

Henrique de Almeida Tórtura

Otimização da linha de luz HARPIA através de simulações de ray-tracing

Monografia apresentada ao Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para conclusão do curso de Bacharelado em Física.

Orientador: Prof. Dr. Jonathas de Paula Siqueira - UNICAMP

**São Carlos
2019**

RESUMO

HARPIA será uma linha de luz de difração de pó de raios-X no Sirius, o acelerador síncrotron de quarta geração brasileiro, que irá funcionar como parte do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) dentro do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM). Os experimentos a serem realizados na linha necessitam de um feixe de luz de tamanho vertical de $0,8\text{mm}$, iluminando a área útil de um tubo capilar de 1mm de espessura que contém a amostra, fluxo de fótons de 10^{12} a 10^{13}ph/s/100mA e fator de resolução energética da ordem de 10^{-4} , operando com uma energia entre 5 e 30keV . Para adequar o feixe a tais critérios, foi preciso caracterizar elementos ópticos como onduladores, que geram o feixe de luz inicial através de desvios oscilatórios na trajetória dos elétrons, monocromadores, responsáveis por estreitar a banda de energia, e possíveis espelhos, para colimação e rejeição de harmônicos, e simular seus efeitos na linha de luz. O ondulador será instalado em uma seção reta do Sirius, enquanto os outros elementos podem estar dispostos entre 25m , posição que marca o fim da proteção radiológica, e 60m da fonte, sem ocupar a marca de 34m , na qual há uma divisão de estabilidade do piso. As simulações, que foram realizadas pelo método de ray-tracing com o uso do software SHADOW¹ e de ferramentas derivadas desenvolvidas em Python pelo grupo de óptica do LNLS², mostram que o uso de um ondulador de período de 18mm , instalado na seção Low- β , combinado com um monocromador de Si(111) permite obter fluxos de até $(2,545 \pm 0,001)10^{13}\text{ph/s/100mA}$ com uma resolução de energia de $(1,20 \pm 0,01)10^{-4}$. Para a energia de 20keV , por exemplo, o tamanho do feixe de fótons na fonte, que é aproximadamente gaussiano, foi estimado em $46,5\mu\text{m}$ horizontalmente e $10,5\mu\text{m}$ verticalmente (largura à meia altura) e a divergência horizontal de $39\mu\text{rad}$ e vertical de $24,5\mu\text{rad}$ (largura à meia altura), o que pode ser usado para determinar a melhor posição para o difratômetro a fim de se ter um feixe que se encaixe nas proporções do tubo capilar que guarda a amostra. Introduzir um espelho colimador possibilitaria reduzir o tamanho vertical do feixe, de $(946 \pm 3)\mu\text{m}$ para $(693 \pm 6)\mu\text{m}$ a 40m da fonte em 20keV , e melhorar o fator de rejeição de harmônicos para baixas energias, de $1,53 \cdot 10^{-2}$ a $6,96 \cdot 10^{-4}$ para 5keV , mas levaria a perda de 20 a 30% no fluxo total de fótons para baixas energias, precisando de diferentes faixas de revestimento para ser utilizado em todo o espectro planejado e encarecendo o projeto.

Palavras-chave: Óptica de raios-X, linha de luz de difração de pó, ray-tracing.

1 Introdução

O CNPEM (Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais) é uma Organização Social supervisionada pelo Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações que engloba quatro laboratórios abertos à comunidade científica e empresarial. Dentre eles, o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) operava a primeira fonte de luz síncrotron do Hemisfério Sul (UVX), que encerrou suas atividades de pesquisa para usuários em 2 de agosto de 2019, e está concluindo o Sirius, um novo acelerador de última (4^a) geração que começará a funcionar no início de 2020, possibilitando, por exemplo, análises da composição de materiais nano-estruturados, obtenção de imagens tridimensionais com resolução nanométrica, experimentos em materiais submetidos a condições extremas (de temperatura, pressão e campos magnéticos) e acompanhamento de alterações mecânicas, térmicas e químicas em tempo real.³

A HARPIA será uma linha de luz do Sirius destinada a difração de pó de raios-X, método que permite a análise rápida e não-destrutiva de amostras policristalinas. A linha visa oferecer dados de

alta qualidade para temperaturas ambiente e criogênica, bem como permitir análise de experimentos dinâmicos a uma resolução temporal de ordem de micro-segundo. Essa resolução poderá ser alcançada pelo uso de detectores de ponta e pelo feixe monocromático de alto fluxo de fótons fornecido por ondulator. A HARPIA deverá operar na faixa de raios-X duros, de 5 a 30keV, gerados por um ondulator, com uma resolução energética ($\Delta E/E$) da ordem de 10^{-4} e um feixe em boa aproximação gaussiano, que deve iluminar verticalmente 0,8mm do tubo capilar de 1mm de espessura total que guarda as amostras posicionado no difratômetro.

O presente trabalho procura revisar o projeto da linha HARPIA e caracterizar elementos que podem ser utilizados na sua composição. A próxima seção traz uma revisão de conceitos básicos sobre aceleradores síncrotron, onduladores, monocromadores e espelhos de raios-X. As análises foram realizadas por simulações de traçado geométrico de raios (*ray-tracing*), com o uso do software SHADOW (Subseção 3.1). As influências das fontes de radiação (combinação da seção reta do anel e ondulator), cristais do monocromador e revestimentos do possível espelho no fluxo final total de fótons são expostas na Subseção 4.1, incluindo o fator de rejeição de harmônicos. A Subseção 4.2 traz os resultados da resolução energética para os diferentes onduladores combinados com os cristais disponíveis do monocromador. Finalmente, o tamanho e a divergência do feixe são apresentados para as diferentes fontes, abrangendo uma análise da posição para o difratômetro e as alterações que a inserção de um espelho colimador traria ao feixe, na Subseção 4.3.

2 Revisão

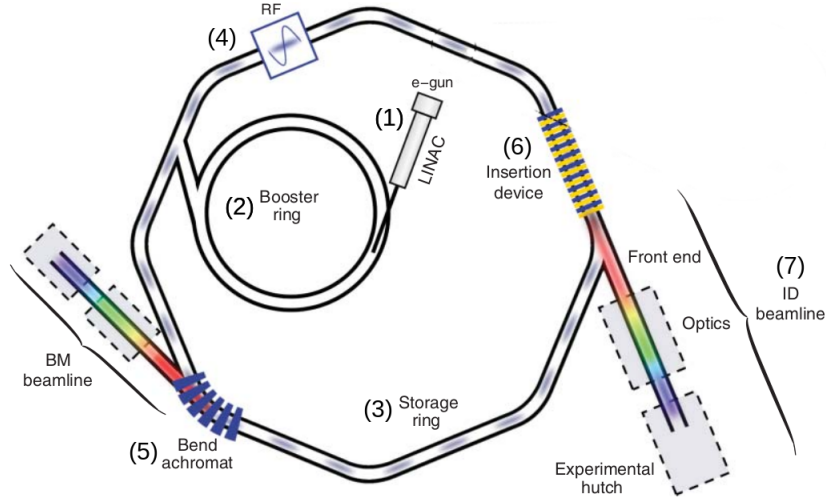
2.1 Radiação Síncrotron

A radiação eletromagnética emitida por partículas carregadas que se movem em velocidade relativística quando são aceleradas e mantidas em trajetórias fechadas por campos magnéticos é conhecida genericamente como radiação síncrotron. Um acelerador síncrotron precisa de um fornecimento constante de elétrons para repor os perdidos por colisões com moléculas residuais de gás, que são gerados, usualmente, por uma fonte termoiônica e passam por um acelerador linear (LINAC) - no caso do Sirius, obtendo uma energia de 150MeV - de onde são injetados em um anel acelerador, conhecido como *booster*. No *booster*, os elétrons são acelerados até a energia do anel de armazenamento, 3GeV para o Sirius, sendo quase continuamente injetados neste último sempre que a corrente do anel de armazenamento cair por um valor estabelecido, no intuito de a manter constante e não causar mudanças abruptas na radiação emitida, estabilizando a operação do acelerador que funcionará ininterruptamente.

No anel de armazenamento, o anel principal do acelerador, os elétrons são mantidos em órbitas fechadas por dipolos magnéticos que conectam os trechos retilíneos do anel e podem ser usados como fontes para linhas de luz, enquanto o feixe de elétrons é focalizado por quadrupolos magnéticos e tem suas aberrações cromáticas, devidas a essa focalização, corrigidas por sextupolos magnéticos. A energia perdida pelos elétrons com a emissão de radiação síncrotron é repostada pelos campos eletromagnéticos das cavidades de rádio frequência (RF). O anel de armazenamento ainda pode possuir dispositivos de inserção instalados em seus trechos retos, como *wigglers* e onduladores, que funcionam como fontes de radiação de alto brilho para linhas de luz, criando trajetórias oscilatórias para os elétrons por dipolos magnéticos cuja polaridade se inverte em um período específico (Figura 1).

