

Beschreibung des Programms REFLEC

F. Schäfers

BESSY TB Nr. 157

Beschreibung des Programms REFLEC
F. Schäfers

Zusammenfassung

Basierend auf den Datensätzen für die atomaren Streufaktoren f_1 und f_2 von Henke et al. im Bereich 30 - 10000 eV wurde das Programm REFLEC entwickelt, das alle relevanten Wechselwirkungsparameter von Materie mit Licht berechnen und graphisch darstellen kann:

Reflexion, Transmission, Absorption von Strahlung, Polarisations-eigenschaften des reflektierten Lichts, optische Konstanten etc. Die Datensätze aller 92 Elemente stehen zur Verfügung, und die berechneten Größen können als Funktion der Photonenenergie oder als Funktion des Einfallswinkels der Strahlung dargestellt werden.

Besonderer Wert wurde auf eine einfache Handhabung des Programms und auf praktische Anwendungen gelegt. Z. B. kann in einfacher Weise die Transmission einer Beamline durch Hintereinanderschaltung mehrerer optischer Elemente (auch Folien) dargestellt werden. Es kann zur Optimierung eines Mehrspiegel-Polarisators für eine feste Energie verwendet werden, oder es können die Eigenschaften verschiedener Spiegel-Beschichtungen miteinander verglichen werden. Das Programm ist somit zusammen mit dem Raytracing-Programm RAY ein wichtiger Bestandteil bei der Konzeption von optischen Elementen und VUV-Beamlines.

1. Einleitung

Die Zusammenstellung der für die soft X-ray Optik elementaren atomaren Streufaktoren f_1 und f_2 durch Henke et al.¹ und deren kürzliche Aktualisierung für alle 92 Elemente des Periodensystems² hat das Design von optischen Systemen enorm vereinfacht. Die Berechnung von so wichtigen Parametern wie Reflexionsvermögen von soft X-ray Spiegeln oder Absorption und Transmission von Filtern verschiedenster Materialien ist damit praktisch zur Routineangelegenheit geworden. Dieser Bericht beschreibt das bei BESSY entwickelte Programm REFLEC, das auf diesen Datensatz der atomaren Streufaktoren zurückgreift und zur Berechnung und Darstellung von verschiedenen optischen Parametern benutzt wird.

Es steht auf dem allgemeinen "PRG"-Bereich der BESSY-VAX zur Verfügung und kann durch

RUN PRG:REFLEC

von jedem User-Account aufgerufen werden. Die Ergebnisse werden auf einem der beiden Laserdrucker ausgegeben.

Im einzelnen bietet das Programm folgende Möglichkeiten:

1. Streufaktoren f_1 , f_2 aller 92 Elemente des Periodensystems verfügbar im Energiebereich 30-10000 eV ^{1,2} (s. Abb. 1)

Darüber hinaus sind die optischen Konstanten n und k folgender wichtiger Spiegel-Coatings für den Normal Incidence Bereich gespeichert³:

Ir (5 - 40 eV)	Cu (5 - 2000 eV)
Os (5 - 2000 eV)	Au (5 - 10000 eV)
Pt (5 - 2000 eV)	SiC ⁴ (10 - 1000 eV)

2. Berechnung und Graphische Darstellung von

Reflexionsgrad R_s , R_p , Transmission T

höhere Ordnungen

lineare, zirkulare Polarisation (Stokes-Parameter S_1 - S_3)

Phasenverschiebung, Elliptizität, Orientierung der Polarisations-Ellipse

optische Konstanten n und k

atomare Streufaktoren f_1 und f_2

Absorptionskoeffizient μ , Absorptionslänge L

Darstellung als Funktion der Photonenenergie (30-10000 eV) oder des Einfallswinkels (bei Spiegeln)

3. Gleichzeitige Darstellung von bis zu 5 verschiedenen Materialien (oder 5 verschiedene Einfallswinkel, Foliendicken oder Photonenenergien)
4. Darstellung von kompletten Beamlinetransmissionen (Spiegel und/oder Folien)
Einzel-Darstellung der optischen Elemente oder Gesamttransmission
5. Berechnung der Depolarisation durch Reflexion (im Stokes-Formalismus) bei vorgegebener Anfangspolarisation (linear, zirkular oder unpolarisiert) und Phasenverschiebung
6. Lineare oder logarithmische Darstellung für beide Achsen
7. Ausgabemöglichkeit auf

Bildschirm

Laserdrucker oben (1.008)

Laserdrucker unten (E.055)

HP Drucker oben (1.006)

ASCII-File

Das Programm ist interaktiv aufgebaut, im Eingabeteil werden sukzessiv die benötigten Parameter abgefragt. Default-Werte können durch <RETURN> übernommen werden. Bei nochmaligem Durchlauf des Programms bleiben die vorherigen Eingaben erhalten.

2. Theorie

In diesem Kapitel soll eine Zusammenfassung der für das Programm relevanten und in dem Programm benutzten Formeln gegeben werden. Für genauere Information wird auf eines der benutzten Lehrbücher verwiesen^{5 - 9}.

