

Développement d'une lentille de Laue pour l'astrophysique nucléaire

Nicolas Barrière

▶ To cite this version:

Nicolas Barrière. Développement d'une lentille de Laue pour l'astrophysique nucléaire. Planète et Univers [physics]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2008. Français. NNT : . tel-00329925

HAL Id: tel-00329925 https://theses.hal.science/tel-00329925v1

Submitted on 13 Oct 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITE TOULOUSE III - PAUL SABATIER U.F.R P.C.A

en vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE TOULOUSE

Spécialité : Astrophysique - Instrumentation

par

Nicolas Barrière

Développement d'une lentille de Laue pour l'astrophysique nucléaire

Soutenue le 1er avril 2008 devant le jury composé de :

Jean-François	OLIVE	Professeur, UPS Toulouse	Président
François	LEBRUN	Directeur de recherche, CEA - Saclay	Rapporteur
Cécile	Malgrange	Professeur Emérite, Université Paris 6	Rapporteur
Filippo	Frontera	Professeur, Université de Ferrara	Examinateur
Pierre	Courtois	Docteur, ILL Grenoble	Examinateur
Emmanuel	HINGLAIS	Ingénieur, CNES Toulouse	Examinateur
Peter	von Ballmoos	Professeur, UPS Toulouse	Directeur de thèse

Centre d'Etude Spatiale des Rayonnements - UMR 5187 9, avenue du Colonel Roche 31028 Toulouse FRANCE

Remerciements

Ces trois années et demi de travail auront été pour moi une douce transition du milieu étudiant vers celui de la recherche. Bien sûr il y a eu quelques périodes d'intense travail et de grand stress, mais c'est sans aucun doute un sentiment agréable que j'en garderai, et c'est pour cela que veux adresser ces remerciements.

Tout d'abord, je dois remercier mon directeur de thèse Peter von Ballmoos, qui a su être là pour me soutenir dans les moments difficiles, toujours prêt à donner un coup de main, même au milieu de la nuit. Alors Peter, un immense merci, car je pense que bien s'entendre avec son directeur de thèse et se sentir soutenu (sans être opprimé) compte pour une grande partie dans la réussite d'une thèse. J'ai beaucoup appris en travaillant avec toi, et ce toujours dans la bonne humeur.

J'ai aussi été amené à discuter (et à déranger) régulièrement certains occupants des bureaux vosins, qui m'ont à chaque fois accordé sans rechigner un peu de leur temps pour me fournir des explications ou des conseils toujours pertinents et utiles. Merci donc à Jürgen Knödlseder, Pierre Jean, Georg Weidenspointner et Gerry Skinner pour leur aide précieuse.

Au cours des projets aucquels j'ai participé, j'ai collaboré avec plusieurs personnes du CESR dont en particulier Gilles Roudil avec qui le courant est tout de suite bien passé, mais aussi Thierry Camus et Eric Lecomte qui m'ont maintes fois dépannés. A Grenoble, l'ILL aura véritablement été mon deuxième labo, en particulier le groupe monochromateur qui m'avait déja accueilli deux semaines lors du DEA. Je pense avoir passé au total plus de deux mois à Grenoble, où j'ai toujours été bien reçu. Je tiens à remercier tout particulièrement Pierre Bastie pour sa gentillesse et tout le temps qu'il m'a accordé. J'ai aussi une pensée pour Pierre Courtois, avec qui les négociations n'ont jamais été faciles, mais se sont toujours déroulées dans une ambiance amicale. Merci aussi à toute l'équipe qui a participé à nous préparer les échantillons de cuivre.

Enfin, aller tous les jours au labo n'aurait pas été la même chose sans les collègues thésards. Je ne veux pas me lancer dans une énumération longue (j'en ai vu passer du monde en presque 4 ans!), mais je dois dire que j'ai vraiment apprécié de faire ma thèse dans un labo où les thèsards sont si motivés pour organiser des activités collectives : pauses café quotidiennes, apéros, barbecues, week-end des doctorants, ... tout cela était bien sympa! Une pensée en particulier à mes collègues de bureau (un peu envahissant toutefois...) et à tous ceux qui sont devenus bien plus que de simple collègues, Denis, Christophe, Natacha, Mathieu, Patricia... et tous les autres! Je sais déjà que les nouveaux thésards ont repris le flambeau de l'organisation de 'social events', et j'espère qu'il perpétueront aussi la collecte de papier que j'ai initiée!

Pour finir, et ce n'est pas la moindre des choses, j'adresse une tendre pensée à Amélie

qui m'a soutenu (et supporté!) pendant toutes ces années. Merci aussi à mes parents de m'avoir permis de satisfaire cette ambition de devenir chercheur.

Un grand merci à tous, grâce à vous j'y suis arrivé!

Résumé

Depuis les débuts de l'astrophysique nucléaire, les découvertes ont toujours été liées à des progrès instrumentaux. Cela est particulièrement vrai dans le domaine X-durs / gamma mous où l'intense bruit de fond induit dans les détecteurs par les rayons cosmiques et les ceintures de van Allen, associé à la faible section efficace d'interaction des rayonnements avec les matériaux du détecteur limitent la sensibilité des télescopes. Il semble aujourd'hui que la technologie des télescopes à masque codés arrive à ses limites, avec les deux instruments à bord d'INTEGRAL. Comment dans ces conditions continuer à faire des découvertes? De nombreuses équipes développent actuellement des télescopes Compton de deuxième génération qui semblent pouvoir apporter une partie de la réponse. Au CESR, une option complémentaire est développée depuis quelques années, réaliser une lentille focalisant les rayons gamma de faible énergie.

Les lentilles de Laue qui ont été étudiées focalisent les rayonnements de la bande des rayons gamma mous (100 keV - 1 MeV) par le biais de la diffraction de Bragg dans le volume de cristaux. La focale associée à une telle lentille est de l'ordre de 100 m, ce qui nécessite un vol en formation pour pouvoir réaliser un télescope spatial. L'avantage de ce concept est de concentrer les rayons gamma depuis une large surface de collection vers un détecteur de faible volume, augmentant ainsi le rapport signal sur bruit significativement par rapport aux instruments actuellement en vol, et donc permettant d'atteindre une sensibilité sans précédent dans cette bande d'énergie.

La faisabilité du concept ayant précédemment été démontrée par le projet CLAIRE, mon travail de thèse a consisté à faire évoluer ce premier prototype vers un concept de mission exploitable scientifiquement. Je me suis principalement attaché à deux aspects : D'une part, la modélisation de la lentille, avec le développement d'un code de simulation rapide (non Monte-Carlo) qui a par la suite été la base de nombreux outils d'optimisation du design et d'évaluation des performances en terme de surface efficace, champs de vue, et sensibilité.

L'autre partie de mon travail a consisté à trouver et caractériser des cristaux potentiellement intéressants pour la réalisation d'une lentille de Laue. Des cristaux de cuivre mosaïque, de germanium mosaïque, des alliages de silicium et germanium avec un gradient de concentration et des empilements de wafers de silicium et de germanium ont été mesurés sur différentes installations incluant le synchrotron européen de Grenoble (ESRF) ainsi que l'instrument GAMS 4 de l'ILL. Ces mesures m'ont permis de dresser l'état de l'art des cristaux actuellement disponibles et utilisables pour une lentille gamma.

Ces travaux ont été appliqués à la conception et l'évaluation des performances des missions MAX et Gamma Ray Imager respectivement proposées au CNES et à l'agence spatiale Européenne.

Abstract

Ever since the dawn of astronomy, cosmic discoveries have been directly associated with instrumental progresses. This certainly applies also to the hard X-ray / soft gamma-ray domain where week photon cross-sections and strong background noise hamper instrument sensitivities. SPI, IBIS, and LAT, the main telecopes onboard INTEGRAL and SWIFT probably represent the pinnacle of what is possible using coded mask techniques. How in this context can we keep improving our knowledge of the sub-MeV sky? A number of teams are currently developing second generation Compton telescopes that seem to be able to bring a part of the answer. At CESR, a complementary solution has been studied for over 10 years; it consists in the realization of a lens focusing soft gamma rays.

The Laue lenses we study focuses in the domain of 0.1-1 MeV thanks to Bragg diffraction in the volume of a large number of small crystal tiles. The focal length of a typical Laue lens system is of the order of 100 m. This requirement calls for two formation flying satellites maintaining lens and detector at the focal distance. The major breakthrough of Laue lenses is to decouple collecting area from detector area. Concentrating a signal from the large area of a Laue lens onto a small focal spot dramatically increases the signal over background ratio with respect to present technologies. Here's the reason for the long awaited leap in sensitivity.

The feasibility of the Laue lens concept for astrophysics has been demonstrated by the CLAIRE project between 2001 and 2003. The objective of the present thesis was to improve the concept, finding viable technical solutions towards a future space mission. Two aspects of the lens R&D have been highlighted in this thesis : the first one is an analytical model of the lens that is used to calculate and improve the performance of a certain configuration, the second aspect concerns the search and the characterization of diffracting media of interest.

The lens model developed relies on a fast semi-analytical simulation library, permitting to build several design- and optimisation-tools. For the configuration of a given lens, this code computes the resulting effective area and point spread function in a handful of seconds. The model helps finding lens configurations (mass, pack ratio of the lens rings, ...) which are automatically refined to match with effective area and energy coverage constraints. These tools have been used to investigate various design aspects, such as the influence of focal length, size, mosaic spread, structure and materials of crystals, etc... The central evaluation criterion in the model is a figure of merit, based on the compactness of the focal spot and the intensity of the collected signal.

The second part of this work addresses the actual search and characterization of crystals potentially interesting for Laue lenses. Copper and germanium mosaic crystals, silicon-germanium alloys with a concentration gradient, and stacks of either silicon or germanium wafers have been studied in various facilities including the European Synchrotron Radiation Facility (Grenoble, France) and the GAMS 4 gamma ray spectrometer of the Institute Laue Langevin (Grenoble, France). These quantitative measurements permitted me to evaluate the quality of crystals currently available in the light of the requirements I had calculated with the above described to lens model.

The MAX and GRI mission concept studies, proposed to CNES in 2005 and to ESA in 2007 respectively, have largely benefited of this work. The design process and performance evaluation of MAX and GRI are presented in detail in this thesis.

Table des matières

R	emer	ciemer	nts	ii
R	ésum	é		v
\mathbf{A}	bstra	.ct		viii
Ta	able o	les ma	tières	ix
Ta	able o	des fig	ures	xv
Li	ste d	es tab	leaux	xx
In	trod	uction		1
1	L'as	strophy	ysique nucléaire	5
	1.1	Les ra	yons gamma	6
		1.1.1	Le spectre électromagnétique	6
		1.1.2	Découverte des rayons gamma	6
	1.2	Les dé	buts de l'astronomie gamma	7
	1.3	Les ra	ies gamma nucléaires en astronomie	11
	1.4	Thème	es scientifiques majeurs pour une lentille gamma	18
		1.4.1	La physique de l'explosion des supernovae de Type Ia	18
		1.4.2	L'origine du rayonnement gamma de fond de ciel	21
		1.4.3	La physique des jets dans les systèmes binaires compacts	23
		1.4.4	L'accélération des particules dans les champs magnétiques extrêmes	24
2	Pou	rquoi	une lentille gamma?	27
	2.1	Les in	struments existants	28
		2.1.1	Détection des rayons γ	28
		2.1.2	Les spectromètres en matériaux semi-conducteurs	29
		2.1.3	Télescopes à modulation d'ouverture	32
		2.1.4	Télescopes Compton	34
			2.1.4.1 Mesure de la polarisation à l'aide d'un télescope Compton	36
		2.1.5	Instruments futurs	37
	2.2	Princi	pe d'une lentille de Laue	39
	2.3	Evolut	tion des lentilles de Laue	41

		2.3.1	La première lentille de Laue : focalisation X	42
		2.3.2	La lentille CLAIRE : focalisation γ	43
3	Diff	raction	n des ravons X et γ dans les cristaux	45
Ū	3.1	Notior	s utiles de cristallographie	46
	0.1	3.1.1	Définition d'un cristal	46
		3.1.2	Plans réticulaires d'un cristal	46
		3.1.3	Notations	46
		3.1.4	Le réseau réciproque	48
		3.1.5	La construction d'Ewald	49
		3.1.6	La relation de Bragg	50
		3.1.7	Géométries de diffraction	52
	3.2	Diffrac	ction par un réseau cristallin idéal	52
		3.2.1	Diffusion de Thomson par un électron	53
		3.2.2	Effet de la polarisation	53
		3.2.3	Diffusion par une distribution périodique d'électrons	55
		3.2.4	Intensité diffractée par un petit cristal - Théorie cinématique	57
			3.2.4.1 Intensité et réflectivité intégrées	61
		3.2.5	Calcul du facteur de structure - Effet de l'agitation thermique	62
		3.2.6	Théorie dynamique de la diffraction	65
		3.2.7	La surface de dispersion	66
		3.2.8	Approche qualitative de la théorie dynamique	68
		3.2.9	Grandeurs caractéristiques	69
		3.2.10	Réflectivité différentielle	70
		3.2.11	Intensité et réflectivité intégrée	71
			3.2.11.1 Influence de la polarisation?	74
	3.3	Diffrac	ction dans les cristaux mosaïques	74
		3.3.1	Le modèle de Darwin	74
		3.3.2	Réflectivité d'un cristal mosaïque	75
		3.3.3	Extinction primaire et secondaire	77
	a 4	3.3.4	Courbes de diffraction	77
	3.4	Diffrac	ction dans les cristaux à plans cristallins courbes	81
		3.4.1	Obtenir des cristaux à plans diffractants courbes	81
		3.4.2	Intensité diffractée : Extension de la théorie PPK	82
		3.4.3	Interpretation au travers du concept de surface de dispersion	85
		3.4.4	Calcul de F_{hkl} et d_{hkl} dans le cas d'un alliage binaire $\ldots \ldots \ldots$	86
		3.4.5	Courbes de diffraction	87
4	Pré	sentati	ion et étude théorique des cristaux mesurés	89
	4.1	Facteu	ır de mérite	90
	4.2	Spécifi	ications des cristaux pour lentille de Laue	91
		4.2.1	Choix des matériaux	91
		4.2.2	Largeur du domaine de diffraction	93
	4.5	4.2.3	Structure cristalline	95
	4.3	Présen	itation des différents cristaux étudiés	96

		4.3.1	Le cuivre	96
		4.3.2	Le germanium	98
		4.3.3	Le silicium-germanium	99
		4.3.4	Les empilements de wafers	99
	4.4	Etude	théorique	104
		4.4.1	Cristaux mosaiques	104
			4.4.1.1 Epaisseur optimale - Réflectivité en fonction de l'épaisseur	104
			4.4.1.2 Réflectivité en fonction de la mosaicité	106
			4.4.1.3 Réflectivité en fonction de l'énergie	107
		4.4.2	Cristaux à plans courbes	108
			4.4.2.1 Epaisseur optimale - Réflectivité en fonction de l'épaisseur	108
			4.4.2.2 Réflectivité en fonction de la mosaicité	109
			4.4.2.3 Réflectivité en fonction de l'énergie	110
		4.4.3	Empilement de wafers	111
			4.4.3.1 Epaisseur optimale	111
			4.4.3.2 Réflectivité en fonction de l'énergie	111
	4.5	Conclu	sion du chapitre	113
-	D (14 . 4 .	/	118
9	Kesi	ultats (Euroáni	experimentaux	116
	0.1	Expension 5 1 1	Nature des mesures	116
		519	Traitement des dennées	$\frac{110}{117}$
		5.1.2	Configuration expérimentale à l'ESDE	117
		5.1.0 5.1.4	Configuration experimentale à l'ULI	110
	59	D.1.4 Rógultz	ets ovpórimentaux sur le cuivre	120
	0.2	5.2.1	Cuivro mossiquo : Echantillons do la boulo 805	120 191
		0.2.1	5211 Objectifs	121
			5.2.1.2 Configuration expérimentale	121
			5.2.1.2 Comparation experimentaire	121
			5.2.1.9 resultations experimentations in results in the second	122
			805	124
		5.2.2	Cuivre mosaïque : échantillon Cu834.31	125
		0	5.2.2.1 Présentation de l'échantillon et objectifs	125
			5.2.2.2 Configuration expérimentale	125
			5.2.2.3 Résultats expérimentaux - Analyse	125
			5.2.2.4 Conclusion des mesures sur le cristal Cu834.31	129
		5.2.3	Cuivre mosaïque - échantillons Cu834.21 et Cu834.22	130
		0.2.0	5.2.3.1 Présentation des échantillons et objectifs	130
			5.2.3.2 Configuration expérimentale	131
			5.2.3.3 Résultats expérimentaux - Analyse	131
			5.2.3.4 Conclusion	132
	5.3	Résulta	ats expérimentaux sur le germanium mosaïque	134
	-	5.3.1	Résultats expérimentaux - Analyse	134
	5.4	Résulta	ats expérimentaux sur le silicium-germanium à gradient de concen-	
		tration		135

