.

A seção de choque pode ser visualizada imaginando que cada átomo, do ponto de vista da radiação incidente, seja uma superfície de área efetiva σ dado pela seção de choque. Uma vez que um fóton incide sobre a área de uma dessas

¹Não há um consenso entre as bibliografias quanto uma definição da faixa de energia que recebe a nomenclatura de raios-X duros, sendo esse valor um tanto arbitrário.

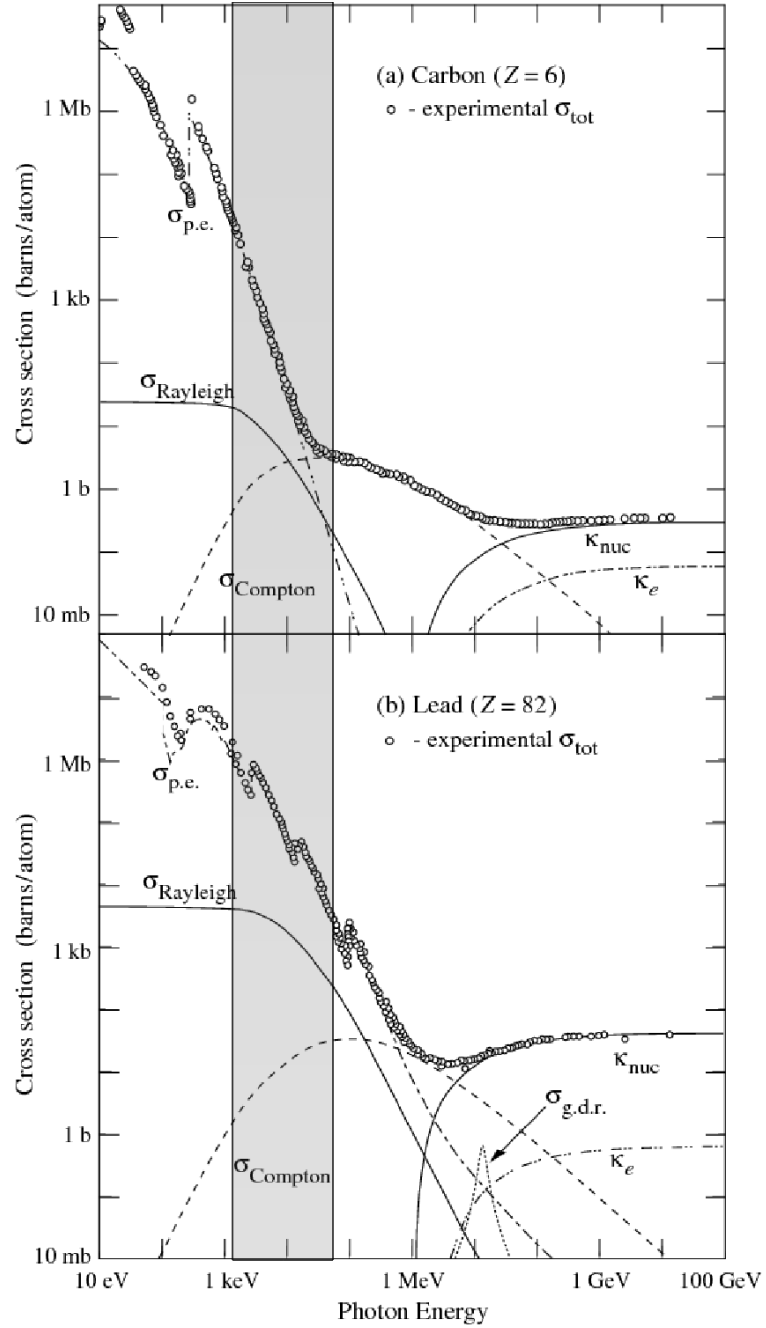


Figura 2.1: Seção de choque (a) do carbono e (b) do chumbo para interação com fótons em função da energia ($1\text{barn} = 10^{-28}\text{m}^2$) para um extenso intervalo de energia. A faixa cinza destaca a faixa de energia de raios-X duros. Os pontos representam medidas experimentais, enquanto as curvas mostram as contribuições dos diferentes processos: $\sigma_{\text{p.e.}}$ seção de choque relacionada ao efeito fotoelétrico, σ_{Rayleigh} ao espalhamento Rayleigh, σ_{Compton} ao espalhamento Compton, κ_{nuc} à produção de pares devido ao campo nuclear, κ_e à produção de pares devido ao campo gerado pelos elétrons, $\sigma_{\text{g.d.r.}}$ às interações nucleares que causam a quebra do núcleo[Amsler, 2008].

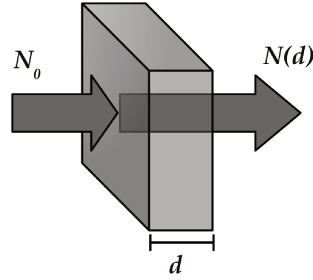


Figura 2.2: Geometria da Eq. 2.1 onde uma quantidade N_0 de fótons incide uma material de espessura d e densidade ρ_a , e uma quantidade $N(d)$ é transmitida.

superfícies, ele interage sendo espalhado ou absorvido.

Tratando essa visão matematicamente, temos que o número de fótons N que atravessa uma espessura d de determinado material onde incide um número N_0 de fótons (Fig. 2.2) é dado por [Als-Nielsen and McMorrow, 2001]

$$N(d) = N_0 e^{-\rho_a \sigma d} = N_0 e^{-\mu d}, \quad (2.1)$$

onde ρ_a é a densidade atômica do material (número de átomos por volume) e σ a seção de choque total, e onde definiu-se o parâmetro μ chamado de *coeficiente de atenuação*

A visão de que a seção de choque corresponde à uma probabilidade de interação permite separá-la como uma soma da seção choque de cada processo (espalhamento elástico, efeito fotoelétrico, etc.). Matematicamente teremos então

$$\sigma = \sum_i \sigma_i, \quad (2.2)$$

sendo que i representa os processos pelos quais os fótons interagem com o material.

A análise também pode ser expandida para materiais compostos considerando a densidade de cada elemento ρ_j no material. Além disso, as seções de choque também dependem dos elementos em questão. Sendo assim, o coeficiente de atenuação em função dos processos e dos elementos torna-se:

$$\mu = \sum_{ij} \rho_j \sigma_{ij} = \sum_{ij} \mu_{ij} \quad (2.3)$$

onde escrevemos um coeficiente de atenuação μ_{ij} para cada elemento j e para cada interação i .

A seção de choque pode ser calculada individualmente para cada processo. Isso é feito de formas distintas, cada uma com aproximações adequadas à cada um dos fenômenos e que é feito por duas abordagens principais uma pelo Eletromagnetismo Clássico e outra pela Mecânica Quântica.

A abordagem pelo Electromagnetismo Clássico considera a atuação da Força de Coulomb e as interações entre o campo elétrico da radiação e os elétrons atômicos. Em geral utiliza-se das aproximação de elétrons livres (Thomson) ou elétrons em potencial harmônico (Rayleigh);

A abordagem pela mecânica quântica dos diversos fenômenos também considera a interação entre fótons e elétrons atômicos e utiliza teoria de espalhamento, teoria de perturbação dependente do tempo (em geral uma perturbação harmônica) e segunda quantização. A Hamiltoniana $H(\mathbf{R}, t)$ que descreve a interação entre a radiação e os elétrons atômicos é dada por [Cohen-Tannoudji et al., 1978]

$$H(\mathbf{R}, t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{P} - e\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 + V(R) \quad (2.4)$$

onde m e e são a massa e a carga do elétron, $\mathbf{P}$ o operador momento linear, $\mathbf{R}$ o operador posição, $\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$ o potencial vetor e $V(R)$ o potencial de Coulomb gerado pelo núcleo atômico.

Abrindo o termo quadrado, podemos tratar o problema em termos de uma perturbação aos elétrons ligados à um átomo por um potencial Coulombiano (problema do átomo de hidrogênio) com Hamiltoniana H_0 dado por

$$H_0 = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V(R), \quad (2.5)$$

e a perturbação $W(t)$ será escrita por

$$W(t) = \frac{e^2}{2m} [\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 - \frac{e}{m} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}, t). \quad (2.6)$$

A solução dos termos perturbativos irão descrever os diversos fenômenos [Als-Nielsen and McMorro, 2001]: em primeira ordem os termos $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$ e $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$ descrevem respectivamente a absorção fotoelétrica e o espalhamento elástico. Em segunda ordem teremos que $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$ descreve o espalhamento ressonante enquanto que o termo $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$ descreve o espalhamento inelástico.

Neste trabalho será adotado uma abordagem clássica e/ou semi-clássica: clássica no sentido que utiliza electromagnetismo clássico para descrever a interação entre radiação eletromagnética e matéria, e considera os elétrons como livres ou ligados por potencial harmônico; e utiliza conceitos semi-clássicos como o modelo atômico de Bohr e considera algumas interações como colisões elásticas ou inelásticas.

2.1 Absorção

O processo de absorção de radiação está relacionado com o efeito fotoelétrico, onde um fóton é absorvido pelo átomo e um elétron é emitido (excitado) da nuvem eletrônica Fig. 2.3a. O elétron é emitido com energia E igual à energia do fóton E_γ menos a energia de ligação do elétron E_0

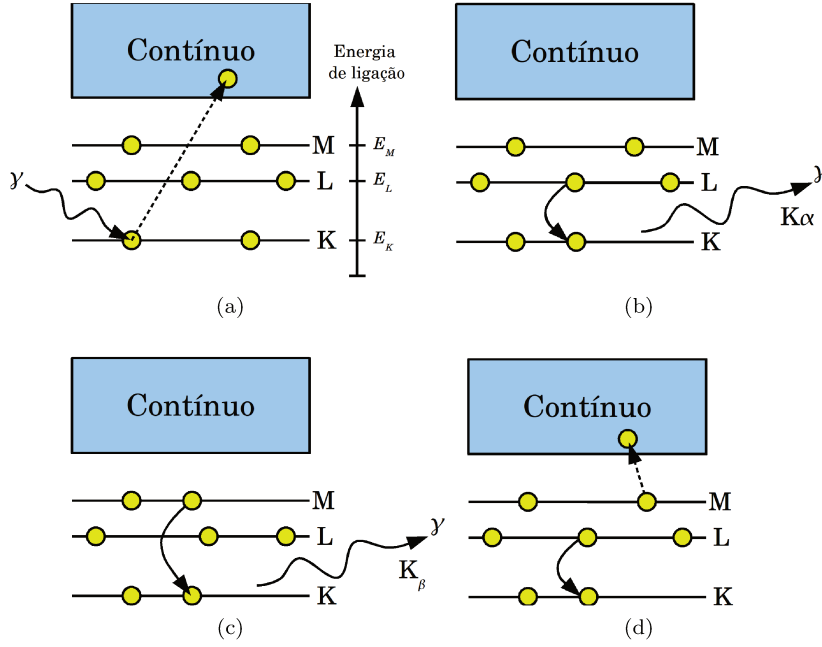


Figura 2.3: (a) Absorção fotoelétrica e a subsequente emissão de radiação de fluorescência (b) $K\alpha$ e (c) $K\beta$ por uma transição respectivamente de um elétron da camada L e da camada M para a camada K. (d) Por ultimo emissão de um elétron Auger.

$$E = E_\gamma - E_0 \quad (2.7)$$

deixando um nível eletrônico de energia E_0 desocupado. Por esse motivo, o efeito só ocorre para radiação com energias superiores às de ligação dos elétrons.

O nível eletrônico vago é então ocupado por um elétron de camadas eletrônicas de maiores energias (Fig. 2.3b e 2.3c). Essas transições eletrônicas são descritas pela Mecânica Quântica e obedecem à regra de seleção atômica [Cohen-Tannoudji et al., 1978].

Ao ocupar o nível vago, o elétron terá um excesso de energia dado pela diferença de energia de ligação entre o nível que ele ocupava anteriormente e o nível atual. Essa diferença de energia é então liberada de duas formas: através de fótons (Figuras 2.3b e 2.3c) ou elétrons (Figuras 2.3d). Ao fenômeno de emissão de fótons denomina-se *fluorescência*, enquanto a emissão de elétrons é feita por dois processos denominados *emissão Auger* ou *emissão Coster-Kronig* [Thompson and Vaughan, 2001], dependendo da camada de origem do elétron que fez a transição

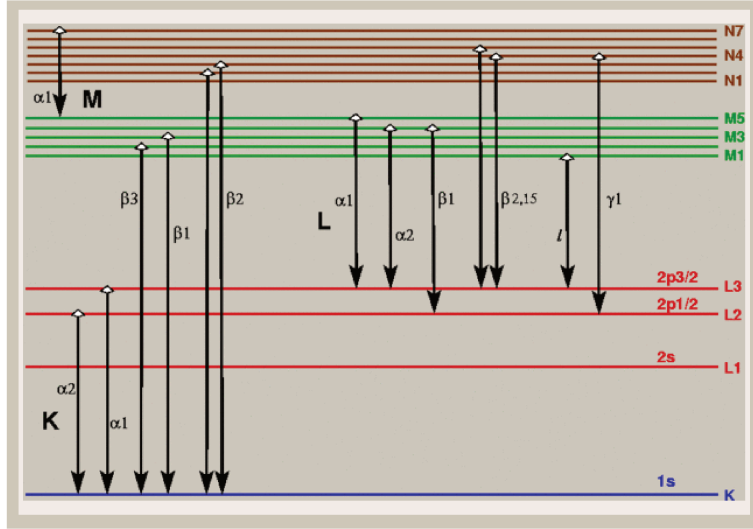


Figura 2.4: Esquema das transições entre as camadas eletrônicas que causam a emissão de fluorescência e suas respectivas nomenclaturas de acordo com a *notação espectroscópica*. Figura extraída do programa *Hephaestus* (<http://cars9.uchicago.edu/~ravel/software/abouthephaestus.html>)

Devido ao princípio de conservação de momento o processo de absorção requer um terceiro integrante à colisão, no caso o núcleo atômico²[Gruppen and Shwartz, 2008]. Devido à proximidade com o núcleo, os elétrons das camadas *K* terão uma grande seção de choque de absorção para energias próximas à sua energia de ligação ($\approx 80\%$ da seção de choque total).

O cálculo da seção de choque do efeito fotoelétrico é feito à partir da teoria quântica de espalhamento e teoria de perturbação de primeira ordem independente do tempo [Als-Nielsen and McMorro, 2001]. Além disso, utiliza-se duas aproximações nas quais o elétron ejetado tem função de onda na forma de uma onda esférica e a função de onda $\psi_K(r)$ de um elétron ligado da camada *K* tem dependência apenas radial da forma

$$\psi_K(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_o^3}} \exp\left(\frac{-rZ}{a_o}\right) \quad (2.8)$$

onde Z é o número atômico, a_o o raio de Bohr e r a distância em relação ao núcleo.

Essa aproximação é válida para energias da radiação superiores à de ligação do elétron. Para energias próximas à da borda é necessário utilizar a função de onda correta para o elétron espalhado ao invés da aproximação da onda plana,

²Por isso um elétron livre não é capaz de absorver um fóton.

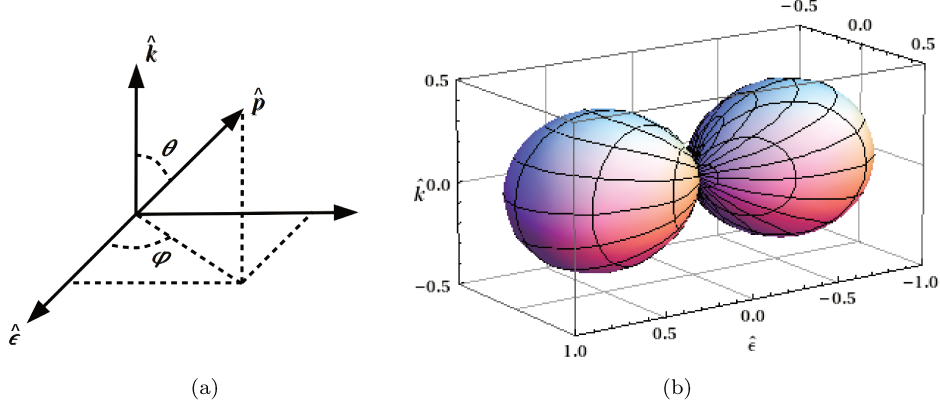


Figura 2.5: (a) Sistema de coordenadas da emissão de elétron no efeito fotoelétrico. (b) Gráfico polar em 3 dimensões da distribuição angular do elétron emitido por efeito fotoelétrico no fenômeno de absorção.

o que leva à inserção de um fator de correção $f(\xi)$. Na aproximação de Born o resultado obtido é que a seção de choque por elétron ligado da camada K é dado por

$$\sigma_{ab_K} = \frac{256\pi}{3} \cdot \hbar c \cdot r_0 \frac{E_K^{5/2}}{E^{7/2}} f(\xi), \quad (2.9)$$

sendo $f(\xi)$ dado por

$$f(\xi) = 2\pi \sqrt{\frac{E_k}{E}} \left[\frac{\exp(-4\xi \operatorname{arccot} \xi)}{1 - \exp(-2\pi\xi)} \right], \quad \xi = \sqrt{\frac{E_K}{E - E_K}}. \quad (2.10)$$

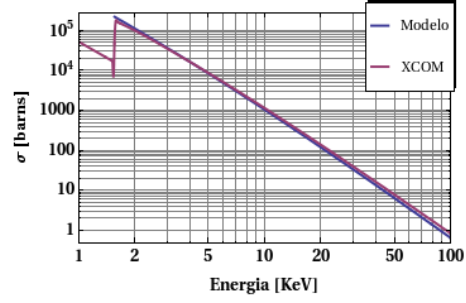
A seção de choque diferencial, ou seja, a seção de choque em função da direção do elétron emitido para energias superiores à de ligação tem dependência angular dada por [Heitler, 1954]

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} \propto \sin^2 \theta \cos^2 \phi, \quad (2.11)$$

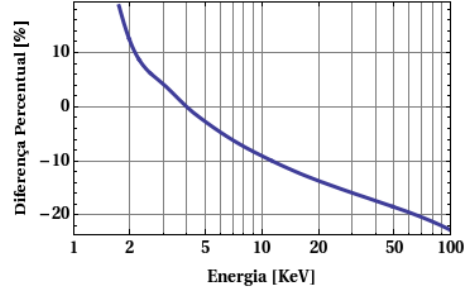
e é mostrada na Figura 2.5.

A Figura 2.6a compara os valores obtidos pela Equação 2.9 com a seção de choque obtida à partir do cálculo dos *phase-shift* de um potencial central e um modelo atômico de Hartree-Slater e fornecidos pelo programa *XCOM*³ [Berger et al., 1998]. Observa-se na Figura 2.6b um discordância de até 10% entre os modelos, principalmente em regiões muito próximas ou muito distantes

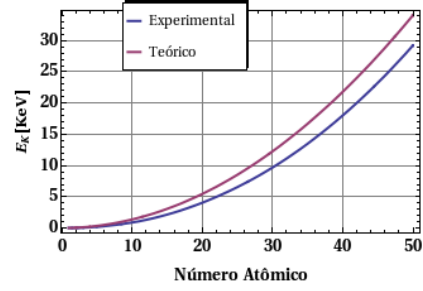
³Mais detalhes quanto os modelos utilizados pelo programa em <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/Text/chap2.html>



(a)



(b)



(c)

Figura 2.6: (a) Equação 2.9 sobreposta aos dados fornecidos pelo programa *XCOM* [Berger et al., 1998]. (b) Diferença percentual entre esses valores. (c) Comparação da Equação 2.12 com dados de [Thompson and Vaughan, 2001]. O ajuste de uma função da forma $E_K \propto Z^2$ aos dados experimentais fornece uma relação de $E_K = 11,468 \cdot Z^2$

da borda. Dessa forma que o uso dessas formulas deve-se restringir à regiões pouco distantes da borda.

A energia de ligação para os elétrons da camada K , considerando o modelo atômico de Bohr, é dado por

$$E_K = \frac{Z^2 mc^2}{2 \cdot 137^2} = 13.613 \cdot Z^2. \quad (2.12)$$

Na Figura 2.6c compara-se esse resultado com dados experimentais. Para energias acima e distantes da borda podemos assumir $f(\xi) \approx 1$, de forma que nessa região de energia levamos Eq. 2.12 em 2.9 e obtemos que

$$\sigma_{ab_K} \propto \frac{Z_K^5}{E^{7/2}}. \quad (2.13)$$

2.2 Espalhamento

O espalhamento de fótons por um material é o fenômeno onde um fóton incide sobre uma carga ou distribuição de cargas e deflete sua trajetória, podendo alterar sua energia (*espalhamento inelástico*) ou não (*espalhamento elástico*).

Na faixa de raios-X as fontes espalhadoras serão elétrons livres e elétrons ligados aos núcleos atômicos. Apesar de a princípio qualquer distribuição de carga poder funcionar como fonte espalhadora, a energia e frequência de raios-X causa efeitos ressonantes com os elétrons ligados, motivo pelo qual se concentra o estudo nesse tipo de espalhador.

Apesar da abordagem pela mecânica quântica citada anteriormente, usualmente utiliza-se aproximações e uma abordagem clássica para descrever certas propriedades do espalhamento. Na descrição clássica uma onda eletromagnética oscilante força o movimento de cargas, que por sua vez tornam-se fontes de radiação similares à dipolos oscilantes (antenas). As ondas incidentes são tratadas como ondas eletromagnéticas harmônicas da forma $\vec{E}_0 = |\vec{E}_0| \exp \left[i(\vec{k}\vec{x} - \omega t) \right] \hat{e}$, onde $\vec{k}$ é o vetor de onda, ω a frequência de oscilação, $\hat{e}$ a direção de polarização. A onda espalhada é uma onda radiante $\vec{E}_{rad}$ que do ponto de vista matemático é tratada como uma onda esférica do formato

$$\vec{E}_{rad}(\vec{r}) = |\vec{E}_{rad}(\Omega)| \frac{e^{ik'r}}{r} \hat{r} \quad (2.14)$$

sendo $|\vec{E}_{rad}|$ a amplitude e k' o módulo do vetor de onda da onda esférica espalhada. r é a distância entre o espalhador e o ponto de observação.

Apesar de ser uma onda esférica, a onda espalhada não será isotrópica e terá a dependência angular dada por $\vec{E}_{rad}(\Omega)$. Em geral escreve-se a amplitude $\vec{E}_{rad}(\Omega)$ normalizada pela amplitude do campo elétrico incidente E_0 por $f(\Omega)$:

$$f(\Omega) = \frac{|\vec{E}_{rad}(\Omega)|}{|\vec{E}_0|}. \quad (2.15)$$

onde $f(\Omega)$ é chamado de *amplitude de espalhamento*.

Quanto à seção de choque, define-se uma *seção de choque diferencial* $\frac{d\sigma_{esp}(\Omega)}{d\Omega}$ em função do ângulo de espalhamento. Para cada ângulo de espalhamento pode-se pensar que há uma parte da seção de choque $d\sigma_{esp}$ que interage com a onda, tal que a seção de choque total σ_{esp} é a soma das frações $d\sigma_{esp}$

$$\sigma_{esp} = \int d\sigma_{esp}. \quad (2.16)$$

Assim a intensidade (energia por unidade de área) da onda espalhada pela área $d\sigma_{esp}$ será igual à intensidade que atravessou uma área angular $dA = r \sin \theta d\theta \cdot r d\phi = r^2 d\Omega$ à uma distância r do espalhador. Utilizando agora o princípio de conservação de energia temos que [Jackson, 1997]

$$I_0 d\sigma_{esp} = I_{rad} r^2 d\Omega \quad (2.17)$$

$$\frac{d\sigma_{esp}}{d\Omega} = r^2 \frac{I_{rad}}{I_0}. \quad (2.18)$$

Uma vez que a intensidade é proporcional ao módulo quadrado do campo elétrico, temos que

$$\frac{d\sigma_{esp}}{d\Omega} = r^2 \frac{|\vec{E}_{rad}(\vec{r})|^2}{|\vec{E}_0|^2}$$

que pela definição de amplitude de espalhamento (Eq. 2.15) e pela Eq. 2.14), levam à

$$\boxed{\frac{d\sigma_{esp}}{d\Omega} = |f(\Omega)|^2}, \quad (2.19)$$

ou seja, a seção de choque diferencial é igual ao módulo quadrado da amplitude de espalhamento. Assim, para obter a seção de choque de espalhamento deve-se calcular a função da amplitude da radiação espalhada.

Nos próximos capítulo faremos uma descrição clássica do modelo de espalhamento a fim de obter a seção de choque diferencial de cada tipo de espalhamento e entender as propriedades da radiação espalhada.

2.2.1 Espalhamento Elástico

O estudo da distribuição de cargas na matéria deve considerar que os elétrons estão ligados por um potencial Coulombiano gerado pelo núcleo. Dependendo da energia da ligação e da energia da radiação incidente, os elétrons podem ser considerados como livres. O espalhamento de radiação eletromagnética por um elétron livre, descrito classicamente, é conhecida por *espalhamento Thomson*.

Para energias próximas à energia de ligação ocorrem efeitos ressonantes devido à ligação entre as cargas e o núcleo atômico, e um modelo para a ligação

entre os elétrons e o átomo faz-se necessário. O modelo clássico de espalhamento por cargas ligadas é usado para descrever o espalhamento de luz visível pela *lei de Rayleigh*, sendo o espalhamento de radiação eletromagnética por cargas ligadas usualmente chamado de *espalhamento Rayleigh*.

À seguir descreve-se os dois modelos de espalhamentos, o de espalhamento por elétrons livres e por elétrons ligados.

Elétrons Livres - *Espalhamento Thomson*

Um elétron livre sujeito ao campo elétrico de uma onda eletromagnética sentirá uma força Coulombiana tal que

$$\vec{F} = e\vec{E} = eE_0 \exp(i\omega t) \hat{e} \quad (2.20)$$

onde a dependência espacial foi ignorada pois consideramos que a amplitude de oscilação do elétron é pequena em comparação com o comprimento de onda do campo oscilante [Jackson, 1997].

Como visto no Cap. 1.2.2, uma carga acelerada emite radiação de acordo com a Equação 1.9. Trabalhando no regime não relativístico, pode-se utilizar Eq. 1.10 sendo necessário fornecer apenas a aceleração $\vec{\beta} = \frac{1}{c} \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2}$ da carga, o que é obtido da Eq. 2.20. Assim, obtendo $\vec{\beta}$ de Eq. 2.20 e levando em Eq. 1.9 obtemos que o campo elétrico irradiado é dado por

$$\vec{E}_{rad} = \frac{r_0}{r} E_0 \exp(i\omega t) \sin \vartheta \quad (2.21)$$

onde $r_0 = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \right)$ é o chamado raio clássico do elétron e ϑ o ângulo entre o vetor de polarização e o de observação (Fig. 2.7a). Usando agora a definição de amplitude de espalhamento em Eq. 2.15, temos que a amplitude de espalhamento Thomson $f_T(\Omega)$ será dada por

$$\boxed{f_T(\Omega) = r_0 \sin \vartheta}, \quad (2.22)$$

que levado à Eq. 2.19 produz a expressão para a seção de choque diferencial do espalhamento Thomson

$$\boxed{\frac{d\sigma_T}{d\Omega} = r_0^2 \sin^2 \vartheta}, \quad (2.23)$$

cuja distribuição angular é mostrada na Fig. 2.7b.

Por fim, integrado em todas as direções chegamos à seção de choque total do espalhamento Thomson:

$$\boxed{\sigma_T = \frac{8\pi}{3} r_0^2}. \quad (2.24)$$

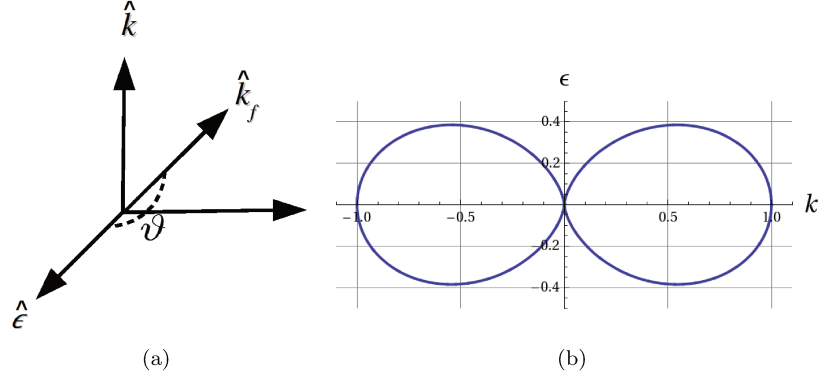


Figura 2.7: (a) Orientação dos vetores e definição do ângulo ϑ no espalhamento elástico, onde $\hat{k}$ é a direção de propagação e $\hat{\epsilon}$ é o versor de polarização da onda eletromagnética. (b) Gráfico polar mostrando a distribuição angular da intensidade relativa emitida pelo espalhamento Thomson.

Elétrons Ligados - *Espalhamento Rayleigh*

A descrição do espalhamento elástico por elétrons ligados parte de um modelo para a interação entre o núcleo e as cargas que permita calcular o campo elétrico irradiado pelo centro espalhador.

Utiliza-se então uma descrição deste potencial como o potencial de um oscilador harmônico amortecido que sofre ação de uma força externa (problema do oscilador harmônico amortecido forçado). A força externa que atua sobre o sistema será a força elétrica harmônica, como a descrita por Eq.2.20 [Jackson, 1997], da radiação eletromagnética incidente sobre os elétrons ligados. A dinâmica de oscilação de elétron será descrita por

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \tau \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{eE_0}{m} \exp(i\omega t), \quad (2.25)$$

onde x é a posição do elétron na direção de oscilação, ω_0 a frequência natural de oscilação (onde $\hbar\omega_0$ é a energia de ligação atômica do elétron), τ a constante de amortecimento, e ω a frequência da onda incidente.

Verifica-se em Eq. 2.25 que o termo à esquerda é a equação dinâmica de um oscilador harmônico amortecido, onde a constante de amortecimento τ e a frequência natural do sistema ω_0 se relacionam ao potencial que liga o elétron ao átomo. Quanto ao termo da direita, ele diz respeito à radiação incidente, onde E_0 é a intensidade e ω a frequência angular da radiação incidente.

A solução da Eq. 2.25 é uma função harmônica dada por:

$$x(t) = |x_0| \exp[i(\omega t + \delta)] \quad (2.26)$$

onde

$$x_0 = \left(\frac{eE_0}{m} \right) \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2 - i\omega\tau}$$

$$\delta = \pi + \arctan \left(\frac{\omega\tau}{\omega^2 - \omega_0^2} \right).$$

Analogamente ao caso do espalhamento pelo elétron livre, calcula-se o valor de $\vec{\beta}$ derivando Eq. 2.26 e utiliza-se a equação de Larmor (Eq. 1.10) para o campo elétrico irradiado por carga acelerada, obtendo a distribuição angular da amplitude de espalhamento de um elétron ligado dado por

$$f_R(\Omega, \omega) = r_0 \sin \vartheta \frac{\omega^2}{\sqrt{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\tau)^2}} \exp(i\delta), \quad (2.27)$$

que, levado à Eq.2.19, produz a expressão para a seção de choque diferencial:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = r_0^2 \sin^2 \vartheta \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\tau)^2}. \quad (2.28)$$

Integrando em todas as direções do espaço chegamos à seção de choque para o espalhamento Rayleigh em função da seção de choque do espalhamento Thomson σ_T (Eq. 2.24)

$$\sigma_R = \sigma_T \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\tau)^2}. \quad (2.29)$$

A Fig. 2.8 mostra o comportamento da função para um caso de múltiplo elétrons ligados.

O modelo de elétron ligado por um potencial do tipo oscilador harmônico amortecido é uma simplificação da interação entre os elétrons e o núcleo de um átomo. Porém esse modelo mostra propriedades do espalhamento por uma carga ligada: observando a função $f_R(\Omega, \omega)$ temos que a amplitude de espalhamento irá depender da energia da radiação eletromagnética incidente e haverá uma mudança de fase da radiação com um aumento de δ , que por sua vez também depende da energia. Esse comportamento se estende à seção de choque diferencial e total. Além disso, na frequência natural do sistema ω_0 o sistema têm um efeito ressonante, motivo pelo qual denomina-se o espalhamento nessa faixa de frequências de *espalhamento ressonante*⁴ e ω_0 de *frequência de ressonância*.

Tomando os valores limites desse modelo obtemos correspondência com resultados conhecidos. No limite em que a frequência da onda eletromagnética, e consequentemente de oscilação do elétron, é muito maior que a frequência de ligação tal que $\omega \gg \omega_0$, o elétron se comporta como se estivesse livre e o fator de espalhamento Rayleigh (Eq. 2.27) se reduz ao fator de espalhamento Thomson

⁴Também conhecido como *espalhamento anômalo*.

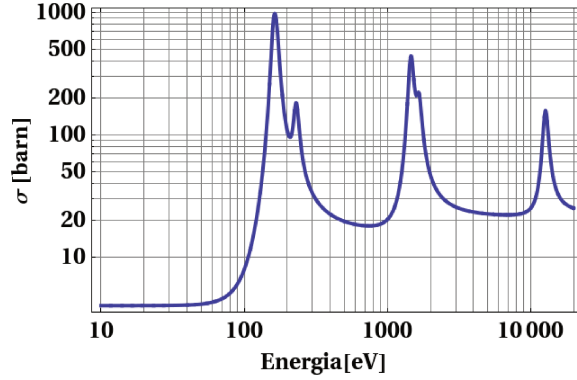


Figura 2.8: Seção de choque calculada para um átomo de Selênio à partir de Eq. 2.29 com $\tau = 0.1\omega_0$ e energias de ligação dos elétrons de $E_K = 12658\text{eV}$, $E_{Ls} = 1652\text{eV}$, $E_{Lp} = 1455\text{eV}$, $E_{Ms} = 229.6\text{eV}$, $E_{Mp} = 166.5\text{eV}$ e $E_{Md} = 160.7\text{eV}$.

(Eq. 2.22), assim como a seção de choque Rayleigh se reduz à seção de choque Thomson ($\sigma_R = \sigma_T$) em Eq. 2.29.

No limite oposto de elétron fortemente ligado, temos que $\omega \ll \omega_0$ e obtemos que a seção de choque é proporcional à $\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4$, resultado conhecido classicamente como *lei de Rayleigh*⁵.

Manipulando algebricamente a função de espalhamento atômico Rayleigh da Eq. 2.27 podemos escrever $f_R(\Omega, \omega)$ em termos da função de espalhamento atômico Thomson $f_T(\Omega)$ como

$$\boxed{f_R(\Omega, \omega) = f_T(\Omega) [1 + f'(\omega) + i f''(\omega)]} \quad (2.30)$$

sendo as funções reais $f'(\omega)$ e $f''(\omega)$ dadas por

$$f'(\omega) = -\frac{\omega_0^2(\omega_0^2 - \omega^2) + (\omega\tau)^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\tau)^2} \quad (2.31)$$

$$f''(\omega) = \frac{-\omega^3\tau}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\tau)^2} \quad (2.32)$$

Para a faixa de energia de interesse, ou seja, para raios-X duros, os valores de ω são da ordem de 10^{19}s^{-1} , enquanto que os valores de τ são em geral muito inferiores às frequências de ligação nos dielétricos e da ordem de 10^{13}s para os metais [Jackson, 1997]. Sendo assim, a função f'' longe das frequências de ressonância ω_0 será muito próxima de zero. Seu valor só será relevante para

⁵Apesar de a lei de Rayleigh se aplicar para o limite $\omega \ll \omega_0$, usualmente utiliza-se o nome *espalhamento Rayleigh* para elétrons ligados em geral.

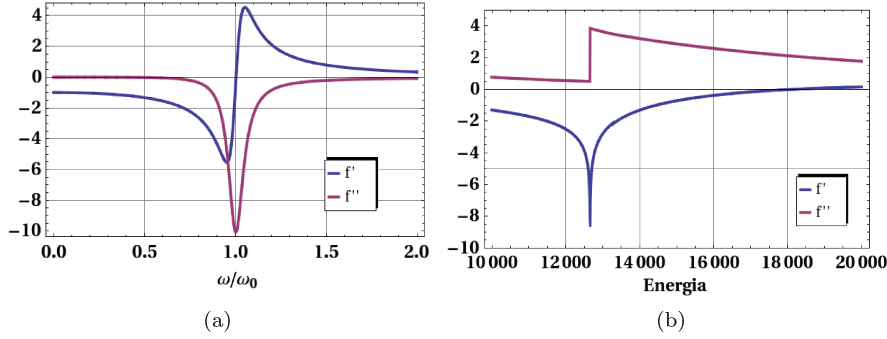


Figura 2.9: (a) Valores teóricos de $f'(\omega)$ e $f''(\omega)$ obtidos pelas Eq. 2.31 e 2.32 com $\tau = .1\omega_0$ (b) Valores de $f'(\omega)$ e $f''(\omega)$ do Selênio obtidos pelo software *Hephaestus* (<http://cars9.uchicago.edu/~ravel/software/abouthephaestus.html>).

valores próximos da ressonância, fazendo com que $f_R(\Omega, \omega)$ seja essencialmente real para uma grande faixa de frequências.

Com a mesma aproximação de que $\tau \ll \omega_0$, observa-se que a função f' assume valores negativos menores que -1 para valores de $\omega < \omega_0$ e que $f' \rightarrow -1$ quando $\omega \rightarrow 0$.

Na situação em que $\omega > \omega_0$, os valores de f' são maiores que 0 e $f' \rightarrow 0$ quando $\omega \rightarrow \infty$. Quando $\omega \rightarrow \omega_0$ a função começa a divergir e o valor de τ se torna relevante.

Sendo assim, para energias da radiação menores que a de ressonância, um elétron ligado sempre espalhará menos radiação do que um elétron livre (espalhamento Thomson). Porém, para valores acima da frequência de ressonância um elétron ligado irá emitir mais radiação do que um livre.

Considerando um átomo com elétrons ligados de formas diferentes (diferentes camadas eletrônicas), temos que o fator de espalhamento atômico será dado por:

$$f_R(\Omega, \omega) = f_T(\Omega) \sum_j Z_j [1 + f'_j(\omega) + i f''_j(\omega)] \quad (2.33)$$

onde Z_j é o número de elétrons ligados pela forma j com frequência de oscilação ω_j e tempo de amortecimento τ_j . As funções $f'(\omega)$ e $f''(\omega)$ são tais que $\omega_0 = \omega_j$ e $\tau = \tau_j$.

Porém este estudo do espalhamento Rayleigh fornece resultados numéricos imprecisos quando comparados com os valores experimentais. Na verdade o resultado mais relevante deste modelo de elétron ligado por um potencial harmônico amortecido é a capacidade de prever a presença das divergências em frequências específicas, as frequências de ressonância. Dessa forma, esse modelo para o espalhamento Rayleigh deve ser usado de forma qualitativa, e não quantitativa.