Parâmetros geralmente usados para medir a qualidade de um feixe de radiação síncrotron são o

Figura 1: Esquema de um acelerador síncrotron: (1) acelerador linear, (2) *booster*, (3) anel de armazenamento, (4) cavidade de rádio frequência, (5) dipolo magnético, (6) dispositivo de inserção em trecho reto do anel, (7) estação experimental - linha de luz.



Fonte: Adaptado de Willmott ⁴.

fluxo, i.e., o número de fótons por segundo que passam em determinada área, e o brilho, dado por

$$Brilho = \frac{Fluxo}{\epsilon_x \epsilon_y}, \quad (1)$$

sendo a emitância da fonte $\epsilon_{x,y}$ (nas direções x ou y), dada como o produto do tamanho $\sigma_{x,y}$ com a divergência $\sigma'_{x,y}$

$$\begin{aligned} \epsilon_x &= \sigma_x \sigma'_x, \\ \epsilon_y &= \sigma_y \sigma'_y \end{aligned} \quad (2)$$

O brilho, portanto, fornece a distribuição espacial e angular do fluxo. Nas seções que seguem, adota-se a unidade de fluxo normalizada por $100mA$ da corrente do anel de armazenamento, ou seja, $[Fluxo] = \frac{ph}{s(100mA)} = ph/s/100mA$. Ao longo de um dado anel de armazenamento de um acelerador síncrotron, a emitância é uma constante⁴. Como um elétron pode ter um momento transversal não nulo e desviar da órbita ideal, os quadrúpolos magnéticos são usados para a focalização do feixe, de maneira que σ_x e σ_y variam ao longo do anel. Essa variação pode ser medida pelo parâmetro β , definido de forma que

$$\begin{cases} \beta_x = \sigma_x / \sigma'_x \\ \beta_y = \sigma_y / \sigma'_y \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \sigma_x = \sqrt{\epsilon_x \beta_x} \\ \sigma_y = \sqrt{\epsilon_y \beta_y} \end{cases}. \quad (3)$$

Logo, um feixe focalizado terá maior divergência (Low- β), enquanto um feixe maior será mais paralelo (High- β).

2.2 Ondulador

Em um ondulador, elétrons passam por campos magnéticos transversais, criados por dipolos com sentido periodicamente alternado, o que os faz percorrer uma trajetória oscilatória, e os pulsos de

radiação são emitidos em um cone estreito de maneira a se interferirem (ver Figura 2). Interferência construtiva ocorrerá para os comprimentos de onda $\lambda'_n = L_u/\gamma n$, sendo L_u o período do ondulator no referencial laboratório, que sofre uma contração de Lorentz para L_u/γ no referencial relativístico do elétron⁵, e n o número inteiro relacionado ao harmônico. Esse comprimento de onda, porém, é percebido de forma alterada pelo efeito Doppler. Um elétron de carga e e massa m_e se deslocando na direção longitudinal z com oscilações na direção transversal x causadas por um campo magnético na direção y tem a equação de movimento transversal

$$\gamma m_e \frac{dv_x}{dt} = -eB \sin(2\pi z/L_u) v_z, \quad (4)$$

cujas soluções da velocidade é,

$$\begin{aligned} v_x &= v_{0x} \cos(2\pi z/L_u), \\ v_{0x} &= \frac{eBL_u}{2\pi\gamma m_e}. \end{aligned} \quad (5)$$

A velocidade média em um período será $\langle v_x \rangle = \frac{cK}{\sqrt{2}\gamma}$, definindo o parâmetro K do ondulator como

$$K = \frac{eBL_u}{2\pi m_e c}. \quad (6)$$

O fator de Doppler na direção longitudinal, $2\gamma_z^2$, será

$$2\gamma_z^2 = \frac{2}{1 - (v^2 - v_x^2)/c^2} = \frac{2\gamma^2}{1 + \gamma^2 v_x^2/c^2}, \quad (7)$$

que é, em média, $f_D = \frac{2\gamma^2}{1 + K^2/2}$. Dessa maneira, a energia da radiação emitida é

$$E = \frac{hc}{\lambda_n} f_D = \frac{2\gamma^2 n h c}{L_u (1 + K^2/2)}. \quad (8)$$

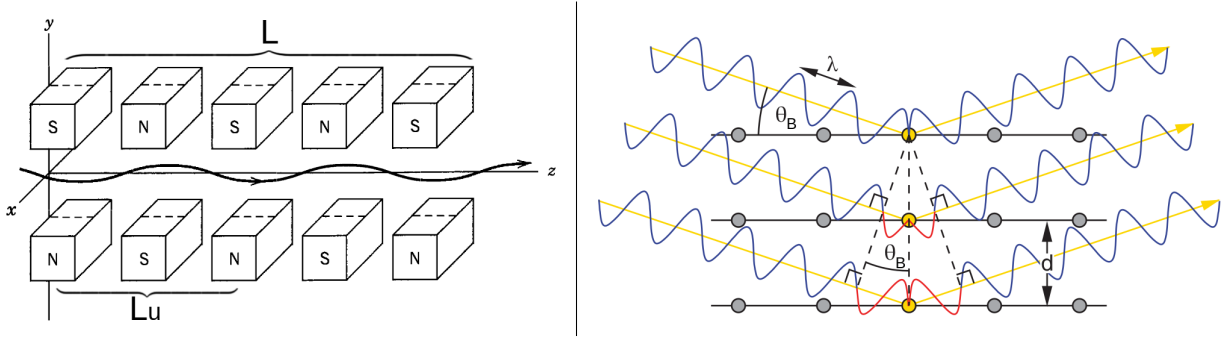
Como podemos expressar o fator de Lorentz γ pela energia total do elétron em movimento relativístico, dada a relação

$$E_e = \gamma m_e c^2, \quad (9)$$

obtemos pelas Equação 8 e Equação 9 uma maneira de, para um dado harmônico fixo n , varrer a energia produzida ajustando o parâmetro K do ondulator, por exemplo, mudando a intensidade do campo B pela separação entre os ímãs. Acima de certa energia, a intensidade da radiação emitida para um certo harmônico se torna menor que o valor para o próximo harmônico e seu respectivo valor de K , considerando que K deverá ter um limite máximo permitido dado pela separação mínima entre os ímãs do ondulator⁴. Ainda deve-se considerar que, para um observador no eixo longitudinal z , os harmônicos pares são desprezíveis e apenas harmônicos ímpares são emitidos. A monocromaticidade⁶ de um pico de radiação λ_n depende do inverso do seu harmônico n e do seu número de períodos N

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_n} \approx \frac{1}{nN}. \quad (10)$$

Figura 2: Representação de um ondulator de período de tamanho L_u e comprimento total L (esquerda) e condição de interferência construtiva para a Lei de Bragg (direita).



Fonte: Adaptado de Jackson⁷ e Willmott⁴.

Os parâmetros geométricos, tamanho σ e divergência σ' , do feixe de radiação gerado por um ondulator podem ser aproximados por uma convolução com a distribuição do feixe de elétrons de banda de energia σ_E ⁸,

$$\begin{aligned}\Sigma_x &= \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_{r0}^2 Q_S^2(\sigma_e)}, \\ \Sigma_{x'} &= \sqrt{\sigma_{x'}^2 + \sigma_{r'0}^2 Q_a^2(\sigma_e)},\end{aligned}\tag{11}$$

sendo σ_e e σ_e' o tamanho e a divergência, respectivamente, do feixe de elétrons, $\sigma_e = 2\pi n N \sigma_E$ a banda de energia normalizada, e comprimento total L . Os outros parâmetros e funções são dados por

$$\begin{aligned}\sigma_{r'0} &= \sqrt{\frac{\lambda_n}{2L}}, \\ \sigma_{r0} &= \frac{\sqrt{2\lambda_n L}}{4\pi}, \\ Q_a(\xi) &= \sqrt{\frac{2\xi^2}{e^{-2\xi^2} - 1 + \sqrt{2\pi}\xi \operatorname{erf}(\sqrt{2}\xi)}}, \\ Q_S(\xi) &= 2[Q_a(\xi)]^{2/3}.\end{aligned}\tag{12}$$

2.3 Monocromador de Cristal

Monocromadores são instrumentos específicos para selecionar uma fina faixa de banda de energia, tornando o feixe de radiação mais monocromático através de efeitos de difração. A maioria dos monocromadores de cristais é constituída de silício e germânio já que estes materiais tem alta condutividade térmica, sendo necessário refrigerar os cristais que absorvem a maior parte do feixe policromático incidente para evitar deformações térmicas. Um arranjo comum é o chamado DCM (*double-crystal monochromator* ou monocromador de cristal duplo), constituído por dois cristais que possuem o mesmo ângulo de incidência, de maneira que não há desvio na trajetória do feixe mas apenas uma translação de sua posição.

Para se obter o pico central de energia que é difratada por planos cristalinos em um ângulo θ_B , a

respeito da superfície, usamos a lei de Bragg (ver Figura 2)

$$m\lambda = 2d\sin(\theta_B), \quad (13)$$

significando que a radiação que tiver comprimento de onda (vezes um múltiplo inteiro) igual ao caminho percorrido entre os planos cristalinos, distanciados por d , terá interferência construtiva e será transmitida. A transmissão de múltiplos de λ pode ser indesejada para a realização de experimentos em linhas de luz, de maneira que estes harmônicos precisam ser suprimidos, por exemplo, pela adição de espelhos (ver Subseção 2.4).