		5.4.1	$\mathrm{Si}_{1-x}\mathrm{Ge}_x$ à gradient de concentration variable : échantillon SiGe 10	.3136
			5.4.1.1 Présentation de l'échantillon et objectifs	. 136
			5.4.1.2 Configuration expérimentale	. 136
			5.4.1.3 Résultats expérimentaux - Analyse	. 137
			5.4.1.4 Conclusion \ldots	. 139
		5.4.2	$Si_{1-x}Ge_x$ à gradient de concentration variable : échantillons SiGe 6	1 142
			5.4.2.1 Présentation des échantillons et objectifs	. 142
			5.4.2.2 Configuration expérimentale	. 143
			5.4.2.3 Résultats expérimentaux - Analyse	. 143
			$5.4.2.4$ Conclusion \ldots	. 145
		5.4.3	$Si_{1-x}Ge_x$ à gradient de concentration constant : échantillon SiGe 32	22145
			5.4.3.1 Présentation de l'échantillon et objectifs	. 145
			5.4.3.2 Configuration expérimentale	. 145
			5.4.3.3 Résultats expérimentaux - Analyse	. 145
			$5.4.3.4$ Conclusion \ldots	. 146
	5.5	Résult	ats expérimentaux sur les empilements de wafers	. 147
	5.6	Conclu	usion	. 151
0	a			
6	Con	ceptio	n et etude de lentilles de Laue	155 156
	0.1	Les Ou	Présentation	. 150
		0.1.1 6 1 9	Fonetionnement	. 150
		0.1.2	6 1 2 1 Los paramètros d'entrée	. 150
			6.1.2.2 Principo du calcul	. 150
			6.1.2.2 Timicipe du calcul	160
		613	Validation : comparaison avec le code Monte Carlo Simul ons	. 100
	69	Conco	ption d'une lentille de Laue	. 101
	0.2	6 9 1	La distance feele	. 104 164
		0.2.1 6.2.2	Soction dos cristaux ot mospicitó	166
	63	0.2.2 La mis	ssion Camma Ray Imagor	168
	0.0	631	Présentation de la mission GBI	168
		0.0.1 6 3 2	Contraintes et valeurs requises	160
		633	Design de la lentille · Première itération	170
		0.0.0	6.3.3.1 Choix de la focale	170
			6.3.3.2 Choix des cristaux et allocation des plages de rayons	171
			6.3.3.3 Evaluation du résultat	172
		634	Design de la lentille · Version finale	174
		635	Les miroirs multicouches	178
		636	Le plan focal	179
		6.3.7	Satellite optique et structure de la lentille	. 181
		6.3.8	Le vol en formation	. 183
		6.3.9	Performances	. 184
		5.5.6	6.3.9.1 PSF et imagerie	. 184
			6.3.9.2 Sensibilité et champ de vue	. 188
	6.4	La mis	ssion MAX	. 190
	-			

	6.5 Conclusion	. 201
Co	nclusions et perspectives	203
Bi	oliographie	207
A	Acronymes	223
в	Liste des expériences et des participants	225
С	Liste des mesures effectuées C.1 Cristaux de cuivre C.2 Cristaux de germanium C.3 Cristaux de silicium germanium à gradient de concentration variable C.4 Cristaux de silicium germanium à gradient de concentration constant	227 . 227 . 230 . 230 . 233
D	Calcul de sensibilitéD.1Observation d'une raie fineD.2Observation d'une raie élargieD.3Observation d'un continuum	235 . 235 . 238 . 239
Е	Rocking curves E.1 Cu 834.31	241 . 241 . 250 . 263 . 269 . 271
\mathbf{F}	Description complète de la lentille GRI	275

Table des figures

1.1	Le spectre électromagnétique	7
1.2	Opacité au niveau du sol de l'atmosphère terrestre en fonction de la lon-	
	gueur d'onde du rayonnement.	8
1.3	Couverture "temps - énergie" des instruments γ	10
1.4	Carte du ciel dans la raie à 1809 keV issue de la désinté gration de l' $^{26}\mathrm{Al.}$.	16
1.5	Carte du ciel de l'émission dans la raie d'annihilation $\mathrm{e^+}$ - $\mathrm{e^-}$ à 511 keV	18
1.6	Nombre cumulatif de supernovae de type Ia observées entre 1995 et 2005 $$	
	en fonction de la distance	19
1.7	Profiles selon 4 modèles de la raie à 847 keV lors de l'explosion d'une	
	supernovae	20
1.8	Spectre du rayonnement de fond extragalactique	21
1.9	Modèle des sites d'émission potentiels dans la magnétosphère d'un pulsar .	26
2.1	Atténuation selon les différentes interactions dans le Ge et le CdTe	30
2.2	Schéma de fonctionnement d'un détecteur HPGe de type SPI	33
2.3	Principe du télescope à masque codé	34
2.4	Principe du télescope Compton	35
2.5	Section efficace de diffusion Compton et facteur de modulation polarimé-	
	trique en fonction de l'angle de diffusion	37
2.6	Le télescope MEGA	38
2.7	Principe d'une lentille de Laue	40
2.8	La lentille CLAIRE en cours d'assemblage	44
3.1	Les 14 réseaux de Bravais	47
3.2	Exemples de plans réticulaires dans une maille cubique	47
3.3	Définition du vecteur de diffusion \vec{H}	49
3.4	Construction d'Ewald	50
3.5	Interprétation de la relation de Bragg dans l'espace réel	51
3.6	Géométries de diffraction	52
3.7	Diffusion de Thomson par un électron dans un repère sphérique	54
3.8	Diffraction par un cristal dans l'espace direct et dans l'espace réciproque .	59
3.9	Condition de diffraction selon la théorie cinématique dans l'espace réciproque.	66
3.10	Influence de l'indice de réfraction du cristal sur la condition de diffraction,	
	dans l'espace réciproque	67
3.11	Surface de dispersion dans l'espace réciproque	67

3.12	Vue schématique de la surface de dispersion et des conditions aux limites dans le cas Laue symétrique	68
3.13	Bocking curve sur la réflexion Si220 à 300 keV dans le cas d'un cristal parfait	71
3.14	Fonction $B_0(2A)$: Effet du Pendellösung sur l'intensité intégrée	72
3.15	Représentation d'un cristal mosaïque dans le modèle de Darwin.	75
3.16	Forme des courbes de diffraction pour diverses valeurs de α .	79
3.17	Evolution du paramètre α en fonction de l'énergie, de la mosaïcité et de la longueur des cristallites	80
3.18	Efficacité de diffraction maximum (au pic) et intégrée en fonction de α .	81
3.19	Positionnement d'un cristal à plan courbe pour réaliser une lentille de Laue	83
3.20	Représentation dans l'espace direct et dans l'espace réciproque du transfert d'énergie d'une branche à l'autre de la surface de dispersion lors de la	
	traversée d'un cristal courbe ayant un fort gradient de contrainte	86
4.1	Densité électronique des éléments purs dans l'état cristallin satisfaisant les conditions pour une lentille de Laue	92
4.2	Pouvoir de diffraction de différents cristaux usuels en diffraction, et de matériaux potentiellement intéressants.	93
4.3	Comparaison entre les empreintes produites par un cristal de Ge 111 mo- saigue et un cristal de Ge 111 à plans courbes.	95
4.4	Comparaison entre le spot focal produit par un anneau de cristaux mo- seïques et celui produit par le môme anneau contenant des cristaux à plans	
4 5	courbes	96
4.5	Monochromateur a neutrons fait de cristaux de cuivre a l'Institut Laue	97
46	Four Bridgman à l'ILL et boule de cuivre cristallin qui v sont produites	98
4.7	Schéma d'une boule de $Si_{1-x}Ge_x$ à gradient de concentration et four de groissance Czochralcki à l'IKZ	100
18	Boule de SiCe à gradient de concentration constant produite à l'IKZ	100
4.0 4.9	Emplement de wafers idéal	101
4.10	Spécifications pour la découpe des wafers de silicium	102
4.11	Wafers de silicium en cours d'empilement dans leur support en aluminium	103
4.12	Réflectivité au pic en fonction de l'épaisseur d'un cristal de cuivre pour les	105
1 1 9	reflexions 111 et 200 à 500 keV	105
4.13	Epaisseur optimale en fonction de l'energie pour des cristaux de cuivre selon	106
4.14	Réflectivité au pic en fonction de la mosaïcité dans le cas de cristaux de quivre pour les réflections 111 et 200 à 500 keV et à 850 keV	100
4.15	Réflectivité intégrée en fonction de la mosaïcité dans le cas de cristaux de	100
	cuivre selon les réflexions 111 et 200 à 500 keV et à 850 keV	107
4.16	Réflectivité au pic en fonction de l'énergie diffractée dans le cas de cristaux de cuivre selon les réflexions 111 et 200	108
4.17	Réflectivité au pic en fonction de l'épaisseur d'un cristal de Si pour la	
	réflexion 111 à 300 keV dans le cas de mosaïcités de 15, 30 et 45 arcsec $\ .$.	109

4.18	Réflectivité en fonction de la mosaicité pour des cristaux de Si et Ge à plans courbes, selon la réflexion 111.
4.19	Réflectivité de cristaux de Si et Ge à plans courbes selon la réflexion 111 en fonction de l'énergie
4.20	Epaisseur optimisant la réflectivité au pic pour un cristal parfait de Si ou de Ge
4.21	Réflectivité maximum du pic central en fonction de l'énergie pour les dif- férents wafers dont nous disposons
4.22	Largeur de Darwin $2\delta_W$ pour le silicium et le germanium
4.23	Réflectivité en fonction de l'énergie pour divers empilements idéaux de wafers et nombre de wafers nécessaires pour les réaliser
5.1	Schémas de rocking curves en réflexion et transmission
5.2	Configuration expérimentale à l'ESRF lors de l'expérience de septembre 2006118
5.3	Cabine d'expérience de la ligne ID15A de l'ESRF et porte échantillon aspirant.119
5.4	Configuration expérimentale à l'ILL lors de l'expérience sur le spectrometre
	GAMS 4
5.5	Cabine d'expérience de l'instrument GAMS4
5.6	Interféromètre de l'instrument GAMS 4 de l'ILL
5.7	Echantillon Cu 805.23 après sa découpe
5.8	Homogénéité de la mosaïcité de l'échantillon Cu 805.23 et rocking curves
	du cristal Cu 805.11.3
5.9	Cristal Cu805.23, réflexion 220, mesures à 489 keV : Réflectivité en fonction
	de l'épaisseur
$5.10 \\ 5.11$	Echantillon Cu 834.31
5 19	GAMS 4
0.12	réflexion 220 à 815 keV en fonction de la position sur le cristal
5.13	Rocking curves moyennees sur les 10 points de mesures du cristal Cu 834.31,
514	a 815 kev selon la rellexion 220
0.14	of sinstées comparées à la courbe du maximum théorique en fonction de la
	mosaïcité
5.15	Echantillons Cu 834.21 et 834.22
5.16	Echantillons Cu 834.21 et 834.22. Réflectivité en fonction de l'épaisseur 133
5.17	Rocking curves du cristal Ge 127_6b issu de l'anneau 0 de la lentille CLAIRE135
5.18	Cristal à gradient de concentration variable SiGe 10.3
5.19	Mosaïcité en fonction de la position le long de l'axe de croissance du cristal SiGe 10.3.
5.20	Efficacité de diffraction en fonction du paramètre α pour le cristal SiGe
	10.3, réflexion 111, épaisseur de 20 mm.
5.21	Efficacité de diffraction en fonction du paramètre α pour le cristal SiGe 10.3, réflexion 111, épaisseur de 28 mm
5.22	Série de 15 RC en transmission en registrées à 297 keV sur le cristal SiGe10.3141

5.23	Efficacité de diffraction en fonction du paramètre α pour un cristal de	
	silicium soumis à un gradient thermique	142
5.24	Echantillons SiGe 61 symétrique et asymétrique	143
5.25	Mosaïcité en fonction de la position le long de l'axe de croissance sur les	
	cristaux SiGe 61 symétriques et asymétriques	144
5.26	Efficacité de diffraction des cristaux SiGe 61 symétrique et asymétrique en	
	fonction de α	144
5.27	Schéma du cristal à gradient de concentration constant SiGe 322	146
5.28	Efficacité de diffraction en fonction de α pour les différents points du cristal	
	SiGe 322 mesuré à 517 keV.	147
5.29	Rocking curves enregistrées sur le cristal à gradient constant SiGe 322	148
5.30	Intensité intégrée diffractée par différents empilements de wafers en germa-	
	nium comparé à un cristal en $Ge_{1-x}Si_x$ issu de la lentille CLAIRE	149
5.31	Rocking curves fines d'un empilement de 15 wafers de germanium de 500	
	μ m d'épaisseur.	150
5.32	Rocking curves d'un empilement de 4 wafers pris dans la colle	150
6.1	Repérage des axes de la lentille et des cristaux	157
6.2	Comparaison du spot focal simulé par le code semi-analytique Simulentille	
	et de celui produit par le code Monte-Carlo SimuLens pour une source sur	
	l'axe de visée	162
6.3	Comparaison des profils des spots focaux et des surfaces efficaces calculées	
	par les deux codes pour une source sur l'axe de visée	162
6.4	Comparaison des spots focaux simulés par les deux code pour une source	
	à 72 arcsec de l'axe de visée	163
6.5	Comparaison des profils des spots focaux et des surfaces efficaces calculées	
	par les deux codes pour une source à 72 arcsec de l'axe de visée	163
6.6	Facteurs de mérite en fonction de la distance focale de la lentille pour	
	diffracter dans une bande d'énergie donnée	165
6.7	Nombre total de photons diffractés vers le plan de détection et fraction	
	de signal pris en compte pour optimiser la significativité de détection en	1.0.0
	tonction de la focale.	166
6.8	Facteurs de mérite FM et FM^m en fonction de la mosaïcité et de la section	105
0.0	des cristaux (carrés) pour une focale de 100 m	167
6.9	Nombre de photons diffractés et fraction à prendre en compte pour maxi-	
	miser le niveau de detection en fonction de la mosaicite et de la section des	167
C 10	Vie d'artista de télescore en ticl Comme Des luceres	107
0.10	Vue d'artiste du telescope spatial Gamma Ray Imager	108
0.11	Companyage des différents cristeurs pour la lentille du CPI à une distance	170
0.12	focolo do 71 m	171
6 1 2	Bayon de l'anneau on fonction de l'énergie diffractée pour une facele de 70	1/1
0.19	m. Les différents matériaux et réfleviens utilizables sont représentés	179
614	Surface officace de la promière itération du plan de la lantille du Comme	119
0.14	Bay Imager	179
	тау шады	тю

6.15	Comparaison des différents cristaux pour la lentille du GRI à une distance
	focale de 100 m
6.16	Rayon de l'anneau en fonction de l'énergie diffractée pour une focale de 100
	m. Agencement de la lentille du GRI
6.17	Surface efficace de la lentille GRI telle qu'elle a été proposée à l'ESA 176
6.18	Taux de remplissage des anneaux en fonction du rayon pour la version finale
	de la lentille GRI
6.19	Evolution de la surface efficace de la lentille GRI en fonction de l'angle
	zénithal de la source. Les angles représentés sont (en acrsec) 0, 30, 60, 90,
	120, 150 et 180
6.20	Schéma et principe des miroirs à incidence rasante du GRI
6.21	Représentation schématique du plan focal du GRI
6.22	Vue éclatée du satellite détecteur du GRI
6.23	Configuration du satellite optique du GRI
6.24	Secteur de lentille supportant les modules sur lesquels sont fixés les cristaux.185
6.25	PSF des plages de cristaux n° 0, 2, et 3 de la lentille GRI $\ldots \ldots \ldots \ldots 186$
6.26	Profil radial intégré et normalisé des trois PSF des plages de cristaux 0
	(rouge), 2 (bleu), et 3 (vert) de la lentille GRI $\ldots \ldots \ldots$
6.27	Evolution de la PSF avec le dépointage dans le cas d'une source ponctuelle. 187
6.28	Principe de l'imagerie par une lentille γ
6.29	Sensibilité du GRI pour 100 ks de temps de pose
6.30	Evolution de la sensibilité avec le dépointage de la source
D 1	PSF idéale d'une lentille pour une source ponctuelle sur l'ave
D.1	PSF idéale d'une lentille pour une source ponctuelle à 60 arcsec hors de l'ave 240
1.4	i si racale a une fenenne pour une source ponetache a do areste nois de l'axe240

Liste des tableaux

1.1	Les faits marquants de l'Astronomie γ	12
1.2	Inventaire des raies γ observées $\ldots \ldots \ldots$	14
1.3	Principales raie γ de décroissance nucléaires $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	15
2.1	Propriétés physiques et informations relative à l'utilisation du germanium et du tellure de cadmium en tant que détecteur [Limousin, 2001]	29
2.2	Résolution de différents instruments utilisant des détecteurs en germanium ou en tellure de cadmium.	31
2.3	Estimation des performances de l'Advanced Compton Telescope	39
2.4	Caractéristiques dimensionnelles de la lentille CLAIRE	44
3.1	Type de maille, paramètre de maille et distances inter-réticulaires pour qualques éléments	40
<u>ว</u> า	quelques elements	49 62
3.2 3.3	Température de Debye, facteur de Debye pour $T = 300$ K, et facteurs de	05
	structure pour les réflexions 111 et 220 à 500 keV de divers éléments	64
3.4	Coordonnées des atomes dans une maille cubique face centrée (cfc)	65
3.5	Longueurs d'extinction pour différents éléments et réflexions dans le cas d'un faisceau non polarisé de 200 keV	72
3.6	Longueurs d'extinction pour différents éléments et réflexions dans le cas d'un faisceau non polarisé de 500 keV	73
3.7	Longueurs d'extinction pour différents éléments et réflexions dans le cas	70
१ 0	d un faisceau non polarise de 900 kev. \dots	13
$\frac{3.8}{3.9}$	Exemple de valeur de α pour différent couples mosaïcité - épaisseur	74 79
4.1	Exemples de valeurs de mosaicité minimum pour produire une bande pas-	0.4
4.2	Analyse quantitative des simulations montrées en figure 4.4. Les termes	94
	sont explicités dans la section 4.1	97
4.3	Inventaire des wafers à disposition	102
5.1	Résultats des mesures et analyses de quatre échantillons issus de la boule de cuivre n° 805	199
5.2	Mesures sur le cristal 834.31.	127