Do ponto de vista prático, para se obter os valores de $f'_j(\omega)$ e $f''_j(\omega)$, muito

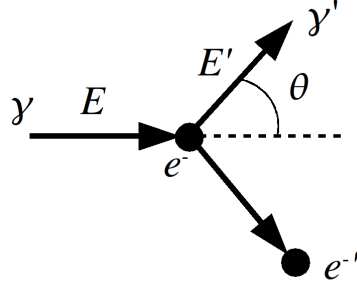


Figura 2.10: Ilustração do espalhamento Compton na visão corpuscular dos fótons. Um fóton γ com energia E colide com um elétron e^- , transferindo parte do momento linear. O fóton é então espalhado com energia E' em uma direção θ . Os rótulos com linha se referem ao fóton e elétron espalhados.

úteis em diversas aplicação de interação radiação matéria, se utiliza de um teorema chamado *Teorema Óptico*[Sakurai, 1994], que relaciona $f_j''(\omega)$ com a seção de choque total por

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} f''(\omega). \quad (2.34)$$

Quanto à $f_j'(\omega)$, ele é determinado à partir de uma transformação integral que o relaciona com $f_j''(\omega)$ chamada de *Transformações de Kramers-Kronig* e dado por[Sakurai, 1994]

$$f'(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{f''(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (2.35)$$

$$f''(\omega) = -\frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{1 + f'(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (2.36)$$

onde $\mathcal{P}$ é o chamado *valor principal* da integral [Arfken and Weber, 2005].

2.2.2 Espalhamento Inelástico

Os espalhamento Thomson e Rayleigh assumem que a energia do fóton não sofre alteração durante o processo. Essa aproximação é particularmente boa quando a energia de um fóton é muito menor que a energia de repouso e a energia de ligação do elétron.

Porém, quando a energia do fóton se torna maior que a de ligação e comparável à energia de repouso do elétron (511KeV, [Amsler, 2008]), parte da energia do fóton é transferida para o elétron e a energia do fóton espalhado é

menor que a do fóton incidente. À esse tipo de processo denomina-se *Espalhamento Compton* [Jackson, 1997].

A descrição teórica desse tipo de espalhamento utiliza-se do conceito quântico de que a radiação eletromagnética é composta de partículas sem massa com energia e momento $\hbar\omega$ e $\frac{\hbar\omega}{c}$ (*teoria corpuscular da radiação eletromagnética*). Porém, alguns resultados podem ser obtidos por cinemática relativística, como a energia E' dos fótons espalhados que é extraído da cinemática da colisão de duas partículas relativísticas, produzindo [Als-Nielsen and McMorrow, 2001]

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{mc^2}(1 - \cos \theta)}, \quad (2.37)$$

onde o ângulo θ é mostrado na Fig. 2.10. O comportamento de E' em função do ângulo e para algumas energias são plotados na Fig. 2.11a.

A dedução da seção de choque do espalhamento Compton é feita por uma descrição quântica e é expressa pela equação de *Klein-Nishina* [Heitler, 1954]

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} = \frac{1}{2}\alpha^2 r_c^2 \left(\frac{E'}{E}\right)^2 \left[\left(\frac{E'}{E}\right) + \left(\frac{E'}{E}\right)^{-1} - 1 + \cos^2(\theta) \right], \quad (2.38)$$

onde α é a constante de estrutura fina, θ é o ângulo de espalhamento; $r_c = \hbar/m_e c$ é definido como o *raio de Compton* e m_e é a massa do elétron. A figura 2.11b mostra que para a faixa de energias de raios-X a distribuição angular é isotrópica.

A equação de Klein-Nishina é usada principalmente para radiação gama (fótons com energia superior à 100KeV), cuja faixa de energia permite considerar os elétrons da maioria dos elementos como elétrons livres. Porém, há muitos elementos cujo elétrons (principalmente os da borda K) têm energia de ligação na faixa de raios-X duros. Isso faz com que seja necessário uma correção para elétrons ligados, dada pela função de espalhamento incoerente $S(q, Z)$ [Kane, 2006] de forma que a seção de choque diferencial para o espalhamento Compton é dado por:

$$\boxed{\frac{d\sigma_{inel}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} S(q, Z)}. \quad (2.39)$$

A função $S(\vec{K}, Z)$ em sua forma analítica depende da energia da radiação incidente e da função de onda do elétron espalhado antes e depois da interação Compton [Kane, 2006]. Porém, do ponto de vista prático, utiliza-se valores tabelados para S em função do fóton espalhado e do número atômico Z do átomo espalhador [Chantler, 2000]. Valores tabelados da função S podem ser obtidos em [Wilson, 1995, Tabela 7.4.3.2].

Para a seção de choque total é necessário fazer a integração espacial da função S . Por utilizar tabelas, deve-se utilizar um método numérico para tanto. Em geral utiliza-se programas computacionais como *XCOM* [Berger et al., 1998] que possui um grande banco de dados para várias interações de diversos elementos isolados. A Figura 2.11d mostra a seção de choque total fornecida por

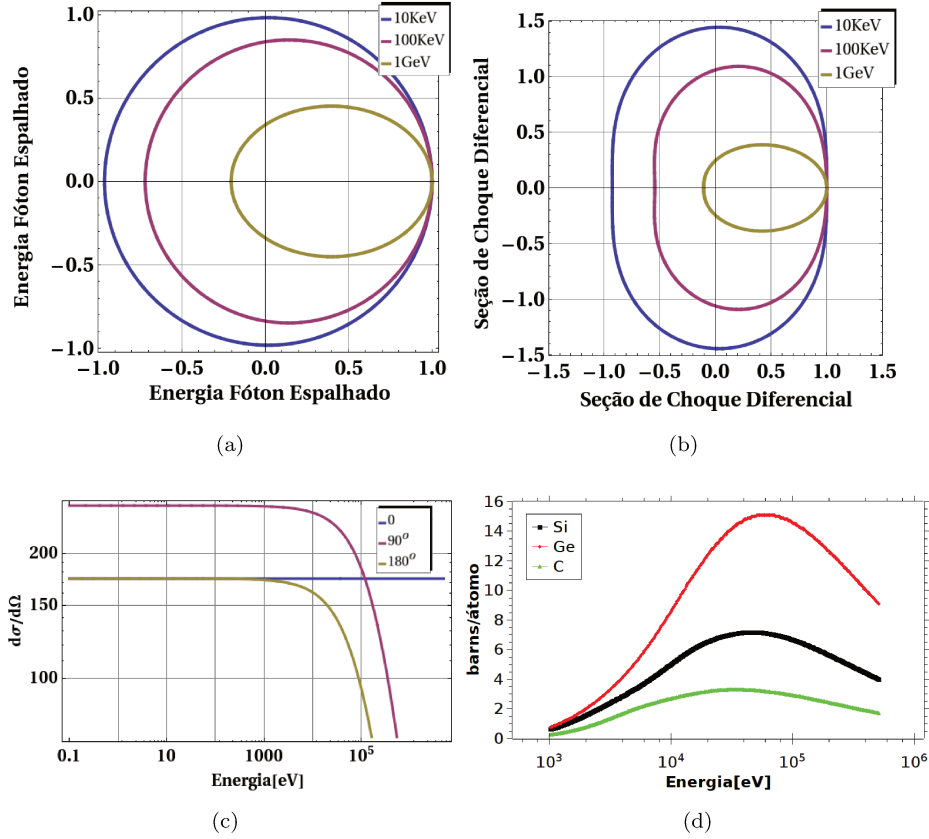


Figura 2.11: (a) Gráfico polar da energia dos fótons espalhados no espalhamento Compton em função da direção de espalhamento (ângulo θ na Figura 2.10), normalizados pela energia do fóton incidente. (b) Gráfico polar da seção de choque diferencial para as energias 10KeV, 100KeV e 1GeV, normalizado pela intensidades espalhada à 0deg. (c) Seção de choque diferencial do espalhamento Compton em função da energia do fóton incidente para os ângulo de espalhamento de 0, 90° e 180°. (d) Valores da seção de choque total para o espalhamento Compton para o Silício, o Germânio e o Carbono obtidos pelo programa *XCOM*.

este programa. No caso do espalhamento Compton, os dados utilizados são os fornecidos em [Hubbell and Overbo, 1979].

2.2.3 Distribuição de cargas

Se pensarmos agora no efeito de uma distribuição de cargas espalhando radiação de forma elástica pelo espalhamento Rayleigh, devemos levar em conta o efeito de interferência entre as ondas espalhadas.

Tratando uma distribuição de cargas centrado em O de acordo com figura 2.12, onde cada elétron j tem posição dada pelo vetor $\vec{r}_j$, temos que uma onda representada pelo vetor de onda $\vec{k}_0$ espalhada por um elétron percorre a distância $X_1 + X_2$.

Considerando os centros espalhadores muito distantes do ponto de observação tal que $R \gg X_1$, vamos aproximar que toda radiação espalhada tem o mesmo vetor de onda $\vec{k}$, sendo o módulo do vetor o mesmo da onda incidente (espalhamento elástico). Além disso, vamos considerar que todos os centros espalhadores estão à mesma distância X_2 tal que $X_2 \rightarrow R$.

Assim, tomando como t o momento em que a frente de onda passa pelo ponto O , temos que o campo sentido no ponto P devido à radiação espalhada por um elétron em $\vec{r}_j$ será dada por:

$$E_P = E_0 \frac{f_R(\Omega, \omega)}{X_2} \exp[\omega(t - t_{12})]. \quad (2.40)$$

onde $f_R(\Omega, \omega)$ é amplitude de espalhamento Rayleigh e o tempo t_{12} que a onda levará para caminhar a distância $X_1 + X_2$ será de $\frac{X_1 + X_2}{c}$, de forma que obtém-se que o campo elétrico em P será de:

$$E_P = E_0 \frac{f_R(\Omega, \omega)}{X_2} \exp \left[i\omega \left(t - \frac{X_1 + X_2}{c} \right) \right]. \quad (2.41)$$

O valor de X_1 é dado pela projeção do vetor $\vec{r}_j$ na direção de $\vec{k}_0$ e a distância R pode ser escrita como a projeção do vetor $\vec{r}_j + \vec{X}_2$ sobre a direção da onda espalhada $\vec{k}$:

$$X_1 = \vec{r}_j \cdot \hat{k}_0 \quad (2.42)$$

$$R = (\vec{X}_2 + \vec{r}_j) \cdot \hat{k} \quad (2.43)$$

Vamos considerar que o vetor $\vec{X}_2$ está em uma direção muito próxima da direção de $\vec{k}$ tal que $\vec{X}_2 \hat{k} \approx X_2$, produzindo

$$X_1 + X_2 \approx \vec{r}_j \cdot \hat{k}_0 + R - \vec{r}_j \cdot \hat{k} = R - \vec{r}_j \cdot (\hat{k} - \hat{k}_0). \quad (2.44)$$

Levando Eq. 2.44 em Eq. 2.41, e lembrando que $|\vec{k}| = \frac{\omega}{c}$, temos

$$r_0 E_i = E_0 \frac{f_R(\Omega, \omega)}{R} \exp \left\{ i \left[\omega t - R|\vec{k}| + \vec{r}_j \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) \right] \right\}. \quad (2.45)$$

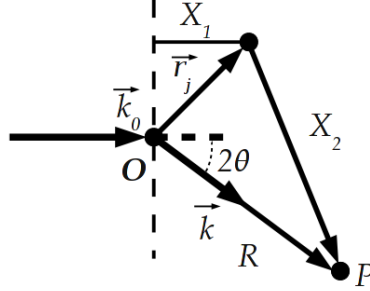


Figura 2.12: Sistema de coordenada utilizado para o cálculo da distribuição angular de intensidade. A partícula está momentaneamente na origem com velocidade na direção $\hat{z}$ e aceleração na direção $\hat{x}$

Logo, o campo observado no ponto P será a soma do campo elétrico gerado pelos N elétrons que constituem o material, escrito matematicamente por

$$E_P = \sum_j^N E_i = E_0 \frac{f_R(\Omega, \omega)}{R} \exp \left[i(\omega t - R|\vec{k}|) \right] \sum_j^N \exp \left[i\vec{r}_j \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) \right]. \quad (2.46)$$

Pela definição de amplitude espalhamento do Capítulo 2.2, comparando Eq. 2.12 com Eq. 2.15 percebe-se que para distribuições discretas de cargas a amplitude de espalhamento será dada por

$$f(\vec{s}) = \sum_{j=1}^N f_j(\Omega, \omega) \exp(-2\pi i \vec{r}_j \cdot \vec{s}), \quad (2.47)$$

onde o vetor $\vec{s}$ é conhecido por *vetor de transferência de momento* e dado por

$$\vec{s} = \frac{\vec{k}_0 - \vec{k}}{2\pi}. \quad (2.48)$$

Definindo o ângulo entre a onda espalhada e a onda incidente por 2θ (Fig. 2.12), por trigonometria obtemos que o módulo do vetor $\vec{s}$ é dado por

$$|\vec{s}| = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}. \quad (2.49)$$

A função $f(\vec{s})$ para a situação física descrita é conhecida como *fator de espalhamento*, que pela definição da Eq. 2.47 é matematicamente o mesmo que a transformada de Fourier da densidade de elétrons.

2.3 Difração

A difração de raios-X é consequência da combinação de dois fenômenos: espalhamento de radiação pelos átomos e interferência construtiva dessa radiação espalhada [Guinier, 1963]. A interferência ocorre uma vez que a onda espalhada tem uma fase bem determinada em relação à onda incidente.

A interferência entre centros espalhadores separados no espaço têm como consequência regiões no espaço onde a presença de radiação espalhada será privilegiada, a exemplo do experimento de difração de dupla fenda (*experimento de Young* [Fowles, 1975]) onde a interferência entre a radiação que atravessa as fendas gera máximos e mínimos de intensidades em determinadas posições de um anteparo.

Há duas teorias que descrevem a difração de radiação eletromagnética por cristais [Authier, 2006]. A mais simples é chamada *teoria cinemática da difração*⁶ e trata de cristais com um grande número de átomos, mas com tamanho pequeno suficiente para ignorar a absorção da radiação e para considerar que todos os átomos recebem a mesma intensidade de radiação. Como a densidade típica de um material é da ordem de 1 átomo/Å, um cristal de dimensão da ordem de micrômetro satisfaz essas condições.

Quando as dimensões de um cristal são grandes, a absorção da radiação no interior do cristal se torna relevante e é preciso uma teoria mais elaborada, chamada de *teoria dinâmica da difração*, descrita ao final da seção.

Cristais

Para fazer um modelo da difração por cristais é necessário descrever o cristal matematicamente. Um cristal ideal é construído por uma repetição infinita e periódica de unidades estruturais idênticas no espaço, sendo essas unidades compostas por estruturas de átomos ou moléculas [Kittel, 1996]. Essas unidades estruturais são denominadas *base do cristal*.

A característica de repetição infinita do cristal é descrita em termos de uma *rede*, sendo que à cada ponto da rede é fixado uma estrutura igual à estrutura da base do cristal. Uma rede é descrita pelos *vetores da rede* $\vec{R}^m$ tal que

$$\vec{R}^m = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 \quad (2.50)$$

$$\vec{R}^m = \sum_{j=1}^3 m_j \vec{a}_j \quad (2.51)$$

onde os números m_j são números inteiros arbitrários e os vetores $\vec{a}_j$ são um conjunto de vetores linearmente independentes chamados de *eixos do cristal*⁷. O paralelepípedo cujas arestas são definidas pelos eixos do cristal é o menor volume cuja repetição forma um cristal e é denominado *célula primitiva* ou *célula unitária*.

⁶Também chamada *teoria geométrica da difração*.

⁷Outras nomenclaturas encontradas na literatura são *vetores primitivos* ou *vetores da base*

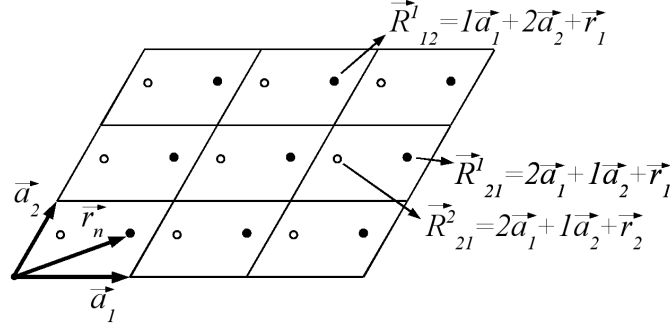


Figura 2.13: Aplicação em duas dimensões da Eq. 2.52 como rótulo da posição de um átomo em um cristal, mostrando a utilização dos índices m^j e n .

Assumindo que cada célula unitária seja constituída de N átomos, a posição de um átomo $\vec{r}_n$, $0 < n \leq N$ na rede é tomado em relação ao vetores da rede de forma que a posição de qualquer átomo pode ser dada por $\vec{R}_n^m$ tal que [Warren, 1990]

$$\boxed{\vec{R}_m^n = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 + \vec{r}_n}. \quad (2.52)$$

A Fig. 2.13 mostra a aplicação da Eq. 2.52 para identificar a posição de um átomo na rede.

2.3.1 Teoria Cinemática

Estuda-se a difração de radiação por um cristal à partir do *fator de espalhamento estrutural* $F(\vec{s})$ do cristal, que de acordo com Eq. 2.47 será dada por

$$\begin{aligned} F_{xtal}(\vec{s}) &= \sum_j^N f_{R_n}(\Omega, \omega) \exp\left(-2\pi i \vec{R}_m^n \cdot \vec{s}\right) \\ &= \sum_{n, m_1, m_2, m_3} f_n(\Omega, \omega) \exp\left[-2\pi i (m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 + \vec{r}_n) \cdot \vec{s}\right]. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Considerando um cristal finito em forma de um paralelepípedo de dimensões $N_1 \vec{a}_1 \cdot N_1 \vec{a}_1 \cdot N_2 \vec{a}_3$ temos que

$$\begin{aligned}
F_{xtal}(\vec{s}) = & \sum_{m_1=-\frac{N_1}{2}}^{\frac{N_1}{2}} \exp(-2\pi i m_1 \vec{a}_1 \cdot \vec{s}) \cdot \sum_{m_2=-\frac{N_2}{2}}^{\frac{N_2}{2}} \exp(-2\pi i m_2 \vec{a}_2 \cdot \vec{s}) \cdot \\
& \cdot \sum_{m_3=-\frac{N_3}{2}}^{\frac{N_3}{2}} \exp(-2\pi i m_3 \vec{a}_3 \cdot \vec{s}) \cdot \underbrace{\sum_{n=1}^N f_{R_n}(\Omega, \omega) \exp(-2\pi i \vec{r}_n \cdot \vec{s})}_{\text{fator de espalhamento da célula unitária}} \quad (2.54)
\end{aligned}$$

A Equação 2.54 tem quatro somatórios onde o último deles depende apenas da distribuição de átomos na célula unitária e os demais dependem apenas da rede. Denomina-se os termos que dependem da rede e da célula unitária respectivamente de fator de estrutura da rede F_{rede} e fator de estrutura da célula unitária F_{un} .

Temos então que o fator de estrutura do cristal é o produto entre os fatores de estrutura da célula unitária e da rede:

$$F_{xtal}(\vec{s}) = F_{un}(\vec{s}) \cdot F_{rede}(\vec{s}) \quad (2.55)$$

tal que

$$\begin{aligned}
F_{rede}(\vec{s}) = & \sum_{m_1=-\frac{N_1}{2}}^{\frac{N_1}{2}} \exp(-2\pi i m_1 \vec{a}_1 \cdot \vec{s}) \cdot \sum_{m_2=-\frac{N_2}{2}}^{\frac{N_2}{2}} \exp(-2\pi i m_2 \vec{a}_2 \cdot \vec{s}) \cdot \\
& \cdot \sum_{m_3=-\frac{N_3}{2}}^{\frac{N_3}{2}} \exp(-2\pi i m_3 \vec{a}_3 \cdot \vec{s}), \quad (2.56)
\end{aligned}$$

$$F_{un}(\vec{s}) = \sum_{n=1}^N f_{R_n}(\Omega, \omega) \exp(-2\pi i \vec{r}_n \cdot \vec{s}). \quad (2.57)$$

À seguir, estudaremos as propriedades de $F_{rede}(\vec{s})$ que definem a chamada *rede recíproca*.

Rede Recíproca

O fator de estrutura de rede $F_{rede}(\vec{s})$ pode ser visto como a transformada de Fourier discreta da rede. Os somatórios de exponenciais podem ser reduzidos para [Guinier, 1963]

$$\sum_{m_j=-\frac{N_j}{2}}^{\frac{N_j}{2}} \exp[-2\pi i m_j (\vec{a}_j \cdot \vec{s})] = \frac{\sin[(N_j + 1)\pi \vec{a}_j \cdot \vec{s}]}{\sin[\pi \vec{a}_j \cdot \vec{s}]}. \quad (2.58)$$

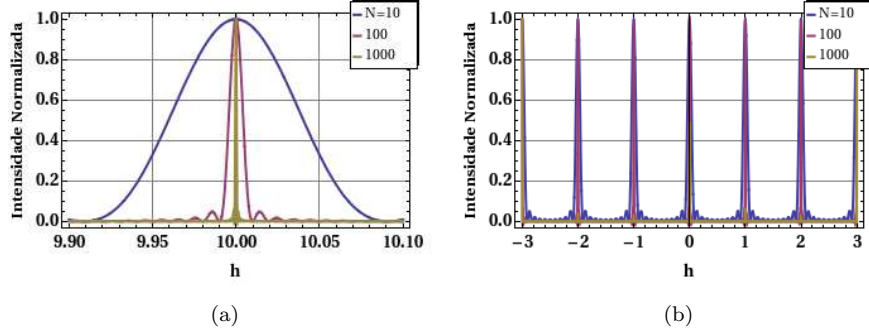


Figura 2.14: (a) e (b) Gráficos da Eq. 2.58 em função de h e para vários valores de N_j , normalizada para os valores de pico multiplicando a função por $(N_j + 1)$. Verifica-se que para valores inteiros de h a função tem picos de valores $N_j + 1$ e largura à meia altura de valor $1/(N_j + 1)$.

Para valores inteiros de $\vec{a}_j \cdot \vec{s}$ a função 2.58 tem picos de valores $N_j + 1$ e largura à meia altura de valor $1/(N_j + 1)$ (Figura 2.14a). Para $N_j \rightarrow \infty$ a função tem comportamento de uma função delta de Dirac da forma $\delta(\vec{a}_j \cdot \vec{s} - h_j)$ para h_j inteiro (Figura 2.14b).

Considerando que essa condição é válida para os três somatórios na Eq. 2.56, então temos que a condição $\vec{a}_j \cdot \vec{s} = h_j$ tem de ser válida simultaneamente para $j = 1, 2, 3$ para que o fator de estrutura do cristal seja diferente de zero. Qualquer valor não-inteiro para h_j faz com que o fator de estrutura seja nulo.

Define-se então um novo vetor $\vec{s}_h$ dada em uma base $\vec{b}_j$ tal que

$$\vec{s}_h = \sum_j h_j \vec{b}_j = \sum_j (\vec{a}_j \cdot \vec{s}) \vec{b}_j \quad (2.59)$$

para a qual o fator de estrutura será não nulo quando o vetor de transferência de momento for igual a ele, ou seja $\vec{s} = \vec{s}_h$. Logo, pela própria definição de base de que $\vec{a}_j \cdot \vec{s}_h = h_j$, temos que

$$\vec{a}_j \cdot \vec{b}_l = \delta_{jl}, \quad (2.60)$$

ou seja, $\vec{a}_j$ será ortogonal a $\vec{b}_l$ se $j \neq l$.

Como $\vec{b}_j$ é ortogonal a $\vec{a}_l$ e $\vec{a}_m$, então a direção $\hat{b}_j$ é dada por

$$\hat{b}_j = \frac{\vec{a}_l \times \vec{a}_m}{|\vec{a}_l| |\vec{a}_m|}. \quad (2.61)$$

Sendo α um ângulo auxiliar entre os vetores $\vec{b}_j$ e $\vec{a}_l$, por Eq. 2.60 temos que

$$\vec{b}_j \cdot \vec{a}_j = |\vec{b}_j| |\vec{a}_j| \cos \alpha = 1 \quad (2.62)$$

$$|\vec{b}_j| = \frac{1}{|\vec{a}_j| \cos \alpha} \quad (2.63)$$

de forma que o vetor $\vec{b}_j = |\vec{b}_j| \hat{b}_j$ fica

$$\vec{b}_j = \frac{\vec{a}_l \times \vec{a}_m}{|\vec{a}_l| |\vec{a}_m| |\vec{a}_j| \cos \alpha}. \quad (2.64)$$

O termo do denominador é análogo ao volume do paralelepípedo formado pelos vetores primitivos da rede que, pela definição de célula unitária, é o volume da célula unitária V_{un} . Escrevendo este termo como o produto triplo dos vetores primitivos chegamos à

$$\vec{b}_j = \frac{\vec{a}_l \times \vec{a}_m}{\vec{a}_j \cdot (\vec{a}_l \times \vec{a}_m)}, \quad (2.65)$$

$$\vec{b}_j = \frac{\vec{a}_l \times \vec{a}_m}{V_{un}}. \quad (2.66)$$

À rede $\vec{R}^m$ (Equação 2.51) com vetores primitivos $\vec{a}_j$ que determina a posição das bases no cristal denomina-se *rede s* e à rede determinada por

$$\vec{S}_h = \sum_j h_j \vec{b}_j \quad (2.67)$$

com vetores primitivos $\vec{b}_j$ dados em função dos vetores da base do cristal e h_j inteiros arbitrários, denomina-se *rede recíproca*. Além disso, a rede recíproca é a transformada de Fourier da rede direta e, pelas propriedades da transformada de Fourier, a rede direta é a transformada de Fourier inversa da rede recíproca.

Logo, os valores de $\vec{s}$ para os quais o fator de espalhamento estrutural difere de zero podem ser descritos por uma rede formada pelo vetor $\vec{s}_h$ cujo vetores primitivos $\vec{b}_j$ são dados em função dos vetores da base do cristal. Em outras palavras, dentre os infinitos valores possíveis do vetor $\vec{s}$, apenas aqueles que coincidirem com um vetor da rede recíproca terá espalhamento não nulo. À essa condição denomina-se *condição de Laue* e matematicamente é expressa por:

$$\vec{s} = \vec{s}_h. \quad (2.68)$$

Quanto à função $F_{rede}(\vec{s})$, dado as propriedades do somatório, para $N \rightarrow \infty$ ela pode então ser escrita como uma série de funções delta de Dirac para cristais:

$$F_{rede}(\vec{s}) = \frac{1}{V_{un}} \sum_{n1=-\infty}^{\infty} \sum_{n2=-\infty}^{\infty} \sum_{n3=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{s} - \vec{s}_h), \quad (2.69)$$

onde o fator $1/V_{un}$ surge de uma normalização da função $F_{rede}(\vec{s})$ ⁸.

Escrevendo a Equação 2.55 com a condição de Laue temos:

$$F_{xtal}(\vec{s}_h) = F_{un}(\vec{s}_h) \sum_{m_1 m_2 m_3} \exp[-2\pi i (m_1 h_1 + m_2 h_2 + m_3 h_3)], \quad (2.70)$$

onde a função $F_{xtal}(\vec{s}_h)$ é conhecida por *fator de estrutura do cristal*.

Índices de Miller

A periodicidade de um cristal permite visualizá-lo como formado por famílias de planos paralelos (como mostrado na Fig. 2.15a) definidos pelas posições de suas unidades estruturais, de forma que é possível descrever a difração de um cristal à partir de determinada família de planos.

Por uma família de planos entende-se um conjunto de planos da rede que seja paralelos e igualmente espaçados, que juntos contêm todos os pontos da rede cristalina de forma que qualquer ponto da rede faz parte de um plano e qualquer plano na rede fará parte de uma família. Porém, como visto na Figura 2.15a, há mais de uma família possível e por isso faz-se necessário uma forma de determinar a orientação de uma família de planos.

Isso é feito utilizando os chamados *índices de Miller* (h, k, l) definidos para determinada família de planos como a posição $\frac{a_i}{h_i}$ do plano mais próximo à origem (mas que não inclua a origem) em que o plano intercepta cada um dos eixos $\vec{a}_i$ da rede (Figura 2.15b)[Ashcroft and Mermin, 1976].

Uma característica do vetor $\vec{s}_h$ da rede recíproca é que ele é normal ao plano que cruza os eixos $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ e $\vec{a}_3$ respectivamente nas posições m_1 , m_2 e m_3 tais que $(m_1, m_2, m_3) \propto (\frac{1}{h_1}, \frac{1}{h_2}, \frac{1}{h_3})$. Essa propriedade de $\vec{s}_h$ pode ser provada fazendo diretamente o produto escalar entre $\vec{s}_h$ e um vetor genérico pertencente ao plano, por exemplo $\frac{\vec{a}_1}{h} - \frac{\vec{a}_2}{k}$:

$$\vec{s}_h \cdot (m_1 \vec{a}_1 - m_2 \vec{a}_2) = \vec{s}_h \cdot \alpha \left(\frac{\vec{a}_1}{h_1} - \frac{\vec{a}_2}{h_2} \right) = \alpha \left(\frac{h_1}{h_1} - \frac{h_2}{h_2} \right) = 0 \quad (2.71)$$

onde utilizou-se a ortogonalidade entre os vetores primitivos $\vec{a}_i$ e $\vec{b}_i$. Pela equação acima temos que quando $h_i = m_i$ para $i = 1, 2$ e 3 o produto escalar será zero, o que significa que o vetor $\vec{s}_h$ será perpendicular ao plano, como queríamos provar.

Sendo assim, usualmente rotula-se esse plano pelos índices de Miller de forma que cada plano hkl têm associado um vetor $\vec{s}_h$ no espaço recíproco. Logo, todo plano tem associado um pico de difração. Se considerarmos ainda a geometria do problema, podemos interpretar que os planos refletem a radiação incidente que satisfaz a condição de Laue.

Além disso, por ser perpendicular ao plano hkl , então a projeção de um vetor entre a origem e um ponto no plano sobre o versor $\hat{s}_{hkl}$ fornece a distância d_{hkl} entre o plano e a origem. Tomando a direção $\vec{a}_3$ como exemplo teremos:

⁸Ver [Guinier, 1963], Seção 4.2.

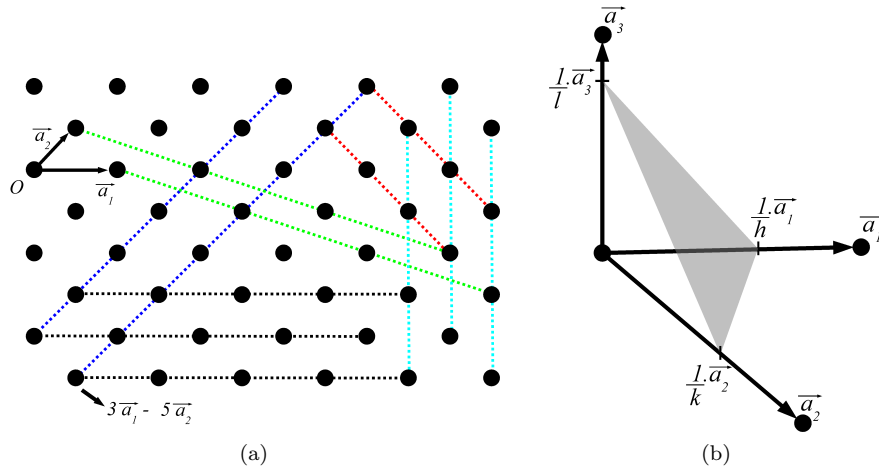


Figura 2.15: (a) Algumas famílias de planos em um cristal de 2 dimensões. Percebe-se que há mais de uma família possível e por isso faz-se necessário uma forma de determinar a orientação de uma família de planos, o que é feito com os índices de Miller (h, k, l) . (b) Ilustração dos índices de Miller: (h, k, l) é definido pela posição $(\frac{a_1}{h}, \frac{a_2}{k}, \frac{a_3}{l})$ do plano mais próximo à origem em que o plano intercepta cada um dos eixos $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ e $\vec{a}_3$ da rede.

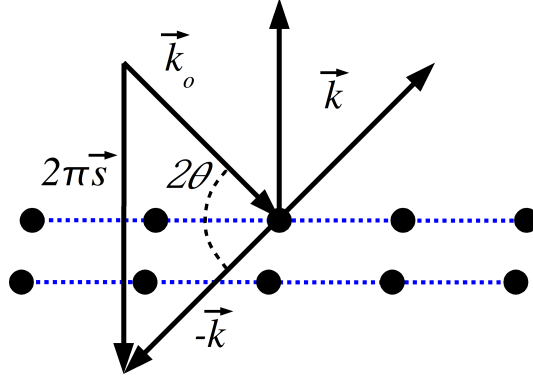


Figura 2.16: Geometria da reflexão por planos hkl e a definição do vetor $\vec{s}$.

$$d_{hkl} = \frac{\vec{s}_{hkl}}{|\vec{s}_{hkl}|} \cdot \frac{\vec{a}_3}{l} = \frac{1}{|\vec{s}_{hkl}|} \frac{h_3}{l} \quad (2.72)$$

$$\boxed{d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{s}_{hkl}|}}. \quad (2.73)$$

Logo, à cada vetor da rede recíproca corresponde uma família de planos hkl do cristal ortogonal ao vetor e tal que seu módulo fornece o espaçamento interplanar.

Lei de Bragg

Alternativamente à teoria cinemática há formulações simplificadas da difração que, apesar de não descrever todas as características do fenômeno, fornecem resultados da teoria cinética e são úteis na análise do fenômeno, como as formulações de Bragg e de Laue.

Manipulando a equação 2.73 chegamos à um resultado derivado por uma formulação alternativa da difração feita por Bragg. Levando 2.73 em 2.49 obtemos que

$$\boxed{\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta} \quad (2.74)$$

sendo λ o comprimento de onda da radiação e θ o ângulo de espalhamento como definido em 2.49. Essa equação é conhecida como *Lei de Bragg* e define a relação entre a onda incidente (λ), a onda espalhada (θ) e a distância interplanar dos planos hkl (d_{hkl}).

Pela formulação de Bragg, a lei de Bragg é obtida considerando que os planos cristalinos teriam a capacidade de refletir parcialmente e de forma especular a

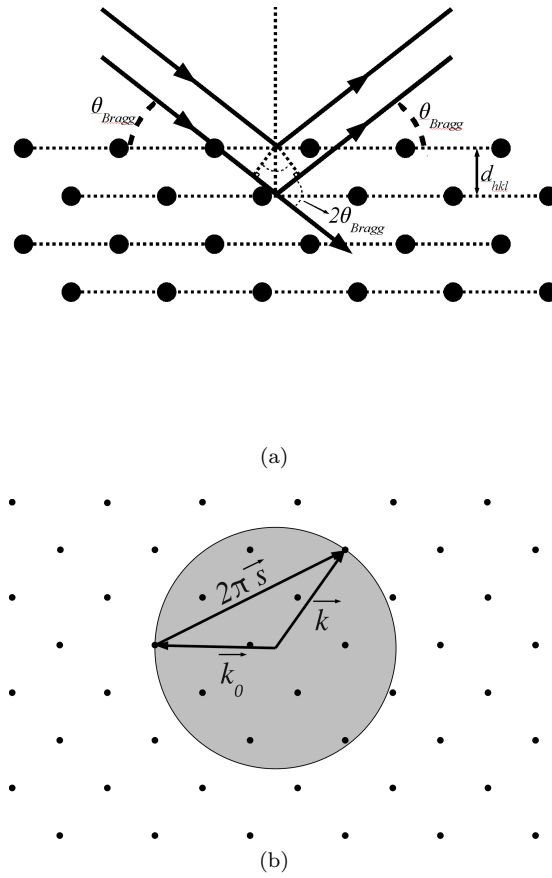


Figura 2.17: (a) Geometria de Bragg: Uma onda com comprimento de onda λ é refletida quando incide um cristal com o ângulo de Bragg dado pela Eq. 2.74. (b) Representação em duas dimensões da esfera de Ewald (uma circunferência neste caso em duas dimensões). Os pontos da rede recíproca que estiverem sobre a esfera irão determinar os vetores da radiação espalhada $\vec{k}$.

radiação incidente. Os picos de difração (*picos de Bragg*) observados seriam consequência da superposição construtiva da radiação refletida pelos vários planos do cristal.

Devido as várias famílias de planos com orientações distintas, diversos picos são observados em diferentes orientações de um mesmo cristal. A figura 2.17a mostra dois raios sendo refletidos especularmente por dois planos sucessivos com mesma orientação. A diferença de caminho percorridos pelos dois raios é de $2d \sin \theta$, sendo o ângulo θ de incidência do feixe em relação ao plano. Para que a interferência seja construtiva devemos ter que a diferença entre os caminhos seja de um número inteiro de comprimentos de ondas $n\lambda$, resultando a relação da Eq. 2.74.

Construção de Ewald

Uma forma de visualizar as condições em que ocorrem os picos de Bragg é a construção geométrica de Ewald. Nela, utiliza-se o espaço recíproco para verificar quais vetores satisfazem a condição de Laue.

Tomando a construção em 2 dimensões como na Figura 2.17b, inicialmente se traça o vetor $\vec{k}_0$ incidindo sobre um ponto da rede recíproca. Constrói-se agora uma circunferência de raio $|\vec{k}|$ com a mesma origem do vetor $\vec{k}_0$. Os pontos da rede recíproca que estiverem sobre a circunferência irão determinar os vetores da radiação espalhada $\vec{k}$.

Tomando a construção em 2 dimensões como na Figura 2.17b, inicialmente se traça o vetor $\vec{k}_0$ à partir de um ponto da rede recíproca. Tomando agora o ponto indicado por esse vetor como origem, constroem-se uma circunferência de raio $|\vec{k}|$. Os pontos da rede recíproca que estiverem sobre a circunferência irão determinar os vetores da radiação espalhada $\vec{k}$.

2.3.2 Teoria Dinâmica

A teoria cinemática considera que a radiação que incide um cristal é espalhada elasticamente (espalhamento Thomson) pelos átomos e a radiação espalhada se soma coerentemente à determinada distância do cristal. Esse modelo descreve satisfatoriamente a difração por cristais pequenos onde a probabilidade da radiação espalhada interagir novamente é pequena e a absorção é desprezível.

Porém, para cristais espessos haverá uma maior quantidade de centros espalhadores e a probabilidade de que a radiação espalhada interaja novamente é não desprezível. Por isso a difração de radiação por um cristal espesso exige uma abordagem específica, dada pela *teoria dinâmica da difração*.

Logicamente a teoria dinâmica não invalida a teoria cinemática e, pelo princípio da correspondência, deve fornecer os mesmos resultados da teoria cinemática quando sujeita às mesmas aproximações. Além disso, apesar de não prever certas propriedades da difração dinâmica, a lei de Bragg fornece resultados precisos, o que faz com que ela seja utilizada mesmo para cristais espessos.