2.1 Atomare Streufaktoren

Die wichtigsten Mechanismen der Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie im weichen Röntgenbereich sind Ionisation und elastische Streuung. Inelastische (Compton-) Streuung und Paarbildungseffekte treten erst oberhalb von einigen 10 keV (bzw. 1 MeV) merklich in Erscheinung, so daß sie in diesem Zusammenhang vernachlässigt werden können. Die Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie kann auf atomarem Niveau beschrieben werden durch einen komplexen atomaren Streufaktor f

$$f = f_1 + if_2 \quad (1)$$

der die Streuung einer Lichtwelle an einem Atom im Vergleich zur Streuung an einem einzelnen, freien Elektron beschreibt, also den Unterschied der am Atom (ϵ) bzw. Elektron (ϵ_e) gestreuten Amplituden angibt:

$$\epsilon = \epsilon_e f \quad (2)$$

Der Streufaktor gibt die effektive am Streuprozeß beteiligte Zahl der Elektronen an, die bei hohen Photonenenergien sich der tatsächlichen Zahl der Elektronen pro Atom annähert. Die Streuung am freien Elektron ist verlustfrei, die gesamte einfallende Strahlung wird wieder ausgestrahlt, für atomare Streuung werden die Absorptionsverluste durch den Imaginärteil f_2 berücksichtigt.

Der atomare Streufaktor beinhaltet also die gesamte atomare Streuinformation, wobei angenommen wird, daß ein Festkörper sich aus individuellen Atomen zusammensetzt. Kollektive Festkörpereffekte werden ausgeschlossen.

Die in Ref.1,2 zusammengestellten atomaren Streufaktoren f_1 und f_2 beruhen auf den besten z. Z. erhältlichen experimentellen sowie auf berechneten Daten für den Photoabsorptionswirkungsquerschnitt μ (siehe Literaturliste in Ref 1, 2). Die von der chemischen Struktur und Festkörpereffekten bestimmte Nahkantenstruktur ist in den theoretischen Berechnungen nicht berücksichtigt, so daß an den Absorptionskanten die Daten mit Vorsicht zu gebrauchen sind. Der Zusammenhang zwischen dem Photoabsorptionswirkungsquerschnitt und dem atomaren Streufaktor f_1 ist durch das Kramer's-Kronig (Dispersions-)Integral gegeben:

$$f_1 = Z + C \int_0^{\infty} \frac{\epsilon^2 \mu_a(\epsilon) d\epsilon}{E^2 - \epsilon^2} \quad (3)$$

Der Thomson-Term Z kann approximiert werden durch die Gesamtzahl der Elektronen.

Für f_2 ergibt das optische Theorem:

$$f_2 = \frac{1}{2} \pi C E \mu_a(E) \quad (4)$$

wobei

$$C = (\pi r_0 h c)^{-1}$$

r_0 :	klassischer Elektronenradius:	$2.818 \cdot 10^{-15} \text{ m}$
h :	Planck's Konstante:	$6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
c :	Lichtgeschwindigkeit:	$2.998 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$
E :	Photonenenergie [eV]:	$1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

f_2 ist also direkt proportional zum atomaren Absorptionsquerschnitt μ_a [cm^2/atom].

Der Massenabsorptionskoeffizient μ [cm^2/g] und der lineare Absorptionskoeffizient μ_1 [cm^{-1}] bestimmen sich aus μ_a zu

$$\mu = N_0/A \cdot \mu_a \quad (5)$$

und

$$\mu_1 = \mu \cdot \rho = (N_0 \cdot \rho/A) \mu_a \quad (6)$$

N_0 : Avogadro's Konstante: $6.023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

A : Atommasse [g]

ρ : Dichte [g/cm^3]

Nach Einsetzen der Zahlenwerte erhält man für den Massenabsorptionskoeffizienten:

$$\mu = \frac{4.21179 \cdot 10^7 \cdot f_2}{E[\text{eV}] \cdot A} \quad (7)$$

Die Absorption wird durch das Lambert'sche Gesetz bestimmt:

$$I = I_0 e^{-\mu \rho d} = I_0 e^{-\mu_1 d} \quad (8)$$

d: Schichtdicke [cm]

Die Absorptionslänge ist definiert als die Strecke L, bei der die Strahlung auf 1/e abgefallen ist:

$$L[\text{cm}] = (\mu \cdot \rho)^{-1} \quad (9)$$

2.2 Optische Konstanten

Die makroskopischen optischen Eigenschaften eines Materials werden i.a. anhand der optischen Konstanten des Materials diskutiert. Sie beschreiben die Antwort des Materials auf einfallende elektromagnetische Strahlung. Ihre Kenntnis reicht aus, um z. B. Reflexion, Transmission und Absorption vollständig zu beschreiben, sie sind also von fundamentaler Wichtigkeit für alle Wechselwirkungsprozesse zwischen Licht und Materie.

Mit den optischen Konstanten sind i. a. der Brechungsindex n und der Extinktionskoeffizient k gemeint, die zu einem komplexen Brechungsindex

$$\tilde{n}(E) = n(E) + i k(E) \quad (10)$$

zusammengefaßt werden, der mit der ebenfalls komplexen Dielektrizitätskonstante über

$$\tilde{n}(E) = \sqrt{\epsilon(E)} \quad (11)$$

zusammenhängt. Die experimentelle Bestimmung der optischen Konstanten erfolgt über Reflexivitäts- oder Transmissionsmessungen über einen möglichst großen Energiebereich. Real- und Imaginärteil der optischen Konstanten sind nicht unabhängig voneinander, sondern es bestehen zwischen ihnen die sog. Kramers-Kronig Relationen, die es erlauben, eine Komponente aus dem spektralen Verlauf der anderen Komponente zu berechnen.

In der Literatur findet man häufig, insbesondere für den Röntgenbereich folgende Darstellung:

$$\tilde{n} = 1 - \delta + i \beta \quad (12)$$

wobei

$$\delta, \beta \ll 1 \quad (13)$$

und δ die Abweichung des Brechungsindex von 1 angibt, und β mit k identisch ist.