5.3	Synthèse des résultats expérimentaux obtenus avec les échantillons Cu834.21 et Cu 834.22.	132
5.4	Moyennes des mosaïcités et longueurs des cristallites déduites des mesures	
	sur les 3 marches les plus épaisses du cristal Cu834.21.	133
5.5	Mesures et résultats sur le cristal Ge 127_6b issu de l'anneau 0 de la lentille	
	CLAIRE.	134
5.6	Calcul du rayon de courbure des plans (111)	139
5.7	Performances du cristal à gradient de concentration constant SiGe 322,	
	mesuré à 517 keV. \ldots	146
6.1	Spécifications des performances reliées à la lentille de Laue du GRI	169
6.2	Contraintes sur le design de la la lentille du GRI	170
6.3	Première itération de l'agencement de la lentille du Gamma-ray Imager	174
6.4	Design final de la lentille GRI	178
6.5	Caractéristiques des différents groupes de couches constituant les miroirs	
	du GRI	178
6.6	Paramètres principaux du plan de détection du GRI.	180
6.7	Spécifications pour le vol en formation de la mission GRI	184
6.8	Comparaison des PSF produites par les différentes plages de cristaux em-	
	ployées sur la lentille GRI.	184
6.9	Paramètres utilisés pour calculer la sensibilité du GRI, dans le cas d'un	
	plan focal en germanium strippé.	188
D.1	Exemples de calculs de α et c_1 pour deux plans focaux différents pour les	
	cas d'une source sur l'axe et d'une source à 60 arcsec hors de l'axe	238

Introduction

Dans le spectre électromagnétique, le domaine des rayons gamma de faible énergie est aussi riche en physique que difficile à observer, deux arguments en faveur du développement de nouveaux instruments plus performants. Ce domaine qui s'étend d'une centaine de keV à un peu plus de 1 MeV, contient des raies gamma nucléaires de grand intérêt astrophysique, qui sont la signature de la composition et des conditions physiques des milieux émetteurs. Un des problèmes majeurs pour l'observation des faibles flux des sources dans cette bande est l'intense bruit de fond induit dans les détecteurs opérant dans l'espace par les rayons cosmiques, les ceintures de van Allen et l'activité solaire. De plus, la détection des photons est rendue difficile par le fait qu'à ces longueurs d'onde, trois interactions inélastiques avec la matière sont en compétition : l'effet photo-électrique, la diffusion Compton et la création de paires (à partir de 1022 keV), et ce avec de relativement faibles section efficaces.

Par contre, le fait que ces rayonnements interagissent faiblement avec la matière est aussi un atout pour l'astrophysique du fait qu'ils témoignent des conditions physiques au coeur des événements violents, sans être absorbés par les couches externes des sources ni par la poussière ou le gaz interstellaire sur la ligne de visée. Mais comment les observer avec suffisamment de sensibilité pour détecter ces flux extrêmement faibles ? Apporter une réponse à cette question est la première motivation de cette thèse. La tendance actuelle dans l'instrumentation des hautes énergies est le développement de télescopes Compton de deuxième génération, plus compacts et plus performants, avec l'émergence de nombreux projets tels que l'ACT (*Advanced Compton Telescope*, Boggs [2006]) ou MEGA (*Medium Energy Gamma-ray Astronomy*, Kanbach *et al.* [2005]). La focalisation des rayons gamma est une voie alternative, ou plutôt complémentaire, qui est explorée au CESR depuis une dizaine d'années. Dans tous les autres domaines du spectre électromagnétique, la surface collectrice est découplée de la surface sensible, ce qui permet à la fois de déterminer la direction d'arrivée des photons et donc de reconstruire une image, et d'associer une grande surface de collection à une caméra de faible volume, ce qui limite le bruit de fond.

La longueur d'onde des rayons γ est inférieure à la distance inter-atomique de la matière. La solution proposée pour les focaliser tire avantage de cette caractéristique : un cristal est vu par des photons gamma comme un agencement périodique de centres diffuseurs, ce qui autorise la diffraction. Une lentille de Laue utilise la diffraction de Bragg en géométrie de Laue (dans le volume de cristaux) pour dévier les rayons gamma. En disposant des cristaux sur des anneaux concentriques, et en les orientant de telle sorte que des rayonnements provenant de l'infini soient diffractés vers un point unique, on obtient une focalisation. La relation de Bragg associe à un angle d'incidence une longueur d'onde diffractée. Ainsi un cristal parfait se comporte comme un monochromateur, ne diffractant

1

les rayonnements que dans une bande extrêmement fine de longueur d'onde. La réalisation d'une lentille de Laue nécessite des cristaux dont les plans diffractants sont répartis sur une gamme d'orientation, comme c'est le cas des cristaux mosaïques et des cristaux à plans courbes. Cette distribution angulaire ne doit pas non plus être trop importante car elle est directement reliée à la divergence du faisceau diffracté, ce qui va à l'encontre de la focalisation. Les cristaux idéaux sont donc un subtil mélange entre ordre et désordre.

Comme on commence à le deviner, cette thèse qui s'inscrit dans une thématique de développement instrumental pour l'astrophysique concerne aussi pour une grande part l'étude de divers matériaux cristallins. le travail effectué se divise en deux thèmes : Le premier concerne la modélisation d'une lentille de Laue; une bibliothèque de routines semi-analytiques suffisamment rapides pour être utilisées dans un programme tournant en boucle a été développée (en langage IDL) de façon à pouvoir optimiser le design de différentes lentilles. Cela a impliqué de maîtriser la modélisation de la diffraction dans les cristaux mosaïques et à plans courbes, en utilisant la théorie dynamique de la diffraction. Grâce à cette bibliothèque, plusieurs outils pour l'étude et le design d'une lentille de Laue ont été créés. Ces outils ont été appliqués à la conception de la lentille du Gamma-Ray Imager et ont permis de déterminer les paramètres optimum des cristaux qui la constituent. Notamment cette bibliothèque a permis de mettre en place un facteur de mérite intégrant tous les paramètres du design et dépendant directement de l'objectif final de l'instrument : la sensibilité. Ce facteur de mérite est utilisé pour comparer différents design, mais aussi différents cristaux.

Le deuxième aspect de cette thèse est l'étude et le développement de cristaux pour une lentille gamma. Quatre types de cristaux ont été étudiés : du germanium mosaïque, du cuivre mosaïque, du silicium-germanium à gradient de concentration et des assemblages de wafers de silicium et de germanium. Pour les deux premiers, le travail a consisté à déterminer les paramètres idéaux, se procurer des échantillons et les caractériser pour juger de leur qualité en regard de nos objectifs. Pour les deux derniers, c'est un véritable travail de développement qui a été mené. Plusieurs itérations ont été réalisées entre la production des cristaux et leur caractérisation. Les mesures ont principalement été réalisées lors de quatre campagnes de mesure au synchrotron européen de Grenoble (ESRF) et à l'Institut Laue Langevin (ILL, Grenoble), où des faisceaux très monochromatiques et faiblement divergents atteignant jusqu'à 815 keV ont permis de réaliser des mesures quantitatives de précision.

Ces travaux ont été menés dans un contexte de grande activité autour des lentilles gamma : En 2003, alors que le projet CLAIRE venait de s'achever après avoir démontré la faisabilité du concept de lentille de Laue [von Ballmoos *et al.*, 2004], le projet MAX était en train de voir le jour dans le but d'être proposé au CNES en réponse à un appel à mission concernant un vol en formation [Barrière *et al.*, 2005]. Bien que MAX n'ait pas été sélectionné, la mission a bénéficié d'une étude en phase 0 et du financement d'une R&D dédiée au développement de cristaux efficaces et à leur montage sur la structure de la lentille. C'est en grande partie dans le cadre de ces R&D que les travaux sur les cristaux présentés ici ont été effectués. En parallèle, l'Agence Spatiale Européenne (ESA) qui avait déjà commandé une 'Etude Technologique de Réference'¹ sur le sujet a décidé de financer

¹http://sci.esa.int/science-e/www/object/index.cfm?fobjectid=36959

une étude sur le développement de cristaux pour une lentille γ . Bien que le CESR n'ait pas un rôle prépondérant dans cette étude, nous avons indéniablement bénéficié de ce contexte. D'autre part, un consortium initié par le CESR a élaboré le concept de mission Gamma Ray Imager, qui a été proposé à l'ESA en Juin 2007 dans le cadre du premier appel à mission du plan Cosmic Vision 2015-2025 [Knödlseder *et al.*, 2007]. Bien que là encore, la mission n'ait pas été retenue, l'idée que la focalisation des rayonnements γ est possible a encore grandi, ce qui ne peut que contribuer à accélérer son développement.

Chapitre 1 L'astrophysique nucléaire

L'astrophysique est une branche de l'astronomie qui étudie la nature physique des corps céleste par le biais des rayonnements qu'ils émettent. De tout temps, les hommes ont regardé le ciel, mais on peut considérer que l'astronomie moderne est née aux alentours de 1609 lorsque Galilée a tourné pour la première fois sa lunette astronomique vers les étoiles. L'astrophysique quand à elle, ne verra le jour que deux siècles plus tard, quand en 1814 Joseph von Fraunhofer a décomposé la lumière solaire à l'aide de son spectromètre utilisant un prisme, et a observé plus de 500 raies sombres dans ce spectre. Il faudra alors attendre 1859 pour que Kirchhoff et Bunsen expliquent que ces raies sombres sont en fait des raies d'absorption atomique dues aux éléments présents dans la couronne solaire, mais le principe même de l'astrophysique était né : décomposer la lumière provenant d'objets célestes pour en déduire leurs propriétés physiques.

L'astrophysique nucléaire est une branche de l'astrophysique qui se base sur l'observation de rayonnements électromagnétiques émis lors de réactions nucléaires, ou bien par des processus physiques mettant en jeu suffisamment d'énergie pour engendrer des photons gamma. En effet, comme nous allons le voir dans ce chapitre, les réactions nucléaires ne sont pas les seules à produire des photons gamma, de nombreux objets célestes laissent aussi une signature dans ce domaine du spectre électromagnétique.

1.1 Les rayons gamma

1.1.1 Le spectre électromagnétique

Les photons, vision corpusculaire d'une onde électromagnétique, sont caractérisés soit par leur longueur d'onde λ , soit par leur fréquence ν , ou encore par leur énergie E exprimée en électron-Volt (eV), l'électron-Volt étant l'énergie qu'acquiert un électron soumis à un champ électrique de un Volt. Ces trois grandeurs sont reliées par la formule 1.1, qui fait intervenir la célérité de la lumière c et la constante de Planck h.

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E} \tag{1.1}$$

La figure 1.1 illustre l'ensemble du spectre électromagnétique, depuis les ondes radio jusqu'aux rayons γ , en passant par la petite fenêtre de la lumière visible. Mais attention à ne pas s'y tromper, le domaine γ représente une variation de longueur d'onde de plus de neuf ordres de grandeurs, pratiquement autant que la variation entre les ondes radio et les rayons X. Bien que les limites soient floues, on considère souvent que le domaine γ s'étend de environ 50 keV ($E = 50 \, 10^3 \, \text{eV} \Leftrightarrow \lambda = 2,48 \, 10^{-11} \, \text{m} \Leftrightarrow \nu = 1,21 \, 10^{19} \, \text{Hz}$), jusqu'au delà d'une centaine de TeV ($E = 100 \, 10^{12} \text{ eV} \Leftrightarrow \lambda = 1,24 \, 10^{-20} \text{ m} \Leftrightarrow \nu = 2,42 \, 10^{28} \text{ Hz}$), ce qui correspond au maximum détecté à ce jour. La bande d'énergie contenant les transitions nucléaires s'étend de environ 50 keV à 10 MeV. Les rayons γ nucléaires font partie des rayons γ de "basse énergie" (d'énergie inférieure à 100 GeV) caractérisés par le fait qu'ils ne sont observables qu'au delà hors de notre atmosphère (mission ballon ou satellite). A partir de 100 GeV, on entre dans le domaine γ de très haute énergie. Ces rayons peuvent être observés depuis le sol en utilisant l'atmosphère comme un calorimètre : Lorsqu'un γ de ce type interagit avec la haute atmosphère, il produit une gerbe relativement collimatée de particules relativistes supra-luminiques (principalement des électrons et des positrons) qui émettent alors de la lumière visible (voir e.g. [Jelley, 1981]). Ce flash Cherenkov, qui trace la gerbe de particule, peut être observé depuis le sol par des télescopes dits "Cherenkov", qui remontent ainsi à l'énergie et à la direction d'incidence du photon γ primordial.

La focalisation des rayons γ décrite dans ce manuscrit ne concerne que les photons d'énergie comprise entre 100 keV et 1 MeV, dans le domaine γ nucléaire.

1.1.2 Découverte des rayons gamma

La découverte des rayons γ est attribuée à Paul Villard au tout début du XX^e siècle. Il a présenté ses travaux dans un papier intitulé "Sur la réflexion et la réfraction des rayons cathodiques et des rayons déviables du radium" [Villard, 1900] le 9 Avril 1900 lors d'une session de l'Académie des Sciences [von Ballmoos *et al.*, 2005b]. Villard y décrit une série d'expériences utilisant une petite source de radium qui ont conduit à la découverte d'un nouveau rayonnement similaire aux rayons X, mais plus pénétrant, qui sera plus tard nommé rayons γ .



FIG. 1.1: Schématisation et illustrations des différents domaines du spectre électromagnétique.

1.2 Les débuts de l'astronomie gamma

Les informations nécessaires à l'écriture de cette partie proviennent essentiellement de von Ballmoos *et al.* [2005b] et de Paul et Laurent [1997].

Comme nous venons de le voir, les débuts de l'astrophysique remontent au XVII^e siècle et la découverte des rayons γ date du début du XX^e siècle. Pourtant l'astrophysique des hautes énergies est une discipline relativement récente, qui n'a véritablement pris son essor que depuis les années 70. Pourquoi un développement aussi lent? Ceci est dû à plusieurs difficultés majeures liées aux domaine γ .

- La première de ces difficultés est l'atmosphère terrestre, qui est opaque à tous les rayonnements au-delà de l'ultraviolet proche (voir figure 1.2). Cela signifie qu'il faut élever les instruments à une altitude d'au moins 35 40 km pour pouvoir observer des rayons γ célestes n'ayant pas subi de diffusion, et donc, qu'il faut soit une mission satellite, soit un vol sous ballon stratosphérique (durée de mesure limitée à quelques heures). Il aura donc fallu attendre le développement de l'aire spatiale et ses (trop) rares missions pour commencer à observer le ciel de façon systématique dans la bande γ nucléaire.
- La deuxième difficulté de l'observation dans ce domaine est l'intense bruit de fond que subissent les détecteurs dû aux rayons cosmiques, et dans une moindre mesure, aux particules solaires et aux ceintures de van Allen.
- La troisième difficulté est liée aux sources elles-mêmes qui pour un même nombre de quanta d'énergie rayonnée émettent beaucoup moins de photons dans le domaine γ que dans les autres domaines. Cela explique que les instruments doivent poser parfois plusieurs semaines pour pouvoir extraire un signal significatif du bruit de fond.



FIG. 1.2: Opacité au niveau du sol de l'atmosphère terrestre en fonction de la longueur d'onde du rayonnement.

Le bond technologique décisif permettant l'exploration du ciel dans les hautes énergies a été accompli durant la seconde guerre mondiale avec l'apparition des fusées V2. En 1948, Perlow et Kissinger lancèrent depuis le Nouveau Mexique (US) deux détecteurs (2 tubes Geiger-Müller protégés par un blindage actif, opérant respectivement dans les bandes 0,1-15 MeV et 3,4-90 MeV) à bord d'une fusée V2 qui atteignit une altitude de 61 km, ce qui permit aux détecteurs de rester 77s "au dessus de l'atmosphère" [Perlow et Kissinger, 1951a,b]. Les deux auteurs déduisirent de l'expérience un flux de 0,09 \pm 0,05 coups par seconde au dessus de 3,4 MeV, mais surtout, ils remarquèrent que le flux de rayons γ cosmiques était plus de trois ordres de grandeurs inférieur au flux total de rayons cosmiques (qui est en fait principalement composé de protons et de noyaux atomiques complètement ionisés). Cette constatation préfigurait le problème majeur de l'astronomie gamma : le bruit de fond.

La première détection réellement significative de rayons γ célestes survint dix ans après la première tentative de Perlow et Kissinger (en dépit de nombreuses autres tentatives restées aveuglées par le rayonnement cosmique) lors d'un vol ballon au-dessus de Cuba [Peterson et Winckler, 1958]. Les deux détecteurs embarqués (un compteur Geiger et une chambre à ions) ont en fait vu des photons γ produits lors d'un sursaut solaire, l'événement ayant été simultanément détecté en radio depuis le sol.