Há basicamente três modelos para a teoria dinâmica da difração formulados independentemente por Darwin, Ewald e von Laue[Authier, 2006]. Darwin des-

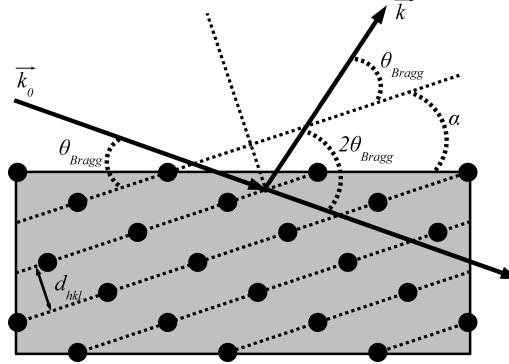


Figura 2.18: Difração por um cristal espesso, mostrando os planos cristalinicos e a orientação em relação à superfície do cristal. Quando os planos cristalinicos estão inclinados por um ângulo α em relação à superfície denomina-se o cristal de *cristal assimétrico*.

creve a interação entre a radiação e matéria usando equações de recorrência para tratar as reflexões e transmissões nos diversos planos cristalinicos. Ele considera que ao encontrar um plano do cristal, parte da radiação será transmitida e parte será refletida, assumindo que a reflexão ocorre na condição de Bragg. Porém, a radiação transmitida por um plano irá encontrar um novo plano da mesma família de planos e novamente poderá ser refletida ou transmitida, uma vez que a condição de Bragg ainda é válida. Quanto à radiação refletida, enquanto se propaga pelo cristal ela também encontra outros planos da mesma família e também terá parte refletida e parte transmitida.

O modelo de Ewald considera o cristal como uma distribuição periódica de dipólos que são excitados pela onda incidente. Esse modelo foi melhorado por von Laue que mostrou que essa abordagem é equivalente à resolver as equações de Maxwell para um meio com uma susceptibilidade elétrica $\chi(\vec{r})$ contínua e periódica.

De acordo com abordagem de von Laue, primeiramente deve-se desprezar qualquer interação entre os fótons e os prótons, bem como interações magnéticas entre os fótons e os momentos magnéticos do átomo. Dessa forma, obtemos a resposta do material ao campo eletromagnético da radiação pela susceptibilidade elétrica $\chi(\vec{r})$, classicamente dado por

$$\chi(\vec{r}) = -\frac{r_o \lambda^2}{\pi} \rho(\vec{r}), \quad (2.75)$$

sendo r_o o raio clássico do elétron, λ o comprimento de onda da radiação e $\rho(\vec{r})$ a densidade volumétrica de elétrons. Como a densidade de cargas de um cristal pode ser escrita como a transformada de Fourier do fator de estrutura (Eq. 2.47), e sendo este último discreto, obtemos que

$$\chi(\vec{r}) = -\frac{r_o \lambda^2}{\pi V} \sum_{hkl} F_{hkl} \exp(2\pi i \vec{s}_{hkl} \cdot \vec{r}) \quad (2.76)$$

$$= \sum_{hkl} \chi_{hkl} \exp(2\pi i \vec{s}_{hkl} \cdot \vec{r}) \quad (2.77)$$

onde V é o volume da célula unitária e χ_{hkl} fica dado por

$$\chi_{hkl} = -\frac{r_o \lambda^2}{\pi V} F_{hkl}. \quad (2.78)$$

A propagação da radiação pelo material é então expressa classicamente pelo vetor deslocamento elétrico $\vec{D}(\vec{r})$, para quem se aplica as relações com os campos eletromagnéticos no material e utiliza-se a equação da onda para obter a equação de propagação[Authier, 2006]:

$$\nabla^2 \vec{D}(\vec{r}) + \nabla \times \nabla \times (\chi(\vec{r}) \vec{D}(\vec{r})) + 4\pi^2 k^2 \vec{D}(\vec{r}) = 0, \quad (2.79)$$

onde k é o módulo do vetor de onda. Por ser uma equação diferencial parcial de segunda ordem com um coeficiente periódico, então a solução para uma onda incidente $\vec{k}_o$ terá a mesma periodicidade do coeficiente $\chi(\vec{r})$ da forma:

$$\vec{D}(\vec{r}) = \exp(-2\pi i \vec{k}_o \cdot \vec{r}) \sum_{hkl} \vec{D}_{hkl} \exp(2\pi i \vec{s}_{hkl} \cdot \vec{r}) \quad (2.80)$$

$$= \sum_{hkl} \vec{D}_{hkl} \exp(2\pi i \vec{k}' \cdot \vec{r}), \quad (2.81)$$

onde se escreveu que $\vec{k}_o - \vec{k}' = \vec{s}_{hkl}$, que é a condição de Laue.

Obter as ondas espalhadas pelo cristal consiste então em determinar os coeficientes complexos $\vec{D}_{hkl}$ utilizando a equação 2.79 e a susceptibilidade do cristal, sendo este último obtida pelo fator de estrutura por Eq. 2.78.

Porém o que se obtém é uma soma infinita em hkl , que por sua vez pode ser escrita como um sistema linear infinito de equações, chamadas de *equações fundamentais* da teoria dinâmica. Elas fornecem que apenas para valores de $\vec{k}$ muito próximos de $\vec{k}'$ é que haverá valores não nulos para os coeficientes $\vec{D}_{hkl}$. Logo, as ondas devem estar na condição de Laue para que elas se propaguem.

Porém os vetores $\vec{k}$ e $\vec{k}_o$ para um material absorvedor serão complexos, enquanto que para um material não absorvedor eles serão reais. Sendo assim, o resultado para material não absorvedor se reduz aos resultados da teoria cinemática da difração (como seria de se esperar), enquanto que para materiais absorvedores temos uma *condição de Laue complexa*.

Pela presença do somatório em hkl , então todos os vetores $\vec{k}$ que respeitam a condição de Laue participam da solução. Pela construção da esfera de Ewald, o somatório é feito sobre todos os pontos da rede recíproca que estão sobre esfera de Ewald.

Para raios-X o que ocorre é que em geral há apenas dois pontos da rede recíproca sobre a esfera de Ewald[Authier, 2006]. Para essa condição denomina-se de *caso de dois feixes*, sendo que o tratamento de difração dinâmica de raios-X se restringem à este caso⁹.

O resultado da teoria dinâmica da difração no caso de dois feixes expressa a intensidade da onda refletida especularmente pelos planos cristalinos em função da radiação incidente. Considera-se uma onda $\vec{k}_o$ incidindo a superfície de um cristal e refletindo em determinado plano cristalino hkl inclinado por um ângulo α , chamado *ângulo de assimetria* com a superfície do cristal (Fig. 2.18). Consideramos a mesma geometria da descrição de Bragg, onde os vetores $\vec{k}$ e $\vec{k}_o$ fazem um ângulo θ com os planos cristalinos.

Devido a complexidade da solução, definem-se alguns parâmetros para simplificar a forma da solução final. Sendo assim, define-se o *parâmetro de desvio* dado por:

$$\eta = \frac{\Delta\theta - \Delta\theta_o}{\delta}, \quad (2.82)$$

onde $\Delta\theta$ é a diferença entre o ângulo do vetor $\vec{k}$ e o ângulo de Bragg e os outros parâmetros são dados por

$$\Delta\theta_o = -\frac{\chi_o(1-\gamma)}{2\sin 2\theta_B} \quad (2.83)$$

$$= \frac{d_{hkl}^2 r_o F_o}{\pi V} \tan \theta_B (1-\gamma),$$

$$\delta = \frac{C\sqrt{|\gamma|\chi_{hkl}\chi_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}}{\sin 2\theta_B} \quad (2.84)$$

$$= \frac{4d_{hkl}^2 r_o C}{\pi V} \tan \theta_B \sqrt{|\gamma|F_{hkl}F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}.$$

onde χ_o é o termo χ_{hkl} em 2.77 para $(hkl) = (000)$, γ é o fator de assimetria dado por

$$\gamma = \frac{\sin(\alpha + \theta_B)}{\sin(\alpha - \theta_B)}, \quad (2.85)$$

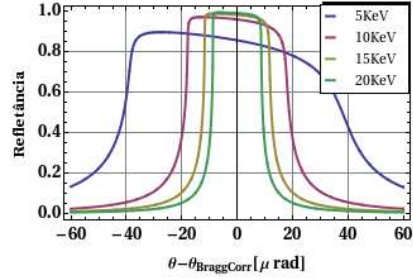
θ_B é o ângulo de Bragg e C é um fator que depende da polarização da radiação, sendo que $C = 1$ para ondas *TE* e $C = \cos 2\theta$ para ondas *TM*¹⁰.

A refletividade I_{hkl} em função do parâmetro de desvio η é dada por:

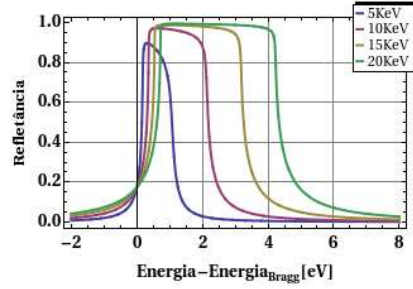
$$I_{hkl} = \left| \frac{F_{hkl}}{F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}} \left| \eta - S[Re(\eta)]\sqrt{\eta^2 - 1} \right|^2 \right| \quad (2.86)$$

⁹Ao casos em que mais de um ponto da rede recíproca estão sobre a esfera de Ewald denomina-se *caso de muitos feixes*. Um exemplo de aplicação é difração dinâmica de elétrons[Authier, 2006].

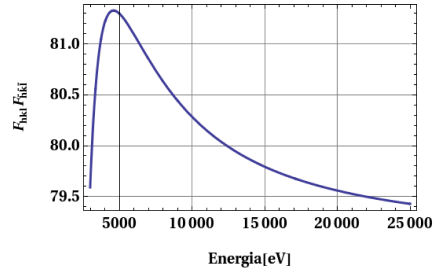
¹⁰Respectivamente chamados de polarização *transversal elétrica (TE)* e *transversal magnética (TM)*. Ondas eletromagnéticas *TE* são aquelas cujo a polarização do campo elétrico está na mesmo plano da interface, enquanto que para ondas *TM* é o campo magnético que está na direção do plano [Fowles, 1975].



(a)



(b)



(c)

Figura 2.19: Refletividade de um cristal espesso calculado pela teoria dinâmica da difração em função (a) do ângulo de incidência e (b) da energia refletida para a reflexão 111 de um cristal de Silício, estrutura de Diamante, ângulo de assimetria de zero graus e constante de polarização igual à 1. (c) Comportamento de $F_{hkl} F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ em função da energia de Bragg, mostrando uma variação de apenas $\approx 2,5\%$

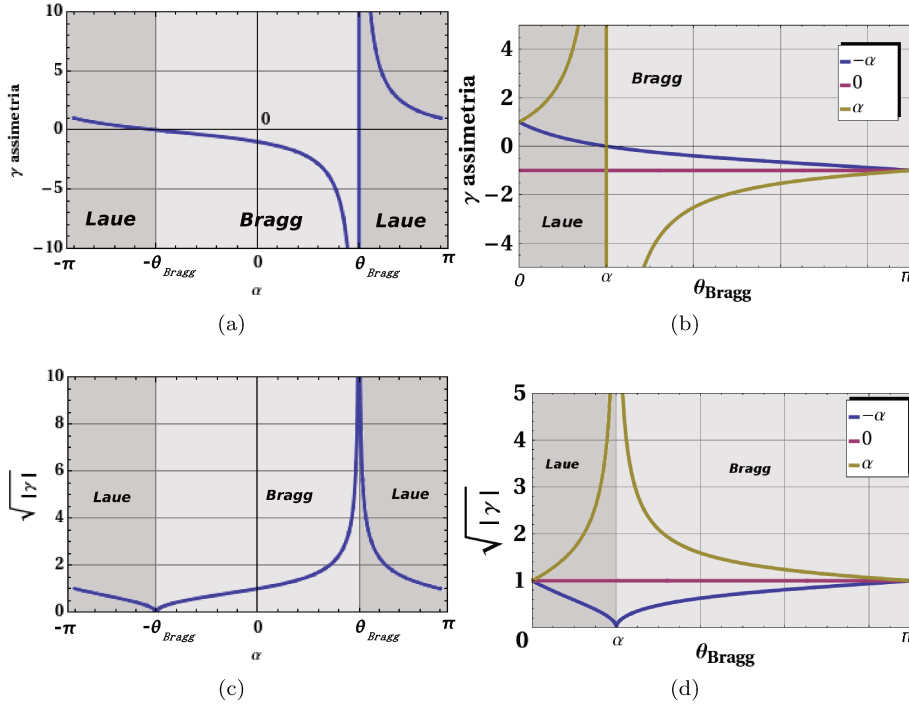


Figura 2.20: Fator de assimetria em função (a) do ângulo de assimetria e (b) do ângulo de Bragg. Comportamento de $\sqrt{|\gamma|}$, que caracteriza o comportamento de ω_{Darwin} , em função (c) do ângulo de assimetria e (b) do ângulo de Bragg. Indicados nos gráficos as geometrias características (Laue ou Bragg) para os valores de θ_B e α . Reflexão 111 de um cristal de Silício com estrutura de Diamante e constante de polarização igual à 1.

onde $S[Re(\eta)]$ é o sinal da parte real de η . As refletividades em termos do ângulo de incidência e da energia da radiação são mostradas em Fig. 2.19a e 2.19b.

Os parâmetros η , $\Delta\theta_o$ e δ são números complexos, mas as partes reais de $\Delta\theta_o$ e δ têm interpretação física: a parte real de $\Delta\theta_o$, $\Delta\theta_{Bragg} = Re(\Delta\theta_o)$, é o ângulo de desvio entre o ângulo referente ao centro da curva de reflexão e o ângulo de Bragg do feixe espalhado; a parte real de 2δ , $\omega_{Darwin} = Re(2\delta)$, é a largura à meia altura da curva de reflexão I_{hkl} e é denominada *largura de Darwin*, que será tratada mais à frente.

O ângulo de assimetria α determina o ângulo de Bragg mínimo para o qual o feixe de radiação incidente é refletido ou transmitido. Por geometria obtém-se que o ângulo de Bragg mínimo para reflexão será igual ao módulo do ângulo de assimetria¹¹. Acima deste ângulo, um feixe refletido por um plano hkl é

¹¹A convenção de sinal para o ângulo α é dada pela Figura 2.18 onde $\alpha > 0$.

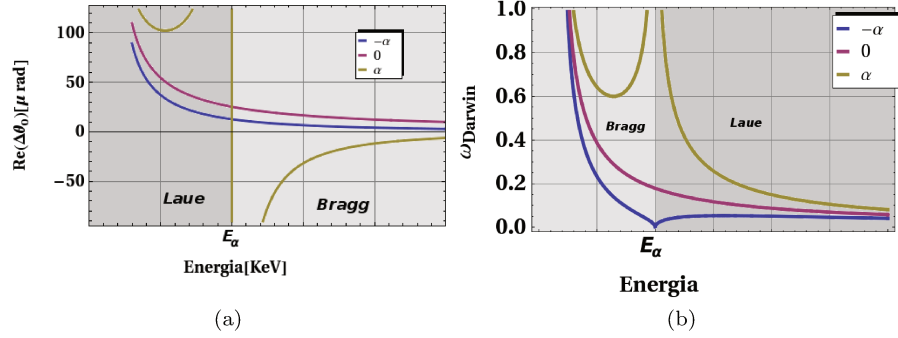


Figura 2.21: (a) $\Delta\theta_{\text{Bragg}}$ e (b) ω_{Darwin} de um cristal simétrico e com ângulos de assimetria positivo e negativo, mostrando uma divergência para energia com ângulo de Bragg igual à α . Reflexão 111 de um cristal de Silício com estrutura de Diamante e constante de polarização igual à 1.

transmitido através do cristal e, a menos que o cristal seja muito espesso e absorva todo o feixe, o feixe é transmitido em uma direção dada pela lei de Bragg.

No modo de reflexão se diz que o cristal está na *geometria de Bragg*, e na *geometria de Laue* para o modo de transmissão, de forma que o ângulo de assimetria determina a geometria do cristal:

$$\begin{aligned} \text{modo de reflexão} &\Rightarrow \text{Geometria de Bragg} \Rightarrow \theta_{\text{Bragg}} > |\alpha| \Rightarrow E_{\text{Bragg}} < E_\alpha, \\ \text{modo de transmissão} &\Rightarrow \text{Geometria de Laue} \Rightarrow \theta_{\text{Bragg}} < |\alpha| \Rightarrow E_{\text{Bragg}} > E_\alpha, \end{aligned}$$

sendo E_α a energia de Bragg para $\theta = \alpha$.

A influência do ângulo de assimetria sobre os outros parâmetros da difração dinâmica são dados em função do fator de assimetria γ (Eq. 2.85), de forma que as propriedades de γ são determinantes para as propriedades de $\Delta\theta_{\text{Bragg}}$ e ω_{Darwin} .

Para um cristal com $\alpha = 0$ o valor de γ será independente da energia de Bragg e igual à -1 , de forma que a dependência de $\Delta\theta_B$ com a energia será dada pelo termo $\tan\theta_B$ e pela dependência em energia de F_o em Eq. 2.83 (Fig. 2.21a para $\alpha = 0$), enquanto que ω_{Darwin} terá a dependência em energia regida pela dependência de $\tan\theta_B$ e $\sqrt{F_{hkl}F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}$ em Eq. 2.84 (Fig. 2.21b para $\alpha = 0$).

Para cristais com corte assimétrico tal que $\alpha \neq 0$ o fator γ tem um comportamento dependente da energia e cujo principais características são (Figuras 2.20a e 2.20b):

- $\gamma = 0$ para $\alpha = -\theta_B$;
- $\gamma \rightarrow \infty$ se $\alpha = \theta_B$;

- $-1 < \gamma < 0$ se $-\theta_B < \alpha < 0$.

Essas propriedades fazem com que ω_{Darwin} , em módulo, tenham valores mínimos em $-\theta_B = \alpha$ e diverjam para valores de $\theta_B = \alpha$ (Figuras 2.20a).

Assim, para valores positivos de α existe valores de θ_B para os quais $\Delta\theta_B$ e ω_{Darwin} divergem. Para valores negativos de α temos que os valores de $\Delta\theta_B$ serão pouco superiores à condição de $\alpha = 0$, a largura de Darwin ω_{Darwin} terá valores menores do que a largura de Darwin à condição $\alpha = 0$ (Figuras 2.21a e 2.21b).

Pela equação 2.84, temos que a dependência da largura de Darwin com o ângulo de assimetria pode ser escrito em função da largura de Darwin $\omega_{\alpha=0}$ para $\alpha = 0$:

$$\omega_{Darwin} = \sqrt{|\gamma|} \cdot \omega_{\alpha=0}. \quad (2.87)$$

Dessa forma, é possível diminuir ou aumentar o largura de Darwin pela escolha do ângulo de assimetria. Observando ainda o comportamento de $\sqrt{|\gamma|}$ em função do ângulo de assimetria e do ângulo de Bragg nas figuras 2.20c e 2.20d, temos que para $\alpha < 0$ haverá uma diminuição da largura de Darwin, enquanto que para $\alpha > 0$ a largura de Darwin será aumentada e irá divergir para o ângulo de Bragg tal que $\theta_{Bragg} = \alpha$. O ângulo de assimetria α em função do fator de assimetria γ pode ser obtido manipulando Eq. 2.85:

$$\tan \alpha = \left(\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right) \tan \theta_B. \quad (2.88)$$

Concluindo, apesar das várias relações desenvolvidas neste capítulo para a difração dinâmica, para obter resultados numéricos ainda é necessário recorrer à valores tabelados dos fatores de estrutura do cristal em função da energia. Mas apesar desta dificuldade, as equações da difração dinâmica fornecem excelentes estimativas numéricas para a reflexão de radiação por um cristal.

2.4 Reflexão e Refração

Os fenômenos de reflexão e refração de ondas eletromagnéticas são tratados considerando uma onda eletromagnética propagante $\vec{E}_i(\vec{x}, t)$ que incide sobre a interface entre dois materiais de índices de refração complexo $\mathcal{N}_1$ e $\mathcal{N}_2$. Obter a onda refletida $\vec{E}_r(\vec{x}, t)$ (reflexão) e a onda transmitida $\vec{E}_t(\vec{x}, t)$ (refração) pelo material consiste em impor condições de contorno aos campos propagantes. De maneira simplificada, supomos as ondas eletromagnéticas como uma onda plana com dependência harmônica no tempo e na direção de propagação z :

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\kappa z - \omega t)}, \quad (2.89)$$

onde o campo magnético é transversal ao campo elétrico [Griffiths, 1999]:

$$\vec{B} = \frac{\omega}{v} \hat{z} \times \vec{E}, \quad (2.90)$$

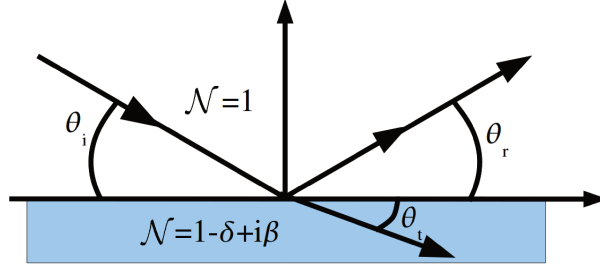


Figura 2.22: Esquema de uma onda incidente do vácuo ($n = 1$) sobre um material ($\mathcal{N} = n + i\beta$). Na interface entre os dois meios ocorrem os fenômenos de reflexão e refração.

sendo $\kappa = \frac{\omega}{c}\mathcal{N}$ e

$$\mathcal{N} = n + i\beta \quad (2.91)$$

$$\mathcal{N}^2 = \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon} \quad (2.92)$$

onde n é a parte real do índice de refração e está relacionado à velocidade de fase v da radiação por $n = \frac{c}{v}$ e c a velocidade da luz no vácuo. β é a parte imaginária e é responsável pela atenuação da radiação no material, sendo relacionada ao coeficiente de absorção μ do material (Eq. 2.1).

O resultado deste tratamento é expresso pela lei de reflexão (ângulo de incidência θ_i igual ao ângulo de reflexão θ_r), pela *Lei de Snell*¹²

$$n_i \cos \theta_i = n_2 \cos \theta_t, \quad (2.93)$$

e pelas *Equações de Fresnel*¹³[Fowles, 1975]:

$$r_{TE} = \frac{\sin \theta - \sqrt{\mathcal{N}^2 - \cos^2 \theta}}{\sin \theta + \sqrt{\mathcal{N}^2 - \cos^2 \theta}} \quad (2.94)$$

$$r_{TM} = \frac{-\mathcal{N} \sin \theta + \sqrt{1 - \frac{\cos^2 \theta}{\mathcal{N}^2}}}{\mathcal{N} \sin \theta + \sqrt{1 - \frac{\cos^2 \theta}{\mathcal{N}^2}}} \quad (2.95)$$

onde r_{TE} e r_{TM} são respectivamente os coeficientes de reflexão para ondas *TE* e *TM*. A *refletância* R será dada por $R = |r|^2$ e a *transmitância* por $T = 1 - R$.

¹²Aqui a Lei de Snell é apresentada por cossenos pois utiliza-se os ângulos em relação à superfície, e não em relação à normal como utilizado normalmente em livros de óptica, Fig. 2.22.

¹³Pelos mesmos motivos que a Lei de Snell, as Equações de Fresnel também sofrem alteração em relação ao descrito comumente nos livros de óptica.

Essas leis dependem apenas do ângulo de incidência, da polarização da radiação e dos índices de refração dos meios. Resta então determinar o comportamento do índice de refração em função da frequência da radiação, que é fisicamente o mesmo que determinar a relação de dispersão dos materiais. Para tanto é necessário determinar a propagação dos campos eletromagnéticos partindo de um modelo para o material.

Será utilizado o modelo de elétrons ligados por um potencial harmônico, como no caso do espalhamento Rayleigh (Cap. 2.2.1), de forma que a dinâmica da carga será descrita pela Eq. 2.26. Pela equação 2.92, para obter o índice de refração devemos obter o valor de $\epsilon(\omega)$, que é definido pela polarização do material em função do campo elétrico aplicado $\vec{E}$. Para a maioria dos materiais (chamados de *dielétricos lineares*) a polarização depende do campo elétrico por uma relação de proporcionalidade dada por [Griffiths, 1999]¹⁴:

$$\vec{P} = [\epsilon(\omega) - \epsilon_0] \vec{E} \quad (2.96)$$

onde $\vec{P}$ é a densidade volumétrica de momentos de dipolos elétricos. Sendo o momento de dipolo $\vec{p}(\vec{t})$ de um elétron oscilante dado por

$$\vec{p}(\vec{t}) = ex(t)\hat{x}, \quad (2.97)$$

usamos $x(t)$ da Eq. 2.26 e que $\vec{P} = \sum_j N_j \vec{p}_j$, onde N_j é a densidade de dipolos do tipo j

$$[\epsilon(\omega) - \epsilon_0] E_0 \exp(i\omega t) = \sum_j e N_j |x_{0j}| \exp[i(\omega t + \delta_j)] \quad (2.98)$$

onde admitimos que a carga oscila na direção do campo elétrico (o mesmo que admitir que a polarização está na direção $\hat{x}$).

Manipulando algebricamente chegamos à

$$\mathcal{N}^2(\omega) = \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{e^2}{m\epsilon_0} \sum_j \left(\frac{N_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\tau_j} \right) \quad (2.99)$$

que, em termos das funções $f'(\omega)$ e $f''(\omega)$ de correção para o espalhamento Thomson (Eq. 2.31 e Eq. 2.32), pode ser escrita como

$$\boxed{\mathcal{N}^2(\omega) = 1 + \frac{e^2}{m\omega^2\epsilon_0} \sum_j N_j f_j [1 + f'(\omega) + i f''(\omega)]} \quad (2.100)$$

onde m e e são a massa e a carga do elétron. O somatório em j leva em conta as diferentes formas que os elétrons estão ligados (diferentes camadas eletrônicas), f_j a fração de elétrons ligada pela forma j com frequência de oscilação ω_j e tempo de amortecimento τ_j . As funções $f'(\omega)$ e $f''(\omega)$ são tais que $\omega_0 = \omega_j$ e $\tau = \tau_j$ em Eq. 2.31 e Eq. 2.32.

¹⁴Foi suprimida a definição de $\vec{P}$ em termos da *susceptibilidade elétrica* [Griffiths, 1999].

Para as energias de raios-X, como descritas no final da Seção 2.2, o termo $\omega\tau_j$ é muito inferior aos termos de ω_j^2 e ω^2 , de forma que fora da ressonância podemos desconsiderar o termo imaginário. Além disso, fora da ressonância, iremos considerar que para dada frequência ω da radiação os elétrons ligados com energia superior à da radiação estarão fortemente ligados de forma a aproximarmos que $\omega_j \rightarrow \infty$. Por outro lado, para elétrons com frequência de ressonância inferiores à frequência da radiação, faremos que $\omega_j \rightarrow 0$. Resumindo:

$$\begin{aligned} \text{elétrons ligados por } \omega_j > \omega &\Rightarrow \omega_j \rightarrow \infty, \\ \text{elétrons ligados por } \omega_j < \omega &\Rightarrow \omega_j \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Utilizando essa aproximação em Eq. 2.99 chega-se à [Fowles, 1975]

$$\mathcal{N}^2(\omega) = 1 - \frac{Nf_0e^2}{m\epsilon_0\omega^2} = 1 - \frac{Nf_0\hbar^2e^2}{m\epsilon_0E^2} \quad (2.101)$$

onde foi feita a substituição de frequência ω pela energia da radiação E e onde f_0 é a fração de elétrons do material que têm frequência de ressonância inferior à da radiação.

Sendo o valor das constantes $\frac{\hbar^2e^2}{m\epsilon_0}$ da ordem de 10^{-18} e a densidade de elétron livres Nf_0 da ordem de de 1 elétron/ $\text{\AA}^3$, temos que na faixa de raios-X ($E_\gamma \approx 10^4 \text{eV}$) o índice de refração é aproximadamente real e que $\mathcal{N}^2$ assume valores próximos mas menores que 1. À partir dessas considerações escreve-se o índice de refração complexo $\mathcal{N}$ por¹⁵

$$\mathcal{N} = n + i\beta = 1 - \delta + i\beta \quad (2.102)$$

$$\mathcal{N}^2 \approx 1 - 2\delta + 2i\beta \quad (2.103)$$

onde desconsiderou-se os termos de ordem 2 para o cálculo de $\mathcal{N}^2$.

Usando a aproximação do valor de $\mathcal{N}^2$ dado por 2.103, podemos relacionar as grandezas δ e β com as funções f' e f'' por Eq. 2.100, obtendo

$$\delta \approx \frac{Ne^2}{2m\omega^2\epsilon_0} \sum_j f_j \cdot [1 + f'(\omega)] \quad (2.104)$$

$$\beta \approx \frac{Ne^2}{2m\omega^2\epsilon_0} \sum_j f_j \cdot f''(\omega) \quad (2.105)$$

¹⁵Deve-se lembrar que o índice de refração é relacionado à velocidade de fase das ondas, e não à velocidade de grupo. Assim, um valor para o índice de refração menor do que 1 não viola o postulado da relatividade, que deve ser aplicado à velocidade de grupo [Als-Nielsen and McMorro, 2001].

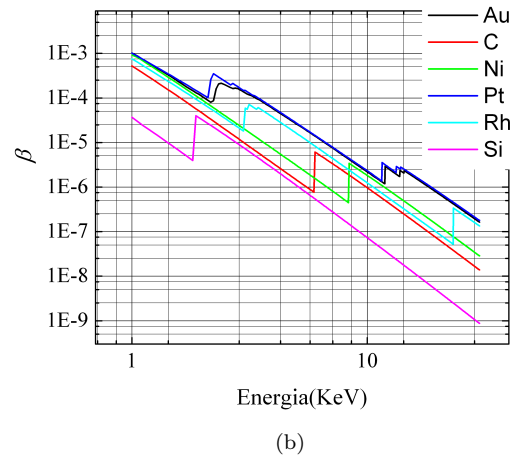
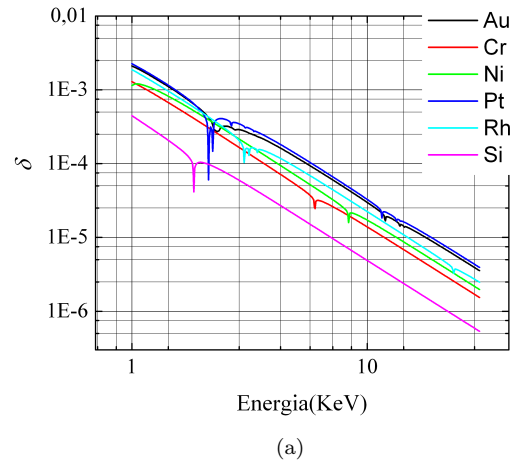


Figura 2.23: Valores de δ e β dos elementos ouro, cromo, níquel, platina, ródio e silício entre 1KeV e 30KeV. Obtido com a ferramenta computacional *DA-BAX* (*DA*ta *BA*se for *X-ray applications*) [del Rio and Dejus, 1997].

Além disso, igualando a parte real de $\mathcal{N}^2$ da Equação 2.103 com a de Eq. 2.101 derivamos uma função para o fator de correção δ é dada por

$$\delta \approx \frac{N f_0 \hbar^2 e^2}{2m\epsilon_0 E^2}. \quad (2.106)$$

Calculando o valor das constantes temos que a expressão para δ se reduz à

$$\delta \approx 6,894 \cdot 10^{-18} \frac{N}{E^2}. \quad (2.107)$$

Sendo o valor típico de N da ordem de 1 elétron/Å³ e a energia dos fótons de raios-X da ordem de $10^4 eV$, temos que δ é da ordem de 10^{-5} para a faixa de raios-X duros (Figura 2.23).

Quanto à absorção, é importante notar que o parâmetro β se refere à atenuação do campo elétrico, enquanto que o parâmetro μ na Eq. 2.1 se refere à atenuação da intensidade da radiação. Uma vez que campo elétrico se relaciona à intensidade por

$$I(\omega) = |\vec{E}(\omega)|^2, \quad (2.108)$$

então os parâmetros β e μ serão relacionados por

$$\mu = 2\beta \frac{\omega}{c}$$

$$\beta = \frac{2\mu c}{\omega} = 2\hbar c \frac{\mu}{E}. \quad (2.109)$$

Dada a propriedade dos materiais de $n < 1$ na região de energia de raios-X, não fosse as propriedades de absorção ($\beta \neq 0$), seria possível produzir espelhos com reflexão total nessa faixa de energia. Para que ocorra reflexão total em uma interface, é necessário que o meio onde a radiação se propaga tenha um índice de refração maior que o do meio em que a radiação está incidindo. Assim, um feixe de raios-X que se propaga no vácuo poderia ser totalmente refletido em uma interface com algum material.

Esse efeito só ocorreria para determinados ângulos de incidências dados pela Lei de Snell, estabelecendo que o ângulo entre a interface e a onda transmitida θ_t seja zero. Ao ângulo θ_i para o qual $\theta_t = 0$ denomina-se ângulo crítico e para qualquer ângulo menor que o ângulo crítico haveria reflexão total. Pela equação 2.93 teremos

$$\cos \theta_c = n \quad (2.110)$$

$$\cos \theta_c = 1 - \delta. \quad (2.111)$$

Dado o pequeno valor de δ , teremos que o ângulo θ_c deverá ser também muito pequeno, permitindo expandir a função cosseno

$$\cos \theta_c \approx 1 - \frac{\theta_c^2}{2} \approx 1 - \delta$$

$$\boxed{\theta_c \approx \sqrt{2\delta}} \quad (2.112)$$

que por 2.107 leva à

$$\boxed{\theta_c = \frac{3,713 \cdot 10^{-14}}{E} \sqrt{N}} \quad (2.113)$$

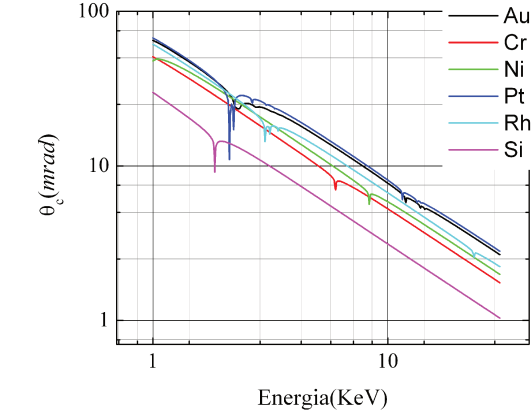
sendo E em eV e N em elétrons/ m^3 . Para os valores típicos de $N = 1$ elétron/ $\text{\AA}^3$ e $E = 10^4 eV$, obtém-se que o ângulo crítico é da ordem de miliradianos (Fig. 2.24a).

Porém, dada as propriedades de absorção do material, a refletância para ângulos abaixo do ângulo crítico se aproxima de 1 mas não atinge este valor. Sabendo que o ângulo crítico é muito pequeno, pode-se fazer aproximações nas equações de Fresnel (Equações 2.94 e 2.95) de forma a obter funções simplificadas para reflexão à ângulos rasantes. Aproximando $\sin \theta \approx \theta$ e utilizando a aproximação para $\mathcal{N}^2$ em Eq. 2.103, chegamos à [Notas Pessoais]

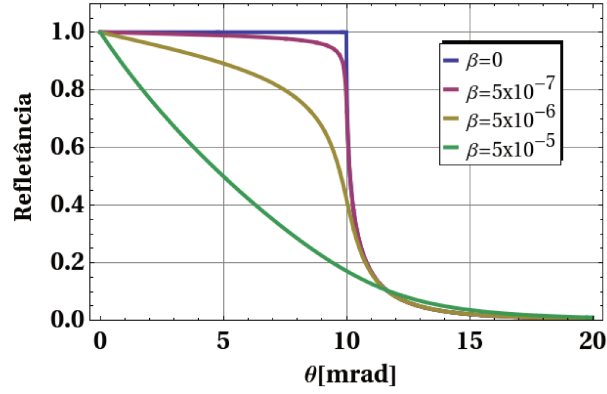
$$r_{TE} = \frac{\theta - \sqrt{-2\delta + 2i\beta + \theta^2}}{\theta + \sqrt{-2\delta + 2i\beta + \theta^2}} \quad (2.114)$$

$$r_{TM} = \frac{-(1 - 2\delta + 2i\beta)\theta + \sqrt{-2\delta + 2i\beta + \theta^2}}{(1 - 2\delta + 2i\beta)\theta + \sqrt{-2\delta + 2i\beta + \theta^2}} \quad (2.115)$$

Como δ e β são muito menores que 1, o termo $(1 - 2\delta + 2i\beta)$ pode ser aproximado para 1, de forma que o módulo de r_{TE} e r_{TM} são aproximadamente iguais e as refletâncias para onda TE e TM terão aproximadamente o mesmo valor. Logo, para a região de raios-X não há diferença na reflexão devido a polarização da radiação. O comportamento teórico da refletência $R = |r|^2$ é mostrado na figura 2.24b. Valores tabelados da refletância do ródio em função do ângulo de incidência e da energia da radiação são mostrados em Fig.2.25.



(a)



(b)

Figura 2.24: (a) Valores de θ_c dos elementos ouro, cromo, níquel, platina, ródio e silício entre 1KeV e 30KeV calculado por eq. 2.113 à partir dos gráficos da figura 2.23. (b) Refletância teórica obtida por Eq. 2.114 em função do ângulo para vários valores do coeficiente β . Valores de $\delta = 5 \cdot 10^{-5}$ correspondente ao ângulo crítico de 10mrad, que contempla vários materiais (Fig. 2.23a).

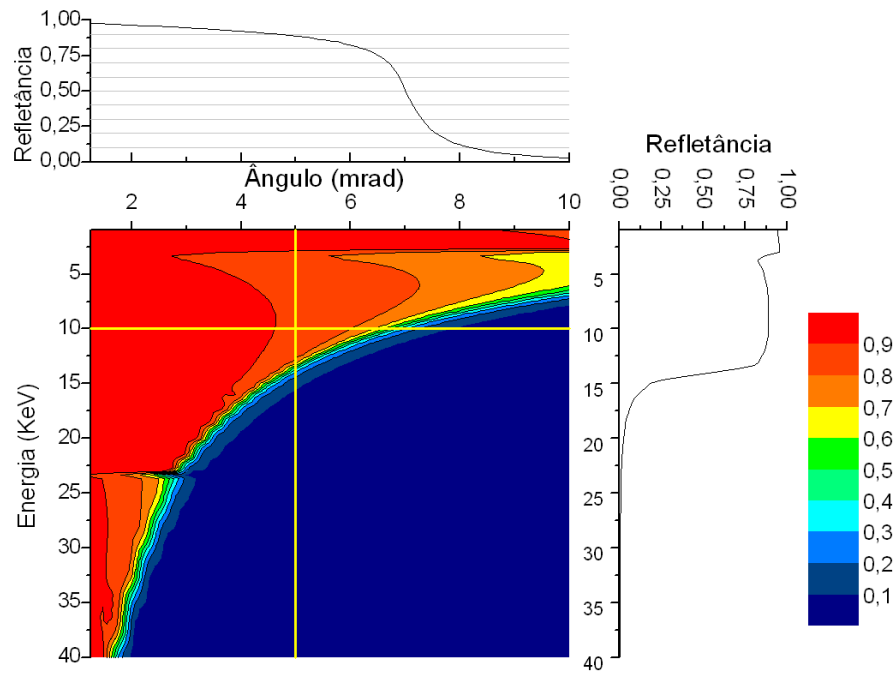


Figura 2.25: Refletância do ródio em função do ângulo e da energia. Os gráficos acima e à direita são os perfis tomados sobre a linha amarela no gráfico de contorno central. Acima temos a dependência angular para a energia de 10KeV . Ao lado temos o perfil em energia para o ângulo de incidência de 5mrad . Dados obtidos com a ferramenta *DABAX*[del Rio and Dejus, 1997].