Der Zusammenhang zwischen der makroskopischen Optik und der atomaren Beschreibungsweise (Kap. 2.1) wird gegeben durch die Verbindung des Brechungsindex n zum atomaren Streufaktor. Dieser Zusammenhang ergibt sich aus der klassischen elektromagnetischen Theorie durch Betrachtung der an einer Grenzfläche Vakuum - Materie gestreuten elektromagnetischen Welle. Alle Atome werden hierbei als unabhängige streuende Dipole betrachtet, so daß das gesamte Dipolmoment pro Einheitsvolumen die Summe aller atomaren Dipolmomente ist und damit proportional zum mittleren atomaren Streufaktor in diesem Volumen. Andererseits wird die Dielektrizitätskonstante ϵ und damit gemäß Gl. 11 der Brechungsindex über das Dipolmoment pro Einheitsvolumen und pro Einheitsfeldstärke bestimmt, so daß hiermit der Zusammenhang zwischen den mikroskopischen und makroskopischen Größen hergestellt ist:

$$\delta = \frac{r_o \cdot \lambda^2 \cdot N_{at}}{2 \pi} f_1 \quad (14)$$

und

$$\beta = \frac{r_o \cdot \lambda^2 \cdot N_{at}}{2 \pi} f_2 \quad (15)$$

$$\lambda : \text{Lichtwellenlänge [nm]} = \frac{1239.85}{E [\text{eV}]}$$

$$N_{at} : \text{Atomdichte [cm}^{-3}] = \frac{N_o \cdot \rho}{A}$$

Der Brechungsindex nimmt quadratisch ab mit der Wellenlänge. Typische Werte sind $\delta = 10^{-2}$ für $\lambda = 5 \text{ nm}$ und $\delta = 10^{-6}$ für $\lambda = 0.5 \text{ nm}$. In der Nähe von Absorptionskanten kann δ auch negativ werden.

Mit diesen Zusammenhängen (14) und (15) ist also eine "vollständige" Beschreibung des optischen Verhaltens von Materie bei Kenntnis der atomaren Streufaktoren im Rahmen der in Kap. 2.1 angegebenen Näherungen möglich.

Nach Einsetzen der Zahlenwerte der Konstanten ergibt sich:

$$n = 1 - \delta = 1 - \frac{415.252 \cdot \rho \cdot f_1}{E^2 \cdot A} \quad (16)$$

$$\beta = k = \frac{415.252 \cdot \rho \cdot f_2}{E^2 \cdot A} \quad (17)$$

2.3 Fresnelgleichungen

Das Reflexionsvermögen bei festem Einfallswinkel θ (zur Normalen) erhält man aus den für komplexe Brechungsindizes verallgemeinerten Fresnelgleichungen⁶:

$$R_s = \frac{a^2 + b^2 - 2a \cos \theta + \cos^2 \theta}{a^2 + b^2 + 2a \cos \theta + \cos^2 \theta} \quad (18)$$

$$R_p = R_s \frac{a^2 + b^2 - 2a \sin \theta \tan \theta + \sin^2 \theta \tan^2 \theta}{a^2 + b^2 + 2a \sin \theta \tan \theta + \sin^2 \theta \tan^2 \theta} \quad (19)$$

wobei

$$2a^2 = \left[(n^2 - k^2 - \sin^2 \theta)^2 + 4n^2 k^2 \right]^{1/2} + (n^2 - k^2 - \sin^2 \theta) \quad (20)$$

$$2b^2 = \left[(n^2 - k^2 - \sin^2 \theta)^2 + 4n^2 k^2 \right]^{1/2} - (n^2 - k^2 - \sin^2 \theta) \quad (21)$$

Im Grenzfall verschwindender Absorption ($k=0$) gehen die allgemeinen Fresnelgleichungen in die für Dielektrika über.

Bei der Reflexion an einer Grenzfläche erfolgt eine für beide Reflektivitätskomponenten R_s und R_p unterschiedliche Phasenänderung. Die gesamte Phasendifferenz Δ ($= \delta_p - \delta_s$) ($0 \leq \Delta \leq \pi$) berechnet sich zu

$$\tan \Delta = \frac{-2b \sin \theta \tan \theta}{a^2 + b^2 - \sin^2 \theta \tan^2 \theta} \quad (22)$$

Die Gleichung 9.11 von Referenz 6, S. 305, die der Gleichung 22 entspricht, enthält einen Druckfehler. Es muß im Zähler $-2b$ statt $-2a$ heißen. Aus der Feststellung, daß der Reflexionsgrad und die Phasenverschiebung abhängig ist von der Polarisierung des einfallenden Lichts, ergeben sich die in vielen Lehrbüchern skizzierten Möglichkeiten der Herstellung polarisierten Lichts über Reflexion, Herstellung von Polarisationsanalysatoren (z. B. Vierspiegelanalysator oder Rabinovitch-Analysator) oder von phasenschiebenden Anordnungen (z. B. $\lambda/4$ -Plättchen) zur Produktion oder Analyse von elliptisch polarisiertem Licht.

2.4. Lichtpolarisation

Der allgemeine Polarisationszustand einer elektromagnetischen Welle kann vollständig durch 3 Parameter beschrieben werden: die Amplituden a_1, a_2 bzgl. eines rechtwinkligen Koordinatensystems und deren Phasenverschiebung Δ . (Zur Illustration verschiedener Phasenverschiebungen siehe Abb. 2.) Eine andere Charakterisierung besteht in der Angabe der großen und kleinen Halbachse der Polarisationsellipse a, b und des Winkels ψ , der die Orientierung der großen Halbachse der Ellipse bzgl. der X-Achse bestimmt (s Abb. 3).