Les premiers indices de l'existence de rayons γ du MeV d'origine extra-solaire vinrent au début des années soixante par deux sondes d'exploration lunaires américaines, *Ranger* β et *Ranger* 5 [Arnold *et al.*, 1962]. Les deux sondes embarquaient des scintillateurs omnidirectionnels dans le but de déterminer l'environnement radiatif sur la lune. Les deux missions avaient pour but de se cracher sur la lune, envoyant des images prise par une caméra de télévision et les données du spectromètre gamma jusqu'à l'impact, et tentant de déposer une capsule contenant un sismographe (les deux missions ont raté la lune et sont maintenant en orbite héliocentrique). Leur détecteur était situé sur un bras déployable de 1,8m de long, dans le but de limiter la composante du bruit de fond due à l'activation de la sonde. Il résulta de ces mesures la détection de ce que l'on appelle encore aujourd'hui *le rayonnement* γ *diffus de fond de ciel.*

En 1967 (il y a seulement 40 ans!) alors que dix années s'étaient écoulées depuis le lancement de Spoutnik 1, le constat était rude : aucun photon gamma d'énergie supérieure à 100 keV n'avait été détecté avec certitude en provenance d'une source extérieure au système solaire. C'est pourtant à cette période que les choses allaient évoluer. En mars 1967, la sonde américaine Orbiting Solar Observatory 3 (OSO 3) fut lancée avec à son bord un détecteur sensible aux rayons gamma d'énergie supérieure à 70 keV. Seize mois plus tard, l'annonce de la détection de rayonnements γ de haute énergie dans une bande du ciel correspondant au plan galactique était publiée [Clark *et al.*, 1968], avec un maximum assez large centré sur le centre galactique, surperposé à une composante isotrope.

A la même époque, une découverte majeure a été faite, plus ou moins involontairement. En 1963, alors que les deux super-puissances étaient en pleine guerre froide, le traité interdisant les essais nucléaires dans l'atmosphère et dans l'espace venait d'être signé. L'US Air Force s'était donné les moyens de contrôler l'application de ce traité avec les satellites Vela, et leurs détecteurs de neutrons, rayons X et γ . Le 2 Juillet 1967, les scintillateurs en CsI des satellites Vela 4a et b ont enregistré une augmentation très importante du taux de comptage pendant six secondes, ce qui représentait le premier sursaut gamma jamais observé. Compte tenu de la situation politique de l'époque, cette découverte n'a été rendue publique que 6 ans plus tard par Klebesadel et al. [1973] dans un papier où les auteurs évoquent l'observation de 16 sursauts γ entre 1969 et 1972, de durées comprises entre 0,1 et 30 secondes, dans la bande d'énergie comprise entre 0,2 et 1,5 MeV. Il aura ensuite fallu attendre 25 ans pour avoir une observation multi-longeur d'onde d'un tel événement : en 1997 la rémanence d'un sursaut γ (afterglow en anglais) a été observée en rayons X par le satellite italien Beppo-SAX [Costa et al., 1997], puis par des télescopes optiques qui ont pu identifier une source à l'origine du sursaut. Cette première observation multi-longueur d'onde a permis de mettre en évidence le caractère cosmologique des sursauts gamma, et ainsi d'éliminer les théories leur attribuant une origine située dans le nuage de Oort ou dans le halo de notre galaxie.

C'est aussi en 1967 que le pulsar du Crabe fut détecté pour la première fois entre 100 et 560 keV par une équipe américaine. L'instrument était composé d'un détecteur NaI(Tl) ayant un collimateur actif, le tout embarqué sur une nacelle portée par un ballon stratosphérique [Haymes *et al.*, 1968].

La première raie γ fut détectée en 1970 lors d'un vol ballon équipé d'un scintillateur NaI(Tl) en provenance du centre galactique [Johnson *et al.*, 1972]. La nature de cet excès à 473 ± 30 keV donna lieu à une vive controverse, certain y voyant la raie de décroissance du ⁷Li à 478 keV (e.g. Fishman et Clayton [1972]) et d'autres la raie d'annihilation e⁺ - e⁻ mélangée au continuum du positronium (e.g. Leventhal [1973]). L'observation de la raie fut confirmée lors d'un deuxième vol ballon [Johnson et Haymes, 1973], où elle est détectée à 5,3 σ au dessus d'un continuum en loi de puissance. C'est grâce à l'arrivée des spectromètres à haute résolution en germanium que l'origine de cette raie fût établie. En 1977 Leventhal *et al.* [1978] ont mesuré précisément l'énergie de la raie en provenance du centre galactique à 510,7 ± 0,5 keV lors d'un vol ballon. La présence du continuum du positronium figuraient aussi dans les données, ce qui confirmait sans équivoque que la raie était produite par l'annihilation e⁺ - e⁻.

Dans le même temps, les premières raies γ nucléaires furent détectées en 1972 par la sonde américaine OSO 7 lors d'une éruption solaire [Chupp *et al.*, 1973]. La sonde était équipée d'un spectromètre relativement précis opérant dans la gamme d'énergie de 300 keV à 10 MeV, ce qui permit d'établir un spectre détaillé de l'émission solaire en période de forte activité, comportant notamment la raie d'annihilation électron-positron à 511 keV, ainsi que la raie de capture neutronique par un atome d'hydrogène ¹H(n, γ)²H à 2,223 MeV. D'autres raies, moins significatives dans le spectre enregistré par OSO 7 ont par la suite été confirmées et étudiées par la sonde *Solar Maximum Mission* (SMM)



lancée en février 1980 [McConnell et al., 1997] (voir tableau 1.2, page 14).

FIG. 1.3: Couverture "temps - énergie" des instruments γ (Adapté de von Ballmoos *et al.* [2005b]).

Ainsi sur la période 1968 - 1973 venaient d'être découvertes les émissions γ du soleil, de la nébuleuse du Crabe et de l'annihilation des positrons dans la direction du centre galactique. Cette période a véritablement marqué la transition entre les premières découvertes de l'astronomie gamma et une exploration plus approfondie.

En 1975, le satellite européen COS-B prit le relais de SAS 2 (*Small Astronomy Satellite* 2) dans l'objectif d'observer notre galaxie, la Voie Lactée. Après sept années en orbite, COS-B permit d'établir une carte détaillée des sites galactiques émettant des photons γ d'énergie supérieure à 30 MeV, ainsi qu'un catalogue de sources gamma comportant deux pulsars radio et un quasar proche, le premier AGN (Noyau Actif de Galaxie) jamais détecté en γ de haute énergie (e.g. [Mayer-Hasselwander *et al.*, 1982]).

A partir de 1977, la NASA lança une série de satellites dédiés à l'astronomie des hautes énergies, les *High Energy Astronomy Observatories* (HEAO). HEAO 1 observait dans la bande 0,2 keV - 10 MeV avec un grand champ de vue, ce qui lui permit de fournir le premier catalogue de sources γ , dont une partie des éléments avaient déjà été observés en X. Deux ans plus tard, HEAO 3 fut lancé, avec à son bord un détecteur en germanium fonctionnant dans la gamme d'énergie de 50 keV à 10 MeV. L'observation de la raie d'annihilation en direction du centre galactique amena à conclure à une variabilité

intrinsèque de la source, dont certains indices laissaient penser que les positrons avaient pour origine un trou noir massif au centre de la galaxie [Lingenfelter *et al.*, 1981]. Cette variabilité que tendait à confirmer les vols ballons de l'époque a été fortement mise en doute à la suite des 9 ans d'observation du télescope SMM.

HEAO3 permis aussi la découverte de la raie de décroissance de l'²⁶Al à 1809 keV dans le plan galactique [Mahoney *et al.*, 1984a], la première raie de décroissance nucléaire a être observée en provenance d'une source extérieure au système solaire.

La période des années 80 fut plutôt calme avec pour seul instrument en fonction (en excluant les missions ballon) le détecteur GRS à bord du satellite américain SMM dévolu à l'étude du soleil. Par contre les années 90 ont connu une moisson de découvertes grâce à une nouvelle génération de télescopes γ . D'abord le télescope à masque codé français Sigma lancé en 1989 à bord du satellite Russe *GRANAT* permettant pour la première fois de réaliser de l'imagerie fine dans la bande 35 keV - 1,3 MeV. Puis en 1991, l'observatoire américain *Compton Gamma-Ray Observatory* (CGRO) avec à son bords quatre instruments couvrant le domaine entre 30 keV et 30 GeV :

- Burst and Transient Source Experiment (BATSE), une moniteur à large champ de vue couvrant de 20 keV à 1000 keV.
- Oriented Scintillation Spectrometer Experiment (OSSE) : 0,05 10 MeV.
- Compton Telescope (Comptel) 0,8 30 MeV, 1 stéradian de champ de vue.
- Energetic Gamma Ray Experiment Telescope (EGRET) : 30 MeV 10 GeV.

Ces deux missions ont largement contribué à faire entrer l'astronomie γ dans une aire nouvelle avec comme résultats phares :

La mission CGRO :

- Découverte d'une distribution isotrope de sursauts gamma.
- Première carte de l'émission d'annihilation e^+ e^- à 511 keV des régions centrales de la galaxie suggérant plutôt une distribution étendue composée d'un bulbe symétrique et d'une émission le long du plan galactique. Cette carte présentait aussi une troisième composante, le *Positive Latitude Enhancement* qui s'est révélé être un artefact de mesure avec les données de INTEGRAL / SPI.
- Première carte de la Voie Lactée dans la raie de l'²⁶Al.

– Etablissement des blazars comme sources (variables) de rayons γ de haute énergie La mission GRANAT

- Imagerie profonde de la région du centre galactique (plus de 5 Ms).
- Etude de la variabilité et des spectres de plusieurs objets candidats trou noirs.

Le tableau 1.1 rassemble les points clés développés dans ce chapitre tandis que la figure 1.3 page 10 présente les différentes missions γ passées, présentes et futures.

1.3 Les raies gamma nucléaires en astronomie

Les informations nécessaires à l'écriture de cette partie proviennent en grande partie de Paul et Laurent [1997] et de Schönfelder [2001].

Un intérêt du rayonnement γ pour l'astronomie est qu'il est extrêmement pénétrant. Cela permet d'observer des zones de la galaxie obscurcies à d'autres longueurs d'ondes, ou

1895	G. Roentgen	découverte des rayons X
1896	H. Becquerel	découverte de la radioactivité
1899	E. Rutherford	découverte du noyau atomique
1900	P. Villard	découverte du rayonnement γ
1911	V. Hess	découverte des Rayons Cosmiques
1932	C. Anderson	découverte du positron
1948	Hulsizer & Rossi	le rayonnement gamma haute énergie
		représente $< 1 \%$ des RC
1948	Perlow & Kissinger	détection marginale de RC γ
1958	EXPLORER 1	découverte des ceintures de radiation
		terrestre (J. Van Allen)
1958	Peterson & Winckler	rayons γ du soleil
1958	Ph. Morrison	conférence au Vatican (nuovo cimento)
1960's	RANGER 3&5	flux des RC diffus : $dn(E) \sim E^{-2,2}$
1961	EXPLORER 11	détection de 22 photons γ hautes énergies
1962	ASE-MIT rocket	découverte de la première source X
		cosmique : SCO X-1
1967-68	OSO-1	rayons γ haute énergie galactique
1967	satellites VELA	découverte des sursauts γ
1968	Haymes et al.	Détection de la nébuleuse du Crabe jusqu'à 560 keV
1970	UHURU	premier $sky \ survey$ dans le domaine X
1972	vols ballons	découverte de la raie à 511 keV galactique
1972-75	SAS-2, COS-B	γ haute énergie en provenance du
		plan galactique, Vela, Geminga
1979	HEAO-3	découverte de la raie à 1809 keV de l' ²⁶ Al
1987	SN1987A	raie du ⁵⁶ Co, détection des ν des SNe
1989-98	GRANAT-SIGMA	sources variables au centre galactique
1991-99	Compton-GRO	carte du ciel de 26 Al, 44 Ti dans Cas A,
		spectre des sources compactes
1997	Beppo-Sax	afterglow des sursauts γ ,
		origine extragalactique
2005	INTEGRAL - SPI	carte du ciel dans la raie d'annihilation e^+ - e^-
		à 511 keV

TAB. 1.1: Les faits marquants de l'Astronomie $\gamma,$ d'après von Ballmoos et~al.~[2005b].

bien de regarder les processus physiques à l'oeuvre au sein même des étoiles. Car l'autre intérêt du rayonnement γ est que c'est le domaine des transitions nucléaires. Observer des raies nucléaires apporte plusieurs informations sur le site émissif : L'énergie de la raie permet d'identifier l'élément qui en est l'origine et son intensité est proportionnelle aux nombre de noyaux présents. De plus le redshift et le profile de la raie nous renseignent sur la dynamique et la température du site émissif.

Les raies nucléaires ayant déjà été observées sont présentées dans le tableau 1.2 page 14. Dans la suite de cette section, nous allons nous intéresser aux processus d'émission des raies nucléaires et aux sites qui les produisent.

Désexitations nucléaires Les noyaux atomiques sont constitués de protons et de neutrons dont l'énergie est quantifiée. De même que le cortège électronique d'un atome ne peut prendre que certaines énergies, l'énergie du noyau atomique ne peut prendre que des valeurs discrètes, dont les transitions correspondent à l'énergie de photons γ . Le spectre d'un nucléide est un spectre de raie qui lui est propre, ce qui permet de l'identifier. Après une décroissance nucléaire de type α , β^- ou β^+ (c.f. § suivant), la plupart du temps le noyau fils se trouve dans un état excité. Il peut alors revenir à l'état fondamental en émettant un photon γ .

L'interaction entre un noyau au repos et un protons de haute énergie est un processus qui peut aussi amener le noyau dans un état excité. De même l'interaction inverse entre un noyau accéléré et un proton ou une particule α conduira à l'émission d'une raie de désexcitation. Dans les deux cas, les raies ainsi produites sont plus ou moins élargies par l'effet Doppler dû au mouvement des noyaux excités. Des raies fines peuvent néanmoins être observées dans le cas où les noyaux cibles sont piégés dans une structure massive, comme par exemple ceux qui se trouvent au sein de poussières ou de grains interstellaires bombardés par les protons du rayonnement cosmique [Lingenfelter et Ramaty, 1977].

La détection la plus importante de ce type de raie a été effectuée par le satellite SMM lors du sursaut solaire du 27 avril 1981 [Murphy *et al.*, 1990], où les éléments suivants ont pu être identifiés : ⁵⁶Fe, ²⁴Mg, ²⁰Ne, ²⁸Si, ¹²C, ¹⁶O. A ce jour aucune raie de désexcitation nucléaire n'a pu être fermement détectée en provenance d'une source extrasolaire.

Désintégration de radionucléides Les isotopes radioactifs que l'on retrouve dans l'Univers sont issus des mêmes processus de nucléosynthèse que la matière 'ordinaire' qui nous entoure et dont nous sommes fait (le corps humain renferme aussi quelques isotopes radioactifs tels que le ¹⁴C ou le ⁴⁰K). Ces processus sont soit hydrostatiques comme les réactions de fusions se produisant au coeur des étoiles, soit explosifs comme dans le cas des novae, supernovae, variables cataclysmiques, etc..., ou bien ils se produisent dans le milieu interstellaire par interaction avec les rayons cosmiques. La désintégration d'une population de noyaux radioactifs suit une loi exponentielle en fonction du temps, dont la caractéristique est la demi-vie, qui représente la durée nécessaire pour que la moitié des noyaux se soient désintégrés. Il existe 3 types de désintégrations :