A divergência do feixe incidente, imperfeições no cristal e a absorção finita contribuem para que a banda $\Delta\lambda$ do feixe resultante seja não-nula. Da derivação da lei de Bragg, obtemos que

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta\theta_B}{\tan(\theta_B)} \approx \cot(\theta_B) \sqrt{\sigma'^2 + \omega_D^2}, \quad (14)$$

considerando que o desvio angular $\Delta\theta_B$ provém da divergência σ' do feixe de radiação e da largura de Darwin ω_D , dada pela teoria dinâmica de difração, que é uma função da energia. Para energias suficientemente altas, porém, a resolução intrínseca do cristal, $\omega_D \cot(\theta_B)$, pode ser considerada constante. Para o Si(111) temos $\Delta E/E \approx 1,35 \cdot 10^{-4}$, por exemplo⁹.

2.4 Espelhos de Raios-X

O índice de refração para raios-X pode ser expresso como¹⁰

$$n = 1 - \delta + i\kappa, \quad (15)$$

com,

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{\rho_a r_0 \lambda^2}{2\pi} f_1^0(\omega), \\ \kappa &= \frac{\rho_a r_0 \lambda^2}{2\pi} f_2^0(\omega), \end{aligned} \quad (16)$$

sendo os fatores $f_1^0(\omega)$ e $f_2^0(\omega)$ as partes real e imaginária da correção de dispersão e, em geral, $\kappa \ll \delta$. Como a parte real de n é ligeiramente menor que 1, é possível que ocorra reflexão total de um feixe proveniente do vácuo para uma interface de determinado material. Assumindo que $\kappa \rightarrow 0$, a lei de Snell no limite de reflexão total fornece o ângulo crítico θ_C em relação à superfície

$$\theta_C = \sqrt{2\delta}. \quad (17)$$

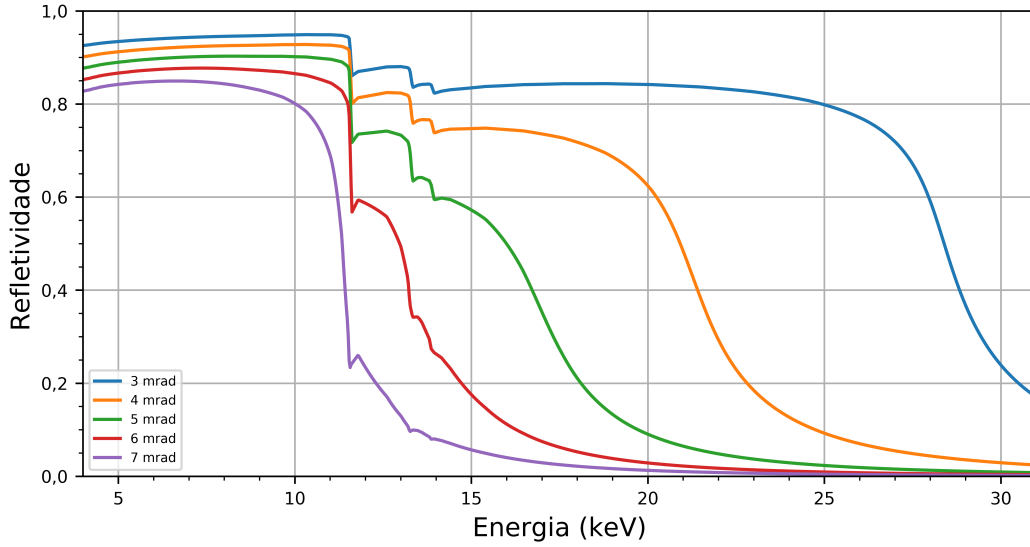
Em boa aproximação, $\theta_C \propto \lambda$, de maneira que o ângulo crítico tende a diminuir com o aumento da energia da radiação incidente, o que significa que, para um dado ângulo de incidência, um espelho de raios-X permite apenas a passagem de radiação abaixo da energia correspondente. Para um ângulo de incidência rasante θ , o coeficiente de refletividade (ver Figura 3) é dado por⁶

$$R = \left| \frac{Q - Q'}{Q + Q'} \right|^2, \quad (18)$$

sendo

$$\begin{aligned} Q &= \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta), \\ Q' &= \sqrt{Q - \frac{4\pi}{\lambda} \sqrt{2\delta} \left(1 - 2i \frac{\beta}{\delta} \right)}. \end{aligned} \quad (19)$$

Figura 3: Refletividade da platina para diferentes ângulos de incidência.



Fonte: Autor.

Tem-se ainda as equações de Coddington para o raio meridional e sagital, respectivamente, de um espelho toroidal⁴

$$\begin{aligned} R_M &= \frac{2}{\sin\theta} \left(\frac{pq}{p+q} \right), \\ R_S &= 2\sin\theta \left(\frac{pq}{p+q} \right), \end{aligned} \quad (20)$$

obtidas pela aproximação da curvatura de um elipsóide. Assim, quando se faz necessário focalizar ou colimar um feixe de raios-X, a Equação 17 nos diz que ângulo é necessário para refletir até determinada energia e a Equação 20 nos diz qual deve ser o raio meridional e/ou sagital dadas as distâncias do ponto objeto p e do ponto imagem q .

3 Metodologia

3.1 SHADOW

As simulações foram realizadas através de programas criados em Python utilizando o SHADOW¹, um programa de ray-tracing com foco dedicado a radiação síncrotron e a simulação de elementos ópticos de linhas de luz, o qual possibilita a análise de erros de superfície em sistemas imperfeitos, desvios de posição e ângulo e pode considerar propriedades não apenas da óptica geométrica, como a refletividade de materiais e efeitos de difração. O feixe simulado consiste de um número predeterminado de raios - objetos com informações de posição, divergência, intensidade de campo elétrico em componentes paralela e perpendicular, entre outras - que são propagados através de elementos ópticos da linha, como fendas, cristais e espelhos. O SHADOW e outros pacotes semelhantes estão integrados na interface gráfica OASYS (ORange SYnchrotron Suite)¹¹, usada para o planejamento de linhas de luz e experimentos de raios-X.

Para a análise, visualização e cálculo do fluxo de fótons do feixe, foram usadas ferramentas desenvolvidas pelo grupo de óptica do LNLS² integradas ao OASYS. Essas ferramentas foram adaptadas para que a simulação pudesse ser executada diversas vezes em *loop*, obtendo os resultados para diferentes pontos de energia, a cada 250eV , dentro do espectro da linha. Para cada energia, vinte simulações foram realizadas gerando diferentes feixes pelo método de Monte Carlo, usado no SHADOW, e considerando a aproximação da Equação 11, de maneira que a incerteza final dos parâmetros foi dada como o maior valor entre o desvio padrão dos resultados do conjunto de simulações e a média das incertezas no ajuste gaussiano, quando este era possível de ser realizado - como no caso da banda de energia, tamanho e divergência do feixe.

3.2 Parâmetros simulados

Foi necessário determinar em qual tipo de seção reta do anel de armazenamento seria mais apropriada a instalação da linha. As seções retas do Sirius diferem no arranjo de ímãs de quadrupólos usados: a High- β utiliza um dubleto enquanto a Low- β usa um tripleto¹². Isso leva a diferentes valores de β para o feixe de elétrons, o que afetará as dimensões do feixe de fótons produzido pelo ondulator como visto na seção 2.2. Para avaliar a seção que mais se adequa aos requisitos da HARPIA, ambas foram simuladas com um mesmo ondulator de período 19mm e os parâmetros do feixe de elétrons para cada uma se encontram na Tabela 1 abaixo.

Tabela 1: Parâmetros do feixe de elétrons para cada seção reta.

	Seção High- β	Seção Low- β
$\sigma_X (\mu\text{m})$	65,2	19,3
$\sigma_Z (\mu\text{m})$	3	1,9
$\sigma'_X (\mu\text{rad})$	3,8	12,9
$\sigma'_Z (\mu\text{rad})$	0,8	1,3

Fonte: Wiki-Sirius¹².