Für praktische Zwecke ist die Beschreibung durch die vier Stokes-Parameter sinnvoll, die folgendermaßen definiert sind:

$$S_0 = I(0,0) + I(90,0) \quad (23)$$

$$S_1 = I(0,0) - I(90,0) \quad (24)$$

$$S_2 = I(45,0) - I(135,0) \quad (25)$$

$$S_3 = I(45,90) - I(135,90) \quad (26)$$

Die Bezeichnung $I(\psi, \Delta)$ bezieht sich auf die Durchlaßrichtung ψ eines Polarisators, der nur Strahlung mit einer Phasenverschiebung von Δ registriert. Offensichtlich gibt S_0 die Gesamtintensität an, S_1 die Linearpolarisation bzgl. des Azimuthalwinkels 0 (und 90) Grad, S_2 die Linearpolarisation bzgl. der dazu um 45 Grad gedrehten Richtung. S_3 gibt den Überschuß an rechtshändiger zirkularer Polarisation vor der linkshändigen Zirkularpolarisation an.

Die Elliptizität, die als das Verhältnis der beiden Halbachsen definiert, ist:

$$\tan \chi = \pm \frac{b}{a} \quad (-45^\circ < \chi < 45^\circ) \quad (27)$$

wird im Stokes-Formalismus bestimmt aus

$$\sin 2\chi = \frac{S_3}{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}} \quad (28)$$

Aus dem Vorzeichen von χ ergibt sich der Umlaufsinn der Ellipse (bei Beobachtung entgegengesetzt zur Fortpflanzungsrichtung des Lichtes):

$\chi > 0$: RCP, rechtshändig zirkularpolarisiert (im Uhrzeigersinn) oder σ^- - Licht (negative Helizität)
 $\chi < 0$: LCP, linkshändig zirkularpolarisiert oder σ^+ - Licht (positive Helizität)

Die Orientierung der Ellipse ψ ergibt sich aus

$$\tan 2\psi = \frac{S_2}{S_1} \quad (0 < \psi < \pi) \quad (29)$$

Zur einfachen geometrischen Darstellung der verschiedenen Polarisationszustände S_1 , S_2 und S_3 mit Hilfe der "Poincare-Kugel" wird auf Referenz 7, S. 31f verwiesen.

Der Anhang A 2 beschreibt ein Verfahren zur experimentellen Analyse des Polarisationszustandes der Strahlung.

3. Programm

Das Fortran Quellprogramm REFLEC.FOR wurde auf der BESSY-VAX entwickelt. Die ausführbare REFLEC.EXE Version steht auf dem allgemeinen Nutzer-Account PRG durch den Aufruf

R PRG:REFLEC

zur Verfügung. Es ist interaktiv und "selfexplaining" aufgebaut, für jede Abfrage wird ein Default-Wert vorgeschlagen, der durch <RETURN> übernommen oder durch eine andere Eingabe überschrieben werden kann. Für einen nochmaligen Durchlauf bleiben die jeweils letzten Werte gespeichert.

Als erstes muß für die Graphik-Emulation der benutzte Terminal-Typ eingegeben werden. Implementiert sind VT100, VISUAL und Workstation.

Dann wird im Eingabeteil hintereinander abgefragt, in welcher Form (als Funktion der Photonenenergie oder des Einfallswinkels) wieviele Elemente (maximal 5) einzeln oder als Gesamtergebnis dargestellt werden sollen. Anschließend werden, in Abhängigkeit vom gewählten Parameter (Reflektivität, Transmission, Polarisierung usw.) die notwendigen Abfragen gesteuert.

Im einzelnen bietet das Programm folgende Möglichkeiten:

1. Darstellung als Funktion der Photonenenergie (30 - 10000 eV):

- a) Reflexionsgrad R_s und/oder R_p , auch für höhere Ordnungen
- b) Transmission T
- c) lineare, zirkulare Polarisierung (Stokes Parameter S_1 - S_3)
- d) Phasenverschiebung Δ , Elliptizität χ , Orientierung der Polarisations-Ellipse ψ
- e) optische Konstanten n und k
- f) atomare Streufaktoren f_1 und f_2
- g) Absorptionskoeffizient μ , Absorptionslänge L

bis zu 5 optische Elemente (a-g) und/oder Einfallswinkel (a,c) bzw. Foliendicken (b).

a) und b) können auch gemischt werden, um komplette Beamlines (Spiegel und Folien) zu simulieren.

Für c) und d) muß die Anfangspolarisation spezifiziert werden.

2. Darstellung als Funktion des Einfallswinkels

- a) Reflexionsgrad R_s und/oder R_p , auch für höhere Ordnungen
- b) lineare, zirkulare Polarisation (Stokes Parameter S_1 - S_3)
- c) Phasenverschiebung Δ , Elliptizität χ , Orientierung der Polarisations-Ellipse ψ

bis zu 5 optische Elemente und/oder Photonenenergien (a-c)

Die Ergebnisse können für jedes optische Element einzeln oder als Gesamtergebnis dargestellt werden.

Im Ausgabeteil kann die graphische Darstellung, für die die "PLT83"-Graphikbibliothek benutzt wird, modifiziert und wiederholt werden:

Die Start- und Stoppwerte für die x- und y-Achse können verändert und zwischen logarithmischer und linearer Achse kann gewechselt werden.