- la radioactivité β^- qui conduit à l'émission d'un électron et d'un antineutrino
- la radioactivité β^+ qui conduit à l'émission d'un positron et d'un neutrino
- la radioactivité α qui conduit à l'émission d'un noyau d'hélium ${}_{2}^{4}$ H
| Processus physiques | Energie
[keV] | Source | Flux [ph cm ⁻² s ⁻¹] | Instrument
(type du détecteur) | Références |
|---|--------------------|--|---|--|--|
| Désexitation nucléaires | | | | | |
| 56 Fe(p,p', γ) | 847 | éruption solaire | jusqu'à ≈ 0.05 | SMM (scintillateur NaI) | Murphy et al. [1990] |
| $^{24}Mg(p,p',\gamma)$ | 1369 | éruption solaire | jusqu'à ≈ 0.08 | SMM (scintillateur NaI) | Murphy et al. [1990] |
| 20 Ne(p,p', γ) | 1634 | éruption solaire | jusqu'à $\approx 0,1$ | SMM (scintillateur NaI) | Murphy et al. [1990] |
| ${}^{28}{\rm Si}({\rm p,p'},\gamma)$ | 1779 | éruption solaire | jusqu'à $\approx 0,09$ | SMM (scintillateur NaI) | Murphy et al. [1990] |
| $^{12}C(p,p',\gamma)$ | 4439 | éruption solaire | jusqu'à $\approx 0,1$ | SMM (scintillateur NaI) | Murphy et al. [1990] |
| $^{16}0(p,p',\gamma)$ | 6129 | éruption solaire | jusqu'à $\approx 0,1$ | SMM (scintillateur NaI) | Murphy et al. [1990] |
| Décroissance radioactive | | | | | |
| 56 Co(EC, γ) 56 Fe | 847, 1238, 2598 | SN1987A | $\approx 10^{-3 \text{ b}}$ | divers scintillateurs et HPGe | Matz et al. [1988a] |
| | 847, 1238 | SN1991T | $\approx 10^{-3 \text{ b}}$ | COMPTEL (scintillateurs) | Morris et al. [1995a] |
| 57 Co(EC, γ) 57 Fe | 122, 136 | SN1987A | $\approx 10^{-4}$ | OSSE (Na-CsI phoswich) | Kurfess et al. [1992] |
| $^{44}\mathrm{Ti}(\mathrm{EC})^{44}\mathrm{Sc}(\beta^+,\gamma)$ | 1157 | Cas A SNR | $7 \ 10^{-5}$ | COMPTEL (scintillateurs) | Iyudin et al. [1994] |
| | 1157 | RX J0852.0-4622 ^c | $3,8\pm0,7\ 10^{-5}$ | COMPTEL (scintillateurs) | Iyudin et al. [1998] |
| $^{26}\mathrm{Al}(\beta^+,\gamma)^{26}\mathrm{Mg}$ | 1809 | sources du plan galactique | $4 \ 10^{-4}$ /rad | COMPTEL (scintillateurs) | Mahoney <i>et al.</i> [1984b]; Share <i>et al.</i> [1985]; von
Ballmoos <i>et al.</i> [1987]; Knödlseder <i>et al.</i> [1999];
Prantzos <i>et Diebl</i> [1996] |
| | 1809 | région du Cygne | $79+2410^{-5}$ | COMPTEL (scintillateurs) | Plüschke et al. [2000] |
| | 1809 | région de Véla | $1-6 \ 10^{-5}$ | COMPTEL (scintillateurs) | Mahoney et al. [1984b]; Share et al. [1985]; von
Ballmoos et al. [1987]; Knödlseder et al. [1999];
Prantzos et Diehl [1996] |
| Annihilation $e^ e^+$ | | | | | |
| | 511 | bulbe galactique | $1,7 \ 10^{-3}$ | OSSE (NaI-CsI phoswich), détecteurs Ge | Johnson et al. [1972]; Albernhe et al. [1981];
Leventhal et al. [1978]; Leventhal [1991]; Share
et al. [1990]; Mahoney et al. [1993]; Purcell et al.
[1997] |
| | 511 | disque galactique | $4,5 \ 10^{-4}$ | OSSE (NaI-CsI phoswich), détecteurs Ge | Johnson et al. [1972]; Albernhe et al. [1981];
Leventhal et al. [1978]; Leventhal [1991]; Share
et al. [1990]; Mahoney et al. [1993]; Purcell et al.
[1997] |
| | 480 ± 120^{ac} | 1E1740-29 | $1,3 \ 10^{-2}$ | SIGMA/scintillateur NaI) | Bouchet et al. [1991] |
| | 511 | Éruption solaire | jusqu'à $\approx 0,1$ | SMM (scintillateurs NaI) | Chupp et al. [1973]; Murphy et al. [1990] |
| | 479 ± 18^{a} | Nova Muscae | $6,3 \ 10^{-3}$ | SIGMA/scintillateur NaI) | Goldwurm et al. [1992] |
| | $400-500^{a}$ | Sursaut γ^{c} | jusqu'à ≈ 70 | scintillateurs variés | e.g. Mazets <i>et al.</i> [1981] |
| | 73500^{a} | Pulsar du Crabe ^c | $3 \ 10^{-4}$ | scintillateurs variés | Olive [1992] |
| Capture neutronique | | | | | |
| $^{1}\mathrm{H}(\mathrm{n},\gamma)^{2}\mathrm{H}$ | 2223 | Éruption solaire | jusqu'à ≈ 1 | SMM (scintillateurs NaI) | Murphy et al. [1990] |
| | 2223 | Naine blanche? RE J0317-853 ^c | | COMPTEL (scintillateurs) | McConnell et al. [1997] |
| 56 Fe (n,γ) 57 Fe | 5947 ^a | Transitoire du 10 juin 1974 | $1,5 \ 10^{-2}$ | détecteur Ge ballon | Jacobson et al. [1978] |
| Raies cyclotrons | | | | | |
| | 10-70 | Sursaut γ ? ^c | jusqu'à ≈3 | scintillateurs variés | Mazets et al. [1981] |
| | 20-58 | plusars variés (e.g. Her X-1) | $3 \ 10^{-3}$ | scintillateurs | Trümper et al. [1977, 1978]; Mihara et al. [1995] |
| | 73-79 | Pulsar du Crabe | $4 \ 10^{-3}$ | scintillateur | Ling et al. [1979] |

 $^a\mathrm{d\acute{e}cal\acute{e}}$ vers le rouge

^bmaximum d'émission

 $^{c}\mathrm{d\acute{e}tection}$ unique et / ou marginale, doit être confirmée par d'autres instruments

TAB. 1.2: Inventaire des raies γ observées, d'après von Ballmoos et~al.~[2005b].

Chaîne de décroissance	Demi-vie	Energie de la raie	Site de production
	[année]	[MeV]	-
$^{7}\mathrm{Be} \rightarrow ^{7}\mathrm{Li}$	$0,\!146$	$0,478\ (0,1)$	Novae
$^{56}\text{Ni} \rightarrow {}^{56}\text{Co} \rightarrow {}^{56}\text{Fe}$	0,216	0,847 $(1,0)$	SN [SN 1987A, SN 1991T]
		$\overline{1,238}$ (0,685)	SN [SN 1987A, SN 1991T]
		$\overline{1,771}$ (0,45)	SN
		2,598(0,17)	SN [SN 1987A]
${}^{57}\text{Co} \rightarrow {}^{57}\text{Fe}$	0,742	$0,122 \ (0,86)$	SN [SN 1987A]
		$\overline{0,136}$ (0,11)	SN [SN 1987A]
$^{22}Na \rightarrow ^{22}Ne$	$2,\!60$	$\overline{1,275}$ (1,0)	Novae
${\rm ^{44}Ti} \rightarrow {\rm ^{44}Sc} \rightarrow {\rm ^{44}Ca}$	86	1,157(1,0)	SN [Cas A, RX J0852.0 4622?]
		$\overline{0,068}$ (1,0)	SN [Cas A]
		$\overline{0,078}$ (0,98)	SN [Cas A]
$^{26}\text{Al} \rightarrow ^{26}\text{Mg}$	$7,21 10^5$	$\overline{1,809}$ (1,0)	WR, AGB (Novae), SNII
			[Galaxie, Vela, Cygne]
${\rm ^{60}Fe} \rightarrow {\rm ^{60}Co} \rightarrow {\rm ^{60}Ni}$	$1,\!17\ 10^{6}$	1,332(1,0)	SN
		$1,173\ (1,0)$	SN

TAB. 1.3: Principales raie γ de décroissance nucléaires. Pour les décroissances doubles, le temps de demi-vie le plus long est reporté. L'énergie des raies déjà détectées est soulignée (voir le tableau 1.2 page 14). Le taux d'embranchement est donné entre parenthèses à coté de l'énergie de la raie. Les sites de production sont : novae, supernovae (SN), étoiles de Wolf-Rayet (WR), de la branche asymptotique des géantes (AGB). Les sites de production identifiés sont indiqués entre crochets. Adapté de [Prantzos et Diehl, 1996].

Le plus souvent, les noyaux fils issus de ces trois types de désintégration se retrouvent dans un état excité, ce qui va les conduire à émettre un photon γ (c.f. § précédent). Il arrive aussi que le nucléide fils soit lui aussi instable, prolongeant ainsi la chaîne de désintégration jusqu'à ce qu'un nucléide fils stable apparaisse. Le tableau 1.3 page 15 donne les principales désintégrations nucléaires et les raies γ associées théoriquement observables dans les objets célestes. Les radionucléides ont des demi-vies qui s'étalent de la fraction de seconde à des milliards d'années, ce qui change considérablement les caractéristiques de la source que l'on observe : Les isotopes à longue durée de vie (e.g. ²⁶Al) ont le temps de diffuser loin de leur site de production avant de se désintégrer. De plus l'observation de ces raies est une intégration de l'activité passée, puisque il faut par exemple 721 000 ans pour que la moitié des noyaux d'²⁶Al produit lors d'un événement soit désintégrés, ce qui explique que l'émission nous apparaisse diffuse (voir figure 1.4). Par contre les isotopes de courte durées de vie apparaissent comme des sources ponctuelles puisqu'ils se désintègrent à proximité de leur site de production. C'est le cas notamment de la raie à 847 keV du ⁵⁶Co produit dans les supernovae (observée dans la supernova de type II SN 1887A par SMM [Matz et al., 1988b], et par CGRO/Comptel dans la supernova de type Ia SN 1991T [Morris *et al.*, 1995b]).



FIG. 1.4: Carte du ciel dans la raie à 1809 keV issue de la désintégration de l' 26 Al. Carte basée sur l'ensemble des données COMPTEL, d'après Plüschke *et al.* [2001].

Spallation La collision énergétique entre un noyau et un proton peut aussi conduire à une spallation, une destruction du noyau cible qui produit un ou plusieurs neutrons rapides et au moins un noyau fils généralement instable. Ces noyaux instables se désintègrent comme indiqué précédemment. Des photons γ sont alors émis lors du retour à l'état fondamental des noyaux stables finalement créés.

Capture neutronique Lorsqu'ils sont soumis à un bombardement intense de neutrons rapides, les noyaux peuvent absorber un neutron, ce qui conduit à la formation d'un isotope de l'élément cible. Cette capture neutronique s'accompagne d'une réorganisation des nucléons se traduisant par l'émission d'un ou plusieurs photons γ . Pour produire des raies détectables, le milieu cible doit être à la fois dense et optiquement mince de manière à laisser s'échapper les photons produits. C'est le cas de la photosphère solaire où la synthèse du deutérium à partir de l'hydrogène (¹H+n \rightarrow ²H+ γ) à pu être observée dans la raie à 2,223 MeV par SMM lors de l'éruption solaire du 27 avril 1981 [Murphy *et al.*, 1990].

Raies cyclotrons Dans un environnement présentant un fort champ magnétique, les particules chargées se déplacent en décrivant une spirale autour des lignes de champ sous l'effet de la force de Lorentz. L'énergie des particules (en général des électrons) est alors quantifiée et donnée par les niveaux de Landau, du fait de la quantification du rayon de leur trajectoire hélicoïdale. Les particules ainsi piégées peuvent absorber ou émettre (en fonction des densités respectives de particules et de rayonnement) des photons d'énergie correspondant à une transition entre deux niveaux de Landau. L'énergie séparant deux niveaux de Landau est donnée par la formule suivante (exprimé en keV) :

$$E_{cycl} = \frac{heB}{m_e c} \approx 11, 6 B_{12} [keV]$$

$$\tag{1.2}$$

où h est la constante de Planck, e, la charge de l'électron, m_e la masse de l'électron, et c la célérité de la lumière. B_{12} est l'intensité du champ magnétique exprimé en unité de 10^{12} gauss (1 gauss = 10^{-4} Tesla). Les pulsars, les magnétars, ou les étoiles à neutrons en

général sont des objets qui peuvent produire des champs magnétiques dépassant les 10^{13} gauss, ce qui porte ces raies cyclotrons dans le domaine γ . La première détection d'une telle raie est attribuée à Trümper *et al.* [1977] dans le spectre du pulsar Hercule X-1 mesuré lors d'un vol sous ballon stratosphérique de quatre heures. L'énergie d'une raie cyclotron est une mesure directe de l'intensité du champ magnétique autour de l'objet. Dans l'exemple précédent, Trümper *et al.* [1977] ont mesuré une raie à 53 keV, ce qui correspond à un champ magnétique de environ 4, 6 10^{12} gauss. Depuis, Ginga et BeppoSAX ont découvert des signatures identiques dans neuf autres pulsars [Mihara *et al.*, 1995; Santangelo *et al.*, 1999], de même que INTEGRAL qui poursuit les observations (e.g. Vela X-1, [Attié *et al.*, 2005]).

Raie d'annihilation e⁺ - e⁻ De masse égale à celle de l'électron et de charge opposée, l'antiparticule de l'électron a été prédit théoriquement par Dirac en 1931 (qu'il nomma d'abord anti-électron). La première observation de cette particule date de 1932 par Anderson [1932] alors qu'il étudiait les rayons cosmiques à l'aide d'une chambre à bulles. C'est lui qui la nommera *positron*.

Les processus de formation de positrons les plus efficaces sont :

- La désintégration β^+ d'éléments radioactifs tels que l'²⁶Al.
- La création de paire e⁺ e⁻ à partir d'un seul photon d'énergie $E > 2m_ec^2$ au voisinage du noyau d'un atome ou d'une particule chargée.
- La création de paire e⁺ e⁻ dans un champ radiatif à partir de 2 photons (interaction photon photon) dont les énergies remplissent la condition $E_1E_2 > (m_ec^2)^2$.
- La décroissance des pions π^+ qui donne dans 0,0123% des cas un positron et un neutrino,
- La décroissance des pions neutres π^0 qui donnent dans 1,198 % des cas un photon plus une paire électron - positron (les pions neutres sont créés notamment lors de l'interaction entre un proton du rayonnement cosmique et un atome du milieu interstellaire par exemple).

L'annihilation d'un positron avec un électron peut se faire suivant deux modes : soit l'annihilation est directe et 2 photons de 511 keV sont émis, soit un positronium se créé (état lié), qui résulte dans un quart des cas par l'émission de 2 photons de 511 keV (parapositronium) et dans trois quarts des cas par l'émission de trois (ou plus) photons dont la somme des énergies correspond à 1022 keV (orthopositronium). Les deux premiers processus conduisent à la formation de la raie caractéristique à 511 keV, alors que le dernier est à l'origine d'un continuum que l'on nome le continuum du positronium. En général, les positrons ne peuvent s'annihiler directement après leur formation, il faut d'abord qu'ils perdent leur énergie cinétique, qu'ils se thermalisent jusqu'à atteindre l'énergie des électrons du milieu ambiant. L'énergie cinétique des positrons et électrons lorsqu'ils s'annihilent conduit à un élargissement de la raie. La spectroscopie fine de cette raie permet donc d'accéder aux conditions physiques du plasma émetteur (densité, température).

En 1977 avec l'avènement des expériences utilisant des détecteurs en germanium, pour la première fois une raie d'annihilation fine a été détectée à 511 keV en direction du centre galactique [Leventhal *et al.*, 1978]. Les premières cartes du ciel furent ensuite établies par CGRO/OSSE [Purcell *et al.*, 1997] puiset plus tard par l'instrument SPI à bord de l'observatoire INTEGRAL, dans la raie à 511 keV [Knödlseder *et al.*, 2005] et dans le continuum du positronium [Weidenspointner *et al.*, 2006]. Jusqu'à très récemment, l'émission dans la raie à 511 keV semblait symétrique, avec le bulbe galactique qui domine largement, et faible composante pour le disque. Mais dernièrement, Weidenspointner *et al.* [2008] a mis en évidence une asymétrie de cette émission avec un excès du coté droit du bulbe (voir Figure 1.5). La distribution des positrons galactiques révélée par cette carte est fortement corrélée avec la distribution des binaires X de faible masse (LMXB) ayant un spectre dur (> 20 keV), ce qui indique qu'ils pourraient être la source majeure des positrons observés. Aucune autre source n'a pour l'instant pu être détectée avec SPI.



FIG. 1.5: Carte du ciel de l'émission dans la raie d'annihilation $e^+ - e^-$ à 511 keV, vu par SPI à bord d'INTEGRAL après 4,3 ans d'observation [Weidenspointner *et al.*, 2008].

1.4 Thèmes scientifiques majeurs pour une lentille gamma

Les différents processus d'émission énoncés précédemment ne sont pas des cibles scientifiques en eux même mais plutôt des vecteurs d'information, des moyens de sonder les propriétés physiques des milieux émetteurs. Les thèmes scientifiques présentés ci-dessous ont été formulés lors de la préparation du concept de mission Gamma-Ray Imager (GRI) qui a été proposée à l'ESA dans le cadre du programme Cosmic Vision. Ils correspondent aux questions que la communauté scientifique se pose sur des objets célestes ou des phénomènes physiques observés mais qui demeurent incompris. Une lentille gamma, en apportant une sensibilité accrue par rapport aux instruments existants et une résolution angulaire de l'ordre de 30 arcsec ($8,310^{-3}$ degrés) dans un champ de vue de l'ordre de 5 à 10 arcmin constitue un nouveau genre d'instrument γ , et de ce fait offre la possibilité d'ouvrir un oeil nouveau sur les processus physiques à l'oeuvre dans les objets encore mystérieux.

1.4.1 La physique de l'explosion des supernovae de Type Ia

Bien que des centaines de supernovae de type Ia (SNIa) soient observées chaque année, et que leur spectre et courbe de lumière optique soient étudiés en détail, la nature intime de ces événements reste jusqu'à présent inconnue. Il est largement accepté qu'une SNIa est le résultat de l'explosion thermonucléaire d'une naine blanche de type CO se trouvant dans un système binaire et ayant accrété de la matière en provenance de son compagnon jusqu'à atteindre la limite de Chandrasekhar. Néanmoins, des questions aussi fondamentales que les caractéristiques des systèmes qui explosent, comment la naine blanche approche de l'instabilité, comment cette instabilité initie l'explosion, ou comment la flamme se propage dans l'étoile attendent toujours une réponse. Cette dernière question est particulièrement problématique du point de vue de la cosmologie : les indices que nous avons aujourd'hui de l'existence d'une énergie sombre sont essentiellement basés sur l'observation de SNIa à grand redshift, et reposent sur une règle empirique reliant la forme de la courbe de lumière de la supernova à la luminosité intrinsèque de l'explosion (e.g. [Schmidt, 2004]). Cependant, personne ne sait comment cette relation fonctionne et, pire encore, si cela fonctionnait également bien dans le passé. La compréhension de la physique des SNIa est donc intimement liée à la compréhension de l'évolution de notre Univers.