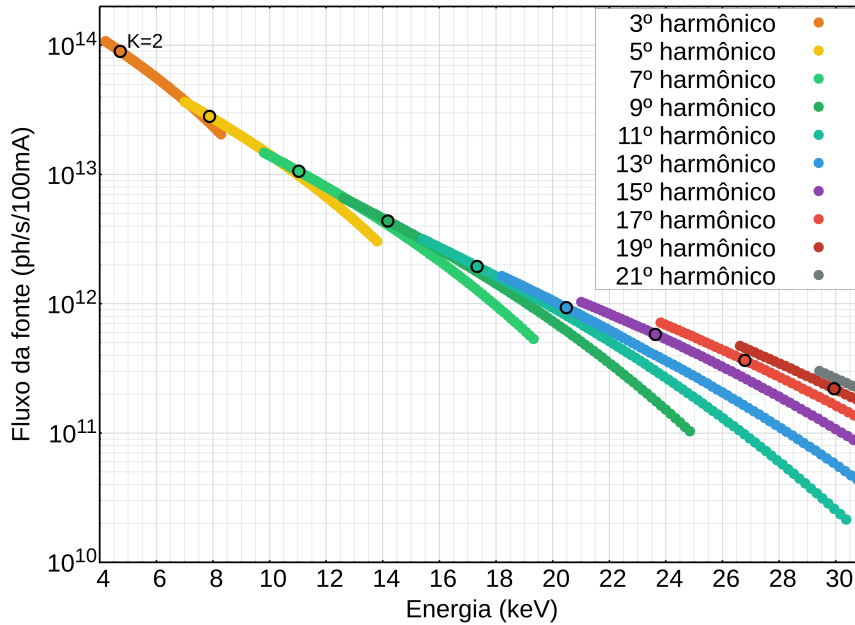
As simulações também se voltaram a determinação do ondulator mais apropriado para a HARPIA, escolhido dentre opções a disposição do CNPEM que foram ou estão sendo consideradas para outras linhas de luz. Novamente, como visto na Subseção 2.2, os ondulators podem ser caracterizados por seu comprimento total, o tamanho do período, o número de períodos e o máximo valor para o parâmetro K que pode ser ajustado. A variação desses parâmetros em cada ondulator, exibidos na Tabela 2, influencia o fluxo de fótons, a resolução energética do feixe e os seus parâmetros geométricos. Uma análise preliminar pelo programa SPECTRA¹³, um software que permite investigar propriedades da radiação síncrotron, revelou que, para os três ondulators simulados, a maior parte do espectro da linha se encontra na situação descrita na Subseção 2.2 em que o maior harmônico possível de ser sintonizado para determinada energia corresponde ao maior fluxo de fótons gerado. A Figura 4 mostra o fluxo calculado pelo SPECTRA para o caso do ondulator de 18mm instalado na seção Low- β com a variação do parâmetro K para diferentes harmônicos. A mudança de harmônico também causa uma variação nos parâmetros geométricos do feixe de radiação e isso deve ser levado em conta caso a linha de luz queira otimizar o brilho, mas, para a HARPIA, pode-se focar apenas em obter o maior fluxo total de fótons. Os resultados carregam então a informação da troca de harmônico de acordo com a variação na energia para a otimização do fluxo.

Tabela 2: Parâmetros dos onduladores disponíveis para a linha HARPIA.

	Período 18mm	Período 19mm	Período 20mm
Nº de períodos	133	126	120
Comprimento(m)	2,4	2,4	2,4
K Máximo	2,186	2,3	2

Fonte: Wiki-Sirius¹².

Figura 4: Fluxo gerado na fonte (ondulador de período 18mm na seção Low- β) calculado pelo SPECTRA. Para um determinado parâmetro K ajustado (como o exemplo destacado de $K = 2$), uma energia é emitida para cada harmônico ímpar. Percebe-se que, dentre os diferentes harmônicos possíveis para se gerar uma energia, o maior harmônico é, em geral, aquele que corresponde ao maior fluxo.



Fonte: Autor.

Todas as simulações descritas até então foram realizadas de acordo com o seguinte arranjo: uma fenda para definir a aceitância (divergência máxima), como de praxe nas linhas, de $1,4 \times 1,4 \text{ mm}^2$ a 28m da fonte ($50 \times 50 \mu\text{rad}^2$) e um DCM, que pode operar com critais de Si(111) ou Si(311), a 30m da fonte, analisando o tamanho do feixe a 40m da fonte. Como a fenda bloqueia apenas uma porção da borda do feixe, efeitos de difração puderam ser desprezados. Uma limitação do ângulo de incidência do monocromador real, que será futuramente instalado na linha, impede que seja factível simular energias abaixo de 8 keV (ângulo de Bragg acima de 30°) ao se considerar o cristal de Si(311). É previsto que a linha não deva ocupar mais que 60m após a fonte e, considerando que o fim da proteção radiológica de linhas de onduladores é em 25m da fonte, os elementos devem estar dispostos entre estes limites. Existe ainda uma divisão de estabilidade no piso em 34m, de maneira que um componente não pode ocupar esta marca.

O feixe estimado na fonte foi propagado analiticamente para se obter seu tamanho em diferentes distâncias, determinando a melhor posição na linha para o difratômetro, adequando o tamanho do

feixe de radiação ao tubo capilar que contém a amostra. Em paralelo, simulações considerando um espelho colimador *up-bounce* (o plano de incidência é o vertical e o feixe é refletido para cima) de raio meridional $21,818\text{km}$, ângulo rasante de incidência $2,75\text{mrad}$ e dimensões $300 \times 5\text{mm}^2$ foram realizadas com o intuito de diminuir o tamanho vertical do feixe e rejeitar harmônicos para as baixas energias da linha, especialmente de 5 a 10keV . Três diferentes materiais de revestimento (Si, Rh e Pt) foram simulados para que todo o espectro da linha pudesse ser viabilizado, considerando que a faixa com revestimento de Si deva ser usada para energias baixas (até aproximadamente 10keV) para a rejeição de harmônicos, a faixa de Rh para energias intermediárias (até 23keV) e a de Pt para as energias mais altas (para o ângulo de $2,75\text{mrad}$, a platina tem refletividade de 70% em 30keV).

O fator de rejeição de harmônicos no arranjo sem espelho foi obtido convoluindo a razão entre a transmissão do terceiro e do primeiro harmônicos do cristal com a razão do fluxo das mesmas energias geradas pelo ondulador: não necessariamente os mesmos harmônicos do cristal. Como já explicado, o harmônico do ondulador será o maior possível a ser sintonizado, portanto, a energia que se quer emitir está geralmente sintonizada para um harmônico n diferente do fundamental. O cristal, entretanto, permite a passagem dos harmônicos n , $2n$, $3n$ e assim por diante. Como a próxima energia que poderia ser transmitida pelo cristal, correspondente a $2n$, é um harmônico par do ondulador, sua intensidade é desprezada e calcula-se o fator de rejeição com o terceiro harmônico do cristal, que corresponde ao $3n$ -ésimo harmônico do ondulador. Finalmente, o fator no caso do espelho inserido será o obtido sem espelho multiplicado pela razão dos fatores de refletividade das energias do terceiro e primeiro harmônico,

$$F_r = \frac{T_{\text{Cristal}-3E}}{T_{\text{Cristal}-E}} \cdot \frac{\text{Flux}_{3E}}{\text{Flux}_E} \cdot \frac{R_{3E}}{R_E}. \quad (21)$$

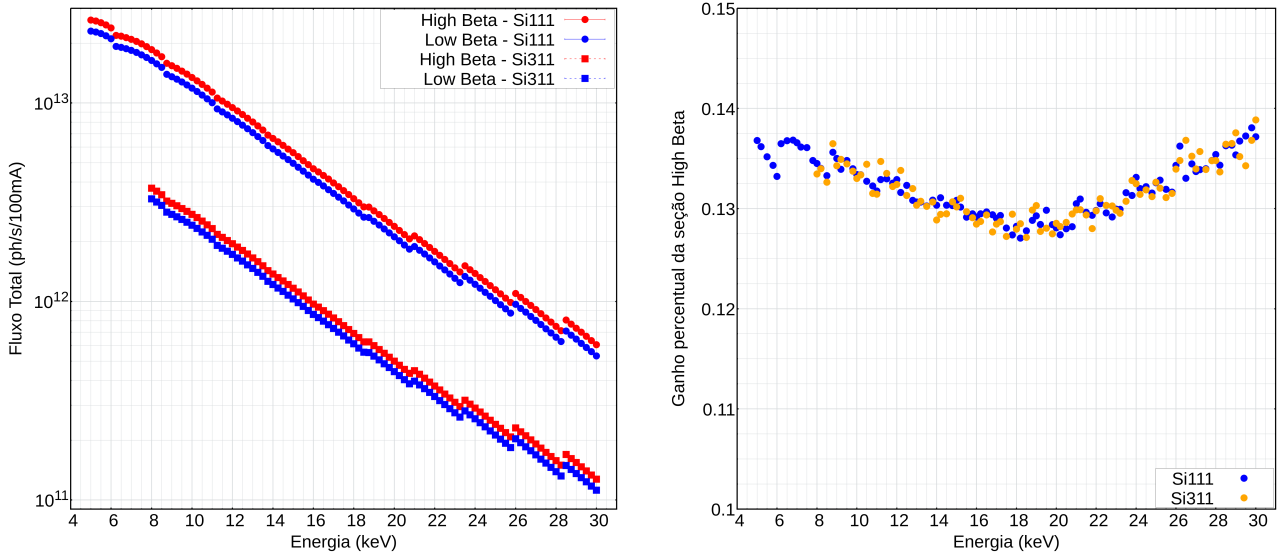
As posições da fenda e do monocromador foram ajustadas para 26m e 28m , respectivamente, da fonte no caso da inserção do espelho, sendo que a dimensão da fenda também teve de se modificar para $1,3 \times 1,3\text{mm}^2$.