Die Darstellung erfolgt zunächst auf dem Bildschirm, sie kann dann auch auf den Laserdrucker LA (Rechnerraum oben) oder LU (Kopierraum unten), auf dem HP-Plotter (Rechnerraum) ausgegeben werden. Ein ASCII-File (x / y) zur Weiterverarbeitung der Daten (z. B. mit dem Programm PHOTON oder für Darstellungen mit der NEMO-Graphik) kann ebenfalls erstellt werden. Anschließend wird zum Anfang des Programms zurückgesprungen.

Die Abbildungen 4 - 8 zeigen Beispiele für die Benutzung des Programms.

Abb. 4 zeigt die Reflektivität R_s und R_p von Gold als Funktion des Einfallswinkels für zwei Photonenenergien von 50 und 500 eV. Die Komponente R_p durchläuft ein Minimum (analog zum Brewster Winkel für Dielektrika).

Der dazu korrespondierende Polarisationsgrad $P = (R_s - R_p)/(R_s + R_p)$ bei einfallender unpolarisierter Strahlung ist für mehrere Photonenenergien in Abb. 5 angegeben. Man beachte, daß der Winkel minimaler Reflexion (Abb. 3) nicht mit dem Winkel maximaler Polarisation (Abb. 4) identisch ist.

Abb. 6 gibt die Depolarisation der Strahlung bei Reflexion an einem Gold-bedampften Spiegel in Abhängigkeit vom Einfallswinkel an. Dargestellt ist der Stokes-Parameter S_3 , der die Zirkularpolarisation angibt. Die einfallende Strahlung ist vollständig zirkularpolarisiert ($S_3 = 1$). Man beachte, daß eine Reflexion im Normal Incidence Bereich die Helizität der Zirkularpolarisation umdreht ($S_3 < 0$), im Bereich von 45° findet eine vollständige Umwandlung in linear-polarisiertes Licht statt.

In Abb. 7 ist die Reflektivität von SiC im Vergleich zu der von Osmium und Gold für den Normal-Incidence Bereich dargestellt.

Abb. 8 schließlich gibt die Transmission verschiedener Folienmaterialien von $1 \mu\text{m}$ Dicke im VUV-Bereich wieder.

4. Zusammenfassung und Ausblick

Mit den in Kap. 3 aufgezeigten Möglichkeiten ist das Programm REFLEC ein wichtiges, schnelles und vielseitiges Hilfsmittel für optische Probleme und Fragestellungen im VUV und Soft X-ray Bereich. Neben dem Raytracing Programm RAY, das die Abbildungseigenschaften eines optischen Systems analysiert und dem Programm PHOTON, das den von einem Speicherring emittierten Photonenfluß und dessen Polarisation berechnet, ist es ein Teil der BESSY Programmbibliothek für den weichen Röntgenbereich.

Insbesondere bei der Konzipierung von optischen Komponenten und Monochromatoren ermöglicht das Programm, einen schnellen Überblick über dessen optische Qualität zu gewinnen. Es hilft bei der Auswahl der optimalen Spiegelbeschichtungen und Einfallswinkel, bei der Bestimmung der Cut-off-Energien von Filtern und Vorspiegeln, bei der Berechnung des spektralen Verlaufs der Transmission von Monochromatoren oder der Polarisationseigenschaften einer optischen Anordnung.

Es kann weiterhin zur Optimierung eines (Mehrspiegel-)Polarisators (oder Licht-Analysators) bzgl. der verwendeten Coatings, der optimalen Einfallswinkel, des Analysiervermögens und der Phasenverschiebung verwendet werden. Die einfallende Lichtpolarisation kann dabei beliebig gewählt werden (vollständig linear und/oder zirkularpolarisierte oder unpolarisierte Strahlung).

Für grundlegende physikalische Fragestellungen können die fundamentalen Konstanten, die die Wechselwirkung zwischen Licht und Materie beschreiben, wie die atomaren Streufaktoren, der Brechungsindex oder der Absorptionsquerschnitt aller Elemente des Periodensystems miteinander verglichen werden.

Folgende Erweiterungen des Programms sind geplant:

1. Es soll demnächst auf die Eingabe von Molekülen erweitert werden, um z. B. auch molekulare Spiegelcoatings wie MgF_2 oder SiC oder organische Folien (Kapton, Polyimid etc.) berechnen zu können.¹⁰ Hierzu wird der atomare Streufaktor ersetzt durch einen mittleren molekularen Streufaktor, der sich aus der gewichteten Summe der beteiligten Atome zusammensetzt. Molekulare Geometrien und Molekülorbitale werden also nicht berücksichtigt, ebensowenig wie chemische Verschiebungen der Absorptionskanten, NEXAFS und EXAFS-Strukturen. Diese haben auch für die hier betrachtete Anwendung als Spiegelcoating oder Filter i. a. keine Bedeutung.

2. Berechnung der Effizienz von Reflexionsgittern
3. Es soll in Kombination mit dem Synchrotronstrahlungsprogramm PHOTON und mit dem Raytracing Programm RAY¹¹ absolute Transmissionen (in Photonenfluß/sec) berechnen können. Dies ist z. Z. "von Hand" bereits machbar: Es muß nur noch die in RAY ausgegebene Transmission mit der vom REFLEC berechneten Transmission multipliziert werden. Diese absolute Beamlinetransmission muß dann mit der einfallenden Lichtintensität (PHOTON) skaliert werden.

5. Anhang

A.1 Struktur der Datenfiles (Kopie vom LBL Berkeley, Juli 1990 (R. Perera, M. Thomas))

Alle 92 Elemente sind jeweils als eigenes ASCII-File mit folgender Filestruktur auf der Directory BESSY\$DUA1:[SCHAEFERS.LBL.DATA] unter dem Filenamen *.F12 gespeichert, wobei * das Elementsymbol bezeichnet.