La source d'énergie des SNIa est la combustion thermonucléaire d'une naine blanche dans un événement destructif. Les isotopes radioactifs et leurs produits de décroissance formés pendant cet événement sont le moteur de la lumière visible émise et représentent des traceurs directs des conditions physiques pendant l'explosion. Avec une sensibilité suffisante, il serait possible de mesurer les signatures γ de ces produits et ainsi de relier les conditions physiques aux courbes de lumières observées dans les autres longueurs d'onde, apportant de nouvelle contraintes sévères aux modèles. Le taux de supernova dans un rayon de 20 Mpc est de l'ordre de 1 par an et monte à 5 par an dans un rayon de 50 Mpc comme indiqué sur la figure 1.6 [Leising, 2005], ce qui permettra d'observer un échantillon suffisamment important sur la durée d'une mission.



FIG. 1.6: Nombre cumulatif de SNIa observées entre 1995 et 2005 en fonction de la distance. La ligne courbe montre le nombre attendu si 150 SNIa par an sont réparties de façon homogène à moins de 100 Mpc. Reproduit de [Leising, 2005].

Modes de combustion. Bien que plusieurs possibilités sur le déroulement de la combustion thermonucléaire dans les SNIa aient été suggérées, le mécanisme fondamental reste à déterminer [Gómez-Gomar *et al.*, 1998]. Actuellement, les modèles de détonation retardée semblent être les plus adaptés aux observations optiques. La quantité, la distribution de vitesse et d'expansion des éléments radioactifs synthétisés pendant l'explosion sont caractéristiques d'un modèle, c'est pourquoi les observations en gamma ont le potentiel pour les discriminer (voir figure 1.7). Les observables les plus parlantes sont le flux dans les raies γ principales, telles que la raie à 847 keV issue de la décroissance du ⁵⁶Co, la raie d'annihilation e⁺ - e⁻ à 511 keV, ainsi que le continuum du positronium en dessous de 511 keV. Leurs évolutions temporelles avec le vieillissement de la supernova sont le reflet de ce qui s'est produit à l'intérieur de la naine blanche pendant sa destruction.



FIG. 1.7: Profiles de la raie de décroissance radioactive à 847 keV du 56 Co 120 jours après l'explosion de la supernova à une distance de 1 Mpc. Les différents modèles utilisés sont : en trait plein : déflagration; en tirets longs : déflagration retardée; en tirets : détonation; en tiret-points : le model sub-Chandrasekhar [Gómez-Gomar *et al.*, 1998].

Variété. Les SNIa présentent un degré remarquable d'homogénéité spectroscopique et photométrique. Certaines d'entre elles, cependant, sont particulières. Des événements comme la SN 1991T sont plus lumineux que la moyenne, tandis que d'autres comme la SN 1991bg sont moins lumineux [Hamuy *et al.*, 1996]. De plus, même celles qui sont considérées comme normales montrent des différences dans leurs courbes de lumière. Les observations en gamma d'un échantillon important de SNIa permettraient de clarifier si leur variété optique est liée à une variété physique dans le mécanisme d'explosion, ou si le même mécanisme physique est assez flexible pour expliquer la variété des observations.

Physique de l'explosion. En plus du diagnostic des SNIa, l'observation des raies et du continuum dans le domaine γ traite de certaines des questions les plus fondamentales concernant l'effondrement du noyau en supernova : Comment et où l'intense flux de neutrinos se couple t-il à l'éjecta stellaire? A quel point les explosions sont elles asymétriques (question à rattacher aux conditions de formation d'un jet)? Et quels sont les rendements de nucléosynthèse durant les processus de combustion statiques et explosifs?

La masse éjectée de ⁴⁴Ti pourrait être mesurée avec une bonne précision par un télescope à lentille de Laue dans la SN 1987A. Avec les autres rendements isotopiques déjà connus, ceci fournirait une contrainte sans précédent sur des modèles de cet événement. Le ⁴⁴Ti peut également être mesuré et tracé dans plusieurs restes historiques de supernovae galactiques. Ces mesures aideraient à clarifier la dynamique de l'éjection, incluant la question de la fréquence de l'apparition d'un jet lors de l'effondrement du noyau.

1.4.2 L'origine du rayonnement gamma de fond de ciel

Le rayonnement gamma de fond de ciel se présente comme une intense émission d'apparence diffuse et isotrope. Il a été détecté depuis le début de l'astronomie gamma, lors d'expériences de télédétection du sol lunaire (c.f. §1.2), cependant son origine demeure encore incertaine aujourd'hui. Cette émission s'étend de environ 1 keV jusqu'au delà de 100 GeV (voir figure 1.8). Actuellement, l'hypothèse la plus sérieuse attribue son origine aux contributions additionnées de différents types de noyaux actifs de galaxies (AGN), ces galaxies dont le centre abrite un trou noir accrétant super-massif (de l'ordre de 10^6 à $10^9 M_{\odot}$)



FIG. 1.8: Spectre du rayonnement de fond extragalactique provenant des observations de plusieurs instruments. Les sources contribuant potentiellement à ce spectre sont modélisées (pointillés : galaxies Seyfert; tiret-points : Blazars du MeV; tirets : Blazars standards). Adapté de Comastri [1999].

Des indices observationnels étayant ce scénario existent; en dessous de ~ 8 keV la majeure partie de l'émission de fond ($\gtrsim 80\%$) a été résolue en sources discrètes qui ont pu être identifiées comme des galaxies de Seyfert [Hasinger, 2004]. De même, au dessus de 100 MeV une population substantielle de blazars présentant un spectre d'émission comparable à celui du fond extragalactique a été observée. Dans le domaine des rayons X-dur et γ de faible énergie, la situation est beaucoup moins claire. Pour reproduire la forme spectrale du rayonnement de fond au-dessus de 10 keV, les modèles de synthèse supposent une contribution fortement obscurcie des AGN. Le spectre ainsi obtenu est fortement dépendant de l'hypothèse sur l'énergie de coupure et de la fraction relative des sources 'Comptonisées' (i.e. dont le spectre d'émission a été transformé en une loi de puissance présentant une coupure à haute énergie du fait des multiples diffusions subies par les photons) parmi la population d'AGN obscurcis. La connaissance de la distribution des énergies de coupure est donc fondamentale pour établir la liste des classes de sources

contribuant au rayonnement γ de fond. Au dessus de quelque centaines de keV, les blazars pourraient devenir une contribution importante, ce qui reste à vérifier.

Caractéristiques spectrales des AGN dominés par l'accrétion. L'émission de haute énergie des AGN dominés par l'accrétion (par opposition aux AGN dominés par leur jet, les blazars, voir plus bas), également appelés galaxies de Seyfert, est au premier ordre une loi de puissance s'étendant de quelques keV à plus de 100 keV.

Les caractéristiques spectrales les plus intéressantes pour la compréhension de la physique de ces objets sont l'excès à 30 keV et la coupure exponentielle à haute énergie. La coupure à haute énergie représente une cible privilégiée pour une mission gamma équipée d'une lentille de Laue dans la mesure où aucun autre type d'instrument ne serait mieux adapté à son étude fine.

Les modèles de spectres de galaxies de Seyfert attribuent la loi de puissance à la diffusion Compton inverse des photons de basse énergie par des électrons chauds. Les variations autour de ce modèle de base dépendent de la distribution d'énergie de ces électrons et de leur position par rapport au disque d'accrétion. L'indice de la loi de puissance et l'énergie de coupure étant directement liés à la température et à la profondeur optique du plasma chaud de Comptonisation, la connaissance précise de ces deux paramètres peut apporter des éléments à notre compréhension du mécanisme primaire d'émission, de la géométrie de la source et de la physique du plasma près du générateur central.

L'énergie précise de la coupure est encore inconnue, et les informations disponibles se fondent sur quelques observations clairsemées et le fait qu'aucune galaxie de Seyfert n'a été détectée au delà de quelque centaines de keV [Johnson *et al.*, 1993] . Les résultats obtenus jusqu'ici ne posent pas de contraintes fermes sur la distribution des énergies de coupure (l'énergie de coupure est elle identique pour tous les AGN?), et nous ne savons pas si elle est liée à d'autres paramètres des AGN tels que la luminosité, l'obscurcissement ou le redshift. Eventuellement, des états spectraux semblables à ceux observés dans les binaires compactes galactiques pourraient également exister dans les AGN, et la présence d'une coupure pourrait être liée à l'état physique du système. Une détermination précise de la coupure à haute énergie dans un échantillon statistiquement significatif d'AGN dominés par l'accrétion serait donc une étape fondamentale pour notre compréhension de la physique de ces objets.

Caractéristiques spectrales des AGN dominés par leur jet. Les AGN dominés par leur jet, également appelés blazars, ne présentent pas de composante réfléchie sur le disque d'accrétion comme dans le cas dans des galaxies de Seyfert, et en particulier, ils sont caractérisés par des spectres de loi de puissance pure s'étendant jusqu'à la gamme des rayons γ avant de présenter une coupure. Ces propriétés sont attribuées à l'émission non-thermique d'un jet relativiste émis dans une direction voisine de celle de la ligne de visée, avec l'énergie de coupure dépendant probablement de l'angle de vue du jet. Les observations de CGRO/COMPTEL ont révélé une nouvelle classe de blazars ayant des énergies de coupure dans le régime du MeV [Collmar *et al.*, 1999], qui pourrait contribuer à l'émission cosmique de fond dans ce régime intermédiaire (Figure 1.8). La détermination de la contribution de cette population au rayonnement de fond cosmique ainsi que l'étude de la physique de l'émission γ dans les jets font de ces objets un objectif de choix pour une mission basée sur une lentille de Laue.

Sonder la physique et la géométrie des AGN par le biais de mesures de polarisation. Les disques d'accrétion et les jets sont supposés être des sites d'émission polarisée. Pour un disque, le degré de polarisation dépend de l'angle d'émission par rapport à son plan et de la profondeur optique de la région d'émission; pour un disque optiquement épais, des niveaux de polarisation de l'ordre de 10% sont attendus [Lei *et al.*, 1997]. Dans le cas d'un jet, on attend de l'étude de la polarisation des informations sur la physique et la géométrie des zones d'émission. La mesure de la polarisation des jets dans le domaine gamma nucléaire participera à compléter une vue pour l'instant trop clairsemée pour en tirer des conclusions.

1.4.3 La physique des jets dans les systèmes binaires compacts

Les étoiles à neutron et les trous noirs sont les objets les plus denses connus dans l'univers. Bien qu'invisibles par nature, les trous noirs deviennent observables quand ils accrétent du gaz, le plus souvent en provenance d'un compagnon stellaire proche. Contrairement aux rayons X, qui tracent l'apport de matière par l'intermédiaire d'un disque d'accrétion chaud, les rayons γ sondent l'écoulement final de la matière au delà de la dernière orbite stable, où le temps et l'espace sont régis par la relativité générale. C'est aussi lors de cette ultime chute que prennent naissance les jets collimatés de particules relativistes. En effet, les jets semblent maintenant être un aspect courant du phénomène d'accrétion bien que leur physique et leur nature soient encore mal comprises. Il n'est pas encore clairement établi comment le réservoir d'énergie que représente un système d'accrétion se transforme en un jet de particules relativistes. Les jets sont souvent des phénomènes transitoires, mais on ne sait toujours pas ce qui les déclenche. En outre, la collimation du jet est mal comprise, et en général, la composition du plasma accéléré n'est pas connue non plus (plasma d'électron, d'ion, de paire électron-positron). Enfin, les processus de rayonnement qui se produisent dans les jets ne sont pas bien établis.

Les mesures précises des composantes spectrales d'émission dans les divers états de ces systèmes serait déjà un grand pas vers la compréhension du lien entre accrétion et formation d'un jet. Aussi, l'étude comparative entre les systèmes binaires comportant une étoiles à neutron (NSB) et ceux comportant un trou noir (BHB) permettrait d'évaluer l'impact d'un horizon (rayon en deçà duquel les photons ne peuvent plus s'échapper du trou noir) sur les caractéristiques de l'émission de haute énergie. Enfin, la recherche de la production de paire et de la signature de l'annihilation peut révéler la nature du plasma formant les jets. Ces mesures ne peuvent être réalisées qu'à l'aide d'un instrument présentant une sensibilité accrue par rapport aux instrument actuellement en service.

Identification des états fondamentaux des BHB. Les spectres des systèmes binaires compacts renferment les informations sur les composantes physiques de ces systèmes d'accrétions, alors que les différents états d'émission reflètent les interactions dynamiques entre phénomènes d'accrétion, de chauffage, d'accélération et d'éjection. Des mesures précises des composantes de haute énergie des spectres d'émission doivent permettre d'identifier les états fondamentaux dans les BHB. Ces observations nous indiqueraient la manière dont la gravité est convertie en rayonnement, et quel processus physique est à l'origine des photons de haute énergie.

Etude des transitions des BHB. Les états de transition sont particulièrement intéressants car ils peuvent permettre de relier l'activité du disque à celle du jet. Des signes de variations rapides de la coupure à haute énergie pendant les transitions ont été observés, mais la nature de ces variations n'est pour l'instant pas claire. Une variation de l'énergie de coupure traduit un changement de l'état physique du plasma émetteur, c'est pourquoi l'étude détaillée des spectres de transition est cruciale pour comprendre la physique mise en jeu.

Caractéristiques spectrales des NSB. Le spectre à haute énergie des étoiles à neutron binaires est pour l'instant mal connu. Une composante semblable à l'émission dure observée dans certains états spectraux des BHB pourrait exister, mais jusqu'ici les détections sont rares. La comparaison entre les spectres de NSB et de BHB permettrait d'étudier l'influence de la présence d'une surface dure par opposition à un horizon sur les processus d'accélération et de chauffage, ainsi que sur la nature des états de base de la matière en accrétion.

Nature du plasma chaud. Une question cruciale est l'observation des signatures d'annihilation de paire dans les systèmes binaires à accrétion. Sa présence posera de fortes contraintes sur le processus d'accélération en cours. Avec seulement deux détections par SIGMA [Gilfanov *et al.*, 1994], dont la véracité a été remise en cause par la suite, ce champ est encore pratiquement inconnu. Les observations à grande sensibilité pendant les états transitoires associés à l'accélération et à l'éjection de jets relativistes, permettront de sonder la composition du plasma accéléré et de déterminer si il contient des signatures d'annihilation.

1.4.4 L'accélération des particules dans les champs magnétiques extrêmes

Les champs magnétique et gravitationnel ultra-intenses créés par un pulsar en font un excellent laboratoire pour l'étude des processus physiques en conditions extrêmes. La rotation rapide du pulsar entraine la création de champs électriques très importants sur sa surface qui sont en mesure d'accélérer des particules jusqu'à des énergies extrêmes, alimentant le vent de particules relativistes qui forme son environnement. Dans les champs magnétiques extrêmes, les effets électrodynamiques quantiques (QED) changent profondément les caractéristiques des procédés de rayonnement de continuum tels que l'émission synchrotron et la diffusion Compton. Ils mènent également à des processus physiques exotiques tels que la production de paire par un seul photon, la polarisation du vide et le dédoublement de photon, des phénomènes qui ne peuvent pas être reproduits en laboratoire. Bien que la plupart des jeunes pulsars semblent atteindre leur maximum de luminosité dans le domaine des rayons γ de faible énergie, leur flux relativement faible les rendent difficiles à détecter, ce qui explique qu'une poignée seulement aient pu être étudiés jusqu'ici. Enrichir les statistiques permettra l'étude des courbes de lumière sur une gamme d'énergie beaucoup plus large que ce qui est accessible aujourd'hui, fournissant des éléments cruciaux sur la physique de l'accélération dans ces objets.

Sonder les champs magnétiques ultra-intenses des magnétars. Les magnétars représentent une classe d'objets compacts extrêmes qui possèdent un champ magnétique très élevé, de l'ordre de 10^{14-15} Gauss, bien au delà de la valeur critique de champ magnétique pour l'apparition des effets exotiques de QED. Ces objets sont en fait des étoiles à neutrons particulières, qui tirent leur énergie de la décroissance de leur champ magnétique. Très récemment notre connaissance sur des magnétars s'est énormément améliorée. Le résultat le plus saisissant est la détection de queues spectrales dures pulsées dans les spectres de six magnétars se trouvant dans un état spectral calme. Les limites supérieures obtenues par CGRO/COMPTEL dans le régime du MeV suggèrent une coupure spectrale nette entre 200 keV et 1 MeV, démontrant que ces étoiles à neutron exotiques émettent une fraction substantielle de leur énergie dans la bande (ignorée auparavant) des rayons γ de faible énergie.

La détermination de l'endroit précis de la coupure spectrale contraindrait de manière significative les modèles théoriques, la plupart du temps basés sur l'accélération des particules dans des configurations de boucles magnétiques entortillées. De plus, un instrument suffisament sensible pour établir le spectre détaillé d'un magnétar pourrait mener à la détection de structures spectrales fines (raies cyclotron) à partir desquelles l'intensité du champ magnétique et sa topologie peuvent être déterminées directement. Enfin, la mesure de la polarisation de l'émission d'un magnétar sonderait l'importance du dédoublement magnétique des photons se produisant dans la magnétosphère (le niveau de polarisation attendu est de l'ordre de 25 % dans ce cas).

Repérer les sites d'émission dans la magnétosphère des pulsars. Malgré des décennies de modélisation théorique, l'emplacement des sites de production et la nature de l'émission de haute énergie sont encore peu clairs dans le cas des pulsars puisant leur énergie de leur moment angulaire. Les modèles les plus développés supposent comme emplacement d'émission de haute énergie les cornets polaires (polar-cap accelerator), ou des cavités dans la magnétosphère externe (outer-gap accelerator), juste à l'extérieur des dernières lignes de champ fermées, comme montré sur la figure 1.9 [Hirotani, 2006]. Les prévisions concernant les spectres de phases résolues, la morphologie des impulsions et la polarisation aux hautes énergies sont très différentes selon ces modèles. Les observations dans le domaine γ nucléaire joueront donc un rôle décisif dans leur discrimination. En combinant spectroscopie, timing et mesures de polarisation, un instrument à lentille de Laue permettrait d'identifier les emplacements de production de l'émission de haute énergie dans la magnétosphère des pulsars.