Capítulo 3

Dispositivos Ópticos para Raios-X

As propriedades de tamanho do feixe, divergência e largura espectral da radiação de um acelerador síncrotron são inadequadas à maioria dos experimentos de interação de raios-X com a matéria. Para torná-la apropriada utiliza-se das propriedades de interação de raios-X com os materiais para construir dispositivos que adequam a radiação emitida pela fonte aos experimentos com raios-X.

Devido à variedade de técnicas que se utilizam da radiação síncrotron, existe uma variedade de dispositivos e de formas de associá-los para cumprir os requisitos de um experimento. Dentre os diversos dispositivos existentes destacam-se monocromadores, espelhos de reflexão total, espelhos multicamadas, lentes e filtros. Concentraremos no estudo de monocromadores e espelhos de reflexão total e espelhos multicamadas, por serem os principais em uma linha de raios-X duros.

3.1 Espelhos de Raios-X

Espelhos de raios-X em uma linha de luz têm como principal função focalizar e colimar o feixe de radiação síncrotron. Além disso, as propriedades do fenômeno de reflexão de raios-X faz com que os espelhos tenham funções adicionais, como absorção de parte da potência do feixe e supressão de fótons de altas energias.

Os espelhos são constituídos de um substrato (em geral silício) revestido por um material pesado (ródio, ouro ou platina, entre outros). De forma a terem propriedades focalizantes, podem ser constituídos em formatos esféricos, cilíndricos, toroidais ou cônicos[Mills, 2002].

Dependendo da potência absorvida podem sofrer de problemas térmicos e torna-se necessário que sejam refrigerados. O método mais comum de refrigeração é o de circular líquido refrigerante em seu interior, em geral água refrigerada.

O desempenho de um espelho é determinado principalmente por:

- *natureza do fenômeno de reflexão*: dependência com a energia da radiação e com o ângulo de incidência;
- *questões de óptica geométrica*: formato da superfície do espelho, magnificação e aberrações;
- *limitações técnicas na fabricação*: erro de inclinação da superfície¹, rugosidade;
- *problemas térmicos*: por absorver parte da radiação, dependendo da disposição do espelho na linha, a potência absorvida pode ser significativa e gerar deformações na forma da superfície do espelho, comprometendo as propriedades ópticas;
- *limitações de construção da linha*: em geral uma linha tem limitações de espaço e do ângulo de inclinação do feixe em relação ao piso.

À seguir tratamos dos parâmetros que influenciam o desempenho de um espelho de raios-X e como eles se relacionam, além de como essas propriedades podem ser usadas para obter um feixe de raios-X de acordo com as necessidades de um experimento.

3.1.1 Dependência com o ângulo de incidência

Devido à propriedade dos materiais em que o índice de refração é menor que 1 para energias acima de $10^3 eV$ (como visto no Cap. 2.4), é possível utilizar a reflexão total dos materiais abaixo de um ângulo crítico θ_c . Valores de θ_c são dados por Eq. 2.113 e a Figura 2.24a mostra o valor do ângulo crítico para alguns elementos.

O baixo valor do ângulo crítico nessa faixa de energia ($\theta_c \approx 10 mrad$ para $10 KeV$), faz com que espelhos de raios-X tenham que operar com incidência rasante. Como consequência, espelhos de raios-X têm características específicas que os distinguem de espelhos para luz visível:

- Para captar todo o feixe de radiação é necessário que o espelho seja longo. Por exemplo um feixe de raios-X à 5 metros da fonte de elétrons tem um tamanho vertical típico de 3 milímetros, que incidindo um plano à um ângulo de 5 miliradianos ilumina um comprimento de 0,6 metros.
- Para posicionar o espelho com um ângulo da ordem de miliradianos é necessário uma movimentação mecânica com precisão de décimo de miliradiano. Em um espelho de 1 metro isso significa que os atuadores mecânicos devem ter precisão da ordem de 10 micrômetros.

¹Em inglês *slope error*: diferença ou erro entre o ângulo de inclinação da superfície prescrita e a obtida no processo de fabricação.

- A óptica geométrica faz uso da *aproximação paraxial* que trata apenas dos raios paraxiais, aqueles que estão próximos ao eixo óptico do elemento óptico[Fowles, 1975]. Devido ao baixo ângulo de incidência essa aproximação não é válida para espelhos de raios-X e é necessário verificar a validade dos conceitos de óptica geométrica antes de aplicá-los (mais detalhes na Seção 3.1.3).

3.1.2 Dependência com a energia da radiação

Pela dependência da refletância com a energia, os espelhos são utilizados como *filtros “passa baixa”* de energia. Por exemplo o ródio, como pode ser visto na Figura 2.25, para ângulo de incidência de 5mrad e energias acima de 15KeV tem refletância inferior à 25%, enquanto que para o mesmo ângulo e para energias entre $3,5\text{KeV}$ e 12KeV a refletância é maior que 80%. Logo, operando 5mrad o ródio é um bom refletor para energias menores que 12KeV e um absorvedor de fótons com energia superior à 12KeV . De forma geral, trabalha-se com refletâncias da ordem de 80% na faixa de energia desejada, o que faz com que o número de espelhos em uma linha de luz seja um parâmetro à ser minimizado.

De forma geral, trabalha-se com refletâncias da ordem de 80%, o que faz com que o número de espelhos em uma linha de luz seja um parâmetro à ser minimizado.

Como um espelho opera em geral com um ângulo fixo, a presença de um espelho em uma linha de luz é em geral o fator limitante da máxima energia que uma linha pode operar, sendo a escolha do material refletor do espelho determinada pelo intervalo de energia desejado. O ródio, por exemplo, limitaria a operação de uma linha à $\approx 12\text{KeV}$ operando à 5mrad .

Para operar em um intervalo muito grande de energia (de 1KeV à 30KeV) em geral utiliza-se um mesmo substrato onde se deposita duas faixas de material refletor distintos, como por exemplo ródio para o intervalo de 3 à 12KeV e a platina de 14 à 40KeV .

3.1.3 Propriedades Ópticas

O feixe obtido de uma fonte de radiação síncrotron, pela natureza do fenômeno de produção de radiação, é inerentemente divergente [Wiedemann, 2003]. Pela construção de um anel de armazenamento a distância mínima da fonte de radiação que é acessível para instrumentação é da ordem de 5 metros. À essa distância, pela divergência do feixe (da ordem de $\approx 10\text{mrad}$ na horizontal e $0,5\text{mrad}$ na vertical), uma fonte pontual forneceria um feixe de tamanho horizontal e vertical respectivamente da ordem de $\approx 2,5\text{mm}^2$.

De forma geral os experimentos que fazem uso de radiação síncrotron necessitam da maior quantidade de fótons em um determinada área, que muitas vezes é micrométrica. Dessa forma, é necessário que se processe a radiação fornecida pela fonte para focalizar o feixe divergente nesta pequena área.

Além disso, existem aplicações com necessidade de alta resolução de energia que necessitam feixe colimado (divergência próxima de zero). Um feixe colimado

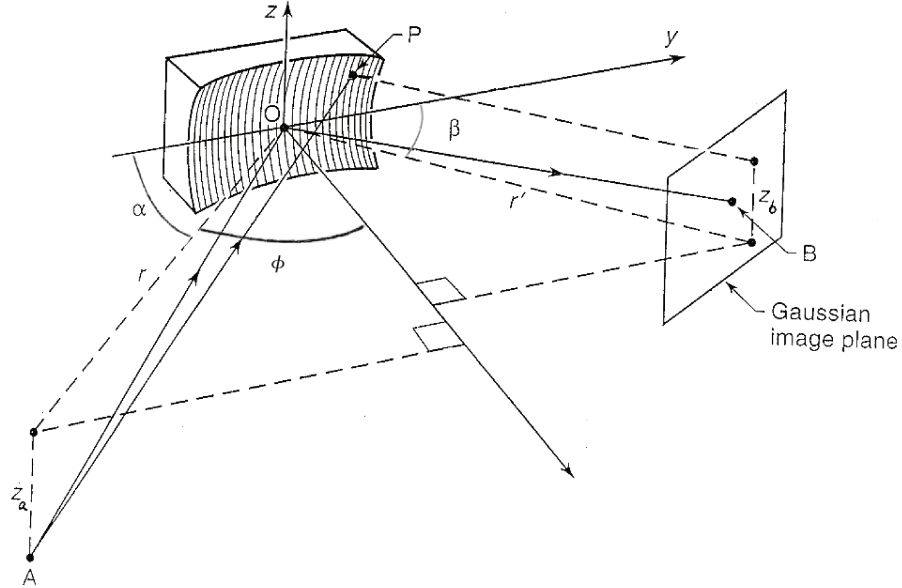


Figura 3.1: Sistema de coordenadas utilizados para o estudo de espelhos focalizantes. No caso de espelhos teremos que os ângulos α e β são tais que $\alpha = \beta$. Figura extraída e editada de [Thompson and Vaughan, 2001].

favorece a seleção de energia pelo monocromador dentro de uma pequena faixa de energia.

Os efeitos de colimação e focalização do feixe são obtidos utilizando óptica focalizante, como espelhos com superfícies curvas. Para objetos pontuais a óptica geométrica fornece resultados analíticos exatos, onde uma fonte pontual é totalmente focalizada em um ponto por uma superfície elíptica e colimado por uma superfície parabólica, e um feixe colimado é focalizado por uma superfície parabólica.

A óptica geométrica trabalha em uma situação ideal onde o objeto e a imagem estão sobre o *eixo óptico*², ou usa a aproximação de que a distância ao eixo óptico é infinitesimalmente pequena ($\phi \approx 0$ em Fig. 3.1). À essa aproximação denomina-se *aproximação paraxial*. Além disso aproxima-se que todos os raios provenientes do objeto incidem a superfície no ponto P com ângulo de $\phi \approx 0$, de forma a se utilizar a aproximação $\sin \phi \approx \phi - \frac{\phi^3}{3!} + O(\phi^5)$.

A aplicação dos conceitos de óptica geométrica para objetos de tamanho finito (não pontuais) é então feita em duas etapas distintas onde $\sin \phi$ é aproximado para ϕ e posteriormente para $\phi - \frac{\phi^3}{3!}$. Ao resultados de cada uma destas

²Em um sistema óptico composto por lentes e/ou espelhos, o eixo óptico é o eixo que passa pelo centro de curvatura das superfícies e em muitos casos coincide com um eixo de simetria rotacional do sistema. Ver exemplo em Fig. 3.2a

aproximações denomina-se respectivamente *óptica de primeira ordem* (ou *óptica Gaussiana*) e *óptica de terceira ordem*. Apesar de óptica de primeira ordem ser estritamente válida na aproximação paraxial, os resultados obtidos representam boas aproximações pra ângulos diferentes de zero [Korsch, 1991].

A óptica de primeira ordem define a geometria básica da formação de imagem, determinando a localização de uma imagem “ideal” para todos os pontos de um objeto (também conhecido por *imagem Gaussiana*), mas por outro lado não é capaz de prever a qualidade da imagem.

Os principais resultados fornecidos pela óptica Gaussiana são dados por (ver Fig. 3.1)

$$\frac{1}{r} + \frac{1}{r'} = \frac{1}{f}, \quad (3.1)$$

onde r é a distância objeto-espelho, r' é a distância espelho-objeto e f é a distância focal do espelho. Para o caso de um espelho colimador deve-se fazer $r' \rightarrow \infty$. O outro resultado relevante é que o comprimento z_b da imagem será dado por

$$z_b = z_a \frac{r'}{r} = z_a \cdot M, \quad (3.2)$$

onde z_a é o comprimento do objeto (Fig. 3.1). À relação $\frac{r'}{r} = M$ denomina-se *magnificação*.

Na óptica de primeira ordem a superfície que concentra os raios de um fonte pontual é um paraboloide (diferente do elipsoide na aproximação paraxial) dado pela equação

$$4fz = x^2 + y^2. \quad (3.3)$$

A óptica de terceira ordem é vista como uma teoria para prever quanto a teoria de primeira ordem falha em seus resultados. As diferenças entre as dimensões da imagem prevista pela teoria de terceira e de primeira ordem são denominados *aberrações primárias*³, onde se obtém cinco efeitos distintos: astigmatismo, aberração esférica, coma, curvatura de campo e distorção. Termos de ordem maior na expansão da função seno (acima de $O(\phi^5)$) dão origem à aberrações de mais alta ordem, mas restringimos nosso estudo aberrações primárias.

Os resultados da óptica geométrica indicam que superfícies cônicas como elipsoides e paraboloides são os mais indicados para focalizar e colimar um feixe de luz. Porém o processo de fabricação de tais superfícies para espelhos de raios-X são caros uma vez que incidência rasante exige espelhos longos na direção longitudinal.

Assim, o que se faz é aproximar as superfícies cônicas por superfícies esféricas e construir espelhos com estes formatos. Além disso, o ganho de performance de espelhos cônicos em relação à esféricos se perde para objetos de tamanho diferente de zero.

Na região paraxial o foco de um espelho com superfície esférica e raio de curvatura R é dado por

³Também conhecidas por *aberração de Seidel* [Malacara and Malacara, 2004]

$$f = \frac{R}{2}, \quad (3.4)$$

mas para objetos fora da região paraxial a relação entre o foco e o raio de curvatura na óptica Gaussiana é dado pelas equações de Coddington [Born and Wolf, 1999][Malacara and Malacara, 2004]:

$$f_t = \frac{1}{2} R \sin \alpha, \quad (3.5)$$

$$f_s = \frac{1}{2} \frac{R}{\sin \alpha}. \quad (3.6)$$

onde f_t e f_s são respectivamente o foco longitudinal (Fig. 3.2b) e sagital (Fig. 3.2c), R o raio de curvatura da superfície esférica e α o ângulo mostrado na Fig. 3.1.

No caso de espelhos para linhas de luz estamos interessados em colimar e focalizar uma fonte de luz, de forma que os efeitos de curvatura de campo e distorção, relevantes para formação de imagens, serão negligenciados. Isso se deve ao fato de que, em uma linha de luz, não estamos interessado em formar uma imagem perfeita do objeto, mas somente em focalizar e demagnificar uma imagem, permitindo assim negligenciar os efeitos relevantes para formação de imagens.

Estudaremos assim os três tipos de aberração relevantes: astigmatismo, aberração esférica e coma. Uma vez que esses efeitos de aberração se somam, a aberração total será a soma dos efeitos de coma, aberração esférica e astigmatismo.

Assumindo uma fonte de formato e divergência gaussiana, cujo tamanho tem valor de desvio padrão S_z , o efeito de aberração sobre a imagem é aumentar seu tamanho de foco F de $M \cdot S_z$ para um tamanho de foco efetivo F_{ef} dado por [Forstner et al., 1992]

$$F_{ef} = \sqrt{F^2 + (\Delta S_{ab})^2} = \sqrt{(S_z \cdot M)^2 + (\Delta S_{ab})^2} \quad (3.7)$$

onde M é a magnificação (de acordo com Eq. 3.2) e ΔS_{ab} é o tamanho da imagem de um objeto pontual que sofre aberração.

As aberrações primárias são exaustivamente tratadas nos livros de óptica. Porém, poucos tratam o problema aplicado à espelhos de raios-X onde a incidência é rasante. Quando comparado à óptica de luz visível, a teoria de aberração de reflexão à incidência rasante se torna muito complicada e é necessário uma descrição que considere o ângulo rasante e a falta de simetria axial destes sistemas. Tal problema é tratado por [Korsch, 1991] e aplicado para linhas de luz por [Susini and Wulff, 1993], de onde o presente trabalho se baseia. Além das aberrações primárias trataremos do aumento da imagem causada pelo erro de inclinação da superfície por erro intrínseco do processo de fabricação.

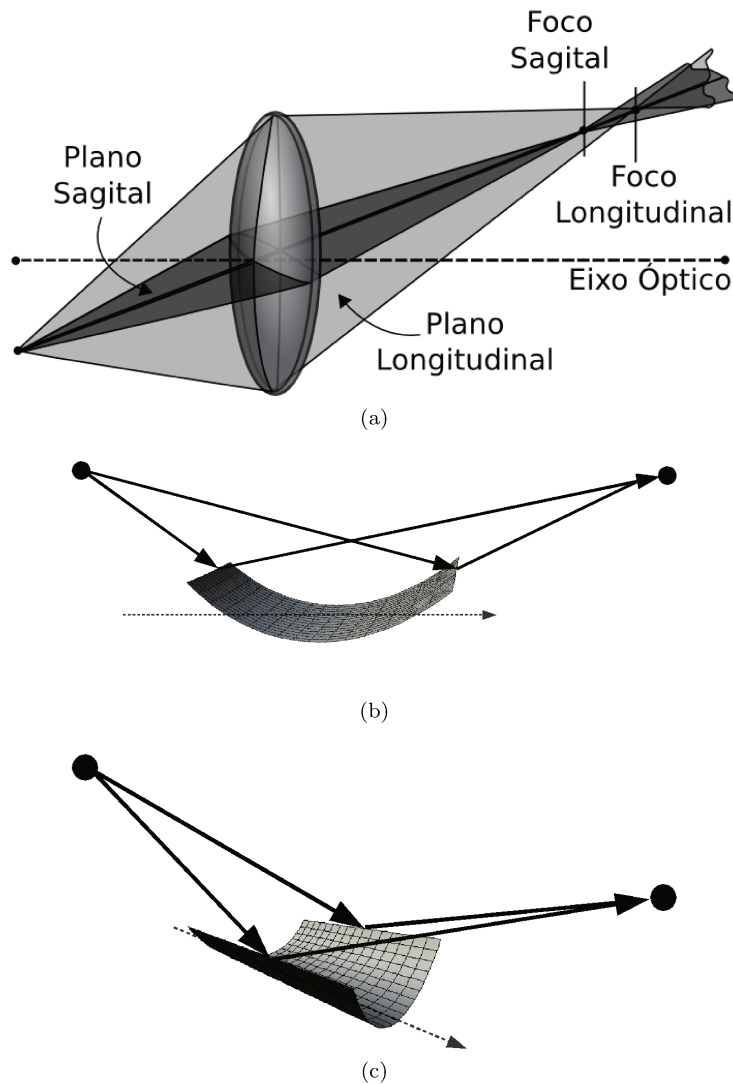


Figura 3.2: (a) Acima é mostrado os planos transversal e sagital para uma lente. Observa-se que para cada plano há um foco em posição distinta (astigmatismo). Figura editada à partir do original obtida em <http://en.wikipedia.org/wiki/File:Astigmatism.svg>. (b) Geometria de focalização longitudinal e (c) sagital. A linha tracejada indica a direção de propagação do feixe de radiação.

Astigmatismo

O astigmatismo é o efeito que ocorre quando a fonte de luz está fora do eixo paraxial e os raios no plano longitudinal (meridional) tem um foco em posição distinta dos raios no plano sagital. A Figura 3.2a mostra esse efeito para lentes. A aplicação para espelhos é direta. Esse efeito pode ser obtido diretamente das equações de Coddington em Eq. 3.5 e Eq. 3.6. Igualando as equações por R obtemos:

$$f_t = f_s \sin^2 \alpha. \quad (3.8)$$

Espelhos esféricos de raios-X, por trabalharem com incidência rasante, sofrem fortemente de astigmatismo. Tomando um ângulo de incidência rasante típico de 10mrad teremos que $\sin^2(10\text{mrad}) \approx (5\text{mrad})^2 \approx 10^{-4}$, ou seja, o foco sagital será 10^4 vezes maior que o tangencial.

O astigmatismo pode ser cancelado utilizando uma superfície com diferentes raios de curvaturas no plano sagital e tangencial, ou seja, uma superfície toroidal. Seja R o raio de curvatura tangencial e ρ o raio de curvatura sagital, temos que as equações de Coddington para uma superfície toroidal serão dadas por:

$$f_t = \frac{1}{2} R \sin \alpha, \quad (3.9)$$

$$f_s = \frac{1}{2} \frac{\rho}{\sin \alpha}. \quad (3.10)$$

Uma imagem livre de astigmatismo terá $f_t = f_s$, o que implica

$$\rho = R \sin^2 \alpha. \quad (3.11)$$

Assim, um toróide com raio longitudinal R e raio sagital ρ dado por Eq. 3.11 terá uma imagem livre de astigmatismo. Aplicando as Equações 3.9 e 3.10 à Equação 3.1 obtém-se diretamente a relação entre os raios de curvatura e as distâncias ao objeto e à imagem livre de astigmatismo.

$$\frac{1}{r} + \frac{1}{r'} = \frac{2}{R \sin \alpha}, \quad (3.12)$$

$$\frac{1}{r} + \frac{1}{r'} = \frac{2 \sin \alpha}{\rho}. \quad (3.13)$$

Aberração esférica

A aberração esférica ocorre quando se utiliza espelhos com superfícies esféricas ao invés de espelhos com a superfície adequada (elipsoide ou paraboloide) e ocorre mesmo para objetos pontuais sobre o eixo óptico (condição paraxial ideal).

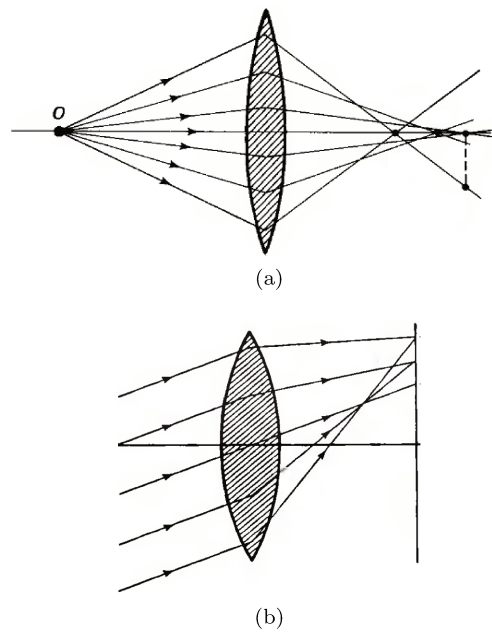


Figura 3.3: (a) Aberração esférica: os raios que passam próximos ao centro da lente são focalizados em um mesmo ponto, enquanto que aqueles mais distantes do centro são focalizados em outra posição. (b) Coma: raios fora do eixo óptico encontram diferentes inclinações da superfície na lente e são direcionados para pontos diferentes. Figura extraída de [Pedrotti and Pedrotti, 1993].

Ao utilizar uma superfície esférica em substituição à uma superfície cônica utiliza-se um raio de curvatura da esfera o mais próximo possível ao raio de curvatura da superfície no centro do espelho, de forma que a diferença entre as superfícies é zero no centro do espelho e aumenta gradativamente com a distância ao centro. A Figura 3.3a mostra o efeito de aberração esférica em uma lente com uma fonte pontual, onde os raios distantes do centro geram uma imagem diferente de um ponto no foco gaussiano.

Como espelhos de raios-X têm comprimento muito maior que a largura, a aberração esférica (e também o efeito de coma) é muito mais intensa na direção longitudinal, sendo sua atuação no plano sagital desprezada.

O acréscimo ao tamanho da imagem devido à aberração esférica em um espelho com incidência rasante é dado por [Susini and Wulff, 1993]

$$\Delta S_{esf} = \frac{3}{16} L^2 \frac{\alpha(1 - M^2)}{r'}, \quad (3.14)$$

onde L é o comprimento do espelho, α o ângulo de incidência em relação à superfície, M a magnificação e r' a distância espelho-imagem.

Observa-se em Eq. 3.14 que:

- sistema com magnificação unitária são livres de aberração esférica;
- há uma dependência L^2 com o tamanho do espelho, uma vez que quanto mais distante do centro do espelho, maior será a diferença entre a superfície esférica e a superfície ideal;
- a aberração diminui para ângulos rasantes, devido ao fato de que quanto menor o ângulo de incidência θ_i maior será o raio de curvatura. Assim, tanto a superfície esférica quanto a cônica se aproximam de um plano, e a diferença entre esfera e cone diminui.

Coma

O efeito de coma ocorre devido à variação de magnificação ao longo do comprimento do espelho [Susini and Wulff, 1993] e ocorre para raios fora do eixo óptico, condição presente nos espelhos de raios-X e para fontes espessas.

O análogo para lentes pode ser visualizando na Figura 3.3b, onde raios fora do eixo óptico encontram diferentes magnificações (inclinações da superfície) na lente. No caso de um espelho os raios distantes de seu eixo óptico incidem em sua superfície com inclinações diferentes da ideal. A Figura 3.4 mostra um objeto fora do eixo óptico com a trajetória dos raios até formarem a imagem no plano focal.

O valor de ΔS_{coma} é dado por [Susini and Wulff, 1993]

$$\Delta S_{coma} = S_z \cdot M + S_z(M + 1) \frac{L}{4r}, \quad (3.15)$$

onde o primeiro termo é conhecido por *coma de primeira ordem* e o segundo por *coma de terceira ordem*, sendo o primeiro normalmente muito maior que o segundo.

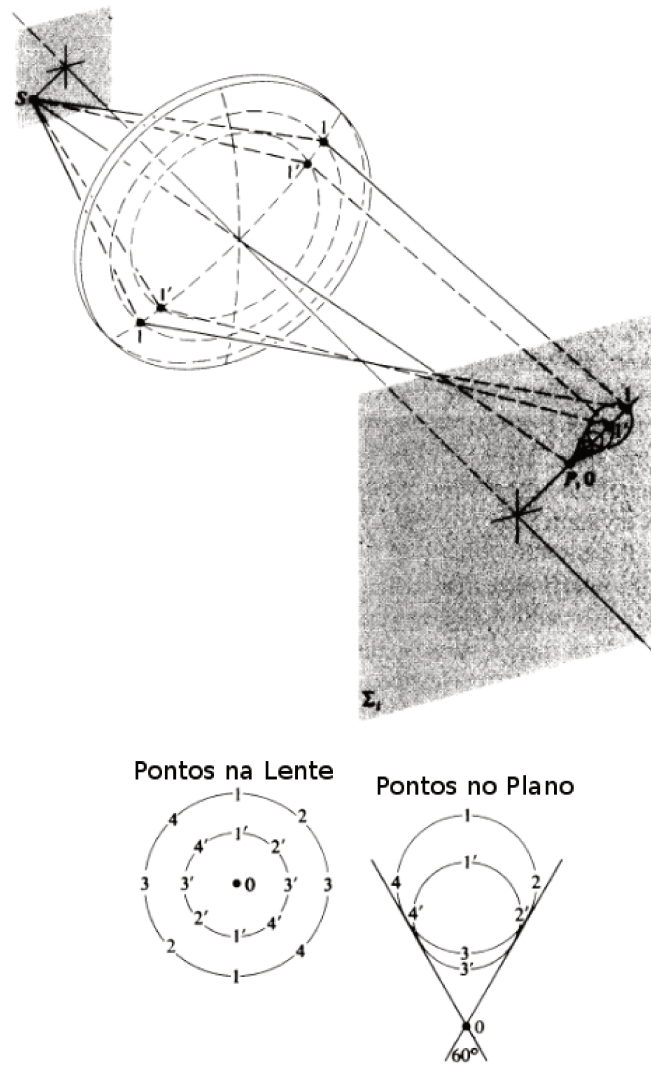


Figura 3.4: Efeito de coma em uma lente com objeto pontual distante do eixo óptico. A figura mostra a trajetória dos raios, o ponto onde cada raio cruza a lente (abaixo à esquerda) e onde incidem sobre o plano focal (abaixo à direita). Figura extraída de [Hecht, 2002].

Efeito do erro de inclinação

O valor do erro de inclinação é um parâmetro que depende do processo de fabricação do espelho. Em geral supõe-se que o erro de inclinação tem uma distribuição gaussiana com determinado valor de desvio padrão σ ou largura à meia altura Δ (FWHM, *full width at half maximum*) e seu efeito sobre a imagem é de aumentá-la por⁴ $2\sigma \cdot r' = 2 \cdot 2.35\Delta \cdot r'$, obtendo um acréscimo ao tamanho da imagem de

$$\Delta S_{slope} = 2 \cdot 2.35\Delta \cdot r'. \quad (3.16)$$

Convolvindo esse resultado com os de aberração e tamanho da fonte, obtemos que o tamanho total da imagem será dado por

$$F_{eff} = \left[(S_z \cdot M)^2 + \left(\frac{3}{16} L^2 \frac{\theta_i(1 - M^2)}{r'} + S_z \cdot M + S_z(M + 1) \frac{L}{4r} \right)^2 + (2 \cdot 2.35\Delta \cdot r')^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.17)$$

A figura 3.5a mostra os efeitos de ΔS_{slope} e ΔS_{ab} sobre o tamanho do feixe para os parâmetros da linha MX2 do LNLS (parâmetros podem ser obtidos em [Guimarães et al., 2009]). Observa-se que há uma magnificação ótima que minimiza os efeitos de aberração. Abaixo dessa magnificação ótima o efeito de aberração predomina, enquanto que para magnificações acima do ótimo domina o efeito devido ao erro de inclinação.

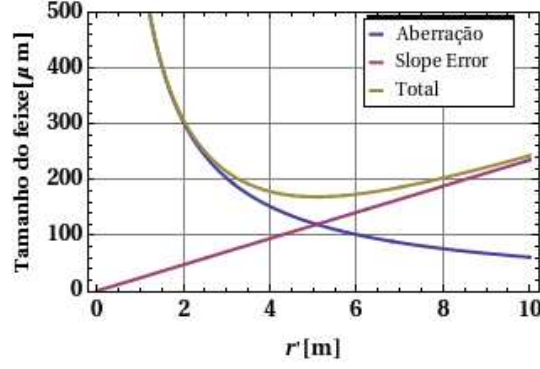
Apesar de a linha MX2 não operar no valor de magnificação ótima, observa-se um ganho pequeno de desempenho entre o ótimo e o valor utilizado de $r' = 8m$. Deve-se lembrar que outros fatores não considerados (rugosidade e fatores térmicos) irão piorar a qualidade da imagem. A atuação de tais fatores é melhor estimada por métodos de simulação por *traçamento de raios* (Cap. 4.1).

Deve-se enfatizar que a tecnologia de fabricação de espelhos tem evoluído de forma a diminuir o valor do erro de inclinação. Um exemplo é o primeiro espelho utilizado na linha MX1 LNLS quando esta foi inaugurada. Tal espelho tinha um erro de inclinação de $45\mu m$ e foi adquirido por volta de 1996[Oliva et al., 1998]. A figura 3.5b mostra que o desempenho da linha MX2 pioraria muito caso se utilizasse um espelho com o valor de erro de inclinação deste espelho utilizado da linha MX1.

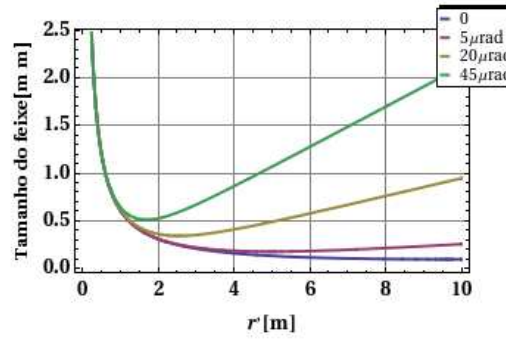
3.2 Monocromadores

O espectro contínuo da radiação síncrotron (Cap. 1.2.3) possibilita que um anel de armazenamento atenda à diferentes experimentos com diferentes necessidades quanto à energia da radiação. Porém, as diferentes técnicas experimentais não

⁴Uma vez que em uma distribuição gaussiana $\Delta = 2\sqrt{2\ln 2}\sigma$



(a)



(b)

Figura 3.5: (a) Tamanho do feixe e valores de ΔS_{slope} e ΔS_{ab} versus a distancia r' entre o espelho e a posição de observação, para os parâmetros da linha MX2 [Guimarães et al., 2009]. (b) Tamanho da imagem para diversos valores de erro de inclinação, entre eles o valor de *slope error* do espelho da linha MX1 ($45\mu\text{rad}$)

Experimento	$\frac{\Delta E}{E}$
Microscopia	$10^{-1} - 10^{-2}$
Análise Estrutural	$10^{-2} - 10^{-3}$
Espalhamento Inelástico	$10^{-2} - 10^{-4}$
Absorção (EXAFS)	$10^{-3} - 10^{-4}$
Espalhamento Anômalo	$\sim 10^{-4}$
Interferometria	$\sim 10^{-4}$

Tabela 3.1: Resolução de energia exigida por algumas técnicas[Ciocchi et al., 2000].

utilizam todo o espectro e são necessários dispositivos que selecionam a faixa de energia adequada à cada tipo de experimento. Aos dispositivos com essa função denomina-se *monocromadores*.

Dependendo da técnica, a faixa de energia ΔE necessária pode variar de alguns kiloeletronsvolts à casos onde a máxima variação não pode superar alguns milieletronsvolts[Ciocchi et al., 2000]. A forma de quantificar uma faixa de energia é pela grandeza adimensional *resolução de energia* $\frac{\Delta E}{E}$, também chamada de *banda passante*. A Tabela 3.1 mostra a resolução necessária para diversas técnicas que utilizam raios-X duros, como por exemplo as técnicas de espalhamento anômalo que utilizam um feixe com energia próxima à 10KeV e necessitam de uma resolução de $\sim 1\text{eV}$. Em geral se diz que um valor pequeno de $\frac{\Delta E}{E}$ ($< 10^{-4}$) representa uma alta resolução e uma pequena banda passante, e $\frac{\Delta E}{E} > 10^{-2}$ representa uma baixa resolução de energia e uma banda passante grande.

Para as diferentes faixas e resoluções de energias utilizam-se diferentes dispositivos [Peatman, 1997]: na faixa de ultra violeta e raios-X moles utilizam-se as *grades de difração*; para altas resoluções na faixa de energia de raios-X duros utilizam-se cristais; e para aplicações com raios-X duros e baixa resolução de energia são utilizados *espelhos multicamadas*.

Apesar de algumas técnicas serem tolerantes à baixa resolução de energia, a maioria dos experimentos de raios-X duros tem ganho de qualidade quando realizados em alta resolução. Logo, estas técnicas exigem o uso de cristais.

No entanto, nos últimos anos tem se feito um esforço para conseguir espelhos multicamadas de alta-resolução, com banda passante $\frac{\Delta E}{E}$ de aproximadamente 0,1% [Kazimirov et al., 2006], levemente superior á banda passante de um cristal.

Tal esforço se baseia no fato de que a banda passante de um cristal é menor do que a suportada por determinadas técnicas. Assim, técnicas com limite de resolução próximas à 0,1% poderiam utilizar monocromadores com espelhos multicamadas, tirando vantagem do fluxo superior ao de um cristal fornecido

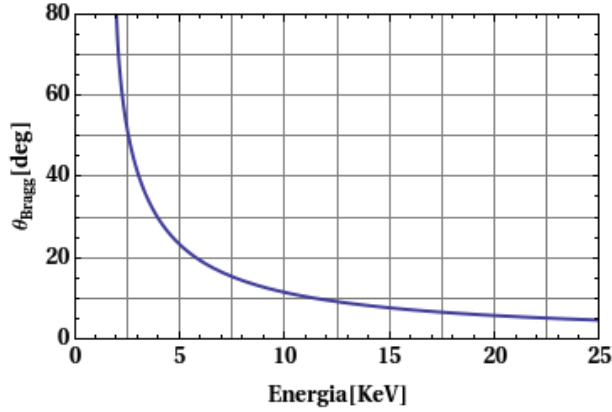


Figura 3.6: Ângulo de Bragg para a reflexão do plano 111 de um cristal de silício.

por esses espelhos.

3.2.1 Monocromadores de cristal espesso

Os monocromadores de cristais são dispositivos que selecionam a energia de um feixe policromático pelo princípio da reflexão de Bragg (Capítulo 2.3), selecionando a faixa espectral da radiação pelo ajuste do ângulo de incidência do feixe sobre um cristal plano (Lei de Bragg, Equação 2.74).

Esses cristais constituem-se de blocos cristalinos espessos de silício com alto grau de perfeição (baixa mosaicidade) de forma que suas características são descritas pela Teoria Dinâmica da Difração (Capítulo 2.3), a qual fornece uma forma de calcular a refletividade de um cristal à partir de seus parâmetros.

Assim como os espelhos, os cristais podem ter propriedades focalizantes através de uma atuação mecânica que deforma sua superfície, formando superfícies cônicas ou esféricas. Porém, quando utilizados como focalizadores, também sofrem de aberrações ópticas.

Apesar de geometricamente serem idênticos aos espelhos, a dependência da reflexão com a energia da radiação e a possibilidade de utilizar planos de Bragg inclinados em relação à superfície (cristal assimétrico, Fig. 2.18) faz com que seu comportamento seja distinto do de um espelho. Apesar de tanto em um espelho quanto em um monocromador os parâmetros a otimizar serem o fluxo final da radiação e o tamanho da imagem gerado pela óptica, em um monocromador de cristal ainda se deve otimizar a resolução em energia.

A seleção da energia é determinada pela lei Bragg, Eq. 2.74, que escrita em função da energia é dada por

$$2d_{hkl} \sin \theta = \frac{2\pi c\hbar}{E} = \frac{1,2398 \cdot 10^{-6}}{E} \quad (3.18)$$

sendo E a energia da radiação em eV, d_{hkl} a distância interplanar dos planos cristalinos hkl em metros, c a velocidade da luz, $\hbar$ a constante de Planck e θ o ângulo de Bragg como definido em Eq. 2.49. O ângulo de Bragg em função da energia para um cristal de Silício pode ser visto em Fig. 3.6.

3.2.2 Resolução de Energia

Usando a lei de Bragg e considerando apenas efeitos geométricos, temos que a resolução de energia determinada pela divergência $\Delta\theta$ do feixe incidente:

$$\Delta E_{Bragg} = \frac{\partial E}{\partial \theta} \Delta \theta_B, \quad (3.19)$$

$$\frac{\Delta E_{Bragg}}{E} = \Delta \theta_B \cot \theta_B. \quad (3.20)$$

Além do efeito geométrico, a resolução de energia é determinada pela aceitância intrínseca do cristal. Essa aceitância, dada pela largura do Darwin do cristal (Cap. 2.3.2), é uma propriedade da difração dinâmica e ocorre para os casos onde esse modelo é aplicável, ou seja, para cristais perfeitos espessos.