4 Resultados

4.1 Fluxo de Fótons

O fluxo total de fótons no fim da linha foi de 12,7% a 14% maior com a seção High- β (Figura 5), variando de $(2,117 \pm 0,004) \cdot 10^{12}\text{ph/s}/100\text{mA}$ para $(2,388 \pm 0,004) \cdot 10^{12}\text{ph/s}/100\text{mA}$ na energia de 20keV , usando o cristal de Si(111), que permite maior passagem de fluxo. O maior valor obtido com a seção High- β está de acordo com o fato de o feixe de elétrons ter menor divergência que em comparação a Low- β , de maneira uma porção menor do feixe de radiação gerado será perdida na fenda que define a aceitância da linha.

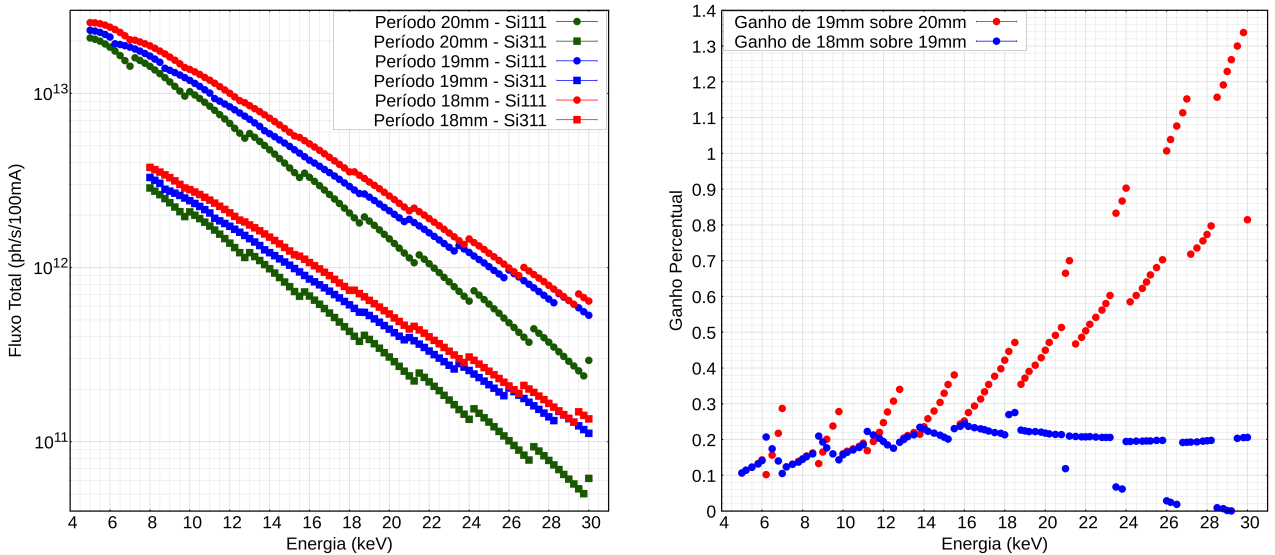
Figura 5: Fluxo total para as diferentes seções do anel e ganho percentual ao na High- β .



Fonte: Autor

Comparando os diferentes onduladores na seção Low- β , o maior fluxo (Figura 6) foi obtido com o ondulador de período 18mm, cerca de 20% maior que o fluxo do de período 19mm, enquanto este, por sua vez, foi até 140% maior que o fluxo do ondulador de período 20mm. O uso do ondulador de 18mm permitiu um fluxo de $(2,545 \pm 0,001) \cdot 10^{13} ph/s/100mA$ a $(6,15 \pm 0,01) \cdot 10^{11} ph/s/100mA$ ao longo do espectro da linha.

Figura 6: Fluxo total e ganho percentual para os diferentes onduladores.



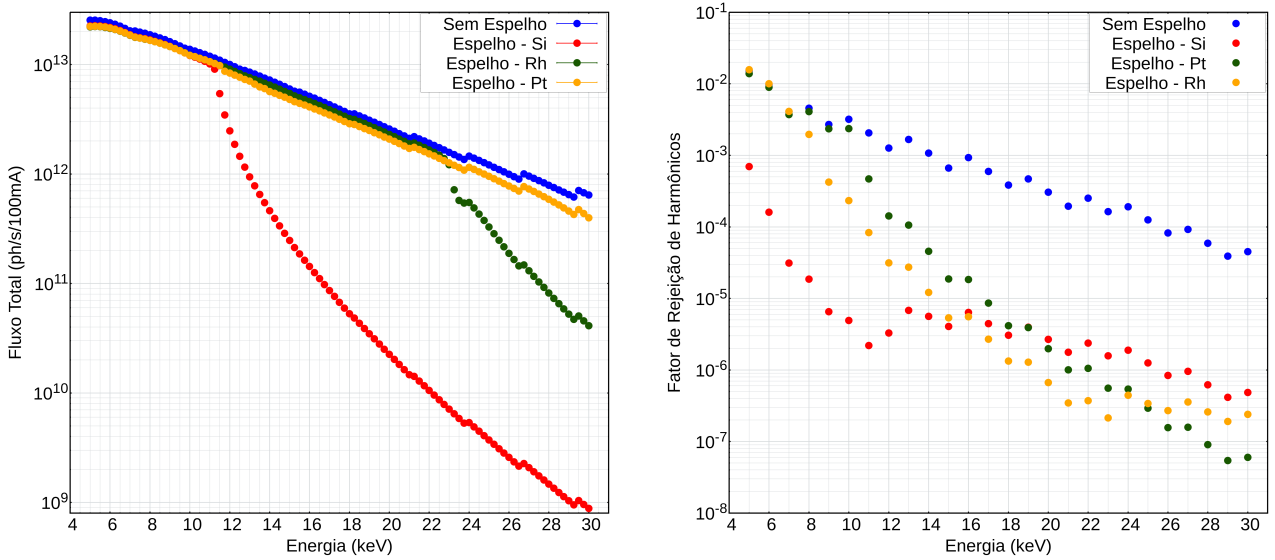
Fonte: Autor

Um padrão relevante que pode ser observado para os outros resultados que seguem em relação

a comparação de onduladores é que, para as energias mais baixas, os onduladores ainda estão sintonizados no mesmos harmônicos, mas, a medida que se varre o espectro, o ondulador de 19mm , que possui maior valor de K máximo, pode sintonizar harmônicos maiores que os outros dois para uma mesma energia, de forma que seu fluxo final é quase equivalente ao de 18mm para alguns pontos.

Com a inserção do espelho colimador na linha, o fluxo total será reduzido de acordo com o fator de refletividade do revestimento e a dimensão do espelho. Diferentes faixas de revestimento trazem dificuldades de alinhamento e estabilidade para seu uso no projeto da linha, de forma que pode não ser realista considerar a operação com todos os três materiais simulados. A queda no fluxo para a energia final da linha, 30keV , foi de $(6,42 \pm 0,01) \cdot 10^{11}\text{ph/s/100mA}$, sem espelho, a $(3,974 \pm 0,007) \cdot 10^{11}\text{ph/s/100mA}$, com o espelho na faixa de Pt, uma perda de quase 40%. O fator de rejeição de harmônicos apresentou melhora de $1,53 \cdot 10^{-2}$, sem espelho, a $6,96 \cdot 10^{-4}$, com espelho na faixa de Si, na energia de 5keV . Contudo, isso acarreta numa perda de fluxo total de fótons de aproximadamente 20 a 30% para as energias mais baixas (Figura 7).

Figura 7: Fluxo total e fator de rejeição de harmônicos para cada revestimento do espelho.