Les pulsars, sources de positrons? La plupart des théories courantes au sujet des magnétosphères de pulsar exigent la formation d'un plasma de paire de électron-positron, les pulsars étant potentiellement un contributeur important au budget galactique de po-



FIG. 1.9: Modèle des sites d'émission potentiels dans la magnétosphère d'un pulsar : *polar-gap accelerator* au niveau du cornet polaire, et *outer-gap accelerator* juste à l'extérieur des dernières lignes de champ fermées . Reproduit de [Hirotani, 2006].

sitron. Cependant, excepté des déclarations non confirmées de détection de la raie d'annihilation redshiftée dans la nébuleuse du Crabe [Gilfanov *et al.*, 1994], la signature d'annihilation prédite a jusqu'ici échappée à la détection. Un télescope à lentille de Laue permettrait d'effectuer une recherche approfondie des signatures d'annihilation dans les pulsars, fournissant une mesure directe de leur émissivité de positron. De plus, l'analyse de la forme de la raie permettra de sonder l'emplacement de production et ses conditions physiques.

Accélération de particules dans les nébuleuses de pulsar. Les jeunes pulsars actifs sont souvent enfoncés dans une nébuleuse constituée du vent de particules relativistes émises (PWN : Pulsar Wind Nebula), dans lesquelles la plupart de l'énergie dissipée par rotation est absorbée par l'interaction entre les particules du vent et la matière constituant l'environnement direct du pulsar. Le découplage par l'analyse de synchronisation du signal pulsé peut fournir des informations sur la physique agissant dans la magnétosphère et l'environnement proche de ces systèmes.

Récemment, des observations depuis le sol avec les télescopes Cherenkov HESS et MA-GIC ont établi les PWNe comme étant une classe importante de sources galactiques de rayons γ . Des contre-parties dans les rayons X et γ de faible énergie ont été détectées par INTEGRAL [Ubertini *et al.*, 2005; Malizia *et al.*, 2005]. Il a ainsi été possible de démontrer que dans certains cas, les spectres des PWNe peuvent être expliqués par l'émission synchrotron des mêmes électrons qui sont responsables de l'émission au TeV détectée par les télescopes Cherenkov, produite par des interaction Compton inverses. Augmenter la taille de l'échantillon observé dans les rayons γ de faible énergie permettrait pour la première fois de réaliser une étude statistique. De plus la résolution angulaire offerte par une lentille de Laue permettrait de résoudre spatialement les PWNe, ce qui serait un grand pas vers la compréhension des échanges d'énergies s'y déroulant.

Chapitre 2 Pourquoi une lentille gamma?

Comme nous venons de le voir au chapitre précédent, les avancées dans le domaine de l'astrophysique nucléaire ont toujours été liées à des progrès instrumentaux. Nous allons voir dans ce chapitre sur quels principes fonctionnent les télescopes γ qui ont montré les meilleurs performances. Cela permet de cerner leurs points forts, mais aussi leurs limites, ce qui est la première étape pour créer une nouvelle génération d'instruments plus performants. A partir de là nous verrons le principe d'un télescope basé sur une lentille γ , et ce qu'il peut apporter à l'astrophysique nucléaire.

2.1 Les instruments existants

Tous les instruments du domaine gamma nucléaire utilisés jusqu'à aujourd'hui ont en commun de ne pas avoir de système de focalisation. Cela implique qu'il faut inventer des systèmes alternatifs pour reconstruire la direction d'arrivée des photons, condition sine qua none pour remonter à la position de la source dans le ciel et donc réaliser à proprement parler un télescope. Les deux principes de reconstruction de la direction d'incidence actuellement utilisés sont la modulation d'ouverture et la reconstruction Compton. Ces deux principes sont présentés dans les sections suivantes.

Une autre conséquence de l'absence d'optique focalisante pour les rayons γ est que de fait, la surface de collection est donnée par la surface du détecteur lui même. C'est ce point en particulier qui limite beaucoup la sensibilité des instruments. En effet, dans l'espace le taux de comptage de bruit de fond induit dans un détecteur est approximativement proportionnel à son volume, du fait de l'environnement radiatif au voisinage de la Terre (ceintures de van Allen, éruptions solaires, rayonnement cosmique). Cela implique que la sensibilité n'augmente qu'avec la racine carré de la surface des détecteurs (voir Annexe D), ce qui commence à poser un problème vu les dimensions des instruments actuellement en service. Toutefois, cela n'est plus vrai dans le cas d'un détecteur Compton traçant la trajectoire de l'électron de recul, comme nous allons le voir dans la section 2.1.4.

Mais avant de voir le principe des instruments existants, voyons d'abord le principe de détection des rayons γ .

2.1.1 Détection des rayons γ

Tous les détecteurs de rayon γ fonctionnent sur le même principe, qui se décompose en deux étapes successives :

- 1. Le processus d'interaction, au cours duquel le photon γ éjecte un électron d'un atome du volume de détection par effet photoélectrique, ou bien par diffusion Compton, ou encore vient se matérialiser en une paire électron-positron dans le champ coulombien d'un noyau atomique. La figure 2.2 page 33 illustre les différentes interactions γ -Ge dans le cas d'une diode du plan de détection de SPI (INTEGRAL). Dans le domaine X-durs / γ , il est fréquent qu'un même photon subissent plusieurs interactions avant de céder toute son énergie résiduelle à un électron lors d'une ultime interaction photoélectrique. Dans ce cas, plusieurs électrons primaires auront été créés. Tout au long de leur trajet, les électrons éjectés ou matérialisés perdent de l'énergie en ionisant les atomes du milieu détecteur, les électrons secondaires arrachés lors de ces ionisations pouvant à leur tour ioniser d'autres atomes.
- 2. Le processus de détection, au cours duquel on traduit sous forme de signaux électriques la présence d'électrons 'libres' dans le volume du détecteur. Dans le cas d'un spectromètre (cas qui nous intéresse) l'amplitude du signal électrique doit être proportionnel à la quantité d'énergie déposée dans le volume du détecteur par le photon incident (donc à la sommes des énergies des électrons primaires).

2.1.2 Les spectromètres en matériaux semi-conducteurs

Le but de cette section n'est pas de décrire le fonctionnement de tous les détecteurs de manière exhaustive, mais plutôt de présenter le principe de ceux qui reviennent le plus souvent dans cette thèse. Nous allons donc voir comment fonctionnent les détecteurs en germanium (Ge) et en tellure de cadmium (CdTe). Dans les deux cas, il s'agit de matériaux semi-conducteurs cristallins, leurs propriétés physiques ainsi que quelques informations relative à leur utilisation en tant que détecteur sont présentées dans le tableau 2.1. Pour plus d'information sur la physique et les méthodes de détection, voir [Knoll, 1989].

	Ge	CdTe
Z	32	48-52
Masse volumique $[g/cm^3]$	$5,\!32$	$5,\!86$
Structure cristalline	Diamant	Diamant
Température d'utilisation [K]	77-100	250 - 300
$Gap \ [eV]$	$0,\!66$	$1,\!44$
Mobilité e ⁻ $[cm^2V^{-1}s^{-1}]$	36000 (77K)	$950 (300 {\rm K})$
Mobilité trous $[cm^2V^{-1}s^{-1}]$	42000 (77K)	$80 (300 {\rm K})$

TAB. 2.1: Propriétés physiques et informations relative à l'utilisation du germanium et du tellure de cadmium en tant que détecteur [Limousin, 2001].

Milieu détecteur. Dans ces deux cas, le but est de disposer d'un milieu suffisamment dense et volumineux pour que le photon X-dur / γ dépose toute son énergie au contact des électrons du milieu. Il faut aussi que ce milieu soit libre de charges mobiles de façon à ce que les électrons éjectés de leurs atomes ne soient pas noyés parmi les électrons de conduction du milieu (par opposition aux électrons de valence). Lorsque la matière est sous forme cristalline, l'énergie des électrons ne peut prendre certaines valeurs associées à la périodicité du cristal, ce qui créé un gap entre deux bandes contenant les énergies permises, la bande de conduction et la bande de valence. Si le matériau est semi-conducteur, ce gap n'est pas trop important et les électrons peuvent passer de la bande de valence à la bande de conduction avec un faible apport d'énergie (c.f. tableau 2.1). Les impuretés ou les défauts du cristal (dislocations, permutation, ...) cassent la périodicité du cristal et dégradent localement la structure des bandes d'énergie, d'où la nécessité d'utiliser des cristaux ultra purs et le plus parfaits possible.

Interaction γ - cristal Les coefficients d'atténuation selon les différentes interactions que peuvent subir des photons dans le Ge et le CdTe sont présentées dans la figure 2.1. Dans les deux cas, on voit que la diffusion Compton domine sur la gamme d'énergie qui nous intéresse, entre 300 keV et 1 MeV. Cela signifie que le photon incident a plus de probabilité de subir une diffusion Compton en première interaction. Il va donc être dévié puis subir d'autres interactions jusqu'à avoir perdu suffisamment d'énergie pour que l'interaction photoélectrique devienne la plus probable, et qu'il transfere ainsi son énergie résiduelle à un électron du détecteur. Le problème est qu'il peut s'échapper du détecteur avant d'y avoir déposé toute son énergie, ce qui fausse la mesure (voir figure 2.2 page 33).



FIG. 2.1: Coefficient d'atténuation (μ/ρ) dans le germanium (à gauche) et dans le tellure de cadmium. Pour ces matériaux, la diffusion Compton domine dans la bande des rayons γ nucléaires. (source : XCOM database)

Collection des charges Pour collecter les charges produites dans le cristal, il faut un champ électrique élevé (~ 1000 V cm⁻¹). Cependant, même en prenant un cristal ultra pur et refroidi, et en appliquant la tension au travers de conducteurs ohmiques, on autorise l'échange de charge entre les électrodes et le cristal, ce qui provoque un courant de fuite beaucoup trop important pour que le dispositif soit utilisable. Pour prévenir ce phénomène, le principe de la jonction n-p est utilisé. Le cristal possède toujours des impuretés qui sont soit de type p, soit de type n¹. Un des contact est formé par une couche fortement dopée de l'espèce minoritaire du cristal, ce qui provoque l'apparition d'une zone de charge d'espace vidée de ses porteurs de charge majoritaires. L'application d'une tension inverse élevée entre les électrodes permet d'étendre cette zone de charge d'espace à tout le volume du cristal, depuis la jonction jusqu'à l'électrode opposée. Pour empêcher l'injonction de porteurs minoritaires au niveau de l'électrode opposée à la jonction n-p, celle ci est également dopée, mais cette fois ci de l'espèce majoritaire du cristal. On a ainsi un contact rectifiant (la jonction n-p) et un contact bloquant. Ce dispositif permet de diminuer fortement le courant de fuite dans le volume du cristal. Il faut aussi limiter le courant se propageant à la surface du cristal, ce qui est obtenu en passivant la surface lors de la fabrication, et en évitant toute contamination lors du montage et de l'utilisation.

Par cette méthode le volume de détection se retrouve vide de charges mobiles, tous les électrons étant dans la bande valence du cristal, et soumis à un important champ électrique. Un électron pourra passer dans la bande de conduction s'il reçoit plus d'énergie

¹Les impuretés de type p possèdent un électron de valence de moins que les atomes du cristal, ce qui créé des trous supplémentaires dans le cristal (équivalent de charges positives). Au contraire les impuretés de type n possèdent un électron de valence de plus que les atomes du cristal, ce qui fait que cet électron faiblement lié passe facilement dans la bande de conduction du cristal.

que le gap, la différence d'énergie entre le dernier niveau de la bande de valence et la bande de conduction du semi-conducteur. L'agitation thermique peut faire franchir ce gap à des électrons, ce qui cause l'apparition d'un courant de fuite. C'est pourquoi dans le cas du germanium (dont le gap est deux fois plus petit que celui du CdTe, voir le tableau 2.1), il est nécessaire de travailler à température cryogénique.

Les électrons primaires causés par les interactions du rayon γ incident vont ioniser d'autres atomes et produire d'autres électrons de conduction qui vont eux même être accélérés et ioniser d'autres atomes, et ainsi de suite. De plus les électrons qui quittent la bande de valence laissent un "trou", qui va immédiatement être comblé par un électron voisin, lui même laissant un trou à sa place d'origine. Ainsi les trous peuvent être vu comme des charges positives qui se déplacent en sens inverse des électrons. Les électrons et les trous sont ensuite collectés par les électrodes qui appliquent la haute tension. Ce signal est envoyé à un pré-amplificateur avant de suivre toute la chaîne de détection dont nous ne parlerons pas ici.

Résolution du spectromètre La résolution d'un détecteur se caractérise dans le cas d'une absorption totale (le photon incident dépose toute son énergie dans le détecteur) par la largeur à mi-hauteur du pic associé à des photons mono-énergétiques (typiquement une raie de désintégration nucléaire). De manière générale, la résolution dépend de plusieurs facteurs, la statistique du processus de création de charge, les propriétés de collection du détecteur (géométrie, champ électrique, qualité des contacts électriques, mobilité des porteurs), le bruit intrinsèque et le bruit induit par la chaîne d'acquisition.

Le germanium permet d'obtenir la meilleure résolution (voir tableau 2.2), mais pour cela il faut le refroidir à ~ 90 K. Les détecteurs en CdTe (et CdZnTe) présentent une résolution moindre, mais qui ne cesse de s'améliorer grâce à l'efforts de développement qui est fait partout dans le monde(voir les performances mesurées sur les pixels d'ECLAIRs actuellement en développement au CESR, tableau 2.2). En effet ces détecteurs peuvent être utilisés à température ambiante, ce qui simplifie beaucoup les choses pour une expérience embarquée sur satellite (plus de simplicité = moindre coût + fiabilité).

Instrument	matériau	Туре	Energie	Résolution	$\Delta E/E~[\%]$
			[keV]	[keV]	
SDI	Co	10 diados convintos	198	1,8	0,9
511	Ge	19 diodes coaxiales	1100	2,5	$0,\!23$
NCT	Co	planar strippé $1,5~{\rm cm}$	$59,\!53$	0,95	1,6
NOI	Ge	d'épaisseur	1000	2,5	0,25
ISCDI	CdTo	16384 pixels de $4x4x2$	100	8,0	8,0
199111	Cure	mm^3	500	24,5	4,9
ECLAIRs	CdTe	$1 \text{ pixel de } 4\text{x}4\text{x}1 \text{ mm}^3$	$59,\!53$	1,6	2,7

TAB. 2.2: Résolution de différents instruments utilisant des détecteurs en germanium ou en tellure de cadmium.

De manière générale, les impuretés et les défauts du cristal dégradent la résolution spectrale en ralentissant la migration des charges (surtout les trous), ce qui cause une collection incomplète du signal et provoque un étalement du pic vers les basses énergies. Dans le germanium, c'est la grande mobilité des porteurs et la qualité des cristaux de haute pureté (HPGe) qui permet d'atteindre de si bonne résolution. Cependant, après quelques temps dans l'espace les détecteurs en germanium se dégradent sous l'influence du bombardement des protons du rayonnement cosmique. Ceci peut être corrigé en effectuant un recuit, un réchauffement du germanium jusqu'à environ 100°C pendant plusieurs dizaines d'heures qui permet aux atomes déplacés de revenir à leurs positions d'origine.

Les détecteurs en CdTe, sont beaucoup moins sensibles aux effets des protons énergétiques de l'environnement spatial. Ils ne nécessitent donc pas ces recuits réguliers, ce qui ajoute encore à la simplicité de leur utilisation.

2.1.3 Télescopes à modulation d'ouverture

Les télescopes à modulation d'ouverture bloquent une partie du signal incident de façon à réaliser une modulation temporelle ou spatiale.

La modulation temporelle. Elle peut être obtenue de plusieurs manières, son grand avantage étant sa simplicité de mise en oeuvre. En effet dans sa version la plus simple, le télescope est constitué d'un détecteur entouré d'un collimateur limitant le champ de vue, la modulation étant assurée par le pointage de l'instrument. Par exemple le satellite HEAO-3 a balayé le ciel pendant 6 mois à l'aide de 4 détecteurs HPGe entourés d'un collimateur actif en NaI(Tl) leur conférant un champ de vue de 30°. Dans la même idée, mais déjà plus complexe, l'instrument CGRO-OSSE était composé de 4 détecteurs indépendants en NaI(Tl) pouvant pivoter selon un axe commun. Les détecteurs changeait de pointage toutes les deux minutes, ce qui permettait à la fois d'obtenir une modulation temporelle et un monitoring relativement fin du bruit de fond (e.g. [Johnson *et al.*, 1993]). L'utilisation de grilles et collimateurs tournants (c.f. HESSI [Lin et al., 1998]) est une autre alternative permettant de remonter à la position de la source par déconvolution de Fourrier des événements détectés. Finalement, la modulation temporelle la plus simple consiste à utiliser la Terre ou la Lune comme masque. Connaissant les positions relatives du satellite et de l'astre occulteur, il est possible de déterminer la position de la source à partir de la modulation du signal. Cette technique a été employée avec succès par SMM [Purcell et al., 1989] et CGRO-BATSE [Harmon et al., 1992], et est encore proposée aujourd'hui du fait de son très bon rapport performances / simplicité de mise en oeuvre (et donc faible coût) [Miller, 2007].