Sendo a largura de Darwin ω_D dada pela parte real de 2δ (Eq. 2.84), ela se relaciona com a resolução de energia por [Ciocci et al., 2000]

$$\frac{\Delta E_{Darwin}}{E} = \omega_D \cot \theta_B. \quad (3.21)$$

Levando em consideração o efeito geométrico e a resolução intrínseca do cristal, teremos uma resolução total dada por

$$(\Delta E)^2 = (\Delta E_{Bragg})^2 + (\Delta E_{Darwin})^2 \quad (3.22)$$

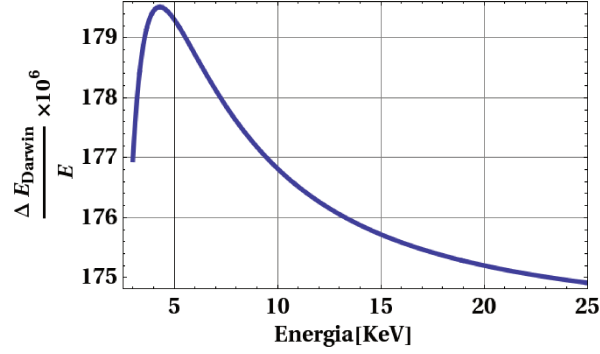
$$\frac{\Delta E}{E} = \sqrt{(\Delta \theta_B)^2 + (\omega_D)^2} \cot \theta_B. \quad (3.23)$$

Utilizando Eq. 2.84 obtém-se que resolução intrínseca de energia $\Delta E_{Darwin}/E$ terá uma dependência com a energia dada por:

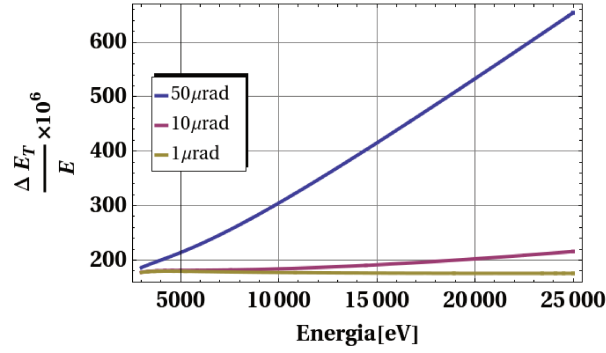
$$\frac{\Delta E_{Darwin}}{E} = \omega_D \cot \theta_B \propto \sqrt{|\gamma|} \cdot \sqrt{F_{hkl} F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}. \quad (3.24)$$

Uma vez que $\gamma = -1$ para $\alpha = 0$ e $\sqrt{F_{hkl} F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}$ tem um comportamento aproximadamente constante (Fig. 2.19c), então um cristal simétrico tem uma resolução de energia intrínseca aproximadamente constante. Na Fig. 3.7a observa-se que para um cristal de silício a variação seria de $\approx 2\%$. A Figura 3.7b mostra a resolução de energia total para alguns valores de divergência e para a largura de Darwin de um cristal de Silício.

Como visto na Eq. 2.87 da Seção 2.3.2, a largura de Darwin pode ser alterada utilizando um cristal assimétrico ($\alpha \neq 0$, Fig. 2.18). No caso de monocromadores de cristais normalmente pretende-se minimizar a resolução em energia,



(a)



(b)

Figura 3.7: (a) Para o mesmo cristal, termo de Darwin da banda passante mostrando uma variação de $\approx 2\%$ na faixa de energia de 5KeV à 25KeV . (b) Banda passante total (termo de Bragg e de Darwin) de um cristal de Silício na reflexão 111 em função da energia e para alguns ângulos de divergências. Gráficos para um cristal de Silício na reflexão 111, com um ângulo de corte assimétrico igual à zero

de forma que é comum utilizar um cristal assimétrico com determinado ângulo α de assimetria, tal que para determinada energia a largura de Darwin seja minimizada (Fig. 3.8c e 3.8d).

Lembrando ainda que um ângulo de assimetria limita a faixa de energia refletida, de acordo a geometria de Laue ou Bragg (Fig 2.20), então a escolha do ângulo de assimetria de um cristal deve considerar a resolução de energia e a faixa de energia de interesse para a operação de um monocromador de cristal.

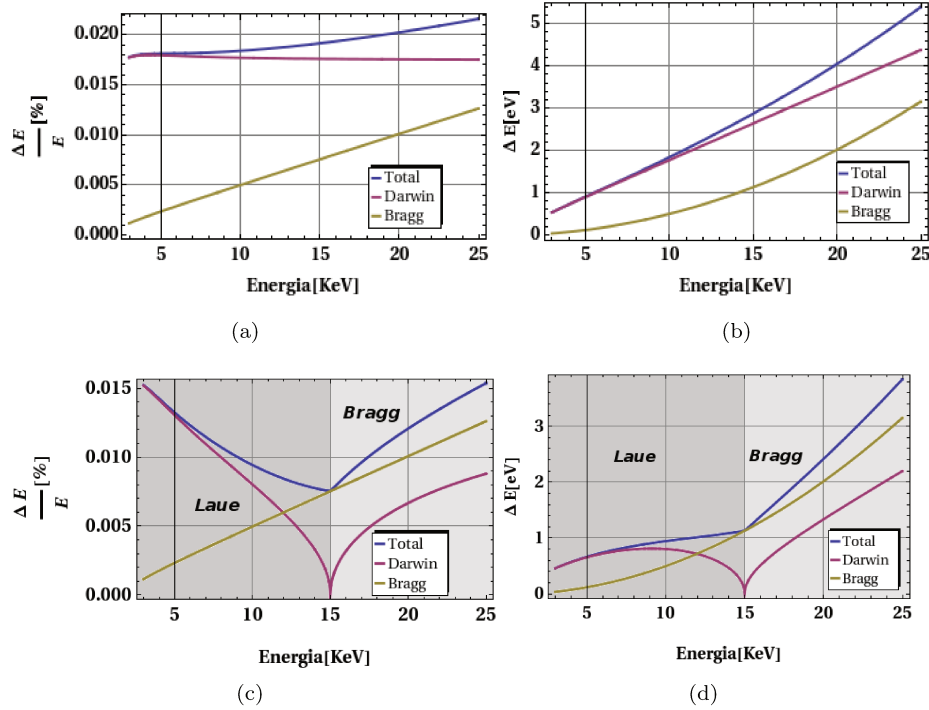


Figura 3.8: Banda passante total e os termos de Darwin e Bragg em (a) porcentagem e (b) em energia para um cristal sem corte assimétrico e (c) e (d) para um corte assimétrico de $\alpha = 7.574$ deg, valor correspondente ao ângulo de Bragg para uma energia de 15KeV e divergência do feixe de entrada de $\Delta\theta = 10\mu\text{rad}$. Todos os gráficos para reflexão 111 de um cristal de silício.

3.2.3 Focalização longitudinal

As propriedades de focalização de um cristal são descritas à partir da óptica geométrica, onde se utiliza um cristal curvo na geometria de Bragg como ele-

mento focalizante⁵. O cristal curvo é tratado de forma semelhante à um espelho de superfície curva (esférica, toroidal ou cilíndrica), com uma alteração que considera a possibilidade de o cristal ser assimétrico. Com essa alteração, a equação de focalização Eq. 3.1 será dada por[Ciocchi et al., 2000]

$$\frac{2}{R} = \frac{1}{f} = \frac{\sin(\theta_B + \alpha)}{r} + \frac{\sin(\theta_B - \alpha)}{r'}, \quad (3.25)$$

onde R é o raio de curvatura da superfície do cristal, f é a distância focal, r a distância entre o objeto e o elemento óptico focalizante, r' a distância entre o elemento óptico e a imagem, θ_B o ângulo de Bragg e α o ângulo de assimetria.

Essa nova configuração dá origem à um novo termo $\Delta\theta_{curv}$ para a resolução de energia. Isto ocorre por que a curvatura do cristal faz com que o ângulo de incidência da radiação com a superfície seja diferente ao longo do cristal. O valor de $\Delta\theta_{curv}$ é dado por [Ciocchi et al., 2000]

$$\Delta\theta_{curv} = \frac{L}{2} \left| \frac{\sin(\theta_B + \alpha)}{r} - \frac{\sin(\theta_B - \alpha)}{r'} \right|, \quad (3.26)$$

de forma que a resolução de energia total é a convolução das contribuições da largura de Darwin, da divergência geométrica $\Delta\theta_B$ e do erro angular ao longo da superfície curva:

$$(\Delta E)^2 = (\Delta E_{Bragg})^2 + (\Delta E_{Darwin})^2 + (\Delta E_{curv})^2, \quad (3.27)$$

$$\frac{\Delta E}{E} = \sqrt{(\Delta\theta_B)^2 + (\omega_D)^2 + (\Delta\theta_{curv})^2} \cot \theta_B. \quad (3.28)$$

Porém, é possível escolher r e r' adequadamente de forma a cancelar o termo $\Delta\theta_{curv}$. Impondo $\Delta\theta_{curv} = 0$ em Eq. 3.26 chegamos à

$$\frac{r'}{r} = \frac{\sin(\theta_B - \alpha)}{\sin(\theta_B + \alpha)} = -\frac{1}{\gamma}. \quad (3.29)$$

À essa relação denomina-se *condição de Guinier*. Recordando que a relação $\frac{r'}{r}$ é a magnificação (Eq. 3.2) e que o termo à direita se relaciona ao fator de assimetria γ (Eq. 2.85), chegamos à

$$M = -\frac{1}{\gamma}. \quad (3.30)$$

Ou seja, para magnificação igual à $-\gamma^{-1}$ o termo da resolução de energia devida à focalização será nulo. Um sistema óptico nesta configuração é denominado *óptica de Johan*[Johann, 1931] e a condição de Guinier aplicada à Eq. 3.25 produz

⁵Não serão tratadas as propriedades focalizantes de um cristal na geometria de Laue, que podem ser encontradas em [Mammen, 2001] para focalização longitudinal e em [Zhong et al., 2001a] e [Zhong et al., 2001b] para focalização sagital.

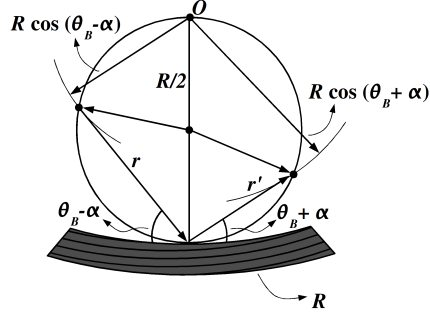


Figura 3.9: Configuração óptica para cristal focalizante na Geometria de Johann, onde a resolução em energia $\Delta E/E$ é otimizada quando a imagem está sobre o círculo de Rowland. Os ângulos θ_i e θ_e são os ângulos de incidência e de emergência, cujo valores são respectivamente $\theta_B - \alpha$ e $\theta_B + \alpha$

$$r = R \sin(\theta_B - \alpha), \quad (3.31)$$

$$r' = R \sin(\theta_B + \alpha), \quad (3.32)$$

e o ângulo de corte α em função da magnificação, à partir de 2.88, é dado por

$$\tan \alpha = \left(\frac{1 - M}{1 + M} \right) \tan \theta_B. \quad (3.33)$$

Como em geral o objetivo de uma óptica focalizante é diminuir o tamanho da imagem, então em geral deseja-se $M < 1$, o que leva à um valor de $\gamma < -1$. Como pode ser visto na figura 2.20b, γ tem valores menores que -1 na geometria de Bragg para um valor de α maior que zero. Como discutido no Capítulo 2.3.2, nessa condição a largura de Darwin será necessariamente maior do que na condição $\alpha = 0$ (Eq. 2.87). Assim, cancelando o termo $\Delta\theta_{curv}$ e demagnificando a imagem, obrigatoriamente haverá um aumento da largura de Darwin.

No entanto, a geometria de Johann exige que, para manter constantes as distância monocromador-objeto e monocromador-imagem, selecione-se o raio de curvatura adequado para a energia de Bragg desejada. A seleção do raio de curvatura pode ser obtida aplicando-se uma força às extremidades do cristal, forçando com que ele se dobre (Ref. [Sparks et al., 1982]). Isso dificulta o uso da geometria de Johann para experimentos que utilizam diferentes comprimento de onda e faz com que ela seja mais adequada para técnicas que fazem uso de radiação com comprimento de onda fixo (sem alteração durante um experimento), como as técnicas de difração (difração de cristais, difração de pó, cristalografia de proteínas).

Uma interpretação geométrica da óptica de Johann é mostrada na Fig. 3.9. Uma vez que as distâncias r e r' são dadas pelas equações 3.31 e 3.32, por

trigonometria é possível mostrar que, tomando uma origem O à uma distância R do cristal em uma direção perpendicular à superfície, qualquer objeto sobre o círculo de raio $R \cos(\theta_B - \alpha)$ irá gerar uma imagem sobre o círculo de raio $R \cos(\theta_B - \alpha)$.

Além disso, se o objeto estiver sobre o círculo de raio $R/2$ com origem à uma distância $R/2$ da superfície na direção perpendicular, a imagem também estará sobre o mesmo círculo e as distâncias r e r' estarão na condição de Guinier. Ao círculo de raio $R/2$ denomina-se *círculo de Rowland*. Resumindo, um objeto sobre o círculo de Rowland também terá uma imagem sobre o círculo de Rowland e a resolução de energia será minimizada, uma vez que a condição de Guinier estará satisfeita.

3.2.4 Focalização Sagital

Além das questões geométricas que diferenciam a focalização longitudinal da sagital, o fato de que um feixe de radiação síncrotron tenha uma divergência na direção horizontal maior do que na vertical faz com que a focalização sagital tenha características distintas da focalização longitudinal.

No caso de focalização por cristais, essa divergência diminui significativamente a intensidade refletida uma vez que apenas a fração do feixe com divergência menor que a largura de Darwin será refletida.

No entanto, além de focalizar o feixe, com focalização sagital é possível aumentar a intensidade refletida com a escolha adequada do raio de curvatura. Devido à curvatura sagital do cristal, a fração do feixe que irá incidir dentro da aceitância angular da largura de Darwin será superior ao caso de um cristal plano. Além disso, independente da divergência do feixe, para energias superiores à 10KeV , com uma magnificação de $M_{sag} = 1/3$ a fração do feixe dentro da largura de Darwin será maximizada [Sparks et al., 1980].

O uso de cristais para focalização acima de 10KeV é preferível em relação aos espelhos uma vez que acima desta energia, com a diminuição do ângulo crítico da reflexão, um espelho deve trabalhar à ângulos de incidência cada vez mais rasantes, o que diminui o raio de curvatura sagital ($\alpha \rightarrow 0$ em Eq. 3.13) e consequentemente a aceitância horizontal do espelho.

Abaixo de 10KeV o uso de espelhos é mais vantajoso devido à simplicidade de sua fabricação e operação. A principal vantagem de um espelho é que não há necessidade de movimentá-lo ou alterar seu raio de curvatura caso se deseje alterar a energia dentro de sua faixa de operação uma vez que o foco é fixo para qualquer energia.

3.3 Espelhos Multicamadas

No Capítulo 2.4 estudou-se as propriedades da reflexão de radiação eletromagnética em uma interface onde as equações de Fresnel, Eq. 2.94 e Eq. 2.95, permitem determinar a fração da radiação incidente em uma interface que é refletida.

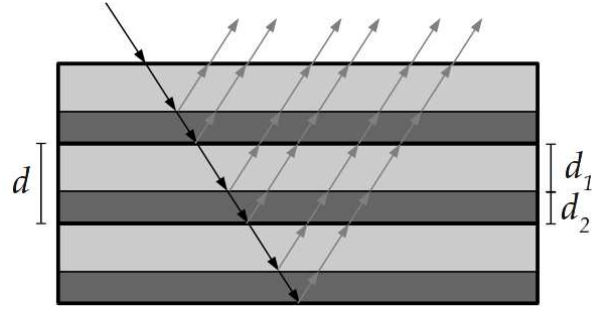


Figura 3.10: Esquema da refletividade em um espelho multicamadas. Em cada interface há uma fração da radiação refletida e outra transmitida, onde a parte transmitida é refratada. As setas em azul representam a radiação incidente, em vermelho a radiação refletida e em tracejado a direção de propagação da radiação na camada anterior, evidenciando o efeito de refração.

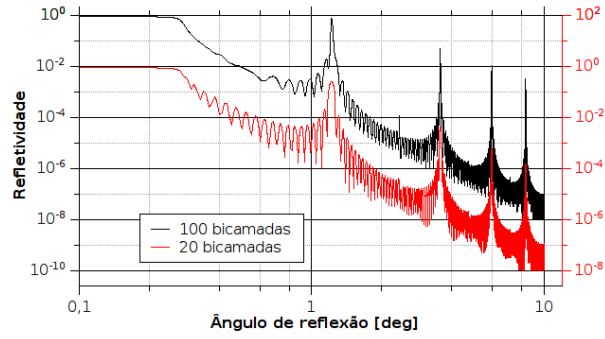
Em geral as propriedades dos materiais fazem com que a reflexão de radiação na faixa de energia de raios-X seja muito pequena, fazendo com que espelhos de raios-X só sejam viáveis quando utilizados com incidência rasante, abaixo do ângulo crítico (Eq. 2.112).

Uma forma encontrada para obter uma refletividade da ordem de 80% para ângulos maiores que o ângulo crítico é a de sobrepor várias interfaces de materiais diferentes de forma que o feixe transmitido por uma interface seja refletido por uma interface subsequente (Fig. 3.10). Como resultado, para energia de 10KeV obtém-se ângulos de reflexão da ordem de 1° , enquanto que o ângulo crítico em geral é menor que $0,3^\circ$ (Fig. 3.11a).

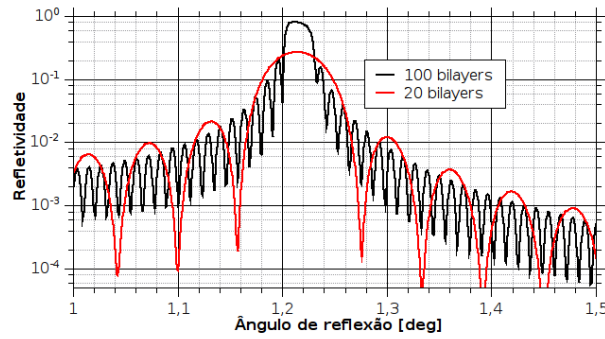
A refletividade de uma interface é maior para diferenças maiores entre os índices de refração de cada meio. Uma vez que o índice de refração, para dada energia, é maior para elementos com maior número atômico, então uma interface de um material leve com um pesado tende a ter uma maior refletividade. Assim, um multicamadas típico é feito sobrepondo camadas de $10\text{\AA}$ a $100\text{\AA}$ alternando materiais leves e pesados.

Além disso, sobrepondo camadas com mesmas espessuras de forma periódica ocorre um efeito de sobreposição da radiação refletida semelhante à interpretação de Bragg para a difração dinâmica (ver descrição de Darwin, Cap. 2.3.2). A diferença na reflexão de um multicamadas é que deve-se considerar a refração da radiação ao atravessar cada interface (ver representação da refração ao longo das multicamadas em Fig. 3.10). Mesmo que haja pouca diferença entre o índice de refração dos meios para a energia dos raios-X duros, por haver um número grande de interfaces este efeito torna-se relevante.

A forma de obter a refletividade teórica de um multicamadas faz uso de um método recursivo onde determina-se a refletividade e o ângulo de refração de cada interface em função do ângulo de incidência, que por sua vez é determinado pelas propriedades da interface anterior.

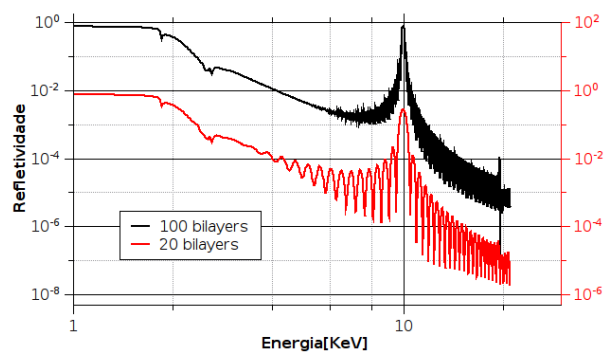


(a)

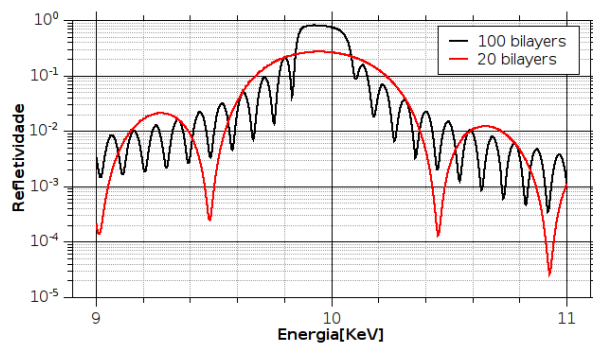


(b)

Figura 3.11: (a) Refletividade de radiação de 10KeV em função do ângulo de incidência em um multicamadas de Silício e Molibdênio, cada camada com $15\text{\AA}$ de espessura. São apresentados dados para 100 bicamadas e 20 bicamadas deslocados na direção vertical para não se sobreporem, de forma que o eixo da curva para 20 bicamadas é apresentada à direita, em vermelho. Os picos são enumerados da esquerda para direita (no sentido crescente do valor angular), a menos do pico próximo de zero da reflexão total abaixo do ângulo crítico.(b) Detalhe do pico 1 em $1,22^\circ$.



(a)



(b)

Figura 3.12: (a) Reflexão do mesmo espelho multicamadas da Fig. 3.11 para um ângulo de reflexão de $1,22^\circ$ em função da energia. Como na Fig. 3.11a, novamente são apresentados dados para 100 bicamadas e 20 bicamadas deslocados na direção vertical para não se sobreporem, de forma que o eixo da curva para 20 bicamadas é apresentada à direita, em vermelho. (b) Detalhe de (a) em uma faixa de energia menor.

Esses cálculos são feitos utilizando programas computacionais e um exemplo de um gráfico obtido pela ferramenta *mlayer* com o programa *XOP* [del Rio and Dejus, 1997] pode ser visto nas Fig. 3.11a e 3.11b. Observa-se uma refletividade próxima à 100% para ângulos menores que 0.25° devido à reflexão total abaixo do ângulo crítico e uma sequência de máximos isolados com intensidade que decrescem com o aumento do ângulo de incidência e que aumentam com o número de camadas.

Utilizando os espelhos multicamadas de Silício e Molibdênio da Fig. 3.11, observa-se que o primeiro pico tem uma refletividade de 82% para o espelho de 100 bicamadas e 27% para o de 20 bicamadas. No segundo pico temos uma refletividade de 5% no caso de 100 bicamadas e 0,04% para o de 20 bicamadas.

Um espelho multicamadas pode ser utilizado tanto como espelho como monocromador de um feixe branco, já que ele é capaz de extrair uma banda passante $\frac{\Delta E}{E}$ da ordem de 1%. A possibilidade de utilização de um multicamadas como monocromador é determinada pelas restrições de resolução das técnicas que farão uso do feixe monocromatizado, como mostrado na Tabela 3.1.

Mas a vantagem da utilização de um espelho multicamadas como monocromador é que ele fornece uma intensidade refletida de um feixe branco superior ao de um cristal de Silício. Isso se deve ao fato de que o multicamadas reflete uma faixa de energia maior do que um cristal. Enquanto um cristal reflete um feixe dentro de um intervalo de $\Delta E \approx 1eV$, um multicamadas pode refletir intervalos desde $\approx 60eV$ até $\approx 300eV$ na faixa de $8KeV$ à $12KeV$.

Capítulo 4

Projeto Óptico da linha de luz

Uma vez entendidas as propriedades das fontes de radiação síncrotron, da interação dos raios-X com a matéria e dos dispositivos ópticos para raios-X, aplicaremos estes conceitos no projeto óptico de uma linha de luz.

A intenção deste projeto é obter um projeto de linha de luz que traga uma melhora de desempenho para determinada comunidade de usuários do LNLS. No presente trabalho será estudado o caso da linhas de luz de cristalografia de proteínas.

A instrumentação estado da arte para uma linha de luz para cristalografia de proteínas, a exemplo das instalações atuais mais modernas e dentro das atuais limitações tecnológicas, é constituída de um anel que gere radiação de alto brilho (alta densidade de fótons de baixa divergência) com energia dos elétrons alta o suficiente para gerar raios-X duros com um Ondulador. Uma linha de luz estado da arte seria constituída de um monocromador de cristal duplo e de dois espelhos na configuração *Kirkpatrick-Baez* [Ciocci et al., 2000] para focalização nos sentidos vertical e horizontal¹.

No atual anel de armazenamento do LNLS, além do baixo brilho, devido à energia dos elétrons de $1,37\text{GeV}$ (parâmetros listados na Tab. 4.1) e dada a atual tecnologia de fabricação de Onduladores, não é possível gerar raios-X duros com um Ondulador. Limitado pela impossibilidade de usar uma fonte de Ondulador, o uso de instrumentação estado da arte também é comprometido, uma vez que não há ganhos significativos em sua utilização com uma fonte de dipolo ou de Wiggler.

Um novo anel de armazenamento para a comunidade científica brasileira está sendo projetado e deverá ter como principais características um alto brilho e uma energia dos elétrons alta o suficiente para que um Ondulador gere um alto fluxo de radiação com energias superior à 10KeV (parâmetros do projeto

¹Um exemplo de tal configuração é a linha PROXIMA2, do laboratório francês SOLEIL (<http://www.synchrotron-soleil.fr/Recherche/LignesLumiere/PROXIMA2>).

	LNLS Atual	LNLS Novo	Soleil (França)	Diamond (Inglaterra)	Shangai
Energia (GeV)	1,37	3	2,75	3	3,5
Diâmetro (m)	30	137	113	179	137
Brilho dipolos à 10KeV[†]	1	$5,6 \cdot 10^3$	$1,6 \cdot 10^3$	$3,6 \cdot 10^3$	$2,2 \cdot 10^3$
Brilho dipolos à 50KeV[†]	1	$2,5 \cdot 10^{10}$	$1,9 \cdot 10^9$	$4,4 \cdot 10^9$	$5,8 \cdot 10^9$
Número de linhas de dipolo	24	20	32	48	40
Número de linhas de trecho reto	4	18	22	22	18
Emitância (nm·rad)	100	1,7	3,7	2,7	3,9

Tabela 4.1: Parâmetros da máquina atual do LNLS e do projeto da nova máquina, comparado com os parâmetros de algumas máquinas de outros laboratórios.

[†]Normalizado pelo valor da máquina atual.

do novo anel são vistos na Tab. 4.1). Além disso, as propriedades da radiação de um Ondulador permitem o uso de óptica estado da arte, melhorando significativamente o desempenho final da linha de luz.

Dado a limitação de uso de Onduladores para gerar radiação de raios-X duros, uma linha de luz que opere nesta faixa de energia na atual máquina do LNLS deve fazer uso da radiação emitida pelos dipolos ou por um Wiggler.

Este trabalho busca então propor um projeto óptico de linha de luz, dentro das atuais limitações tecnológicas e da atual máquina, que tenha um ganho de desempenho quando comparada às atuais linhas de luz.

Instalações Atuais

No presente caso da técnica de cristalografia de proteínas, atualmente a comunidade tem a disposição no anel do LNLS duas linhas de luz:

- *Linha MX1*: uma das primeiras linhas do laboratório, a linha MX1 tem como fonte um dipolo magnético e conta com um sistema óptico simples, constituído de um espelho de Ródio para focalização vertical, e um monocromador de cristal de Silício com corte assimétrico de $7,5^\circ$ e focalização horizontal (Fig. 4.1a);
- *Linha MX2*: primeira linha à utilizar um elemento de inserção no LNLS, a linha MX2 utiliza um Wiggler de 2 Tesla de parâmetro K igual à 33,6 como fonte de radiação (parâmetros do Wiggler em Tabela 4.2), um espelho de Ródio em formato cilíndrico para colimar o feixe na vertical, um monocromador de cristal duplo plano de Silício e um espelho toroidal de Ródio para focalização nas direções vertical e horizontal (Fig.4.1b).

Na Figura 4.1b é possível observar que a linha MX2 utiliza apenas uma fração do feixe do Wiggler: enquanto a fonte emite um leque de radiação de $12,5\text{mrad}$, a linha MX2 utiliza apenas $1,5\text{mrad}$ da parte central deste leque.

Assim, fazendo uso da parte do feixe não utilizada na linha MX2 poderia-se construir uma linha anexa que utilize a parte lateral adjacente ao feixe já utilizado. Essa linha tiraria vantagem do fluxo superior fornecido pelo Wiggler quando comparado à uma linha cuja fonte é um dipolo.

Além disso, para aumentar o fluxo final obtido pode-se utilizar um monocromador com espelho multicamadas ao invés de um projeto típico com cristal de Silício. Porém, um espelho multicamadas típico tem banda passante de $\frac{\Delta E}{E} \approx 1\%$, o que é inviável para a técnica de cristalografia de proteínas. No entanto, um esforço da equipe do laboratório CHESS (*Cornell High-Energy Synchrotron Source*) tornou possível fabricar espelhos multicamadas com banda passante de $\frac{\Delta E}{E} \approx 0,2\%$ [Kazimirov et al., 2006], viabilizando a utilização de multicamadas como monocromadores para a técnica de cristalografia de proteínas [Deacon et al., 1998].

A dificuldade de se utilizar um multicamadas nestes projetos é a limitação de acomodação física dado o baixo ângulo de reflexão, na faixa de $\approx 1^\circ$ à 2° .

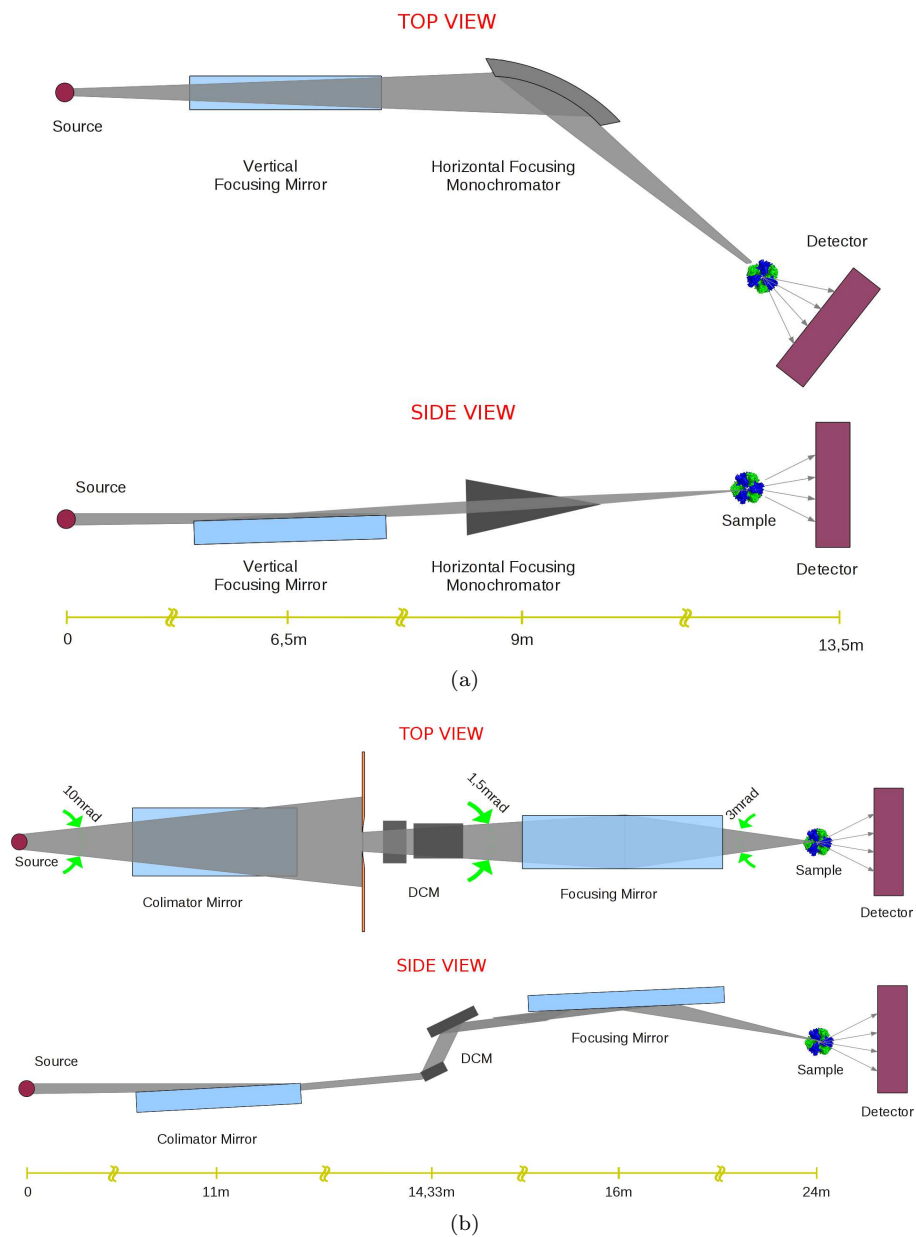


Figura 4.1: Esquema Óptico das linhas (a) MX1 e (b)MX2.

Este fator pode ser determinante na viabilidade do projeto por problemas de acomodação física junta à linha atual.

Além das opções de linha lateral com cristal ou multicamadas, existe a possibilidade de substituir o atual cristal do monocromador da linha MX1 por um multicamadas, uma vez que seria uma alternativa de fácil implementação e a possibilidade de obter um fluxo comparável ao atual da linha MX2, a depender da banda passante escolhida.

Sendo assim, considerando as necessidades e ponderando a facilidade de implementação, determinou-se três configurações ópticas que serão estudada como opções de uma nova linha para cristalografia de proteínas:

1. linha lateral para a MX2² com monocromador de cristal de Silício;
2. linha lateral para a MX2 com monocromador de espelho multicamadas;
3. substituição do cristal do monocromador da linha MX1 por um multicamadas.

A comparação de desempenho dos projetos será feita analisando algumas figuras de mérito, nesse caso o fluxo final em uma área de dimensões $0,4 \times 0,4 \text{ mm}^2$, de $0,1 \times 0,1 \text{ mm}^2$ (valores típicos em um experimento) e o fluxo total de cada projeto. As energias de operação para a qual os desempenho serão analisados serão em $8,5 \text{ KeV}$, a energia onde o fluxo da linha MX2 é máximo, e em $12,4 \text{ KeV}$, energia correspondente ao comprimento de onda da radiação de $1 \text{ \AA}$.

4.1 Simulações de traçamento de raios

Para a avaliação de desempenho das configurações consideradas e das linha atuais foi utilizado um programa computacional de simulação por um método denominado *traçamento de raios* (*ray tracing*).

O programa utilizado chama-se *shadow*[Welnak et al., 1994], um programa otimizado para o projeto de óptica de linhas de luz para radiação síncrotron utilizando o método de traçamento de raios. Ele gera e propaga um feixe (uma coleção de raios individuais) ao longo de um sistema óptico.

Do ponto de vista do programa, cada raio é um conjunto de variáveis com significado físico, como coordenada espacial, direção de propagação, vetor de polarização, energia, etc. A fonte é o início de cada raio e suas propriedades são determinadas pelo método de *Monte Carlo* à partir das distribuições espaciais, angulares e de energia das fontes de radiação síncrotron em um anel de armazenamento (*i.e.* dipolo defletor, Wiggler e Ondulador).

À partir das propriedades físicas de um raio, o programa calcula como ele intercepta o próximo elemento óptico e as propriedades do raio após o elemento

²Faremos referência à linha atual da MX2 como *linha central*, uma vez que ela utiliza a parte central do leque de radiação do Wiggler, e para *linha lateral para a MX2* apenas como *linha lateral*.

óptico (*e.g.* nova direção de propagação e intensidade) de acordo com as propriedades ópticas determinada pela física de cada elemento (reflexão em interfaces, difração dinâmica, etc). No caso de um elemento óptico finito, um raio que não incida na região delimitada por ele recebe um rótulo de "raio perdido".

Após determinado elemento óptico, o programa calcula as propriedades dos raios no próximo elemento, e assim sucessivamente até o último elemento. Os raios após o último elemento óptico na posição da imagem é o que se utiliza como resultado.

O programa tem ainda incorporado outras funcionalidades que auxiliam o procedimento de simulação, como o cálculo de raios de curvatura de elementos ópticos, e interface gráfica para visualização dos resultados.

Além disso, um extenso banco de dados sobre interação de radiação com a matéria tornam a ferramenta extremamente útil para simular o sistema óptico real de uma linha de luz.

4.2 Linha Lateral

4.2.1 Tamanho Aparente da Fonte

Um problema que surge ao tratar uma linha lateral é que há uma mudança de tamanho aparente da fonte. Isso se deve ao fato de que a fonte do Wiggler tem uma grande extensão na direção de propagação dos elétrons (da ordem de alguns metros) quando comparado às dimensões nas direções transversais à propagação (da ordem de milímetro).

Tomando o sistema de coordenadas da Fig. 1.6a, temos que a linha central estará centralizada em torno do eixo central em $x = y = 0$. Por sua vez, uma linha lateral estará centralizada em $y = 0$, mas na horizontal o centro estará deslocado do eixo central ($x \neq 0$). Assim, enquanto uma linha central enxergaria uma fonte pontual, uma linha lateral enxerga a projeção de uma reta. Isso ocorre mesmo no caso ideal de uma fonte sem espessura, onde considera-se o pacote de elétrons pontual e a movimentação transversal dentro do Wiggler como nula.

Assim, uma vez que a linha central utiliza 1,5mrad do feixe do Wiggler, vamos utilizar para a linha lateral o leque de 1,5mrad adjacente à linha central, estando centralizada à 1,5mrad do eixo da linha central.

Com isso em mente, será feito o estudo de tamanho aparente visto por uma linha lateral à partir de três abordagens distintas: primeiramente considerando o caso ideal de um pacote de elétrons pontual e de movimentação transversal nula dentro do Wiggler; à seguir considerando as dimensões do pacote e a movimentação do pacote dentro do Wiggler; e por último por simulações de traçamento de raios.

Fonte Pontual - Abordagem Geométrica

Sendo o comprimento do Wiggler $l = N\lambda_p$, onde N é o número de dipolos e λ_p o período do Wiggler (Cap. 1.3), vamos considerar a fonte de um Wiggler como

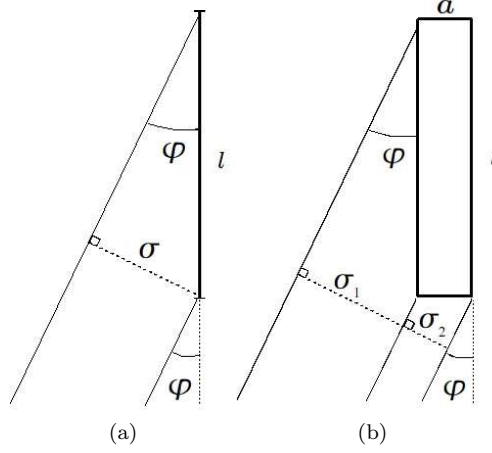


Figura 4.2: Geometria para o cálculo de tamanho aparente de fonte (a) pontual e (b) espessa.

uma reta de comprimento l na direção $\hat{z}$ e sem dimensão nas direções $\hat{x}$ e $\hat{y}$.

A Fig. 4.2a mostra a geometria do problema à partir da visão do plano xy . Assim, por trigonometria, temos que um observador à um ângulo φ da direção de propagação enxerga essa fonte com um tamanho horizontal aparente σ de

$$\sigma = l \sin \varphi. \quad (4.1)$$

Fonte Espessa - Abordagem Geométrica

Considerando agora uma fonte com dimensão horizontal de a (Fig. 4.2b) temos que o tamanho aparente σ visto por um observador à um ângulo φ será de

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2, \quad (4.2)$$

$$\sigma = l \sin \varphi + a \cos \varphi. \quad (4.3)$$

Quanto à largura a da fonte, teremos dois fatores que a constituem: a largura do pacote de elétrons e o deslocamento do pacote dentro do Wiggler. Esses fatores se somam e seus valores podem ser vistos na Tabela 4.2. Para efeito de comparação, trataremos o efeito de mudança de tamanho aparente do Wiggler Supercondutor, o terceiro elemento de inserção do LNLS (Ref. [Meyer, 2009]), que também tem seus parâmetros listados na Tabela 4.2.