Zeile 1	Kommentartext		
Zeile 2-302	h ν	f ₁	f ₂
	Energie [eV]	atomare Streufaktoren	
Zeile 303	Z	A	ρ
	Ordnungszahl	Atomgewicht	Dichte [g/cm ³]

Die 6 Datenfiles: AU0, CU0, IR0, OS0, PT0.F12 und SIC.F12 haben die gleiche Filestruktur, enthalten aber statt f₁ und f₂ die n und k Werte (Kopie der Files *.BES von [SCHAEFERS.OPTCON])^{3,4}. Diese 6 Datensätze sind zusätzlich integriert worden, da der Energiebereich bereits bei 5 eV (bzw. 10 eV für SIC) anfängt und sie somit für Normal-Incidence Optiken interessant sind. Zur Unterscheidung von den anderen Files muß als dritter Buchstabe eine 0 an den Elementnamen gehängt werden.

Beispiel: File AU.F12

1. Zeile:	Au: Energy	F ₁	F ₂
2. Zeile:	30.000000	3.6857e+00	1.0718e+01
...	31.184620	4.7092e+00	1.1806e+01
...	32.416019	6.1502e+00	1.1806e+01
	33.696041	7.1769e+00	1.1190e+01
	35.026600	7.3401e+00	1.0183e+01
.....			

.....

	8081.543945	7.4805e+01	7.6113e+00	
	8400.663086	7.4614e+01	7.1628e+00	
	8732.382812	7.4397e+01	6.7405e+00	
	9077.201172	7.4166e+01	6.3431e+00	
...	9435.634766	7.3935e+01	5.9691e+00	
...	9808.222656	7.3704e+01	5.6171e+00	
302. Zeile:	9999.998047	7.3588e+01	5.4490e+00	
303. Zeile:	79.	196.96654	19.32	Z A RHO (g/cm ³)

A.2 Analyse von polarisiertem Licht (entnommen aus Ref. 5)

A. No intensity variation with analyzer alone

I. If with $\lambda/4$ plate in front of analyzer			II. If with $\lambda/4$ plate in front of analyzer one finds a maximum, then	
1. One has no intensity variation, one has natural unpolarized light			2. If one position of analyzer gives zero intensity, one has circularly polarized light	3. If no position of analyzer gives zero intensity, one has mixture of circularly polarized light and unpolarized light

B. Intensity variation with analyzer alone

I. If one position of analyzer gives		II. If no position of analyzer gives zero intensity	
1. Zero intensity, one has plane-polarized light		2. Insert a $\lambda/4$ plate in front of analyzer with optic axis parallel to position of maximum intensity	
		a) If get zero intensity with analyzer, one has elliptically polarized light	b) If get no zero intensity,
			<div>(1) But the same analyzer setting as before gives the maximum intensity, one has mixture of plane-polarized light and unpolarized light</div> <div>(2) But some other analyzer setting than before gives a maximum intensity, one has mixture of elliptically polarized light and plane-polarized light</div>

6. Literatur

- /1/ B.L. Henke, P. Lee, T.J. Tanaka, R.L. Shimabukuro, B.K. Fujikawa, Atomic Data and Nuclear Data Tables 27, 1 (1982)
- /2/ B.L. Henke, J.C. Davis, E.M. Gullikson, R.C.C. Perera, Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, CA, LBL-26259 UC-411 (1988)
- /3/ Handbook of Optical Constants of Solids, E.D. Palik, Ed., Academic Press, Orlando, (1985)
- /4/ S. Mrowka, P. Jelinsky, S. Bowyer, G. Sanger, W.J. Choyke, SPIE Proceedings 597, 160 (1985)
J.C. Rife and J. F. Osantowski, Proc. Soc. Photo-Opt. Instr. Eng. 315, 103 (1981)
M. Yanagihara, M. Niwano, T. Koide, S. Sato, T. Miyahara, Y. Iguchi, S. Yamaguchi, T. Sasaki, Appl. Opt. 25, 4586 (1986)
M. Yanagihara, S. Sato, T. Koede, S. Takeda, A. Iijima, Jap. J. Appl. Phys. 28, 128 (1989)
- /5/ M.V. Klein, Optics, John Wiley & Sons Inc. New York (1970)
- /6/ J.A.R. Samson, Techniques of Vacuum Ultraviolet Spectroscopy, J. Wiley & Sons, New York (1967)
- /7/ M. Born, E. Wolf, Principles of Optics, Pergamon Press Oxford (1980)
- /8/ W.G. Driscoll, ed., Handbook of Optics, McGraw-Hill, New York (1978)
- /9/ E. Hecht, A. Zajac, Optics, Addison-Wesley Publ. Comp. (1979)
- /10/ M.M. Thomas, J.C. Davis, C.J. Jacobson, R.C.C. Perera, Proceedings SRI 89 Berkeley
- /11/ F. Schäfers, J. Feldhaus, Technischer Bericht BESSY wird veröffentlicht (1990)

7. Bildunterschriften

- Abb.1 Atomare Streufaktoren f_1 und f_2 im soft x-ray Bereich, nach Ref. 1
- Abb.2 Elliptische Polarisierung mit verschiedenen Werten der Phasendifferenz δ ⁷
- Abb.3 Definition der Polarisationsellipse⁷
- Abb.4 Reflektivität R_s und R_p einer Goldschicht als Funktion des Einfallswinkels für 2 Photonenenergien (50 und 500 eV)
- Abb.5 Linearpolarisierung der an einem Goldspiegel reflektierten Strahlung bei einfallender unpolarisierter Strahlung für 5 verschiedene Photonenenergien
- Abb.6 Zirkularpolarisierung (Stokes Parameter S_3) der an einem Goldspiegel reflektierten Strahlung bei einfallender vollständig zirkularpolarisierter Strahlung ($\delta = 90^\circ$) für 2 Photonenenergien (50 und 500 eV)
- Abb.7 Normal-Incidence Reflektivität ($\theta = 0^\circ$) von SiC, Os und Au im VUV-Bereich
- Abb.8 Transmission verschiedener Folien als Funktion der Photonenenergie (Foliendicke 1 μm)