Fonte: Autor

É interessante analisar o fluxo de fótons que atinge a área útil do tubo capilar de $2000 \times 800\mu\text{m}$, realizando simulações com uma fenda final deste tamanho na posição de 40m . Como o tamanho máximo l_M do feixe após incidir em um ângulo rasante θ no espelho é dado por

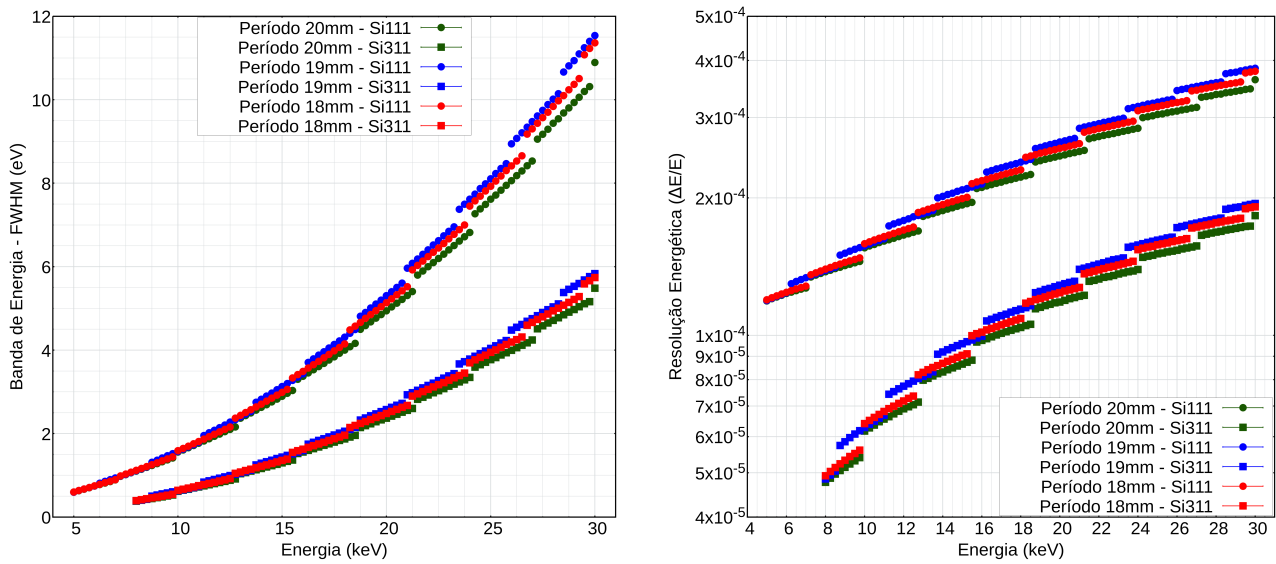
$$l_M = \text{Comprimento} \cdot \sin(\theta) \approx \text{Comprimento} \cdot \theta, \quad (22)$$

temos que o feixe logo após o espelho tem tamanho máximo vertical de $825\mu\text{m}$, ou seja, o espelho não corta o feixe na vertical mais do que a fenda que simula a amostra. O fluxo obtido na região da amostra, considerando a energia de 20keV e o revestimento de Rh, variou de $(1,773 \pm 0,003) \cdot 10^{12}\text{ph/s/100mA}$ a $(2,012 \pm 0,004) \cdot 10^{12}\text{ph/s/100mA}$, um ganho de $\approx 13,5\%$ com o uso do espelho. Contudo, esses ganhos não compensam o encarecimento do projeto se se inserir um espelho na linha.

4.2 Banda e Resolução de Energia

Os feixes obtidos com as diferentes seções do anel tiveram banda e resolução energética equivalentes. Para os três onduladores simulados (Figura 8), esses valores, ainda que não equivalentes, atendem ao critério da linha, estando a resolução muito próxima da resolução intrínseca dos cristais⁹ dada a baixa divergência. Para a energia de 5keV , por exemplo, a resolução chega em $(1,20 \pm 0,01)10^{-4}$. Nas energias mais baixas, percebe-se que a resolução de energia melhora (i.e., diminui) com a diminuição do número de períodos - uma consequência de se aumentar o período do ondulador e manter o comprimento constante (ver Equação 10 e Tabela 2). Mas a medida que a energia aumenta, o ondulador de período 19mm sintoniza um harmônico maior, de maneira que sua resolução e banda de energia crescem, ultrapassando os valores obtidos para o ondulador de período 18mm .

Figura 8: Banda de energia e resolução energética para os diferentes onduladores.



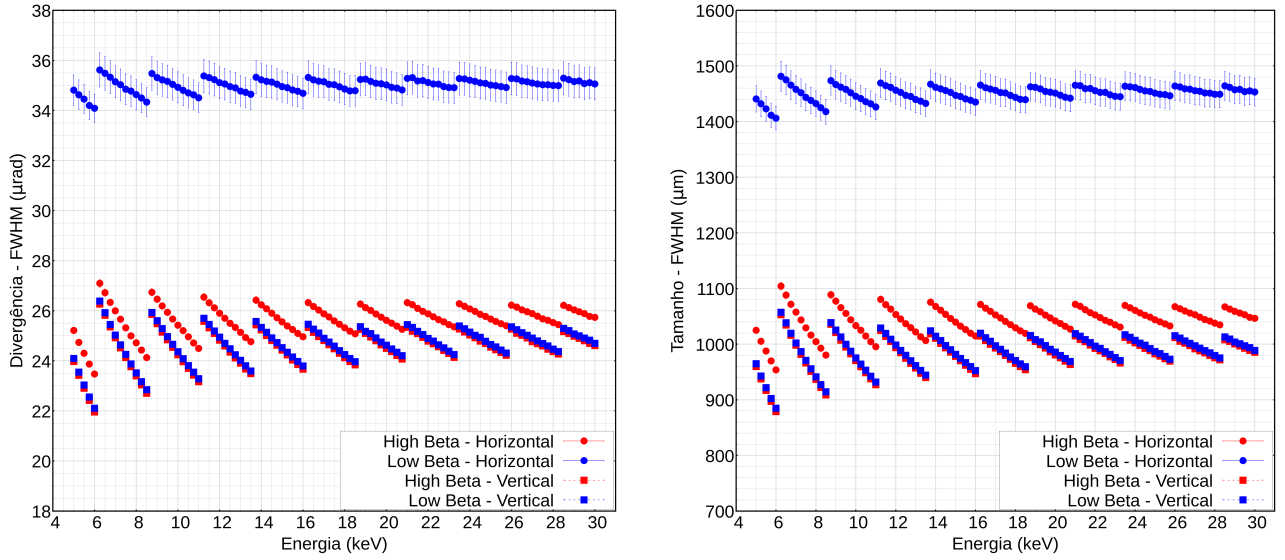
Fonte: Autor

Em compensação a perda no fluxo de fótons em se usar o cristal de Si(311) ao invés do de Si(111), sua resolução energética é melhorada, já que há uma seleção melhor da radiação com energia próxima a desejada.

4.3 Tamanho e Divergência do Feixe

Os feixes de fótons obtidos pelas simulações nas duas diferentes seções retas do anel resultaram em tamanho e divergência verticais equivalentes. O feixe criado na seção High- β , entretanto, tem menor tamanho (tomado a 40m da fonte) e divergência horizontais, de $(1042 \pm 5)\mu\text{m}$ e $(25,6 \pm 0,1)\mu\text{rad}$ (FWHM - *full width at half maximum* ou largura à meia altura) para 20keV por exemplo, quando comparado com o criado na seção Low- β , de $(1450 \pm 20)\mu\text{m}$ e $(35,0 \pm 0,6)\mu\text{rad}$ (FWHM) para a mesma energia (Figura 9). A diminuição do feixe na direção horizontal é indesejada pelos critérios da linha uma vez que o feixe deve se adequar ao formato do tubo capilar. Idealmente deveria-se obter 2mm de tamanho horizontal e, prioritariamente, um tamanho vertical de $0,8\text{mm}$.

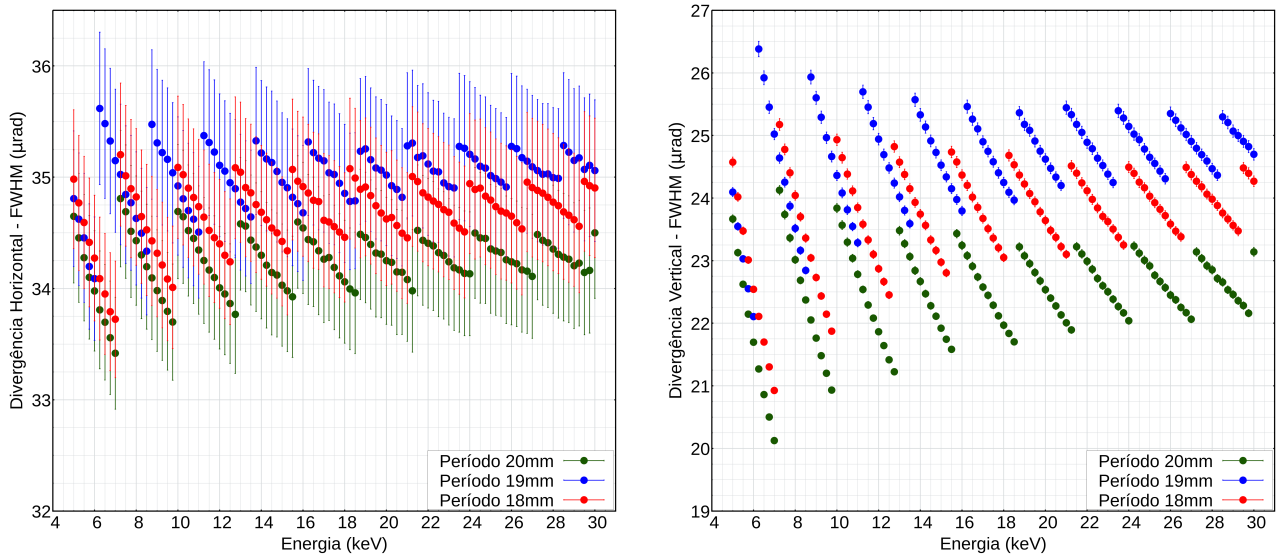
Figura 9: Divergência e tamanho (FWHM) do feixe para as diferentes seções do anel.