Aplicando então a Eq. 4.2 aos parâmetros de cada Wiggler, teremos o tamanho aparente em função do ângulo de observação. Os resultados podem ser vistos na Fig. 4.3a e na Fig. 4.3b. Observa-se que para ângulo próximos de zero

Parâmetro	Wiggler MX2	Wiggler Supercondutor
$l[m]$	2,52	1,02
Número de Períodos N	14	17
Período do Wiggler $\lambda_p[cm]$	18	6
Campo Magnético Máximo [Tesla]	1,97	4,1
Parâmetro K (Eq. 1.26)	33,6	22,97
Energia Crítica [KeV]	2,46	5,12
Tamanho Horizontal Pacote [μm]	1250	1250
Tamanho Vertical Pacote [μm]	28	28
$x_{max}[\mu m]$ (Eq. 1.28)	359,04	81,81
$\vartheta_{max} [mrad]$ (Eq. 1.24)	12,53	8,56

Tabela 4.2: Parâmetros do Wiggler MX2 e do Wiggler Supercondutor. Os 5 primeiros parâmetros são da própria construção de cada Wiggler, os tamanhos de pacote são parâmetros do anel de armazenamento nos trechos retos, e os dois últimos são calculados pelas equações fornecidas no Cap.1.3

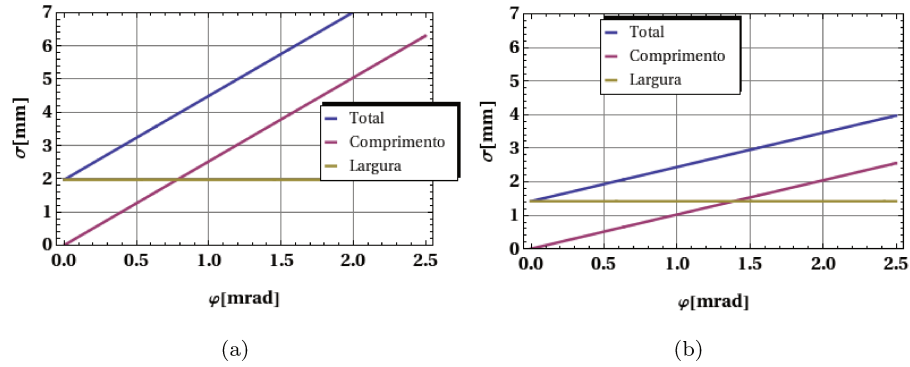


Figura 4.3: Tamanho aparente em função do ângulo de observação para (a) Wiggler MX2 e (b) Wiggler Supercondutor. O termo de comprimento se refere à σ_1 e o termo da largura se refere à σ_2 em Eq. 4.2. Pela figura temos que uma linha lateral à linha MX2 posicionada à 1,5mrad do eixo central terá um tamanho aparente de 5,75mm.

o fator que depende da largura é predominante e que esse fator não sofre grandes alterações no intervalo considerado. Já o fator que depende do comprimento tem um aumento aproximadamente linear com o ângulo de observação.

Assim, considerando que a linha lateral estará centralizada à um ângulo $\varphi = 1,5\text{mrad}$, então uma abordagem puramente geométrica fornece que o tamanho aparente da fonte para a linha lateral na MX2 será de aproximadamente 6mm, enquanto a linha central tem uma fonte de tamanho 2mm.

Fonte Espessa - Abordagem Computacional

Utilizando agora o programa *shadow* para estudar o problema de aumento aparente do tamanho da fonte na linha lateral, foi feita a simulação para o Wiggler da linha MX2 utilizando os parâmetros da Tabela 4.2.

A partir desta simulação, utilizou-se primeiramente uma fenda $15 \times 15\text{mm}^2$ posicionada à 10m da fonte para determinar o feixe da linha central. Para a linha lateral utilizou-se a mesma fenda à 10m da fonte, mas com o centro deslocado horizontalmente em 15mm. Determinou-se assim o feixe efetivo utilizado por cada linha.

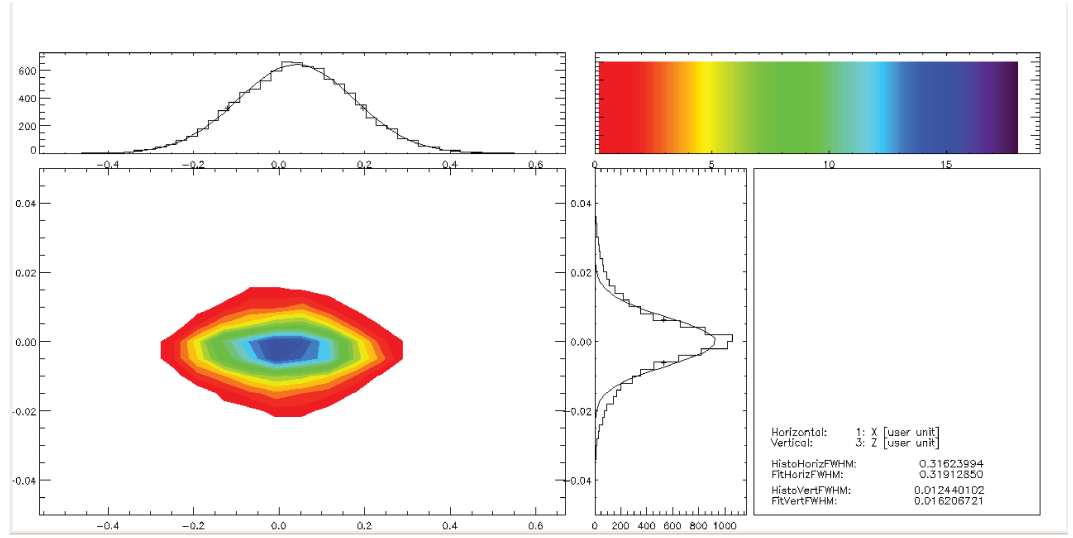
Uma vez que o simulador armazena as propriedades geométricas de cada raio e até o momento não foi utilizado nenhum elemento que altera as propriedades ópticas dos raios, então o simulador permite saber qual dos raios gerados na fonte são efetivamente utilizados por cada linha. Assim, a distribuição espacial desses raios na posição da fonte determinam a *geometria aparente* da fonte para a linha central e linha lateral.

As Figuras 4.4 e 4.5 mostram respectivamente as distribuições espaciais e de divergência dos raios efetivos na posição da fonte, permitindo assim determinar um tamanho e uma divergência efetiva para a fonte.

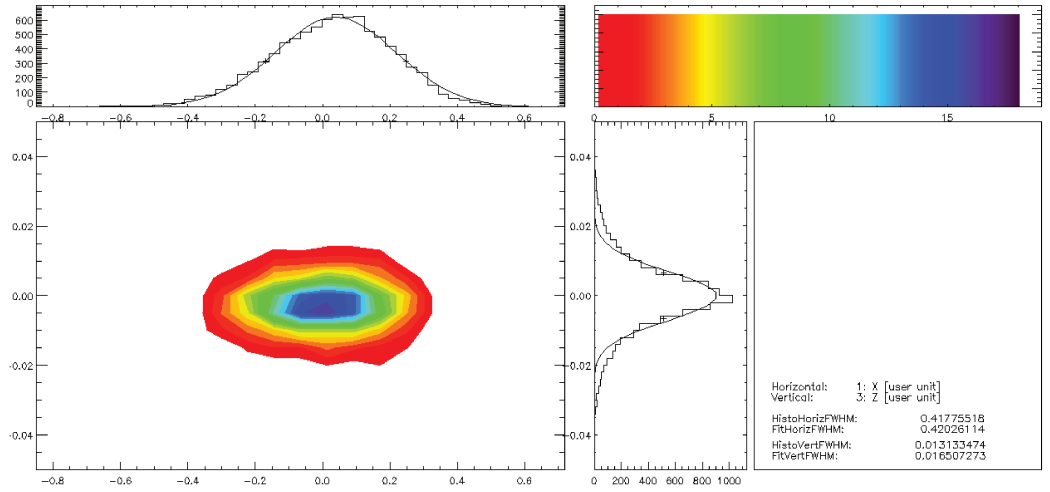
A Tabela 4.4 mostra os valores de largura à meia altura de cada distribuição. Observa-se que o único parâmetro que sofre uma mudança é o tamanho horizontal, que aumenta de 3,191mm para 4,203mm, uma aumento de aproximadamente 32%

Parâmetro	MX1	MX2	Linha Lateral
Tamanho Vertical [mm]	0,019	0,162	0,165
Tamanho Horizontal [mm]	0,094	3,191	4,203
Divergência Vertical [mrad]	0,290	0,308	0,312
Divergência Horizontal [mrad]	7,159	1,299	1,316

Tabela 4.3: Resumo dos resultados do tamanho e divergência aparente da fonte extraídas das Figuras 4.4 e 4.5 obtidas por simulação com o programa *shadow*. Também são listados os valores obtidos pelo mesmo método para alinha MX1.

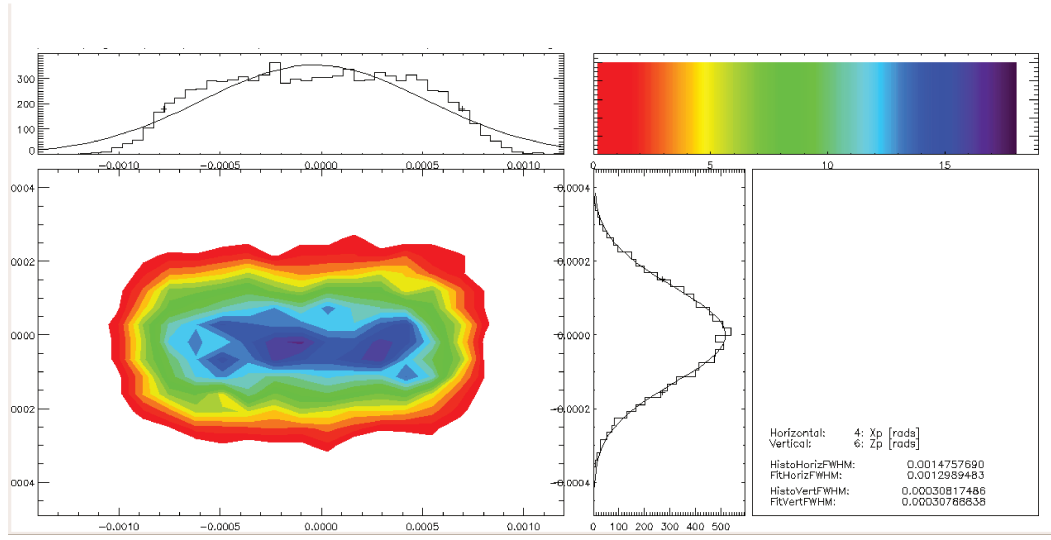


(a)

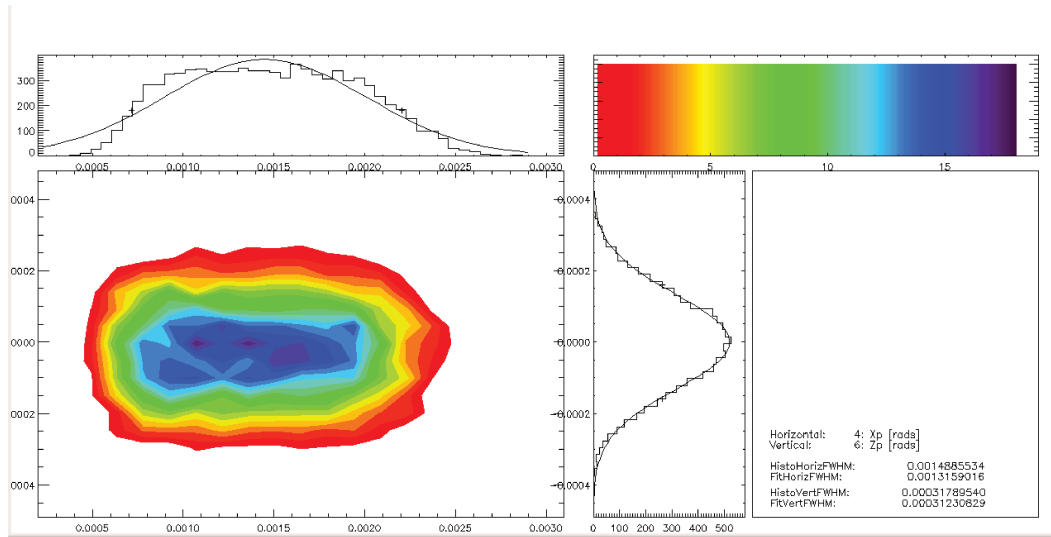


(b)

Figura 4.4: Distribuição espacial dos raios da fonte aparente da (a) linha central e (b) linha lateral.



(a)



(b)

Figura 4.5: Distribuição da divergência dos raios da fonte aparente da (a) linha central e (b) linha lateral.

Tamanho Aparente - Conclusão

Analisando os gráficos da Fig. 4.3 observa-se que o termo $l \sin \varphi$ de Eq. 4.2 é predominante sobre o termo $a \cos \varphi$. Assim, o comprimento da fonte é o fator que mais influencia no aumento de tamanho aparente da fonte para a linha lateral.

Além disso, uma abordagem geométrica simplificada resulta que uma linha lateral à linha MX2 posicionada à 1,5mrad do eixo central terá um tamanho aparente de 5,75mm.

Quanto à simulação de traçamento de raios, o resultado obtido é que a linha central tem uma fonte de tamanho aparente de $\approx 3,1$ mm, enquanto que uma linha lateral posicionada à 1,5mrad da linha central terá um tamanho de fonte aparente de $\approx 4,2$ mm (valores de largura à meia altura). Logo, a linha lateral tem um tamanho aparente 32% maior que a linha central.

Uma vez que a abordagem geométrica desconsidera efeitos considerados na abordagem computacional (*e.g.* geometria do pacote de elétrons, divergência da fonte) esta última tem maior relevância quanto à obtenção de valores numéricos, enquanto que a abordagem geométrica mostra como as dimensões da fonte influenciam o aumento aparente da fonte para linha lateral.

4.2.2 Determinação da óptica da linha lateral

Uma vez entendido e quantificado o aumento aparente de tamanho da fonte para a linha lateral, inicia-se o estudo dos elementos ópticos e sua configuração afim de obter o melhor desempenho final da linha.

O principal objetivo de um sistema óptico de uma linha de luz para cristalografia de proteínas é o de obter um feixe monocromático com a maior densidade de fótons possível. Como as amostras desta técnica têm volume típico entre $0,1 \times 0,1 \times 0,1 \text{ mm}^3$ e $0,5 \times 0,5 \times 0,5 \text{ mm}^3$, então o objetivo será o de obter o maior fluxo em um área da ordem $0,1 \times 0,1 \text{ mm}^2$.

Uma vez que a fonte de radiação, no caso o feixe do Wiggler adjacente ao utilizado pela linha MX2, é policromático e divergente, então a linha de luz desejada deve monocromatizar e focalizar o feixe de radiação da fonte.

Para monocromatizar o feixe temos a opção de utilizar um cristal, tipicamente a reflexão do plano 111 do cristal de Silício, ou um espelho multicamadas.

A focalização pode ser feita por espelhos curvos de incidência rasante, como os descritos no Cap. 3.1. Além disso, pode-se utilizar monocromadores focalizantes tanto com cristais, como na configuração de Johann descrita no Cap. 3.2, como com espelhos multicamadas. A vantagem de utilizar um elemento óptico com duas funções é a de minimizar a quantidade de elementos ópticos em uma linha de luz, já que cada elemento causa uma perda de fluxo pelo fato de as refletividades serem sempre inferiores à 100%.

Por construção, uma linha lateral anexa à MX2 deve fazer uso e estar posicionada após o primeiro espelho da linha MX2. Este é um espelho cilíndrico colimador na direção vertical, sem atuação na direção horizontal.

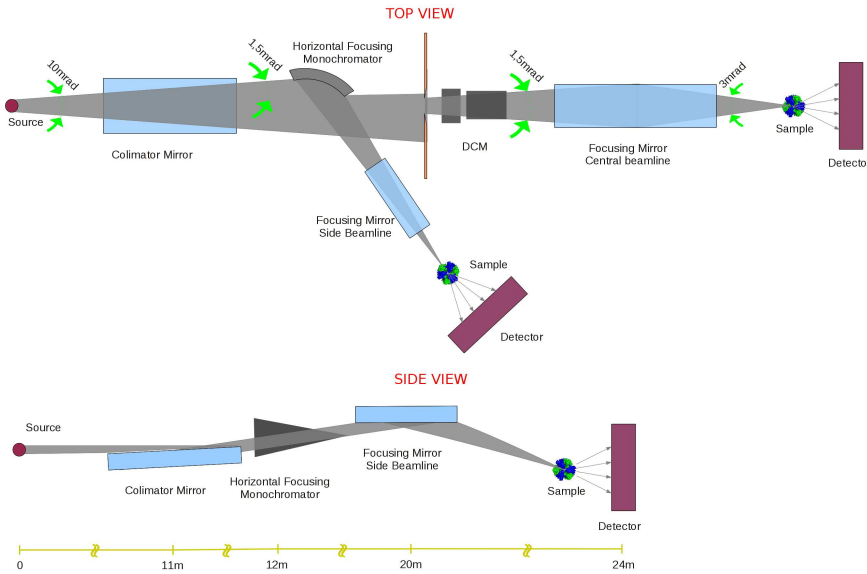


Figura 4.6: Esquema óptico da linha lateral, onde na visão superior visualiza-se também a linha central.

Logo, resta à configuração óptica da linha lateral monocromatizar o feixe, focalizar um feixe divergente na horizontal e focalizar um feixe colimado na vertical. Assim, é proposto utilizar um monocromador com focalização longitudinal horizontal e um espelho cilíndrico para focalização vertical. Um esquema é mostrado na Fig. 4.6

Linha Lateral Com Cristal de Silício

Para uma óptica focalizante de cristal utiliza-se a geometria de cristal focalizante de Johann (Cap. 3.2.3). Nesta geometria os parâmetros magnificação, ângulo de corte, raio de curvatura, ângulo de incidência e reflexão do cristal são vinculados entre eles. Uma vez que um deles é determinado para dada energia de trabalho e dada reflexão (*e.g.*, reflexão 111 ou 311 do Silício, ou 111 do Germânio) os outros serão calculados pelas equações do Cap. 3.2.3.

O problema da geometria de Johann é que ela intrinsecamente sofre de aberração esférica. Em uma óptica livre de aberração, o tamanho da imagem seria menor para magnificações menores (Eq. 3.2). Porém, o aumento do tamanho da imagem pelo efeito de aberração também é influenciado pela magnificação. Assim, deve-se obter por simulação qual a magnificação fornece o menor tamanho de imagem (melhor focalização, maior densidade de fótons), uma vez que os efeitos de aberração estão presentes em uma simulação de traçamento de raios.

Dessa forma, os parâmetros à serem otimizados são as magnificações do

monocromador e do espelho focalizador. Como a posição do monocromador já está determinada à ser logo após o espelho colimador que está à 11m do centro do Wiggler, então a distância monocromador-fonte foi fixado à 12m da fonte.

Com a distância monocromador-fonte fixada, determinar a melhor magnificação restringe-se à simular a geometria de Johann para várias distâncias monocromador-imagem, sendo que para cada simulação deve-se utilizar os valores determinados pelas relações da óptica de Johann para ângulo de corte, raio de curvatura, ângulo de incidência e reflexão do cristal.

A escolha da energia de operação para as simulações de otimização da linha lateral foi de 8KeV . Essa energia foi escolhida por ser próxima à energia da linha $K\alpha$ de fluorescência do Cobre ($8,047\text{KeV}$), energia largamente utilizada nas fontes convencionais de raios-X. Para a técnica de cristalografia de proteínas, uma energia maior seria desejável, porém como a energia crítica deste Wiggler é de $2,5\text{KeV}$ e o fluxo de fótons diminui para energia maiores que a energia crítica, a energia de 8KeV seria um compromisso entre fluxo e viabilidade da técnica. Além disso, o maior fluxo da linha MX2 é para energia de $8,5\text{KeV}$ e é de se esperar que a linha lateral tenha um máximo de fluxo próximo desta energia.

Optando por utilizar a reflexão 111 de um cristal típico de Silício, primeiramente simulou-se uma linha com a fonte, o espelho 1 da linha MX2 e um cristal na geometria de Johann para a energia de 8KeV . Para avaliar o desempenho da focalização horizontal não será utilizado ainda o segundo espelho de focalização vertical

Os resultados da simulação são mostrados na Fig. 4.7. Como está sendo avaliado apenas a focalização horizontal, os parâmetros relevantes serão tamanho horizontal da imagem e fluxo. Para avaliar o desempenho final foram escolhidas duas figura de mérito:

1. fluxo final (parâmetro à ser maximizado) dividido pelo tamanho horizontal da imagem (parâmetro à ser minimizado);
2. fluxo final (parâmetro à ser maximizado) dividido pelo tamanho horizontal da imagem e pela banda passante em eV (parâmetros à serem minimizados).

Os resultados das Figuras 4.7 mostram que o fluxo diminui para maiores magnificações (Fig. 4.7d), mas que o tamanho horizontal da imagem tem um mínimo para magnificação igual à 1 (Figuras (Fig. 4.7c) e (Fig. 4.7d)). A banda passante flutua entre $11eV$ e $11,6eV$ (Fig. (Fig. 4.7b)), o que é pouco para excluir a possibilidade de uma flutuação estatística, problema intrínseco de simulações numéricas.

Mesmo com a queda do fluxo com o aumento da magnificação, as duas figuras de mérito deixam claro que a focalização é melhor para magnificação igual à 1 (Fig. 4.7f). O fato de que o menor tamanho da imagem ocorre para magnificação unitária se deve ao fato de que neste valor de magnificação a aberração esférica é minimizada. Como é conhecido que a óptica de Johann sofre de aberração

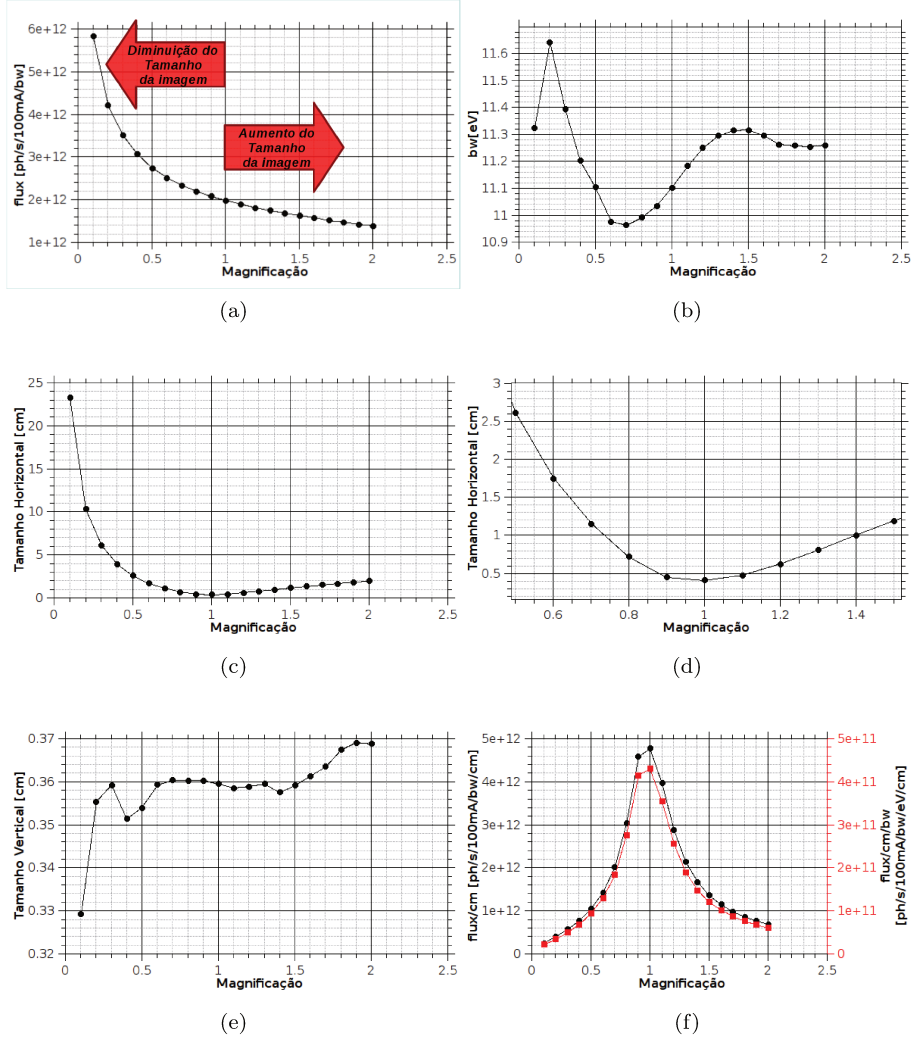


Figura 4.7: Resultados das simulação para escolha da magnificação ideal na direção horizontal pelo monocromador de cristal para a linha lateral. (a) Fluxo com dependência decrescente com a magnificação. (b) Banda passante em função da magnificação. (c) e (d) Tamanho horizontal com mínimo para magnificação unitária. (e) Tamanho da imagem na vertical, mostrando uma variação muito pequena uma vez que a focalização é na horizontal. (f) Figuras de mérito, ambas com máximo em magnificação unitária.

esférica, então não é surpresa que o menor tamanho de imagem ocorra para a magnificação que minimiza a aberração esférica.

Temos então determinado que a magnificação do monocromador será igual à 1, sendo que a imagem final estará posicionada à 12m do monocromador. Assim, o segundo espelho deve ser posicionado neste intervalo.

Para determinar a posição do segundo espelho foram simulados várias configurações de linhas de luz com o espelho 2 em diferentes posições, com o raio de curvatura devidamente ajustado para cada posição uma vez que a distância elemento óptico-imagem é alterada. Optou-se por utilizar um espelho de Ródio operando à 4mrad.

Nas Figuras 4.8 temos os resultados das simulações. Apesar de o fluxo ter um comportamento crescente quanto mais distante do monocromador (e mais próximo da imagem), o aumento é muito pequeno ($\approx 0.01\%$, Fig. 4.8a). Porém o tamanho da imagem tem um valor mínimo próximo de uma distância de 8,0 metros (Fig. 4.8b), sendo então essa a posição ideal do segundo espelho.

Com a configuração óptica determinada, foi simulado se desempenho para várias energias de forma a verificar a escolha de 8KeV. Os resultados são mostrados nas Figuras 4.9, onde em Fig. 4.9a verifica-se um fluxo máximo em 6KeV. Porém, a análise das figuras de mérito em Fig. 4.9c indicam que para 8KeV o desempenho está próximo do ótimo. Mas, uma vez que a linha MX2 tem seu fluxo máximo em 8,5KeV e este valor está próximo da energia onde temos o melhor desempenho, então à partir de agora adotaremos esta energia de operação para as próximas simulações.

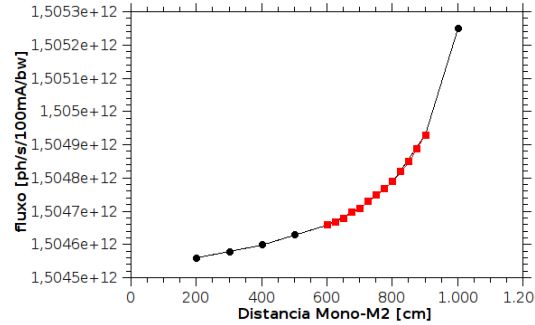
Linha Lateral Com Espelho Multicamadas

Como comentado no início do capítulo, apesar de o ângulo de reflexão de um espelho multicamadas ser muito superior ao ângulo crítico de reflexão (Cap. 3.3), ainda assim deve-se avaliar a possibilidade de acomodação de um monocromador multicamadas junto à linha central.

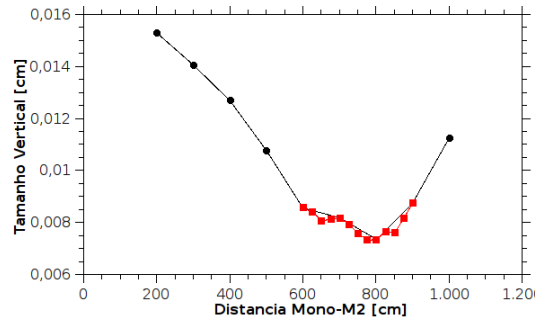
Além da limitação de espaço, ainda deve-se estar atento à banda passante do multicamadas, uma vez que a técnica de cristalografia de proteínas exige uma resolução de energia menor do que a obtida com multicamadas típicos.

Uma vez que a resolução de um espelho multicamadas é limitada pelo processo de fabricação, nas simulações optou-se por utilizar os parâmetros de um multicamadas já fabricado. Assim, optou-se por trabalhar com os parâmetros de um multicamadas em utilização por uma linha de cristalografia, no caso um multicamada de $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{B}_4\text{C}$ (alumina/carboneto de boro) com 280 bicamadas de espessura de 13,5Å, utilizado por Ref. [Deacon et al., 1998]. Os gráficos de desempenho são mostrados nas Figuras 4.10.

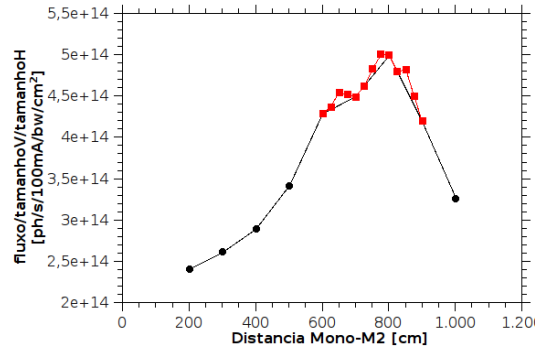
A refletividade em função do ângulo de incidência para radiação de 8,5KeV é vista na Figura 4.10a, onde observa-se que o primeiro pico (Fig. 4.10b) acontece para um ângulo de $1,565^\circ$. Sendo a distância entre o espelho e o monocromador da linha central de 3,33m, então a distância entre o monocromador da linha lateral e da linha central será de 2,33m (ver Figuras 4.1b e 4.6). Considerando que o ângulo total de deflexão do feixe é de duas vezes o de reflexão, somado



(a)



(b)



(c)

Figura 4.8: Resultados das simulações para escolha da posição do espelho focalizador. (a) Apesar do comportamento crescente do fluxo em função da distância mono-espelho, o intervalo de variação é muito pequeno. (b) Mínimo do tamanho vertical e (c) máximo da figura de mérito para distância de 800cm. Em vermelho resultados com um intervalo de amostragem menor.

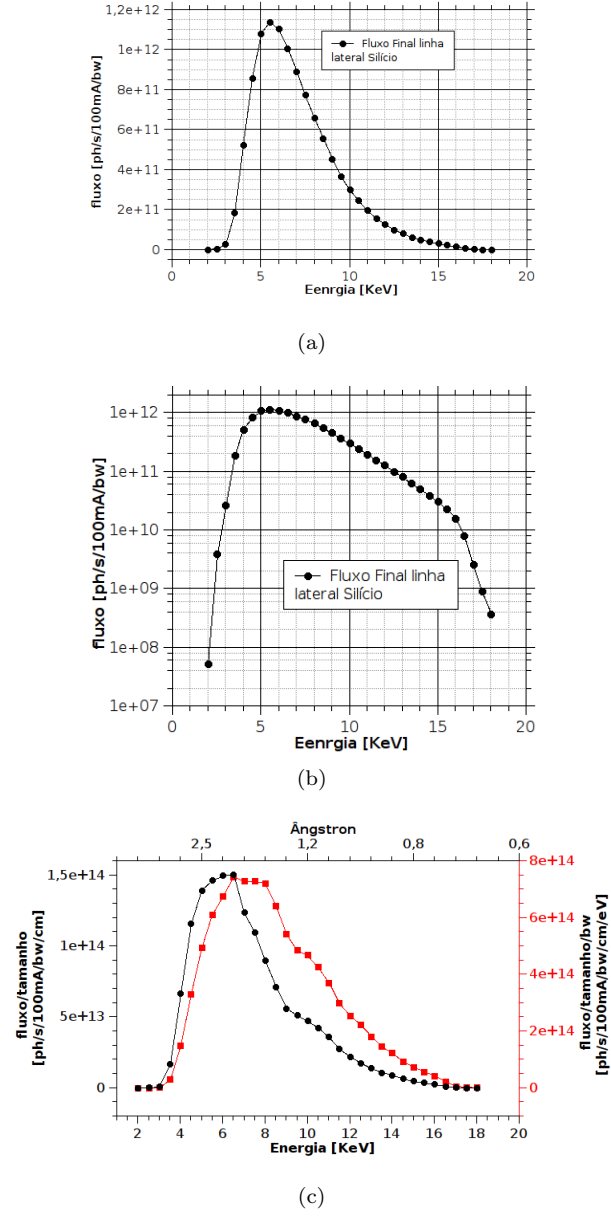


Figura 4.9: Resultados de simulação do desempenho da configuração final da linha lateral de cristal em função da energia de operação. Fluxo em função da energia (a) em escala linear e (b) em escala logarítmica. (c) Figuras de mérito em função da energia, mostrando que pra a energia de operação de 8KeV a linha está próxima do desempenho ideal.

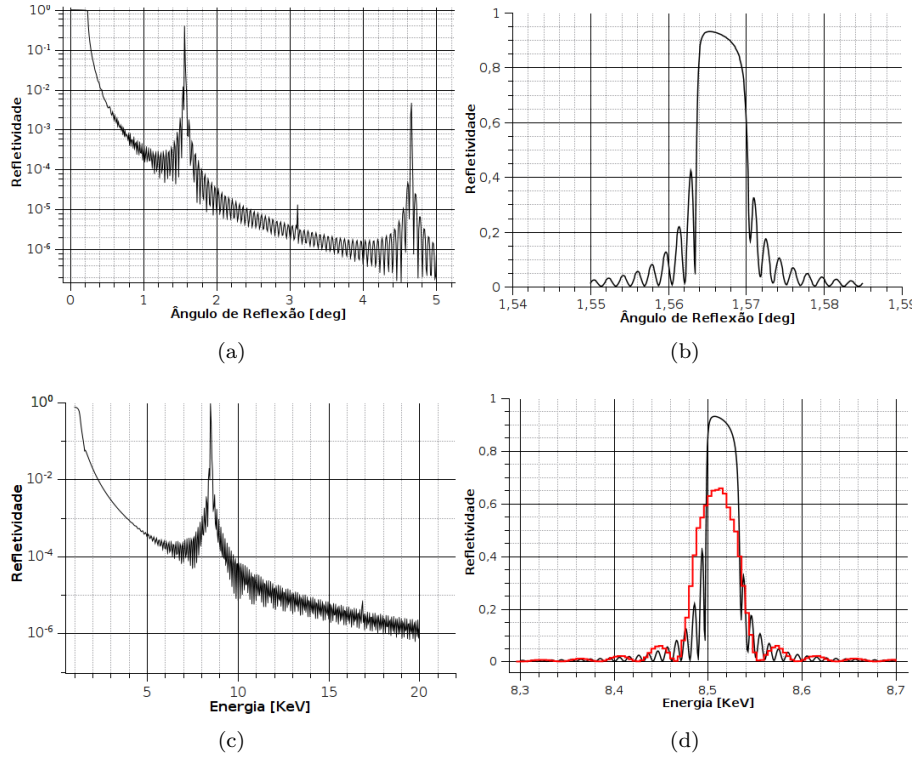


Figura 4.10: Propriedade simuladas do espelho multicamadas do CHES. (a) Refletividade em função do ângulo de reflexão para energia de $8,5\text{KeV}$. (b) Detalhe do pico de $1,565^\circ$. (c) Refletividade em função da energia para o ângulo de reflexão $1,565^\circ$. (d) Detalhe do pico próximo à $8,5\text{KeV}$. Em vermelho a refletividade para um feixe com $\Delta E=400\text{eV}$, onde percebe-se o desaparecimento de alguns picos satélites.

ao 1,5mrad em relação ao eixo da linha central, de um ponto de vista mais prático temos que o feixe da linha lateral estará à apenas 190mm do eixo da linha central, insuficiente para desviar da câmara do monocromador da linha central.

Assim, uma linha lateral com monocromador de espelho multicamadas exige intervir na linha central alterando a câmara de seu monocromador. Por ser uma intervenção de grandes proporções (exige um novo projeto da câmara do monocromador) a utilização de espelho multicamadas para a linha central mostra-se inviável do ponto de vista prático.

Apesar da inviabilidade, foi feita uma simulação simplificada de uma linha lateral com monocromador de multicamadas a fim de comparar seu desempenho com as outras opções e com as linhas atuais. Esse projeto é simplificado no sentido que não foi feita as otimizações de disposição dos elementos ópticos na linha a fim de obter melhor focalização (maior fluxo na menor área).

Neste projeto substituiu-se o cristal de Silício do monocromador do projeto anterior da linha lateral pelo espelho multicamada de $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{B}_4\text{C}$ descrito acima. A única alteração a ser feita é o cálculo do raio de curvatura do espelho multicamadas, uma vez que ele deve focalizar horizontalmente o feixe.

4.3 Substituição do Cristal do Monocromador da MX1 por um Espelho Multicamadas

Uma opção de fácil implementação para as instalações de cristalografia seria substituir o atual cristal do monocromador da linha MX1 por um espelho multicamadas.

Para avaliar o desempenho deste projeto, primeiramente simulou-se a linha MX1 para termos parâmetros de comparação (esquema da linha MX1 em Fig. 4.1a). A simulação do desempenho da linha MX1 com espelho multicamadas consistiu em utilizar os parâmetros do multicamadas de $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{B}_4\text{C}$ do projeto anterior com o mesmo espelho e distâncias atuais da linha MX1.

4.4 Comparação de desempenho entre os projetos

O resultado da simulação dos três projetos é vista na Tabelas 4.4 e 4.5, onde são listados os valores de fluxo total e o fluxo através de aberturas típicas de fendas nos experimentos de $0,4 \times 0,4 \text{ mm}^2$ e $0,1 \times 0,1 \text{ mm}^2$. A Tabela 4.7 mostra os valores de tamanho e divergência da imagem obtida em cada projeto.

Por estas tabelas pode-se observar que o fluxo da linha lateral com monocromador de espelho multicamadas é muito superior aos outros projetos e às atuais instalações. Mas, como comentado, este projeto tem o inconveniente de que o desvio angular do feixe pelo monocromador é muito pequeno, inviabilizando uma linha lateral com monocromador de multicamadas sem alterar a câmara do

monocromador da linha MX2. Por esse motivo de ordem prática este projeto será descartado.