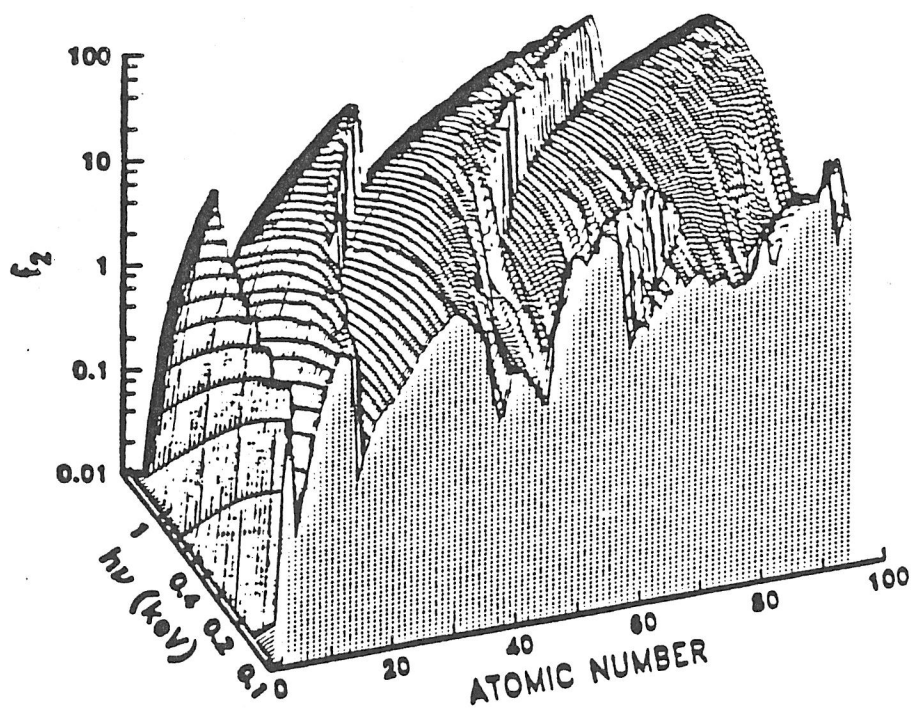
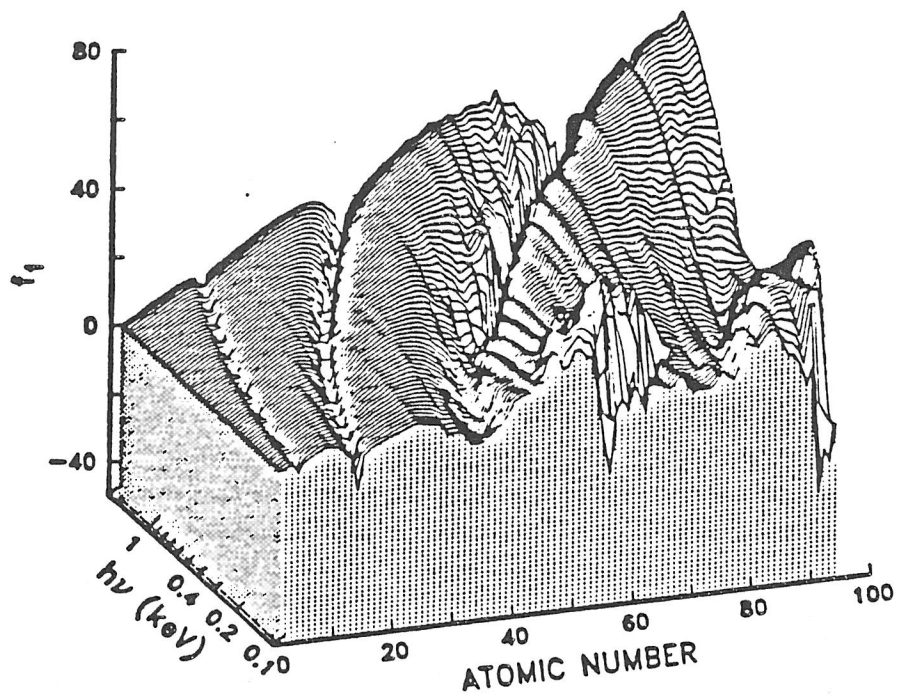