Fonte: Autor

Os tamanhos e divergências (Figura 10 e Figura 11) se reduzem com o aumento do período, mas o uso de harmônicos maiores pelo ondulador de período 19mm faz crescer seu tamanho e o torna menos apropriado que o ondulador de período 18mm . Como o feixe é maior na direção horizontal e é cortado por uma fenda, seu perfil se distancia mais de uma curva gaussiana (Figura 12), o que eleva a incerteza obtida no ajuste em relação a direção vertical.

Figura 10: Divergência (FWHM) do feixe para os diferentes onduladores.

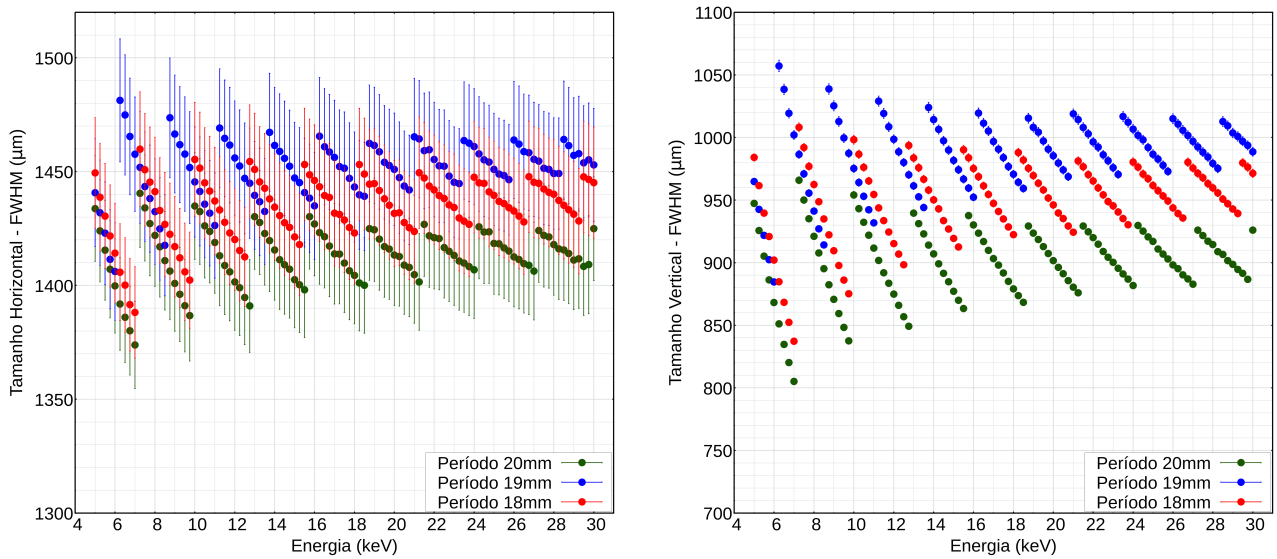


Fonte: Autor

Para a energia de 20keV foi obtido um feixe, a 40m da fonte, de $(1410 \pm 20)\mu\text{m}$ por $(902 \pm 2)\mu\text{m}$

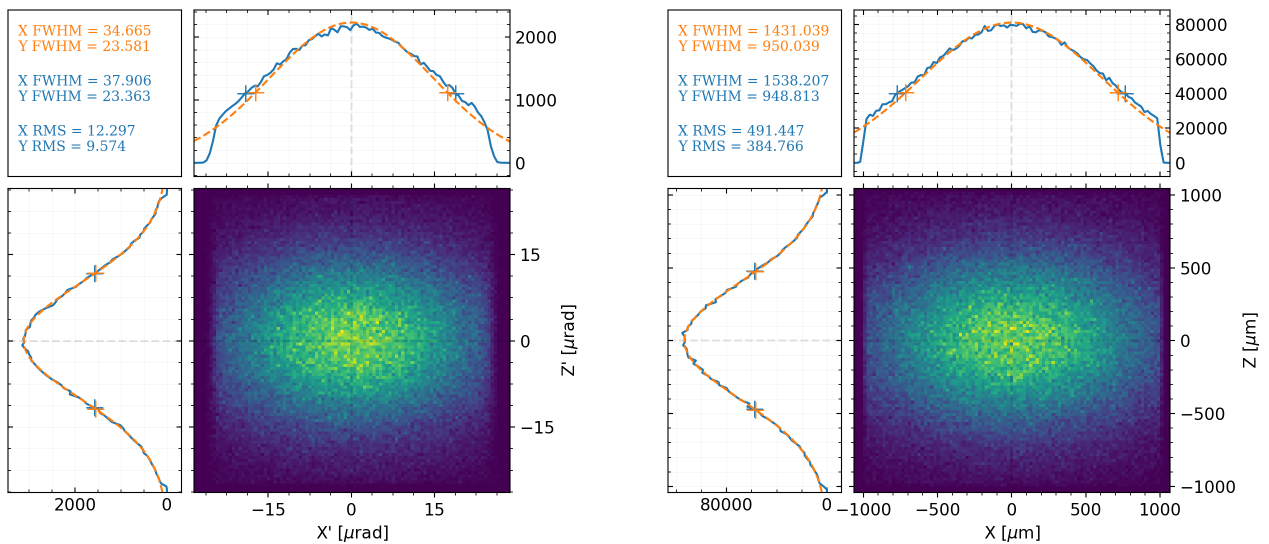
para o ondulador de $20mm$, $(1450 \pm 20)\mu m$ por $(985 \pm 3)\mu m$ para o de $19mm$ e $(1430 \pm 20)\mu m$ por $(946 \pm 3)\mu m$ para o de $18mm$.

Figura 11: Tamanho (FWHM) do feixe para os diferentes onduladores.



Fonte: Autor

Figura 12: Perfis de divergência e tamanho do feixe considerando o ondulador de período $18mm$ para uma simulação na energia de $20keV$.

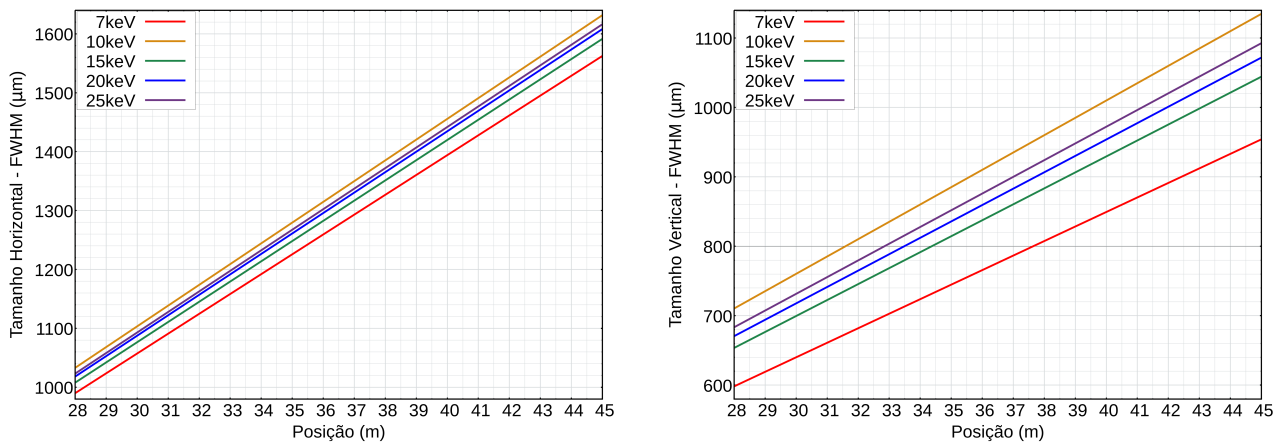


Fonte: Autor

Definindo a fonte de luz com um ondulador de período $18mm$ com parâmetros dados na Tabela 2

instalado numa seção reta Low- β (Tabela 1), é possível usar as equações Equação 11 para uma estimativa analítica do tamanho e divergência do feixe de radiação. Como podemos considerar que esses parâmetros geométricos são pouco influenciados pela fenda ou pelo monocromador, essa estimativa pode ser extrapolada para se obter o tamanho do feixe em diferentes posições da linha, o que pode auxiliar a tomada de decisão em relação a melhor posição para o difratômetro (i.e., a posição da amostra). A Figura 13 resume os resultados para algumas energias de interesse, sendo que as energias de 7keV e 10keV correspondem, aproximadamente, a pontos de menor e maior, respectivamente, tamanho e divergência do feixe.

Figura 13: Tamanho do feixe (FWHM) estimado em função da posição da amostra.