Considerando agora o projetos da linha lateral com monocromador de Si111, temos que a linha lateral tem um desempenho levemente superior ao da linha MX2. Dois fatores fazem com que seja esperado um desempenho semelhante entre a linhas lateral e a central: primeiramente, ambas as linhas têm a mesma aceitância angular do feixe da fonte; além disso a linha lateral esta somente pouco deslocada (1,5mrad) do eixo óptico, de forma que não há grandes diferenças de fluxo em uma diferença tão pequena e com a mesma abertura. Logo, o fluxo superior da linha lateral se deve à banda passante superior (pior resolução em energia) da linha lateral em relação à linha central (Tabela 4.6), que aceita um intervalo de energia maior do feixe branco da fonte.

Finalmente, analisando o desempenho da linha MX1 com monocromador de multicamadas temos que, como esperado, o fluxo final é superior ao atual da linha MX1. Porém, o fluxo é inferior ao da linha lateral com cristal de Si111.

Assim, temos então que a linha lateral com cristal de Si111 tem desempenho superior ao das demais opções avaliadas, sendo que o desempenho desta linha será levemente superior ao da linha MX2. Os gráficos com os resultados são mostrados nas Figuras 4.7.

4.5 Discussão dos resultados

Analisando os resultados na Tabelas 4.4 e 4.5 verifica-se que uma linha lateral com monocromador de multicamadas possui um fluxo muito superior aos das linhas atuais e aos projetos considerados. Porém, essa opção é impraticável por questões de espaço e acomodação junto à linha central devido ao baixo ângulo de reflexão de um multicamadas.

Restam portanto as opções de linha lateral com cristal de Silício e a troca do cristal do monocromador da MX1 por um multicamadas. Comparando o desempenho dessas duas configurações (Fig. 4.11 para 8,5KeV e 4.12 para 12,4KeV), observa-se um desempenho superior da linha lateral com cristal em relação ao uso de multicamadas na MX1, com a vantagem de a banda passante ser menor no caso de uma linha com cristal.

Finalmente determinou-se o máximo parâmetro de rede possível de ser analisado no projeto da linha lateral. Para efetuar estes cálculos foram utilizados os cálculos mostrados no Apêndice A, onde se considera o tamanho da amostra, as características do feixe (banda passante e divergência) e a geometria de detecção. Para cada projeto utilizou-se os valores obtidos pelas simulações para divergência (Tab. 4.7) e pra a banda passante (Tab. 4.6). Os resultados são mostrados na Tab. 4.8, e se referem ao máximo parâmetro de rede detectável na pior (D mínimo) e melhor condição (D máximo).

Observa-se que para os casos de monocromador de Silício 111 o valor do parâmetro de rede máximo é igual ao limite do detector CCD. Nesses caso é possível aumentar o máximo parâmetro de rede detectável utilizando um detector com resolução espacial menor.

Mas nos projetos de multicamadas os valores são inferiores aos limites do detector, e a resolução do projeto é o fator determinante para o máximo parâmetro de rede detectável. Além disso, esses valores inferiores limitam o caso científico do projeto.

Por fim, deve-se enfatizar que o uso de simulações é extremamente útil para comparar os desempenhos dos projetos, mas em geral são falhos para fornecer os valores absolutos que são obtidos em um projeto real.

Isso ocorre uma vez que, por mais completo que sejam os modelos físicos utilizados, há sempre aproximações envolvidas. Na medida do possível deve-se haver um esforço para alimentar as simulações e modelos com valores reais e verificar se as previsões são confirmadas na vida real. Isso é válido tanto para as simulações de traçamento de raios quanto para a estimativa de parâmetros de rede máximo.

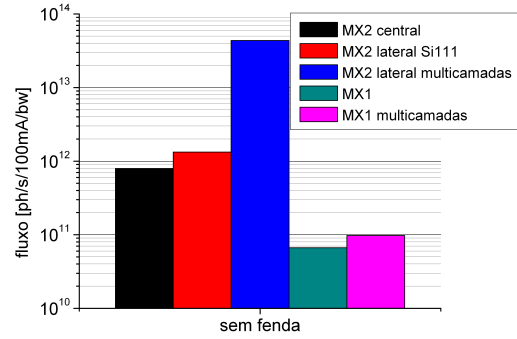
Com isso em mente, a maioria dos resultados descritos neste capítulo devem ser interpretados de maneira relativa. Assim, tomando como referência a linha MX2, temos que o desempenho da linha lateral nos quesitos fluxo e máximo parâmetro de rede têm desempenho comparáveis à linha MX2. O quesito onde o desempenho da linha lateral é pior que a MX2 seria na banda-passante, mas como não há grande diferença entre os parâmetros de rede máximo então não há influência significativa no desempenho final.

Fluxo de fótons à 8,5KeV [γ/s]				
Linha de luz	sem fenda	0,4x0,4mm ²	0,1x0,1mm ²	fluxo fonte [$\gamma/s/eV$]
MX2	$7,938 \cdot 10^{11}$	$1,884 \cdot 10^{11}$	$3,525 \cdot 10^{10}$	$1,447 \cdot 10^{13}$
Linha Lateral	$1,333 \cdot 10^{12}$	$1,209 \cdot 10^{11}$	$3,172 \cdot 10^{10}$	$1,447 \cdot 10^{13}$
Linha Lateral com Multicamadas	$4,351 \cdot 10^{13}$	$3,827 \cdot 10^{12}$	$5,496 \cdot 10^{11}$	$1,454 \cdot 10^{13}$
MX1	$6,655 \cdot 10^{10}$	$2,156 \cdot 10^9$	$2,952 \cdot 10^8$	$2,349 \cdot 10^{11}$
MX1 com Multicamadas	$1,751 \cdot 10^{11}$	$5,793 \cdot 10^{10}$	$3,278 \cdot 10^9$	$2,349 \cdot 10^{11}$

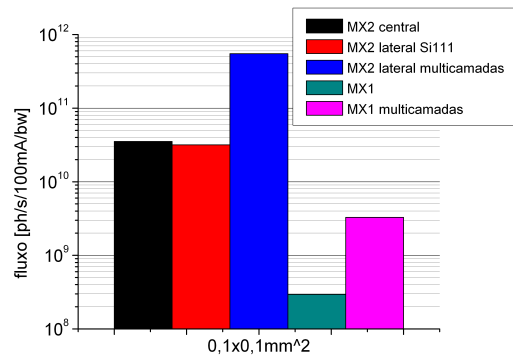
Tabela 4.4: Fluxo de fótons total e através de aberturas de 0,4x0,4mm² e 0,1x0,1mm², para energias de 8,5KeV. Os fluxos são para os projetos considerados, juntamente com o fluxo simulado para as linhas MX1 e MX2 nas condições atuais.

Fluxo de fótons à 12,4KeV [γ/s]				
Linha de luz	sem fenda	0,4x0,4mm ²	0,1x0,1mm ²	fluxo fonte [$\gamma/s/eV$]
MX2	$2,624 \cdot 10^{11}$	$6,324 \cdot 10^{10}$	$1,025 \cdot 10^{10}$	$2,078 \cdot 10^{12}$
Linha Lateral	$4,031 \cdot 10^{11}$	$3,889 \cdot 10^{10}$	$1,062 \cdot 10^{10}$	$2,079 \cdot 10^{12}$
Linha Lateral com Multicamadas	$9,231 \cdot 10^{12}$	$7,092 \cdot 10^{11}$	$1,309 \cdot 10^{11}$	$2,082 \cdot 10^{12}$
MX1	$1,459 \cdot 10^9$	$2,764 \cdot 10^7$	$1,434 \cdot 10^6$	$2,891 \cdot 10^{10}$
MX1 com Multicamadas	$3,777 \cdot 10^{10}$	$2,666 \cdot 10^{10}$	$3,973 \cdot 10^9$	$2,899 \cdot 10^{10}$

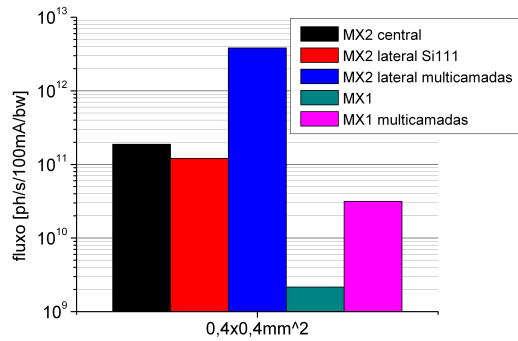
Tabela 4.5: Fluxo de fótons total e através de aberturas de 0,4x0,4mm² e 0,1x0,1mm², para energias de 12,4KeV. Os fluxos são para os projetos considerados, juntamente com o fluxo simulado para as linhas MX1 e MX2 nas condições atuais.



(a)

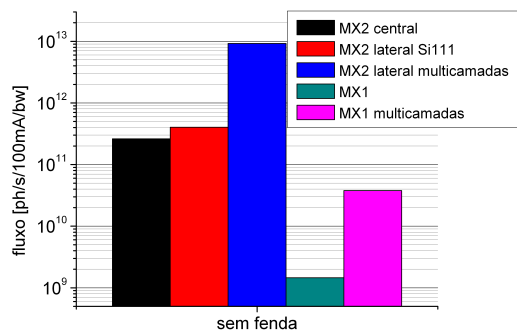


(b)

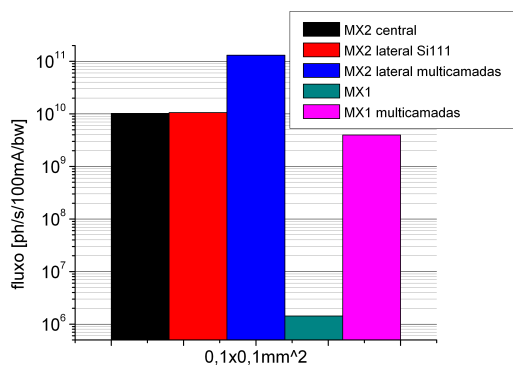


(c)

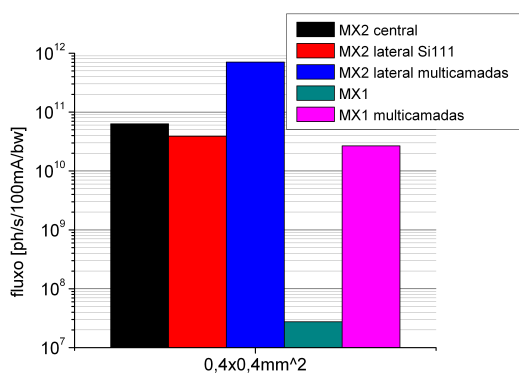
Figura 4.11: Valores simulados dos fluxos para energia de operação de $8,5\text{KeV}$ da linha MX2, da linha lateral com monocromador de cristal, da linha MX1 e da linha MX1 com monocromador de multicamadas. Valores de fluxo (a) total (sem abertura de fendas), (b) em uma área de $0,1 \times 0,1\text{mm}^2$ e (c) em uma área de $0,4 \times 0,4\text{mm}^2$.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.12: O mesmo que Fig. 4.11 para energia de operação de $12,4 \text{ KeV}$. Valores de fluxo (a) total (sem abertura de fendas), (b) em uma área de $0,4 \times 0,4 \text{ mm}^2$ e (c) em uma área de $0,1 \times 0,1 \text{ mm}^2$.

	8,5KeV		12,4KeV	
	ΔE [eV]	$\Delta E/E$ [%]	ΔE [eV]	$\Delta E/E$ [%]
Sem Fenda				
MX2	1,05	0,012	1,72	0,014
Linha Lateral	13,18	0,155	25,45	0,205
Linha Lateral com Multicamadas	131,69	1,549	373,26	3,010
MX1	3,96	0,047	8,39	0,068
MX1 multicamadas	74,16	0,872	166,86	1,346
Abertura de $0,4 \times 0,4mm^2$				
MX2	1,14	0,013	1,67	0,013
Linha Lateral	1,18	0,014	1,83	0,015
Linha Lateral com Multicamadas	56,77	0,668	362,12	2,920
MX1 Si111	3,77	0,044	9,35	0,075
MX1 multicamadas	59,33	0,698	168,03	1,355

Tabela 4.6: Banda Passante em eV para cada projeto, para a energia de operação de 8,5KeV e 12,4KeV. Valores para feixe total (sem fendas) e para abertura de $0,4 \times 0,4mm^2$.

Parâmetros da Imagem	Tamanho Vertical [mm]	Tamanho Horizontal [mm]	Divergência Vertical [mrad]	Divergência Horizontal [mrad]
MX1	0,214	11,332	0,271	5,694
MX1 Multicamadas	0,744	0,421	0,156	0,518
MX2	0,328	1,546	0,369	2,478
Lateral Si111	0,069	4,358	0,868	1,096
Lateral Multicamadas	0,058	4,106	0,772	1,871

Tabela 4.7: Parâmetros geométricos da imagem obtida por simulação para cada projeto para operação em $8,5\text{KeV}$.

a_{max} [Å]		
	40cm	300cm
Distância detector-amostra		
Limite CCD (<i>pixel</i> 80μm)	364.7	2735.3
MX2	364.7	2735.3
Linha Lateral Si111	364.7	2735.3
Linha Lateral Multicamadas	98.2	242.8
MX1	364.7	2735.3
MX1 Multicamdas	95.8	287.5

Tabela 4.8: Parâmetros de rede máximos para as linhas MX1, MX2 e para o projeto da linha lateral. Valores calculados para um feixe $8,5\text{KeV}$, distância do detector à amostra de 40cm e 300cm. (Ver Apêndice A)

Capítulo 5

Conclusão

Foi realizado durante este trabalho um extenso estudo da bibliografia relacionada à fontes de radiação síncrotron, interação de raios-X duros com a matéria, óptica focalizante de incidência rasante e dispositivos ópticos de raios-X.

De posse deste conhecimento, utilizou-se de simulações computacionais de traçamento de raios para simular algumas configurações de linhas de luz, à fim de melhorar o desempenho das linhas de luz de cristalografia de proteínas do LNLS.

Dentre as opções consideradas, a de melhor desempenho foi a de uma linha lateral com monocromador de espelhos multicamadas. Porém, essa configuração mostrou-se inviável dada as limitações de espaço físico imposta pela linha central.

Uma vez descartado este projeto, entre as opções restantes a que obteve melhor desempenho foi o projeto de linha lateral com monocromador de cristal. Esta linha tem desempenho muito semelhante à linha central quando se compara seu desempenho na condição de abertura de $0,4 \times 0,4 \text{ mm}^2$.

Para o feixe total (sem abertura de fendas) a característica que chama a atenção é a banda passante (Tab. 4.6) que é da ordem de 10 vezes o valor para a linha MX2. Essa diferença causa dificuldades para a utilização da linha para a técnica MAD, que exige uma banda passante menor (Tab. 3.1). Além disso, a configuração do monocromador não é adequada para alterações de energias, uma vez que cada energia têm diferentes ângulos de incidência e raio de curvatura do cristal.

Futuramente serão necessárias melhorias nas simulações realizadas à fim de considerar parâmetros de fabricação dos elementos ópticos (rugosidade, *slope error*). Tais modificações devem ser feitas na fase de construção da linha, à medida que os elementos ópticos forem sendo fabricados e tais parâmetros se tornarem disponíveis.

Referências Bibliográficas

- J. Als-Nielsen and D. McMorrow. *Elements of Modern X-Ray Physics*. John Wiley and Sons, 2001.
- C. Amsler. Particle data group: The review of particle physics. *Physics Letters*, B667, 2008.
- G. B. Arfken and H. J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 6 edition, 2005.
- N. W. Ashcroft and D. N. Mermin. *Solid State Physics*. Brooks Cole, 1976.
- A. Authier. Dynamical theory of x-ray diffraction. *International Tables for Crystallography*, B:534–551, 2006.
- M. Berger, J. Hubbell, S. Seltzer, J. Chang, J. Coursey, R. Sukumar, , and D. Zucker. Xcom: Photon cross sections database, nist standard reference database 8 (xgam). *Online*, 1998. URL <http://physics.nist.gov/xcom>.
- M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*. Cambridge University Press, 1999.
- C. T. Chantler. Detailed tabulation of atomic form factors, photoelectric absorption and scattering cross section, and mass attenuation coefficients in the vicinity of absorption edges in the soft x-ray ($z=30-36$, $z=60-89$, $e=0.1$ keV– 10 keV), addressing convergence issues of earlier work. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 29(4):597–1056, 2000. doi: 10.1063/1.1321055.
- F. Ciocci, G. Dattoli, A. Torre, and A. Renieri. *Insertion Devices for Synchrotron Radiation and Free Electron Laser*. World Scientific, 2000.
- J. A. Clark. *The Science and Technology of Undulators and Wigglers*. Oxford University Press, 2004.
- C. Cohen-Tannoudji, B. Dui, and F. Laloe. *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, 1978.
- A. M. Deacon, T. Appleby, D. H. Bilderback, S. E. Ealick, E. Fontes, and D. J. Thiel. Protein crystallography using a multilayer monochromator. *Journal of synchrotron radiation*, 5(Pt 3):494–6, maio 1998.

- M. S. del Rio and R. J. Dejus. Xop: a multiplatform graphical user interface for synchrotron radiation spectral and optics calculations. volume 3152, pages 148–157. SPIE, 1997. doi: 10.1117/12.295554.
- G. Forstner, M. Krisch, and J. Susini. Study of spherical aberrations for the design of esrf beam lines. volume 63, pages 486–488. AIP, 1992.
- G. R. Fowles. *Introduction to Modern Optics*. Holt, Rinehart, and Winston, 2 edition, 1975.
- D. J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Prentice-Hall, 3 edition, 1999.
- C. Grupen and B. Shwartz. *Particle Detectors*. Cambridge University Press, 2 edition, 2008.
- B. G. Guimarães, L. Sanfelici, R. T. Neuenschwander, F. Rodrigues, W. C. Grizolli, M. A. Raulik, J. R. Piton, B. C. Meyer, A. S. Nascimento, and I. Polikarpov. The mx2 macromolecular crystallography beamline: a wiggler x-ray source at the Inls. *Journal of Synchrotron Radiation*, 16(1):69–75, Jan 2009.
- A. Guinier. *X-ray diffraction In Crystals, Imperfect Crystals, and Amorphous Bodies*. Courier Dover Publications, 1963.
- E. Hecht. *Optics*. Addison Wesley, 4 edition, 2002.
- W. Heitler. *The Quantum theory of radiation*. International Series of Monographs on Physics, Oxford: Clarendon, 3 edition, 1954.
- J. H. Hubbell and I. Overbo. Relativistic atomic form factors and photon coherent scattering cross sections. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 8(1):69–106, 1979. doi: 10.1063/1.555593.
- J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley and Sons, 3 edition, 1997.
- H. H. Johann. Die erzeugung lichtstarker röntgenspektren mit hilfe von konkavkristallen. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 69(3):185–206, 1931. doi: 10.1007/BF01798121.
- P. Kane. Inelastic scattering of x-rays and gamma rays. *Radiation Physics and Chemistry*, 75(12):2195 – 2205, 2006. doi: DOI:10.1016/j.radphyschem.2006.08.001.
- A. Kazimirov, D. M. Smilgies, Q. Shen, X. Xiao, Q. Hao, E. Fontes, D. H. Bilderback, S. M. Gruner, Y. Platonov, and V. V. Martynov. Multilayer x-ray optics at chess. *Journal of synchrotron radiation*, 13(Pt 2):204–10, 2006.
- K.-J. Kim. Angular distribution of undulator power for an arbitrary deflection parameter k. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 246: 67–70, 1986. doi: 10.1016/0168-9002(86)90047-1.

- C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. Wiley, 7 edition, 1996.
- D. Korsch. *Reflective Optics*. Academic Press, 1991.
- D. Malacara and Z. Malacara. *Handbook of Optical Design*. Marcel Dekker, 2004.
- C. B. Mammen. Meridional horizontal focusing by bend diamond laue monochromator (não publicado). 2001. URL <http://www.fys.ku.dk/%7Emax2/texts/BendLaue.pdf>.
- G. Margaritondo. *Introduction to Synchrotron Radiation*. Oxford University Press, 1988.
- B. Meyer. Projeto ótico da linha de wiggler supercondutor. Technical report, LNLS - Laboratório nacional de Luz Síncrotron, 2009.
- D. M. Mills. *Third-Generation Hard X-Ray Synchrotron Radiation Sources: Source Properties, Optics, and Experimental Techniques*, chapter 2. John Wiley & Sons, 2002.
- G. Oliva, E. Castellano, R. Garrattb, P. Arruda, A. Leite, I. Polikarpov, and A. Craievich. The protein crystallography beamline at lnls, the brazilian national synchrotron light source. *NIM A*, 405(1):159–164, Mar 1998.
- W. B. Peatman. *Gratings, mirrors, and slits: beamline design for soft X-ray synchrotron radiation sources*. CRC Press, 1997.
- S. J. F. L. Pedrotti and L. S. Pedrotti. *Introduction to Optics*. Prentice-Hall International, Inc., 1993.
- G. K. Razina and V. Y. Epp. Radiation in a wiggler with sinusoidal magnetic field. *Nuclear Instrumentation And Methods in Physics Research A*, 307:562–567, 1991. doi: 10.1016/0168-9002(91)90231-E.
- J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics (2nd Edition)*. Addison Wesley, 2 edition, 1994.
- R. D. Schlueter. *Synchrotron Radiation Sources: A Primer*, chapter Wiggler and Undulator. World Scientific, 1995.
- C. J. Sparks, B. Borie, and J. Hastings. X-ray monochromator geometry for focusing synchrotron radiation above 10 kev. *Nuclear Instruments and Methods*, 172(1-2):237–242, 1980. doi: DOI:10.1016/0029-554X(80)90640-0.
- C. J. Sparks, G. E. Ice, J. Wong, and B. W. Batterman. Sagittal focusing of synchrotron x-radiation with curved crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 195(1-2):73 – 78, 1982. doi: DOI:10.1016/0029-554X(82)90760-1.

- J. Susini and M. Wulff. Study of design parameters governing the performances of synchrotron mirrors. In *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, volume 1997, pages 278–289. SPIE, 1993.
- A. C. Thompson and D. Vaughan. X-ray data booklet, 2001. 2nd edition, Compilado e Editado por Lawrence Berkeley National Laboratory.
- B. E. Warren. *X-ray diffraction*. Courier Dover Publications, 1990.
- C. Welnak, G. Chen, and F. Cerrina. Shadow: A synchrotron radiation and x-ray optics simulation tool. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 347(1-3):344 – 347, 1994.
- H. Wiedemann. *Synchrotron Radiation*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- A. Wilson. *International Table for Crystallography*, volume C. Kluwer Academic, 1995. doi: 10.1107/97809553602060000103.
- Z. Zhong, C. C. Kao, D. P. Siddons, and J. B. Hastings. Sagittal focusing of high-energy synchrotron x-rays with asymmetric laue crystals. i. theoretical considerations. *Journal of Applied Crystallography*, 34(4):504–509, 2001a. doi: 10.1107/S0021889801006409.
- Z. Zhong, C. C. Kao, D. P. Siddons, and J. B. Hastings. Sagittal focusing of high-energy synchrotron x-rays with asymmetric laue crystals. ii. experimental studies. *Journal of Applied Crystallography*, 34(5):646–653, 2001b. doi: 10.1107/S0021889801010627.

Apêndice A

Estimativa do limite de detecção da difração

As descrições do fenômeno de difração feitas no Cap. 2.3 assumem uma condição ideal: um cristal ideal onde incide um feixe perfeitamente monocromático e sem divergência. Neste apêndice será feita uma estimativa dos efeitos das propriedades de um feixe real sobre o fenômeno de difração cinemática. Ao final será comentado a possibilidade de extrapolar os resultados para a difração dinâmica.

A resolução de energia e as propriedades geométricas de um feixe de radiação afetam diretamente a geometria dos picos(pontos) de difração: quanto maior a divergência e/ou banda passante maior será a largura de um ponto¹. Se essa largura for da ordem da distância entre os máximos dos pontos de difração, esses picos irão se sobrepor e serão erroneamente interpretados como um único ponto sobre um detector de área (geometria de detecção na Fig. A.1). Assim, dada a largura dos pontos de difração teremos uma distância mínima entre os picos que será necessária para que eles sejam detectados apropriadamente.

Uma vez que a distância entre os pontos vizinhos é inversamente proporcional ao parâmetro de rede a (de acordo com as propriedades da Eq. 2.58, Fig. 2.14), uma separação mínima entre os pontos implica em um parâmetro de rede máximo. Assim, dada as propriedades geométricas do feixe de radiação incidente, há um parâmetro de rede máximo que irá gerar dados sem sobreposição de pontos de difração.

Para calcular tal efeito deve-se considerar primeiramente a geometria da detecção dos pontos de difração. Assim, devido o objetivo deste trabalho, será considerado a geometria de detecção da radiação difratada pela amostra em uma linha de luz para cristalografia de proteínas (Fig. A.1).

Este tipo de linha faz uso de um detector CCD (*charge-coupled device*) plano, com diâmetro da ordem de 150-300mm e com resolução espacial da ordem de $100 \times 100 \mu m^2$. Eles são posicionados à determinada distância D (40-300mm) da amostra, de forma a determinar o maior ângulo Θ de detecção. Nesta geometria

¹Será usada a largura à meia altura como parâmetro de comparação.

o ângulo de Bragg θ_{Bragg} (Eq. 2.74 e Fig. 2.17a) é igual à metade do ângulo Θ :

$$\Theta = 2\theta_{Bragg}. \quad (A.1)$$

Utilizando esse novo ângulo, temos que o vetor transferência de momento (Eq. 2.49) será dado por

$$s = \frac{2}{\lambda} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) = \frac{2E}{12,4 \cdot 10^{-7}} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \quad (A.2)$$

onde o comprimento de onda λ da radiação foi convertido para a energia E dos fótons em eV.

A forma de determinar o parâmetro de rede máximo baseia-se em determinar o máximo valor de a para o qual a separação entre os pontos Δl_{pontos} é maior que duas vezes a largura do ponto Δl_{FWHM} .

Para tratar o comportamento da difração por um feixe real iremos considerar que a distribuição angular e de energia do feixe tem distribuições Gaussianas e são caracterizadas pelos valores de largura à meia altura ΔE para a energia dos fótons, $\Delta\theta_{div}$ para a divergência e Δs para a largura do pico no espaço recíproco.

A largura de um ponto na difração se manifesta em uma abertura angular $\Delta\Theta$ que é a soma dos efeitos de divergência $\Delta\theta_{div}$ e da abertura angular $\Delta\theta_{Bragg}$, este último devido ao efeito da banda passante e do tamanho do cristal sobre o fenômeno de difração. Tratando a variação $\Delta\theta_{Bragg}$ de forma diferencial, obtém seu valor por teoria de erros:

$$(\Delta\theta_{Bragg})^2 = \left(\frac{\partial\Theta}{\partial E}\Delta E\right)^2 + \left(\frac{\partial\Theta}{\partial s}\Delta s\right)^2, \quad (A.3)$$

onde as derivadas são obtidas de Eq. A.2, e resultam em:

$$(\Delta\theta_{Bragg})^2 = \left[2 \tan\left(\frac{\Theta}{2}\right)\right]^2 \left[\left(\frac{\Delta E}{E}\right)^2 + \left(\frac{\Delta s}{s}\right)^2\right]. \quad (A.4)$$

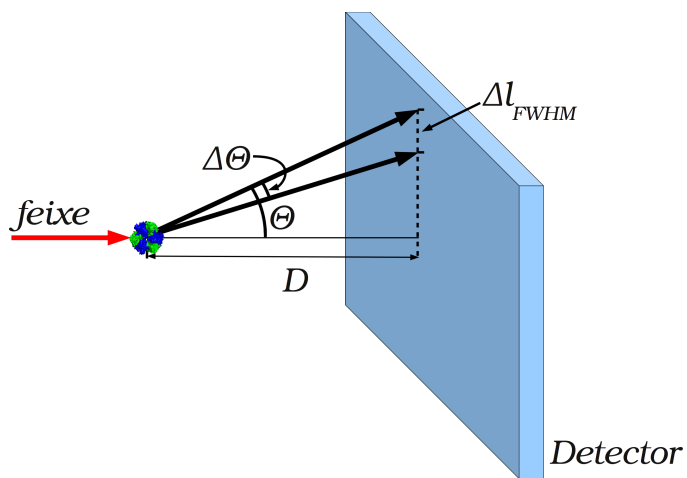
Neste caso Δs se refere à largura à meia altura de um pico de difração no espaço recíproco, que de acordo com a Fig. 2.14 é dado por:

$$\Delta s \cdot a = \frac{1}{N}, \quad (A.5)$$

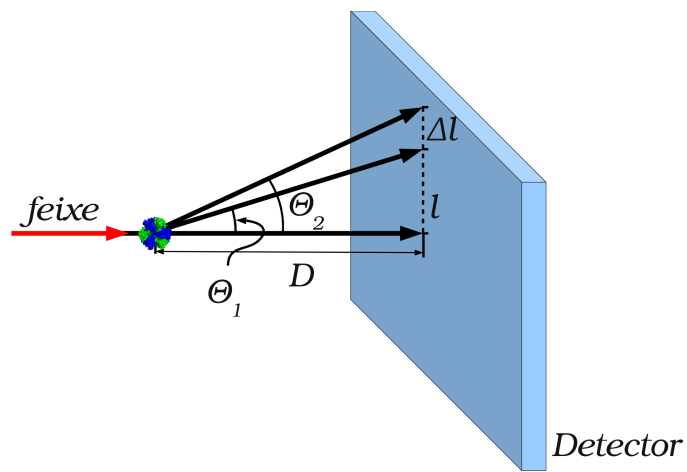
$$\Delta s = \frac{1}{Na} = \frac{1}{L}, \quad (A.6)$$

onde a é o tamanho da célula unitária, N é o número de células unitárias em determinada direção, e L o tamanho do cristal nesta mesma direção. Assim, Eq. A.4 será dada por

$$(\Delta\theta_{Bragg})^2 = \left[2 \tan\left(\frac{\Theta}{2}\right)\right]^2 \left[\left(\frac{\Delta E}{E}\right)^2 + \left(\frac{12,4 \cdot 10^{-7}}{2E \sin(\Theta/2)} \frac{1}{L}\right)^2\right]. \quad (A.7)$$



(a)



(b)

Figura A.1: Geometria de detecção da difração em uma linha de cristalografia de proteínas. (a) A largura angular $\Delta\Theta$ do ponto causa uma largura Δl_{FWHM} sobre a superfície do detector. (b) Dois picos com ângulo Θ_1 e Θ_2 , incidem pontos distantes de Δl sobre o detector.

Uma vez que os efeitos de $\Delta\Theta_{Bragg}$ e $\Delta\theta_{div}$ se somam, por teoria de erros temos que fazer a soma quadrática destes dois termos:

$$(\Delta\Theta)^2 = (\Delta\Theta_{Bragg})^2 + (\Delta\theta_{div})^2. \quad (A.8)$$

No entanto a aceitância angular é limitada pelas propriedades da difração², de forma que para valores inferiores à $\Delta\Theta_{Bragg}$ a divergência aceita será no máximo de $\Delta\Theta_{Bragg}$. Isso faz com que a Eq. A.8 tenha de ser reescrita como:

$$\begin{aligned} (\Delta\Theta)^2 &= 2(\Delta\Theta_{Bragg})^2 & \text{se} & \quad \Theta_{Bragg} \leq \Delta\theta_{div}, \\ (\Delta\Theta)^2 &= (\Delta\Theta_{Bragg})^2 + (\Delta\theta_{div})^2 & \text{se} & \quad \Theta_{Bragg} > \Delta\theta_{div}. \end{aligned} \quad (A.9)$$

Para determinar o efeito de uma abertura angular $\Delta\Theta$ sobre a largura Δl_{FWHM} , primeiramente utiliza-se a Fig.A.1a para determinar a relação geométrica entre l e Θ , que será dada por

$$l = D \tan \Theta, \quad (A.10)$$

de forma que obtém-se Δl_{FWHM} por

$$\Delta l_{FWHM} = \frac{\partial l}{\partial \Theta} \Delta\Theta, \quad (A.11)$$

$$\Delta l_{FWHM} = \frac{D}{\cos^2 \Theta} \Delta\Theta. \quad (A.12)$$

Assim, substituindo $\Delta\Theta$ pela expressão dada em Eq. A.9, temos que

$$\Delta l_{FWHM} = \frac{D}{\cos^2 \Theta} \sqrt{(\Delta\Theta_{Bragg})^2 + (\Delta\theta_{div})^2}. \quad (A.13)$$

Substituindo $\Delta\Theta_{Bragg}$ por Eq. A.4 chegamos à

$$\Delta l_{FWHM} = \frac{D}{\cos^2 \Theta} \sqrt{2 \tan^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right) \left[\left(\frac{\Delta E}{E} \right)^2 + \left(\frac{12,4 \cdot 10^{-7}}{2E \sin(\Theta/2)} \frac{1}{L} \right)^2 \right] + (\Delta\theta_{div})^2}, \quad (A.14)$$

lembrando que deve-se aplicar a condição para $\Delta\theta_{div}$ dada por Eq. A.9.

Devemos agora determinar a separação Δs_{pico} entre os picos em função do parâmetro de rede. Uma vez que a relação entre picos vizinhos e o parâmetro de rede é dado por³

²Semelhantemente à largura de Darwin na difração dinâmica, a aceitância angular será de $\Delta\Theta_{Bragg}$ na difração cinemática

³A Eq. A.15 deve considerar o ângulo entre os vetores $\vec{s}$ e o vetor $\vec{a}$, ou seja, a orientação do cristal em relação ao feixe. Neste caso considerou-se o pior caso onde os vetores estão na mesma direção.

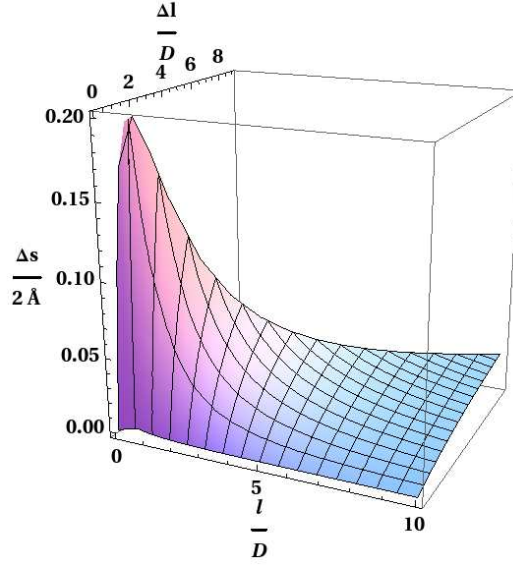


Figura A.2: Δs em função de l e Δl . Observa-se que Δs tem dependência crescente em relação à l e Δl .

$$\Delta s_{pico} = \frac{1}{a}, \quad (\text{A.15})$$

então devemos calcular o valor de Δs_{pico} em função da separação Δl dos pontos no detector. Calculando Δs temos que

$$\Delta s_{pico} = s_1 - s_2 = \frac{2E}{12,4 \cdot 10^{-7}} \left[\sin\left(\frac{\Theta_2}{2}\right) - \sin\left(\frac{\Theta_1}{2}\right) \right]. \quad (\text{A.16})$$

Pelas propriedades das funções trigonométricas e pela geometria do problema, chegamos que o termo seno é dado por

$$\sin\left(\frac{\Theta_1}{2}\right) = \sqrt{\frac{1 - \cos \Theta_1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{D}{2\sqrt{l_1^2 + D^2}}}. \quad (\text{A.17})$$

Utilizando valores de $l_1 = l$ e $l_2 = l + \Delta l$ chegamos à

$$\Delta s_{pico} = \frac{2E}{12,4 \cdot 10^{-7}} \left[\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{D}{2\sqrt{(l + \Delta l)^2 + D^2}}} - \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{D}{2\sqrt{l^2 + D^2}}} \right]. \quad (\text{A.18})$$

A Fig. A.2 mostra a dependência de Δs em função de l e Δl , onde observa-se que Δs tem dependência crescente com Δl para qualquer valor de l . Como

estamos buscando os valores de Δs para $\Delta l > 2\Delta l_{FWHM}$, temos que para determinado Δl_{FWHM} teremos uma valor mínimo de Δs para um intervalo de l . Matematicamente teremos que:

$$\Delta s_{Min} = Max\{\Delta s_{pico}\}, \quad (A.19)$$

para l tal que $0 < l \leq R$ e Δl tal que $2\Delta l_{FWHM} \leq \Delta l < l$, onde R é raio da área ativa do detector. Deve-se lembrar que, por Eq. A.14, Δs_{pico} depende da banda passante e da divergência do feixe incidente.

Apesar do valor de Δl_{FWHM} ser dado pela Equação A.14, os detectores atuais nas linhas tem resolução espacial da ordem de $80\mu m$. Logo, o valor de Δl será limitado também pela resolução espacial, e os valores de Δl_{FWHM} em Eq. A.19 deverão ser tais que $(2x \text{ resolução espacial}) \leq 2\Delta l_{FWHM} \leq \Delta l < l$. Assim, temos que o valor de Δl_{FWHM} deve ser igual à resolução espacial do detector quando o valor obtido pela Equação A.14 for menor que a resolução espacial.

Por fim, uma vez que $\Delta s_{pico} = \frac{1}{a}$, temos que o parâmetro de rede máximo será dado por:

$$a_{Max} = Min\left\{\frac{1}{\Delta s_{pico}}\right\}, \quad (A.20)$$

novamente para l tal que $0 < l \leq R$ e $(2x \text{ resolução espacial}) \leq 2\Delta l_{FWHM} \leq \Delta l < l$.

Devido a complexidade das funções Eq. A.18 e Eq. A.14, não é possível determinar a_{Max} analiticamente em função dos demais parâmetros (Energia, D , $\Delta\theta_{div}$, $\frac{\Delta E}{E}$ e tamanho L do cristal). O método mais apropriado é utilizar programas matemáticos com os valores dos parâmetros e observar o valor de a_{Max} dentro do intervalo l de interesse.

Aplicando estes resultados para as linhas MX1, MX2 e para os projetos desenvolvidos nesta dissertação, utilizamos os valores obtidos por simulação para divergência e banda passante para a energia de operação de $8,5KeV$ e um cristal com dimensão típica de $L = 100\mu m$ ($10^6\text{\AA}$). Os resultados são mostrados nas Figuras A.3 e A.4, onde o máximo parâmetro de rede é dado em função da distância l . O valor do máximo parâmetro de rede de cada projeto é dado pelo mínimo desta curva no intervalo de l onde se faz a medida⁴.

Lembrando ainda que a resolução espacial do detector impõe um valor mínimo de Δl_{FWHM} , teremos então que o detector também limita o máximo parâmetro de rede detectável: quando a distância entre os pontos sobre o detector for menor que a resolução espacial, então essa resolução será o fator limitante.

Atualmente os detectores em operação têm resolução espacial de $80\mu m$ e detectores estado da arte disponíveis comercialmente têm resolução espacial da ordem de $20\mu m$. Para estudar esse efeito, desconsidera-se os efeitos de alargamento do pico pelas propriedades da difração e considera-se que o espaçamento mínimo entre picos é de duas vezes a resolução espacial ($\Delta l_{FWHM} = 2x \text{ resolução espacial}$ em Eq. A.18). Esse resultado pode ser visto na Fig. A.5 onde

⁴Em algumas situações em uma medida não se utiliza toda a área de detecção, que no presente caso da linha MX2 é de $225 \times 225 mm^2$.