Abb. 1

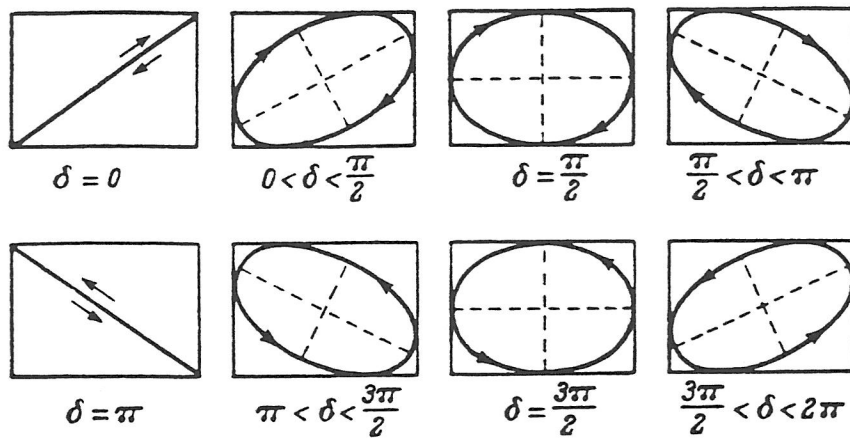


Abb. 2

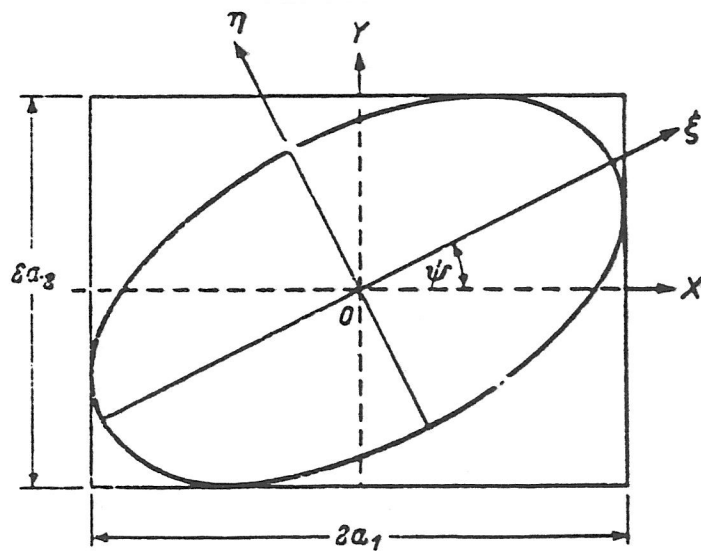


Abb. 3

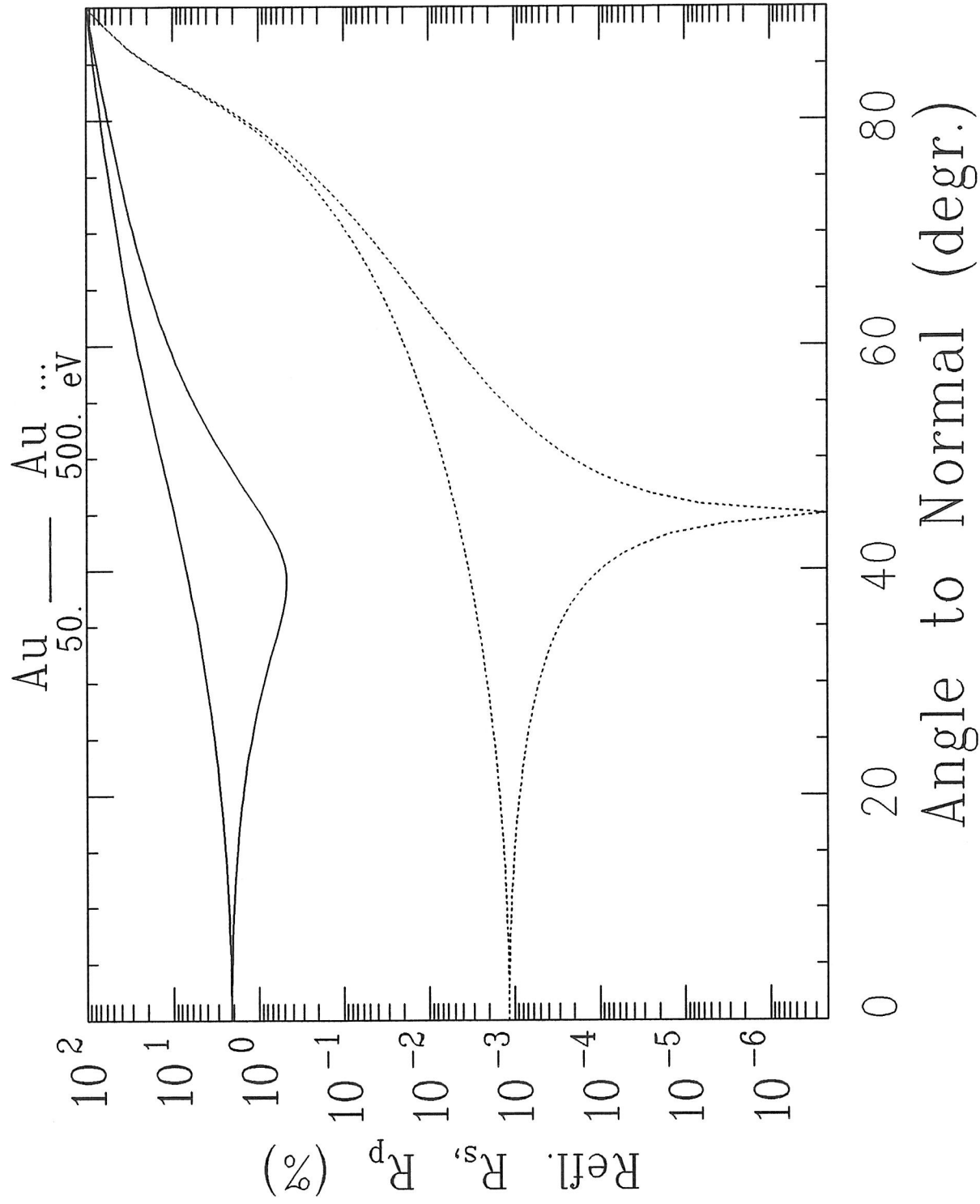


Fig. 4