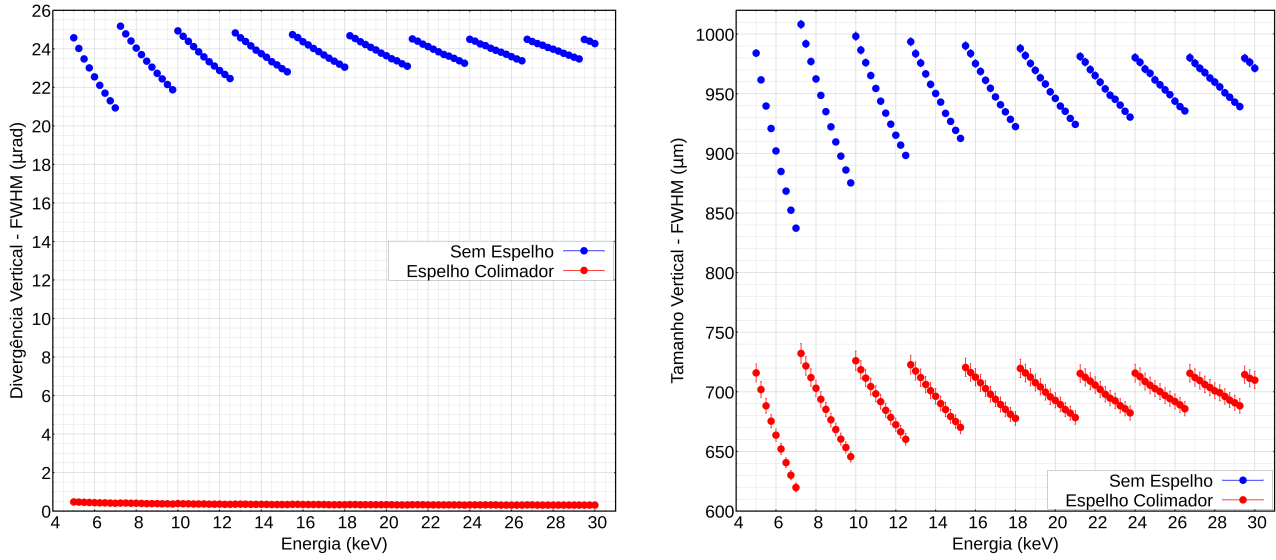


Fonte: Autor

Como a cabana experimental do difratômetro não pode ocupar marca de 34m , onde existe uma divisão do piso para fins de estabilidade do anel, a amostra encontraria um feixe abaixo do critério de tamanho vertical (FWHM) de $800\mu\text{m}$ logo antes da marca mencionada, ou, ultrapassando o critério para $900\mu\text{m}$, logo após. Posicionar o difratômetro antes da marca de 34m pode ser inviável dado que os outros elementos da linha, como fendas e monocromador, só podem ocupar o espaço de 25m da fonte em diante, onde termina a proteção radiológica.

Inserir um espelho colimador a 30m da fonte resultou em, como esperado, um feixe menor que $800\mu\text{m}$ de FWHM na vertical a 40m da fonte e uma divergência quase nula (Figura 14). Para 20keV , por exemplo, o tamanho se reduz de $(946 \pm 3)\mu\text{m}$ para $(693 \pm 6)\mu\text{m}$ e a divergência de $(23,64 \pm 0,07)\mu\text{rad}$ a $(0,323 \pm 0,001)\mu\text{rad}$.

Figura 14: Divergência e tamanho (FWHM) verticais do feixe sem e com o espelho colimador.



Fonte: Autor

5 Conclusões

As simulações puderam auxiliar na determinação da seção reta do anel de armazenamento e do ondulator mais apropriados para a linha de luz HARPIA, mesmo que não satisfazendo todos os objetivos iniciais, como o critério do tamanho vertical do feixe de $0,8mm$. A seção reta Low- β do anel de armazenamento se mostra mais apropriada, mesmo que com menor fluxo, já que o feixe gerado possibilita iluminar mais na direção horizontal, com largura à meia altura de $(1450 \pm 20)\mu m$, quando comparado com o gerado na seção High- β , $(1042 \pm 5)\mu m$. O tamanho pode ser considerado ainda maior na horizontal, já que o ajuste gaussiano tende a subestimar a largura à meia altura nesse caso em que o feixe foi cortado por uma fenda de aceitação $50 \times 50 \mu rad^2$, como visto na Figura 12. O ondulator de período de $18mm$ apresentou maior fluxo total de fótons, mesmo que o ondulator de $19mm$ estivesse sintonizado para harmônicos mais altos na maior parte das altas energias da linha. Apesar de ter um feixe maior quando comparado ao ondulator de período $20mm$, o ganho no fluxo do ondulator de período $18mm$ o torna mais apropriado à linha.

Com a fonte definida, o fluxo total de fótons da linha varia de $(6,947 \pm 0,009)$ a $(2,895 \pm 0,002)ph/s/100mA$, com resolução de energia de $(1,20 \pm 0,01)10^{-4}$ a $(3,78 \pm 0,01)10^{-4}$, considerando o uso de cristais de Si(111) no monocromador, valores que estão dentro de esperado ou até superam outras linhas de luz semelhantes¹⁴. A posição final do difratômetro ainda pode ser otimizada se guiando pelos gráficos expostos na Subseção 4.3. Sem poder, entretanto, ocupar a marca de $34m$ e considerando o espaço que deve ser guardado ao monocromador.

As simulações com o espelho de raio meridional *up-bounce*, posicionado a $30m$ da fonte, mostraram que o feixe fica colimado com divergência próxima de zero e tamanho vertical de abaixo de $0,8m$ para todo o espectro da linha. Apesar da queda do fluxo total no fim da linha, o fluxo de fótons que atinge a área de interesse da amostra aumenta, para $20keV$ por exemplo, em $13,5\%$. O fator de rejeição de harmônicos melhora especialmente para baixas energias com o uso do revestimento de Si

no ângulo de $2,75\text{mrad}$. Contudo, o encarecimento do projeto da linha HARPIA pode não compensar esses fatores. Caso o projeto do espelho colimador seguisse em diante, o comprimento poderia ser otimizado para 290mm , já que no ângulo rasante mencionado, o feixe refletido teria tamanho máximo igual a $800\mu\text{m}$. Seria necessário verificar os efeitos de difração do feixe com a borda do espelho e prosseguir também com simulações de erros de superfície e alinhamento para garantir que a perda do fluxo ou distorção do feixe não supere critérios determinados (em geral, permite-se uma variação de 10% desses parâmetros).

Referências

- 1 RÍO, M. S. del. Shadow3: a new version of the synchrotron x-ray optics modelling package. **J. Synchrotron Rad.**, v. 18, p. 708–716, 2011.
- 2 LUIZ, S. A. L.; PINTO, A. C.; MEYER, B. C. **Widgets developed by the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS) - Optics Group - with useful functions for OASYS1.** OPT-LNLS, 2019. Ferramentas desenvolvidas pelo grupo de óptica do LNLS. Disponível em: <<https://github.com/oasys-lnls-kit/OASYS1-LNLS-ShadowOui>>. Acesso em: 10 out. 2019.
- 3 POR Dentro do CNPEM. CNPEM, 2019. Disponível em: <<http://cnpem.br/por-dentro-do-cnpem/>>. Acesso em: 12 out. 2019.
- 4 WILLMOTT, P. **An introduction to synchrotron radiation : techniques and applications.** Villigen, Switzerland: John Wiley & Sons Ltd, 2019.
- 5 MOBILIO SETTIMIO; BOSCHERINI, F. M. C. **Synchrotron Radiation: Basics, Methods and Applications.** Roma: Springer, 2015.
- 6 ALS-NIELSEN, J.; MCMORROW, D. **Elements of Modern X-ray Physics.** [S.l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 2011.
- 7 JACKSON, J. D. **Classical Electrodynamics.** Berkeley: John Wiley & Sons, Ltd, 1999.
- 8 TANAKA, T.; KITAMURA, H. Universal function for the brilliance of undulator radiation considering the energy spread effect. **Journal of Synchrotron Radiation**, v. 16, n. 3, p. 380–386, 2009. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1107/S09090495090009479>>.
- 9 RÍO, M. S. del; MATHON, O. A simple formula to calculate the x-ray flux after a double-crystal monochromator. **Advances In Computational Methods For X-ray And Neutron Optics, International Society for Optics and Photonics**, v. 5536, p. 157–164, 2004.
- 10 ATTWOOD, D.; SAKDINAWAT, A. Wave propagation and refractive index at x-ray and euv wavelengths. In: CAMBRIDGE. **X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications.** [S.l.]: Cambridge University Press, 2017. p. 60–109.
- 11 OASYS - OrAnge SYnchrotron Suite. Argonne National Laboratory, 2019. Disponível em: <<https://www.aps.anl.gov/Science/Scientific-Software/OASYS>>. Acesso em: 12 out. 2019.
- 12 CNPEM Wiki-Sirius. CNPEM, 2019. Disponível em: <https://wiki-sirius.lnls.br/mediawiki/index.php/Main_Page>. Acesso em: 12 out. 2019.

- 13 TANAKA, T.; KITAMURA, H. *SPECTRA*: a synchrotron radiation calculation code. **Journal of Synchrotron Radiation**, v. 8, n. 6, p. 1221–1228, Nov 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1107/S090904950101425X>>.
- 14 TANG, C.; THOMPSON, S.; HILL, T.; WILKIN, G.; WAGNER, U. Design of powder diffraction beamline (bl-i11) at diamond. **Zeitschrift fur Kristallographie Supplements**, v. 2007, 11 2007.