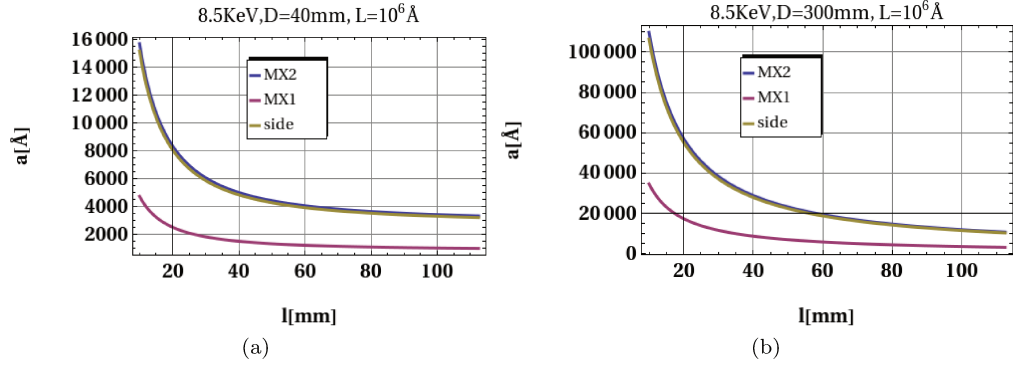


Figura A.3: Função $a = 1/\Delta s$ em função de l (Eq. A.18) para as linhas MX1, MX2 e o projeto de linha lateral com cristal de Silício para (a) $D = 40\text{mm}$ e (b) $D = 300\text{mm}$ respectivamente. O valor mínimo da função corresponde ao parâmetro de rede máximo que pode ser detectado por cada linha.

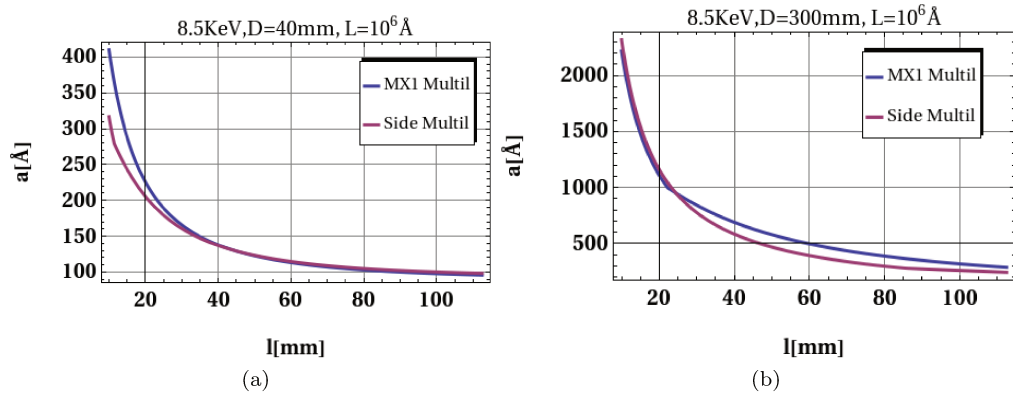
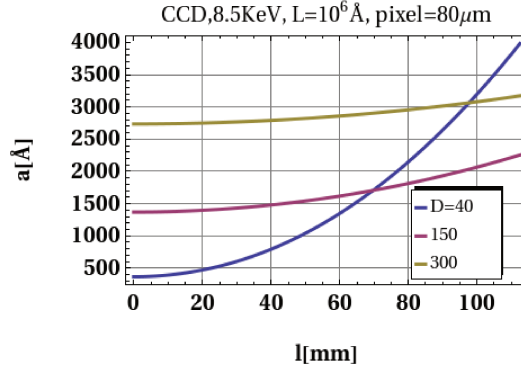
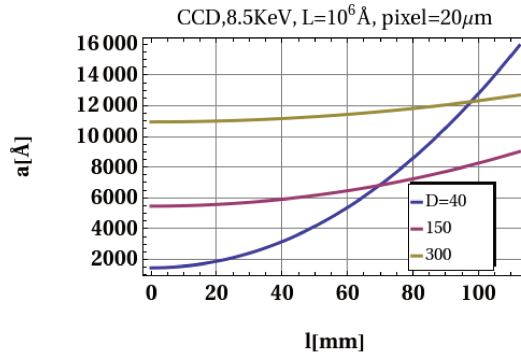


Figura A.4: O mesmo que a Fig. A.3 para os projetos com multicamadas para (a) $D = 40\text{mm}$ e (b) $D = 300\text{mm}$.



(a)



(b)

Figura A.5: a_{max} em função de l (Eq. A.18) para um detector na geometria da Fig. A.1 e resolução espacial de (a) $80 \mu\text{m}$ e (b) $20 \mu\text{m}$ para alguns valores de D e l máximo de 112.5 mm .

calculou-se o máximo parâmetro de rede em função de l para a resolução espacial do detector de $80 \mu\text{m}$ e $20 \mu\text{m}$.

A Fig. A.5 mostra que para distâncias maiores entre o detector e a amostra o máximo parâmetro de rede detectável é maior, apesar de o máximo ângulo de espalhamento detectável ser consequentemente menor.

Finalmente, considerando os dois efeitos (alargamento dos picos e resolução do detector), obtém-se como resultado os gráficos da Fig. A.6 para as linhas atuais e os projetos desenvolvidos nesta dissertação com um detector de resolução espacial de $80 \mu\text{m}$. Os valores mínimos extraídos destes gráficos são listados na Tab. 4.8 e representam os valores finais de máximo parâmetro de rede detectável por cada projeto utilizando um detector com resolução espacial de $80 \mu\text{m}$.

Observa-se que para os projetos de linhas com monocromadores de cristal os limites dos projetos são da mesma ordem dos limites impostos pelo a resolução do detector. Já para os projetos com monocromadores de multicamadas

os limites devido à resolução da linha são muito inferiores ao limite imposto pela resolução espacial.

Na Figura A.7 temos o mesmo caso da Fig. A.6 considerando o uso de um detector com resolução espacial de $20\mu m$. A maior diferença ocorre para o caso da linha MX1, onde a linha seria o fator limitante do máximo parâmetro de rede detectável.

Como discutido no Cap.4.5 estes resultados devem ser usados principalmente como fatores de comparação entre os projetos, uma vez que há aproximações implícitas nestes cálculos. A aproximação mais evidente é a de que a amostra é perfeita, enquanto é conhecido que o grau de desordem, quantificado pela *mosaicidade do cristal* [Warren, 1990], influencia a geometria dos pontos de difração. Além disso não está sendo considerado a rotação da amostra, procedimento utilizado em uma aquisição de dados de cristalografia de proteínas.

Por fim, pode-se obter os resultados para difração dinâmica utilizando diretamente a largura de Darwin angular ω_{Darwin} (Cap. 2.3) como valores de $\Delta\Theta_{Bragg}$ em Eq. A.13.

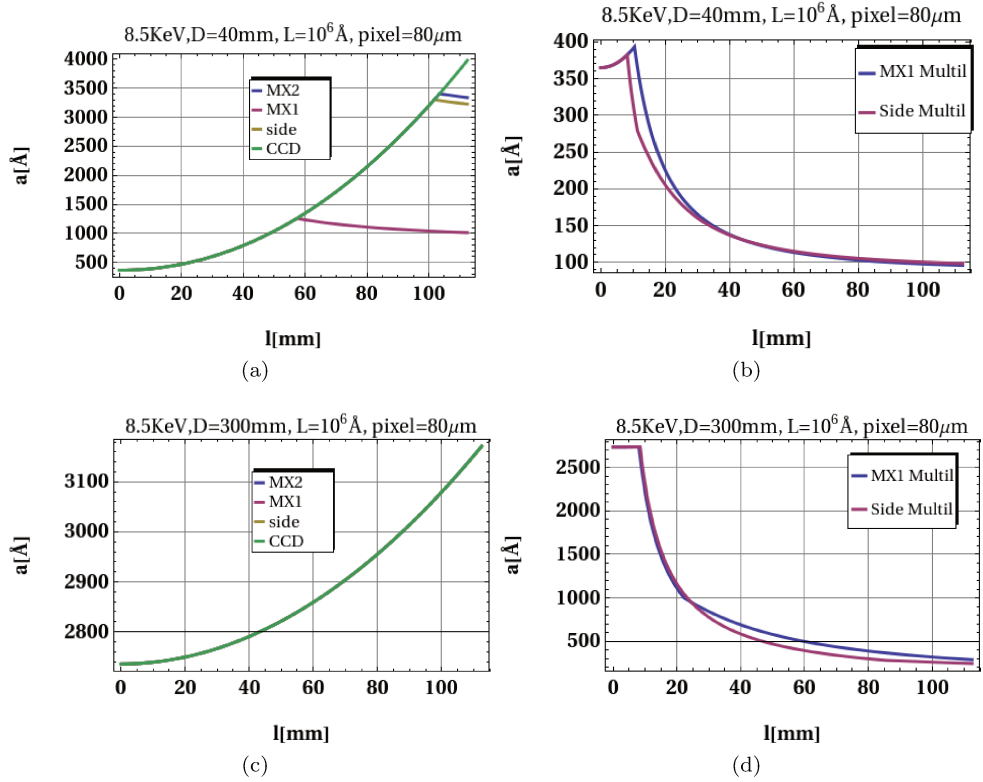


Figura A.6: a_{max} para as linhas MX1, MX2, o projeto de linha lateral com cristal de Silício e o limite dado pelo detector. Valores para (a) $D = 40\text{mm}$ e (b) $D = 300\text{mm}$. (c) e (d) o mesmo para os projetos com multicamadas. O valor mínimo da função corresponde ao parâmetro de rede máximo que pode ser detectado por cada linha. Em (c) a resolução do detector CCD é o fator limitante e todas as curvas estão sobrepostas.

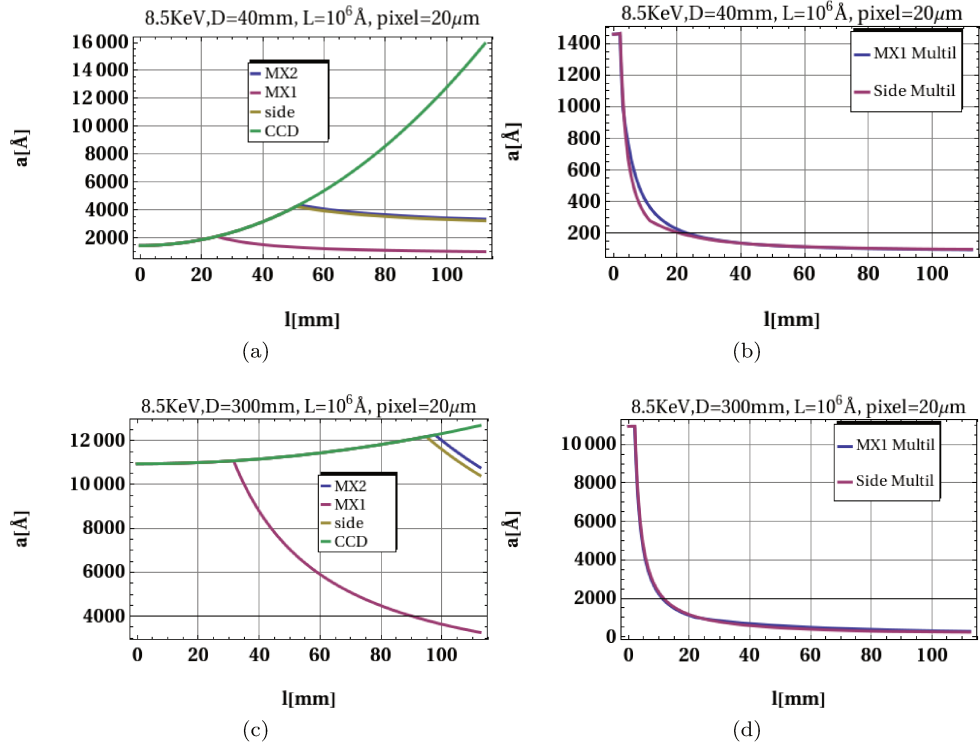


Figura A.7: O mesmo que Fig. A.6 supondo um detector CCD com resolução espacial de $20\mu\text{m}$.

Apêndice B

Códigos para o *Wolfram Mathematica*[®]

Neste Apêndice são fornecidos os códigos de alguns gráficos plotados com o programa computacional *Wolfram Mathematica*[®]. Optou-se por fornecer os gráficos mais relevantes e de certa complexidade.

- Códigos para Fig. 1.4:

```
epsilon[x_, y_] := y/2*(1 + x^2)^(3/2)

Bessel23[En_, gamaPhi_] :=
  (10^En)^2*(1 + gamaPhi^2)^2*(BesselK[2/3, epsilon[gamaPhi, 10^En]])^2

Bessel13[En_, gamaPhi_] :=
  (10^En)^2*(1 + gamaPhi^2)^2*(gamaPhi)^2/(1 + (gamaPhi)^2)*
  (BesselK[1/3, epsilon[gamaPhi, 10^En]])^2

NMaximize[Bessel23[En, 0] + Bessel13[En, 0], En]

Plot3D[Bessel23[En, gamaPhi]/1.47402, {gamaPhi, -3, 3}, {En, -2, 2},
  AxesLabel -> {γθ, log[ξ/Subscript[ξ, c]], (d^2W)/dξdθ},
  PlotRange -> All, BoxRatios -> {1, 1, 1},
  LabelStyle -> Directive[13, Bold],
  TicksStyle -> Directive[10, Bold], ViewPoint -> {20, 30, 20}]
```

```
Plot3D[Bessel13[En, gamaPhi]/1.47402, {gamaPhi, 3, -3}, {En, 2, -2},
  AxesLabel -> { $\gamma\Theta$ ,  $\log[\xi/\text{Subscript}[\xi, c]]$ ,  $(d^2W)/d\xi d\Theta$ },
  BoxRatios -> {1, 1, 1},
  PlotRange -> {Full, Full, {0, 1}}, LabelStyle -> Directive[13, Bold],
  TicksStyle -> Directive[10, Bold], ViewPoint -> {20, 30, 20}]
```

- Códigos para Fig. 1.5:

```
LogLogPlot[
  NIntegrate[Bessel23[Log[10, En], gamaPhi], {gamaPhi, -5, 5}]/3.33018 +
  NIntegrate[Bessel13[Log[10, En], gamaPhi], {gamaPhi, -5, 5}]/3.33018,
  {En, .1, 2}, GridLines -> {{.2, .4, .6, .8, 1., 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2},
    {.4, .6, .8, 1.}}, PlotRange -> {Full, Full},
  Frame -> True, FrameLabel -> { $\xi/\text{Subscript}[\xi, c]$ ,  $dW/d\xi$ },
  FrameStyle -> Directive[12, Bold], PlotStyle -> Thickness[0.01],
  FrameTicks -> {{.4, .6, .8, 1}, None}, {.1, .6, 1, 2}, None}}]

LogLogPlot[{NIntegrate[
  Bessel23[Log[10, En], gamaPhi], {gamaPhi, -5, 5}]/3.33018,
  NIntegrate[Bessel13[Log[10, En], gamaPhi], {gamaPhi, -5, 5}]/
  3.33018}, {En, .1, 2},
  GridLines -> {{.2, .4, .6, .8, 1., 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2},
    {.1, .2, .3, .4, .5, 6, 7, .8, .9, 1.}},
  Frame -> True, FrameLabel -> { $\xi/\text{Subscript}[\xi, c]$ ,  $dW/d\xi$ },
  FrameStyle -> Directive[12, Bold], PlotStyle -> Thickness[0.01]]
```

- Códigos para Fig. 1.8a:

```

DdeK[θ_, φ_, K_, α_] := 1 + θ^2 + (-K * Cos[α] + φ)^2

GdeK[K_] := 
$$\frac{K \left( \frac{16}{7} + 4 K^2 + \frac{24 K^4}{7} + K^6 \right)}{(1 + K^2)^{7/2}}$$


FdeK[θ_, φ_, K_] :=

$$\frac{16 K}{7 \pi GdeK[K]} \text{NIntegrate}\left[\text{Sin}[\alpha]^2 \left( \frac{1}{DdeK[\theta, \phi, K, \alpha]^3} - \frac{4 (-K \text{Cos}[\alpha] + \phi)^2}{DdeK[\theta, \phi, K, \alpha]^5} \right), \{\alpha, -\pi, \pi\}\right]$$


DistPot[θ_, φ_, K_] := GdeK[K] / K * FdeK[θ, φ, K]

kVar = 10
tempVar = DistPot[0, 0, kVar]
Plot3D[DistPot[θ, φ, kVar] / tempVar, {θ, -kVar, kVar},
{φ, -2, 2}, AxesLabel → {γθ, γφ, Intensidade}, PlotRange → Full,
BoxRatios → {.4, .4, .25}, LabelStyle → Directive[12]

```

- Códigos para Fig. 1.9:

```

alfa[ey_, K_, gama_] := ey*gama/K

epsilon[ey_, ez_, EoverEc_, K_, gama_, N_] := 
$$\frac{EoverEc^2 * (1 + (gama*ez)^2)}{(1 - alfa[ey, K, gama]^2)}$$


Zfunction[ey_, ez_, EoverEc_, K_, gama_] := 
$$\frac{EoverEc * (1 + (gama*ez)^2)^{3/2}}{2 * \sqrt{(1 - alfa[ey, K, gama]^2)}}$$


DistWigglerSigma[ey_, ez_, EoverEc_, K_, gama_, N_] :=
  epsilon[ey, ez, EoverEc, K, gama, N] * (1 + (gama*ez)^2) *
  (BesselK[2/3, Zfunction[ey, ez, EoverEc, K, gama]])^2

i = 1

Plot3D[DistWigglerSigma[ey, ez, i, 1, 1, 1]/DistWigglerSigma[0, 0, i, 1, 1, 1],
  {ey, -1, 1}, {ez, -2, 2}, PlotRange -> Full, AxesLabel -> { $\gamma\vartheta$ ,  $\gamma\vartheta$ ,  $\frac{dW}{d\Omega d\epsilon}$ },
  LabelStyle -> Directive[13, Bold], TicksStyle -> Directive[10, Bold]]

ContourPlot[DistWigglerSigma[ey, ez, i, 1, 1, 1]/DistWigglerSigma[0, 0, i, 1, 1, 1],
  {ey, -1, 1}, {ez, -1, 1}, PlotRange -> Full, Frame -> True,
  FrameLabel -> { $\gamma\vartheta$ ,  $\gamma\vartheta$ }, FrameStyle -> Directive[12, Bold]]

i = 1/2

ContourPlot[DistWigglerSigma[ey, ez, i, 1, 1, 1]/DistWigglerSigma[0, 0, i, 1, 1, 1],
  {ey, -1, 1}, {ez, -1, 1}, PlotRange -> Full, Frame -> True,
  FrameLabel -> { $\gamma\vartheta$ ,  $\gamma\vartheta$ }, FrameStyle -> Directive[12, Bold]]

i = 2

ContourPlot[DistWigglerSigma[ey, ez, i, 1, 1, 1]/DistWigglerSigma[0, 0, i, 1, 1, 1],
  {ey, -1, 1}, {ez, -1, 1}, PlotRange -> Full, Frame -> True,
  FrameLabel -> { $\gamma\vartheta$ ,  $\gamma\vartheta$ }, FrameStyle -> Directive[12, Bold]]

```


- Códigos para Fig. 2.8:

$$\text{rel} = 2.8179402894 \cdot 10^{-15}$$

$$\text{freal}[\omega_, \omega 0_, \tau_] := \frac{(-\tau^2 \backslash \omega 0^2 + \text{SuperscriptBox}[\omega 0, 2] (\omega^2 - \omega 0^2))}{\tau^2 \backslash \omega 0^2 + (\omega^2 - \omega 0^2)^2}$$

$$\text{fimaginario}[\omega_, \omega 0_, \tau_] := \frac{-\tau \backslash \text{SuperscriptBox}[\omega, 3] \backslash}{\tau^2 \backslash \omega 0^2 + (\omega^2 - \omega 0^2)^2}$$

$$\text{CrossSection}[\omega_, \omega 0_, \tau_] := \frac{8 \pi}{3} \text{rel}^2 ((1 + \text{freal}[\omega, \omega 0, \tau])^2 + (\text{fimaginario}[\omega, \omega 0, \tau])^2)$$

$$\text{CrossSection2}[\omega_, \omega 0_, \tau_] := \frac{8 \pi}{3} \text{rel}^2 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega 0^2)^2 + (\omega \tau)^2}$$

$$\text{Omega}[x_] := \frac{2 \pi \backslash 3 \cdot 10^8}{12.4 \cdot 10^{-7}} x$$

```

τ = .1
EK = 12 658
ELs = 1652
ELp = 1455
EMs = 229.6
EMp = 166.5
EMd = 160.7

LogLogPlot[ { (2 * CrossSection[Omega[En], Omega[EK], τ * Omega[EK]] +
  2 * CrossSection[Omega[En], Omega[ELs], τ * Omega[ELs]] +
  6 * CrossSection[Omega[En], Omega[ELp], τ * Omega[ELp]] +
  2 * CrossSection[Omega[En], Omega[EMs], τ * Omega[EMs]] +
  6 * CrossSection[Omega[En], Omega[EMp], τ * Omega[EMp]] +
  10 * CrossSection[Omega[En], Omega[EMd], τ * Omega[EMd]] +
  6 * CrossSection[Omega[En], 0, 0]) / 10-28 },
  {En, 10, 20 000}, PlotRange → {Full, Full},
  Frame → True,
  FrameLabel →
    {Energia, σ [barn]},
  FrameStyle → Directive[12, Bold],
  PlotStyle → Thick,
  GridLines → Automatic]

```

- Códigos para Fig. 2.9a:

```

τ = .1
E0 = 10 000
ω0 = 1

Plot[{freal[x, 1, τ], fimaginario[x, 1, τ]}, {x, 0., 2.}, PlotRange → {Full, Full},
  Frame → True, FrameLabel → { $\frac{\omega}{\omega_0}$ }, FrameStyle → Directive[12, Bold], PlotStyle → Thick,
  GridLines → Automatic, PlotLegend → {f', f''}, LegendSize → {.2, .2},
  LegendPosition → {.4, -.2}, LegendShadow → {.01, .01}, LegendTextSpace → 2]

```

- Códigos para Fig. 2.14a:

$$Z2[h_, N_] := (\text{Sin}[(N + 1) \pi h] / ((N + 1) \text{Sin}[\pi h]))^2$$

```

Plot[{Z2[h, 10], Z2[h, 100], Z2[h, 1000]},
  {h, 9.9, 10.1}, PlotRange → All, GridLines → Automatic, Frame → True,
  FrameLabel → {h, Intensidade Normalizada}, FrameStyle → Directive[12, Bold],
  PlotStyle → Thick, PlotLegend → {N = 10, 100, 1000}, LegendSize → {0.3, 0.3},
  LegendPosition → {.55, .35}, LegendShadow → {.01, .01}, LegendTextSpace → 5]

```

- Códigos para Fig. 2.14b:

```

Plot[{Z2[h, 10], Z2[h, 100], Z2[h, 1000]}, {h, -3, 3}, PlotRange → All, GridLines → Automatic,
  Frame → True, FrameLabel → {h, Intensidade Normalizada}, FrameStyle → Directive[12, Bold],
  PlotStyle → Thick, PlotLegend → {N = 10, 100, 1000}, LegendSize → {0.3, 0.3},
  LegendPosition → {.55, .35}, LegendShadow → {.01, .01}, LegendTextSpace → 5]

```

- Para obter os gráficos da Fig. 2.19 da teoria de difração dinâmica são necessários alguns dados sobre o cristal, obtidos com o pacote computacional *XOP* [del Rio and Dejus, 1997] pela ferramenta *DABAX*. Primeiramente obtém-se f' e f'' em função da energia da radiação com o programa *XOP*, e interpola-se os dados para formar as funções $f1$ e $f2$:

```
f1 = Interpolation[{{1890.08, 10.4859}, {1920.65, 11.1017}, {1951.72, 11.5305},
{1983.29, 11.8609}, {2015.37, 12.1301}, {2047.96, 12.3571}, {2081.09, 12.5533}}]
f2 = Interpolation[{{1890.08, 4.00184}, {1920.65, 3.9134}, {1951.72, 3.82687},
{1983.29, 3.74224}, {2015.37, 3.65896}, {2047.96, 3.57698}, {2081.09, 3.49664}]
```

sendo que se fornece a energia e o valor de f' ou f'' . Neste exemplo utilizamos apenas 7 pontos entre 1890,08eV e 2081,09eV. Com os valores de f' e f'' calcula-se os fatores de estrutura F_{hkl} , $F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$, para $hkl = 111$, e F_o para o cristal de silício no formato de diamante, o que é dado por:

$$\begin{aligned} F_{111}(E) &= 4[f'(E) + f''(E)] + 4i[f''(E) - f'(E)], \\ F_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}(E) &= 4[f'(E) - f''(E)] + 4i[f'(E) + f''(E)], \\ F_o(E) &= 8f'(E) + 8if''(E). \end{aligned}$$

No formato do *Mathematica* teremos:

```
FH[Energia_] := 4 * (f1[Energia] + f2[Energia]) + 4 i ( f2[Energia] - f1[Energia] )
FHbar[Energia_] := 4 * (f1[Energia] - f2[Energia]) + 4 i ( f2[Energia] + f1[Energia] )
F0[Energia_] := 8 * f1[Energia] + 8 * i * f2[Energia]
```

Outros parâmetros da reflexão 111 do Silício:

$$\begin{aligned} \{dhkl\} &= \left\{ \frac{5.4309 * 10^{-10}}{\sqrt{3}} \right\} \\ \{Vc\} &= \left\{ (5.4309 * 10^{-10})^3 \right\} \\ \{anguloAssimetria\} &= \{0\} \\ \{Cpolarização\} &= \{1\} \end{aligned}$$

Outros cristais e/ou outras reflexões devem utilizar os mesmos nomes das variáveis para obter o gráfico de reflexão pela difração dinâmica.

Finalmente defini-se as funções e plota-se os gráficos:

```

λB[Energia_] :=  $\frac{12.398 \cdot 10^{-7}}{\text{Energia}}$ 

ϑB[Energia_] := ArcSin[ $\frac{\lambda B[\text{Energia}]}{2 \cdot dhk1}$ ] (*Lei De Bragg*)

γassimetria[anguloAssimetria_, Energia_] :=  $\frac{\text{Sin}[anguloAssimetria + \vartheta B[\text{Energia}]]}{\text{Sin}[anguloAssimetria - \vartheta B[\text{Energia}]]}$ 
(*fator de assimetria, dependente do corte assimetico, Eq.5.1.3.3. Aqui,
eu usei o ângulo entre o plano cristalino e a superfície do cristal*)

Δϑ0r[Energia_] := Re[r0 * λB[Energia]^2 *
  (F0[Energia] * (1 - γassimetria[anguloAssimetria, Energia])) / (2 π * Vc * Sin[2 ϑB[Energia]])]
(*desvio do angulo de Bragg Eq. 5.1.3.4*)

Δϑ0r2[Energia_, anguloAssimetria_] := Re[r0 * λB[Energia]^2 *
  (F0[Energia] * (1 - γassimetria[anguloAssimetria, Energia])) / (2 π * Vc * Sin[2 ϑB[Energia]])]
(*mesma coisa em função do ângulo de corte*)

δ[Energia_] := r0 * λB[Energia]^2 * Cpolarização
  (Abs[γassimetria[anguloAssimetria, Energia]] * FHbar[Energia] * FH[Energia])^(1/2) /
  (π * Vc * Sin[2 ϑB[Energia]])

ηr[ϑ_, Energia_] :=  $\frac{(\vartheta - \vartheta B[\text{Energia}] - \Delta \vartheta 0r[\text{Energia}])}{\text{Re}[\delta[\text{Energia}]]}$ 

β[Energia_] := Arg[(FH[Energia] * FHbar[Energia])^(1/2)]

Aηi[Energia_] := -Tan[β[Energia]]

Bηi[Energia_] :=
  -Im[F0[Energia]] / (Cpolarização * (Abs[FH[Energia] FHbar[Energia]])^(1/2) Cos[β[Energia]]) *
   $\frac{(1 - \gamma_{assimetria}[anguloAssimetria, Energia])}{2 \sqrt{Abs[\gamma_{assimetria}[anguloAssimetria, Energia]]}^{1/2}}$ 

```

```

 $\eta i[\vartheta\_ , Energia\_ ] := A \eta i[Energia] * \eta r[\vartheta , Energia] + B \eta i[Energia]$ 

 $\eta T[\vartheta\_ , Energia\_ ] := \eta r[\vartheta , Energia] + i \eta i[\vartheta , Energia]$ 
(*meio SEM absorção:  $\eta$ ,  $\Delta\vartheta_0$  e  $\delta_0$  são reais *)

 $Z[\eta\_ ] := Abs[\eta - (\eta^2 - 1)^{1/2}] / ; Abs[\eta - (\eta^2 - 1)^{1/2}] < 1$ 

 $Z[\eta\_ ] := Abs[\eta + (\eta^2 - 1)^{1/2}] / ; Abs[\eta + (\eta^2 - 1)^{1/2}] < 1$ 

 $Ih2[\vartheta\_ , Energia\_ ] := Abs\left[\frac{FH[Energia]}{FHbar[Energia]}\right] * (Z[\eta T[\vartheta , Energia]])^2$ 

(anguloAssimetria) = {0}
Plot[{Ih2[ $\vartheta B[5000]$ , Energia + 5000], Ih2[ $\vartheta B[10\,000]$ , Energia + 10 000],
      Ih2[ $\vartheta B[15\,000]$ , Energia + 15 000], Ih2[ $\vartheta B[20\,000]$ , Energia + 20 000]},
      {Energia, -6, 6}, PlotRange → All, Frame → True, GridLines → Automatic,
      FrameLabel → {Energia - EnergiaBragg [eV], Refletância},
      FrameStyle → Directive[12, Bold], PlotStyle → Thick,
      PlotLegend → {5 KeV, 10 KeV, 15 KeV, 20 KeV}, LegendSize → {0.3, 0.3},
      LegendPosition → {.55, .35}, LegendShadow → {.01, .01}, LegendTextSpace → 5]

Plot[{Ih2[ $\vartheta * 10^{-6} + \vartheta B[5000] + \Delta\vartheta_0 r[5000]$ , 5000],
      Ih2[ $\vartheta * 10^{-6} + \vartheta B[10\,000] + \Delta\vartheta_0 r[10\,000]$ , 10 000],
      Ih2[ $\vartheta * 10^{-6} + \vartheta B[15\,000] + \Delta\vartheta_0 r[15\,000]$ , 15 000],
      Ih2[ $\vartheta * 10^{-6} + \vartheta B[20\,000] + \Delta\vartheta_0 r[20\,000]$ , 20 000]},
      { $\vartheta$ , -60, 60}, PlotRange → All, Frame → True, GridLines → Automatic,
      FrameLabel → { $\vartheta - \vartheta_{BraggCorr}$  [μrad], Refletância},
      FrameStyle → Directive[12, Bold], PlotStyle → Thick,
      PlotLegend → {5 KeV, 10 KeV, 15 KeV, 20 KeV}, LegendSize → {.4, .4},
      LegendPosition → {.4, .2}, LegendShadow → {.01, .01}, LegendTextSpace → 2]

```

- Códigos para Figuras em 2.20:

```

Plot[γassimetria[θ*π/180, 2580.9],
  {θ, -90, 90}, Frame → True, GridLines → Automatic,
  FrameLabel → {α, γassimetria}, FrameStyle → Directive[12, Bold],
  PlotRange → {Automatic, {-10, 10}}, PlotStyle → Thickness[0.01]]

Plot[{γassimetria[-20*π/180, (12.398*10-7)/(2*dhk1*Sin[θ*π/180])],
  γassimetria[0*π/180, (12.398*10-7)/(2*dhk1*Sin[θ*π/180])],
  γassimetria[20*π/180, (12.398*10-7)/(2*dhk1*Sin[θ*π/180])]}, {θ, 0, 90},
  PlotRange → {{0, 90}, {-5, 5}}, Frame → True, GridLines → Automatic,
  FrameLabel → {θBragg, γassimetria}, FrameStyle → Directive[12, Bold],
  PlotStyle → Thick, PlotLegend → {-α, 0, α}, LegendSize → {.2, .25},
  LegendPosition → {.5, .3}, LegendShadow → {.01, .01}, LegendTextSpace → 4]

Plot[√Abs[γassimetria[θ*π/180, 2580.9]], {θ, -90, 90}, Frame → True,
  GridLines → Automatic, FrameLabel → {α, √|γ|}, FrameStyle → Directive[12, Bold],
  PlotRange → {Automatic, {0, 10}}, PlotStyle → Thickness[0.01]]

Plot[{√Abs[γassimetria[-20*π/180, (12.398*10-7)/(2*dhk1*Sin[θ*π/180])]],
  √Abs[γassimetria[0*π/180, (12.398*10-7)/(2*dhk1*Sin[θ*π/180])]],
  √Abs[γassimetria[20*π/180, (12.398*10-7)/(2*dhk1*Sin[θ*π/180])]]},
  {θ, 0, 90}, PlotRange → {{0, 90}, {0, 5}}, Frame → True,
  GridLines → Automatic, FrameLabel → {θBragg, √|γ|},
  FrameStyle → Directive[12, Bold], FrameStyle → Directive[12, Bold],
  PlotStyle → Thick, PlotLegend → {-α, 0, α}, LegendSize → {.2, .25},
  LegendPosition → {.35, .3}, LegendShadow → {.01, .01}, LegendTextSpace → 4]

```

- Códigos para Figuras em 2.21:

```
Plot[{ $\Delta\theta_{0r2}[\text{Energia} \times 10^3, -.199] \times 10^6$ ,  $\Delta\theta_{0r2}[\text{Energia} \times 10^3, 0] \times 10^6$ ,
 $\Delta\theta_{0r2}[\text{Energia} \times 10^3, .199] \times 10^6$ }, {Energia, 3, 25}, PlotRange -> {{0, 25}, Automatic},
Frame -> True, FrameLabel -> {Energia[KeV], Re  $\langle \Delta\theta_0 \rangle [\mu\text{rad}]$ },
GridLines -> Automatic, FrameStyle -> Directive[12, Bold],
PlotStyle -> Thick, PlotLegend -> {- $\alpha$ , 0,  $\alpha$ }, LegendSize -> {.2, .2},
LegendPosition -> {.5, .3}, LegendShadow -> {.01, .01}, LegendTextSpace -> 2]
```

```
Plot[{ $\sqrt{\text{Abs}[\gamma_{\text{assimetria}}[-20 \times \pi/180, (12.398 \times 10^{-7}) / (2 \times \text{dhk1} \times \text{Sin}[\vartheta \times \pi/180])]}$ },
 $\sqrt{\text{Abs}[\gamma_{\text{assimetria}}[0 \times \pi/180, (12.398 \times 10^{-7}) / (2 \times \text{dhk1} \times \text{Sin}[\vartheta \times \pi/180])]}$ },
 $\sqrt{\text{Abs}[\gamma_{\text{assimetria}}[20 \times \pi/180, (12.398 \times 10^{-7}) / (2 \times \text{dhk1} \times \text{Sin}[\vartheta \times \pi/180])]}$ },
 $\vartheta$ , 0, 90}, PlotRange -> {{0, 90}, {0, 5}}, Frame -> True,
GridLines -> Automatic, FrameLabel -> { $\vartheta_{\text{Bragg}}$ ,  $\sqrt{|\gamma|}$ },
FrameStyle -> Directive[12, Bold], FrameStyle -> Directive[12, Bold],
PlotStyle -> Thick, PlotLegend -> {- $\alpha$ , 0,  $\alpha$ }, LegendSize -> {.2, .25},
LegendPosition -> {.35, .3}, LegendShadow -> {.01, .01}, LegendTextSpace -> 4]
```


- Códigos para Figuras em 3.8:

```
Plot[{deltaEoverE2[Energia*103, 10-5, 0]*100,
      omegadarwin2[Energia*103, 0]*Cot[phiB[Energia*103]]*100,
      (10-5) Sqrt[(4 dhk12)/lambdaB[Energia*103]2 - 1]*100}, {Energia, 3, 25},
PlotRange -> Automatic, Frame -> True, FrameLabel -> {Energia[KeV],  $\frac{\Delta}{E}$  [%]},
FrameStyle -> Directive[12, Bold], PlotStyle -> Thick,
PlotLegend -> {Total, Darwin, Bragg}, LegendSize -> {0.3, 0.25},
LegendPosition -> {.5, -.32}, LegendShadow -> {.01, .01},
LegendTextSpace -> 5, GridLines -> Automatic]
```

```
Plot[{deltaEoverE[Energia*103, 10-5]*Energia*103,
      omegadarwin[Energia*103]*Cot[phiB[Energia*103]]*Energia*103,
      (10-5) Sqrt[( $\frac{4 dhk1^2}{\lambda B[Energia*10^3]^2} - 1$ )*Energia*103}, {Energia, 3, 25},
PlotRange -> Automatic, Frame -> True, FrameLabel -> {Energia[KeV], Delta[eV]},
FrameStyle -> Directive[12, Bold], PlotStyle -> Thick,
PlotLegend -> {Total, Darwin, Bragg}, LegendSize -> {0.3, 0.25},
LegendPosition -> {.4, -.3}, LegendShadow -> {.01, .01},
LegendTextSpace -> 5, GridLines -> Automatic]
```

```

Plot[{deltaEoverE2[Energia*10^3, 10^-5, -oB[15000]]*100,
      wdarwin2[Energia*10^3, -oB[15000]]*Cot[oB[Energia*10^3]]*100,
      (10^-5) Sqrt[(4 dhk1^2)/lambdaB[Energia*10^3]^2 - 1]*100}, {Energia, 3, 25},
PlotRange -> Automatic, Frame -> True, FrameLabel -> {Energia[KeV], DeltaE/E [%]},
FrameStyle -> Directive[12, Bold], PlotStyle -> Thick,
PlotLegend -> {Total, Darwin, Bragg}, LegendSize -> {0.3, 0.25},
LegendPosition -> {.5, -.32}, LegendShadow -> {.01, .01},
LegendTextSpace -> 5, GridLines -> Automatic]

```

```

Plot[{deltaEoverE2[Energia*10^3, 10^-5, -oB[15000]]*Energia*10^3,
      wdarwin2[Energia*10^3, -oB[15000]]*Cot[oB[Energia*10^3]]*Energia*10^3,
      (10^-5) Sqrt[(4 dhk1^2)/lambdaB[Energia*10^3]^2 - 1]*Energia*10^3}, {Energia, 3, 25},
PlotRange -> Automatic, Frame -> True, FrameLabel -> {Energia[KeV], DeltaE[eV]},
FrameStyle -> Directive[12, Bold], PlotStyle -> Thick,
PlotLegend -> {Total, Darwin, Bragg}, LegendSize -> {0.3, 0.25},
LegendPosition -> {.4, -.3}, LegendShadow -> {.01, .01},
LegendTextSpace -> 5, GridLines -> Automatic]

```