La modulation spatiale. Elle est obtenue en utilisant un masque codé, alternance d'éléments opaques et transparents couvrant le champ de vue. Un collimateur relie le plan de détection composé d'une matrice de détecteurs au masque de façon à éliminer le signal ne passant pas par le masque. Connaissant le motif du masque et la forme de l'ombre projetée sur le plan de détection, il est possible de déduire la direction de la source (principe du sténopé) [Fenimore et Cannon, 1981; Skinner *et al.*, 1987]. Dans le cas d'une source ponctuelle, cette méthode à l'avantage de procurer une mesure simultanée du bruit de fond et du signal (zone d'ombre et zone éclairée).



FIG. 2.2: Schéma de fonctionnement d'un détecteur HPGe de type SPI. Le cristal contient majoritairement des impuretés de type n, la jonction p-n est réalisé au niveau de l'anode en utilisant un dopant p⁺. La cathode est dopée n⁺ de façon a réaliser un contact bloquant. Différentes interactions sont représentées; les interactions γ -Ge : diffusion Compton (C), l'effet photoélectrique (P), la création de paires (Pa); ainsi que les interactions secondaires : rayonnement de freinage des électrons (B pour Bremsstrahlung), l'annihilation e⁺ e⁻ (A). Les photons γ sont représentés par des flèches ondulées, les e⁺ e⁻ en pointillés. Les paires électrons/trous créées le long des trajectoires secondaires sont symbolisées par des flèches à double sens ($t^+ \leftrightarrow e^-$). D'après Kandel [1998]



FIG. 2.3: Principe du télescope à masque codé. La forme de l'ombre du masque projetée sur le plan de détection permet de déterminer la direction de la source.

Le premier grand télescope γ spatial à masque codé, SIGMA à bord de l'observatoire spatial Russe GRANAT, fut opérationnel de 1989 à 1995 [Paul *et al.*, 1991]. En 2002, l'observatoire spatial X-dur et γ INTEGRAL a été lancé avec à son bord deux grands télescopes à masque codé : IBIS, dédié à l'imagerie haute résolution et SPI, plus performant en spectroscopie. Ces deux instruments, encore en service aujourd'hui, représentent quasiment la limite de cette technologie, aussi bien en imagerie qu'en sensibilité. Voici leurs caractéristiques :

IBIS est constitué d'un masque de 53x53 éléments opaques et transparents associé à deux plans de détection superposés (PICsIT : 4096 éléments de CsI, surmonté de ISGRI : une matrice de 16384 détecteurs en CdTe). Sa résolution angulaire est de 12 arcmin dans un champ de vue (entièrement codé) de 9°. A 1 MeV, la sensibilité de raie est de 4 10^{-4} ph/s/cm² (temps d'exposition de 10⁶s) avec une résolution énergétique de 5%. Une description détaillée de IBIS est donnée dans [Ubertini *et al.*, 2003].

SPI possède un masque de 63 éléments héxagonaux en tungstène. Le plan de détection est formé de 19 détecteurs HPGe, lui permettant de réaliser une excellente résolution spectrale sur sa gamme d'énergie s'étendant de 20 keV et 8 MeV. A 1 MeV (voir tableau 2.2). La sensibilité atteint 3 10^{-5} ph/s/cm² pour une raie fine, et 8 10^{-7} ph/s/cm²/keV pour un continuum [Roques *et al.*, 2003]. Pour limiter le bruit de fond, un blindage actif en BGO de 500 kg relie le plan de détection au masque (à comparer aux 20 kg que représentent les 19 détecteurs!).

2.1.4 Télescopes Compton

Comme nous pouvons le voir sur la figure 2.1, pour du Ge ou du CdTe, l'interaction la plus probable entre un photon γ et un détecteur est une diffusion Compton entre ~ 300 keV et 6 MeV. Dans ce type de diffusion, le photon cède une partie de son énergie à un

électron et est dévié d'un angle dépendant de son énergie initiale et de l'énergie cédée :

$$\varphi = \arccos\left[1 - m_e c^2 \left(\frac{1}{E_r} - \frac{1}{E_{tot}}\right)\right],\tag{2.1}$$

où φ est l'angle de diffusion, m_ec^2 est l'énergie de masse de l'électron, E_r est l'énergie transmise à l'électron (énergie de recul) et E_{tot} est l'énergie totale du photon incident. Les télescopes Compton utilisent ce principe pour déterminer la direction d'incidence des photons, comme illustré sur la figure 2.4. Dans leur version la plus simple, ils sont constitués de deux plans de détection superposés. Le premier est optimisé pour que les photons incidents n'y subissent qu'une seule interaction, en y déposant l'énergie E_1 . Le deuxième est beaucoup plus épais de façon à collecter toute l'énergie résiduelle du photon diffusé, E_2 . On peut alors assimiler E_1 à E_r et $E_1 + E_2$ à E_{tot} , ce qui permet de calculer l'angle de diffusion φ . La connaissance des positions (x_1, y_1) et (x_2, y_2) des deux interactions sur les plans de détection permet de remonter à la direction (χ, Ψ) . La position de la source est alors contrainte sur un cône d'ouverture φ et d'axe (χ, Ψ) . Plusieurs photons avec des énergies ou des angles de diffusion différents sont donc nécessaires pour remonter à la position exacte de la source.



FIG. 2.4: Principe du télescope Compton. Le photon incident subi une diffusion Compton dans le premier plan de détection et dépose toute son énergie résiduelle dans le second. La connaissance de la position des interactions et des énergies déposés permet de contraindre la position de la source sur un cercle. Plusieurs photons sont nécessaires pour déterminer précisément la position de la source.

Le système, qui a fait ses preuves (notamment avec le télescope COMPTEL), possède cependant des limitations. D'une part la résolution angulaire est limitée par plusieurs facteurs comme la résolution spatiale et spectrale des interactions dans les plans de détection. L'erreur sur la mesure de l'énergie déposée et sur sa localisation transforme le cercle de localisation de la source en un anneau de 1 à 2° d'angle solide. Même avec une très bonne résolution énergétique et une pixélisation fine, l'imprécision sur la mesure de l'énergie déposée due au fait que l'électron qui participe à l'interaction Compton ne soit pas libre et au repos constitue une limite physique à la résolution angulaire [Zoglauer

et Kanbach, 2003]. D'autre part, seule une petite fraction des événements se comportent selon le schéma idéal : une interaction Compton dans le premier plan de détection suivit d'une absorption totale dans le deuxième. Les énergies mesurées sont souvent incomplètes (interactions multiples dans le premier plan, dépôt d'énergie partiel dans le second), ce qui limite l'efficacité de détection a des valeurs généralement inférieure à 10 % (COMPTEL avait une efficacité de détection inférieure à 2 %!).

Mais malgré cette faible efficacité, les télescopes Compton affichent une bonne sensibilité grâce à une réjection efficace du bruit de fond. Par exemple, la forme du pulse détecté permet de discriminer les photons des particules du rayonnement cosmique dans le premier plan de détection. De plus, les événements n'ayant pas été détecté chronologiquement dans le plan supérieur avant le plan inférieur sont rejetés (la mesure du temps de vol nécessitant une résolution temporelle très élevée, 1 ns pour COMPTEL).

COMPTEL est le premier télescope Compton a avoir observé depuis un satellite (de 1991 à 2000 à bord du satellite CGRO). Sa gamme d'énergie s'étendait de ~ 0,5 à 30 MeV, avec une résolution de 8,8 % à 1,27 MeV. Sa résolution angulaire variait de 3,5° à 500 keV jusqu'à 1,25° à 10 MeV. Les surfaces géométriques du plan de diffusion et du plan inférieur étaient respectivement de 4200 et 8750 cm². Néanmoins, considérant l'efficacité de détection, la surface efficace se réduisaient à 10-50 cm², suivant le processus de sélection des événements opéré et l'énergie des événements. La sensibilité en raie fine à 1 MeV atteignait pourtant ~ 5 10^{-5} ph/s/cm² pour deux semaines d'observation. Une description détaillée de l'instrument est donnée dans [Schönfelder *et al.*, 1993].

2.1.4.1 Mesure de la polarisation à l'aide d'un télescope Compton

Lors d'une diffusion Compton, tous les angles de diffusion sont possibles mais ne sont pas équiprobables. Notamment, la polarisation de l'onde incidente influence l'angle azimutal de diffusion comme exprimé dans la formule de Klein-Nishina

$$\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{E'}{E}\right)^2 \left[\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - 2\sin^2\varphi\cos^2\phi\right],\tag{2.2}$$

où r_e est le rayon classique de l'électron, φ l'angle de diffusion, ϕ l'angle entre le plan de diffusion (défini par la direction d'incidence et la direction de diffusion) et le plan de polarisation (défini par la direction du champ électrique et la direction de propagation de l'onde), et E et E' respectivement les énergies des photons incident et diffusé. Cette formule s'interprète comme la section efficace différentielle de diffusion par effet Compton pour un photon incident d'énergie E dans l'angle solide $d\Omega = \sin \varphi \, d\varphi \, d\phi$. E, E' et l'angle de diffusion φ sont reliés par la formule

$$E' = \frac{E}{\left(1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \varphi)\right)} \tag{2.3}$$

L'efficacité relative d'un polarimètre est caractérisée par le facteur de modulation polarimétrique Q mesuré à l'aide d'un faisceau 100 % polarisé linéairement. Q est défini par

$$Q = \frac{N_{\perp} - N_{/\!\!/}}{N_{\perp} + N_{/\!\!/}} \tag{2.4}$$

où N_{\perp} et N_{\parallel} sont les comptages réalisés dans le plan perpendiculaire au faisceau incident, respectivement dans les directions perpendiculaire et parallèle à la direction de polarisation du faisceau. Le facteur Q peut donc s'écrire

$$Q = \frac{d\sigma_{KN}(\phi = 90) - d\sigma_{KN}(\phi = 0)}{d\sigma_{KN}(\phi = 90) + d\sigma_{KN}(\phi = 0)} = \frac{\sin^2 \varphi}{\frac{E}{E'} + \frac{E'}{E} - \sin^2 \varphi}$$
(2.5)

On voit sur la figure 2.5 que le facteur de modulation polarimétrique est maximisée pour des angles de diffusion φ proche de 90° dans la bande X-durs / γ mous, et que ces angles de diffusions restent probables.



FIG. 2.5: Section efficace (en barn) de diffusion Compton (graphique de droite) et facteur de modulation polarimétrique Q (graphique de gauche) en fonction de l'angle de diffusion φ (en degré) pour différentes énergies : jaune : 100 keV; vert : 300 keV; bleu : 500 keV; rouge : 1 MeV; cyan : 2 MeV.

Ainsi un plan de détection fin et pixelisé est optimal pour la mesure de la polarisation, puisque après avoir subi une diffusion Compton, les événements ayant été diffusés avec de petites ou grandes valeurs de φ - dont l'effet de la polarisation est moins évident sortent du plan de détection, alors que les événements ayant été diffusés avec un angle φ proche de 90° ont une probabilité plus forte de faire une deuxième interaction dans le détecteur. Ce type de détecteur plan peut ainsi permettre d'obtenir une statistique d'événements doubles suffisamment importante pour remonter à la polarisation de l'onde incidente, encore faut il que la source envoie un flux suffisamment important...

2.1.5 Instruments futurs

L'objectif dans l'avenir va être de continuer à améliorer la sensibilité et la résolution angulaire des télescopes. Les télescopes à masque codé ont le potentiel pour améliorer leur résolution angulaire en éloignant le masque du plan de détection (bien que cette distance soit déjà de 3,2 m dans le cas de IBIS), mais il sera difficile de gagner un facteur 10 (ou plus!) en sensibilité par rapports aux instruments à bord d'INTEGRAL dans la bande 100 keV - 1 MeV. En effet, augmenter la sensibilité implique d'augmenter la surface de collection sans augmenter le taux de comptage de bruit de fond, ce qui semble très difficile dans cette bande où le bruit de fond hadronique domine (par opposition à la bande inférieure à ~ 50 keV où le fond diffus cosmique est la source dominante de bruit de fond).



FIG. 2.6: Le télescope MEGA est constitué de trackers strippés en silicium entourés de calorimètres pixelisés en CsI. Ce télescope se base sur l'interaction Compton (avec suivit de l'électron de recul à partir de 2 MeV) et sur la création de paires à partir de 8 MeV.

Les télescopes Compton bénéficient actuellement de développements importants dans le but d'améliorer leurs performances. Une voie prometteuse pour améliorer la résolution angulaire et la sensibilité est l'*electron tracking*, le suivi de l'électron de recul lors d'une interaction Compton. C'est le principe proposé pour l'instrument MEGA (Medium Energy Gamma-ray Astronomy) [Kanbach *et al.*, 2003] qui est constitué d'une pile de détecteurs plans strippés en silicium (Si trackers) entourés de calorimètres pixellisés en CsI (figure 2.6). Opérationnel de 0.4 à 50 MeV, ce télescope utilise principalement à partir de ~ 8 MeV la création de paire en traquant à la fois l'électron et le positron. Lors d'une interaction Compton, le suivi de l'électron de recul devient possible à partir d'énergies de ~ 2 MeV, ce qui réduit l'incertitude sur la direction d'incidence du photon. MEGA aura une surface efficace de ~ 100 cm², un champ de vue de 130° et une résolution angulaire de 2°. Un prototype est actuellement développé et testé au MPE (Garching, Allemagne) [Kanbach *et al.*, 2005].

Un autre concept actuellement développé est le ACT (Advanced Compton Telescope) [Boggs, 2006]. Il s'agit d'un télescope Compton de haute résolution angulaire et spectrale basé sur un empilement de 27 détecteurs plans (2 mm d'épaisseur) strippés en silicium situés juste au dessus de 4 couches de détecteurs plan strippés en germanium de 16 mm d'épaisseur. La fine résolution spatiale ($\sim 1 \text{ mm}^3$) dans les détecteurs en Si associée au

Domaine d'énergie	$0,2 - 10 { m MeV}$
Résolution spectrale	$0{,}2$ - $1~\%$
Champ de vue	25%du ciel
Résolution angulaire	$\sim 1^{\circ}$
Localisation des sources ponctuelles	5
Surface collectrice	$12000~{ m cm}^2$
Surface efficace	$\sim 1000~{ m cm}^2$
Sensibilité en raie élargies (3%)	$1,2 \ 10^{-6} \ \mathrm{ph/s/cm^2}$
Sensibilité en raie fine	$5 \ 10^{-7} \ \mathrm{ph/s/cm^2}$

pouvoir d'arrêt et à la spectroscopie des détecteurs en germanium devrait permettre de localiser relativement finement les sources avec une bonne sensibilité dans un champ de vue large (voir tableau 2.3).

TAB. 2.3: Estimation des performances de l'Advanced Compton Telescope. Adapté de Boggs [2006].

Les télescopes Compton présentent l'avantage d'avoir de très grand champ de vue, ce qui est intéressant compte tenu des temps d'expositions nécessaire dans le domaine des rayons γ nucléaires (typiquement 2 semaines). Ils peuvent atteindre de très bonnes sensibilités, mais leur résolution angulaire est intrinsèquement limitée par l'élargissement Doppler dû au mouvement des électrons, surtout à basse énergie [Zoglauer et Kanbach, 2003].

Une lentille γ semble donc être le seul moyen d'améliorer à la fois la résolution angulaire et la sensibilité dans le domaine des rayons γ de faible énergie. Malheureusement, cela ne peut se faire qu'au prix d'un champ de vue extrêmement réduit, de l'ordre de quelques minutes d'arc, de même que pour tous les télescopes opérant dans les autres domaines de longueur d'onde. Cependant, tout dépend de la caméra qui est placée au foyer, on peut toujours imaginer de focaliser sur un ACT... [Wunderer *et al.*, 2004].

2.2 Principe d'une lentille de Laue

En 1914, le physicien Allemand Max von Laue (1879-1960) reçut le prix Nobel pour avoir prédit et mis en évidence (avec l'aide de Paul Knipping et Walter Friedrich) la diffraction des rayons X par un cristal. Cette découverte a démontré la nature ondulatoire de ce rayonnement en offrant les premières mesures de leur longueur d'onde et en révélant les arrangements atomiques dans les cristaux. Le principe d'une lentille γ , dite de Laue, se base sur la diffraction dans le volume de cristaux pour dévier et focaliser les rayons γ . En positionnant des cristaux en anneaux concentriques (ou en spirale) et en les orientant de sorte qu'il diffractent les rayonnements provenant de l'infini vers un point commun à tous les cristaux, alors on obtient une lentille (figure 2.7). La relation de Bragg relie l'énergie diffractée, E, à l'angle d'incidence des rayons sur les plans diffractants, θ_B , par l'intermédiaire de la distance interréticulaire, d_{hkl} :

$$2d_{hkl}\sin\theta_B = n\,\frac{hc}{E},\tag{2.6}$$

avec n, l'ordre de diffraction, h la constante de Planck et c la vitesse de la lumière. Il est très pratique dans cette formule de considérer hc = 12,3984 keV.Å, ce qui permet d'utiliser d_{hkl} et E dans des unités 'naturelles'. Comme schématisé sur la figure 2.7, du fait que l'angle d'incidence augmente lorsque le rayon augmente, l'énergie diffractée diminue à mesure que l'on va vers l'extérieur de la lentille. Cependant, tout dépend du matériau et de la réflexion utilisée, ce qui se résume en fait par la distance interréticulaire du matériau diffractant (cela ne concerne que l'énergie diffractée, pas l'efficacité de diffraction, cf. chapitre 3).

L'angle de Bragg est déterminé par des considérations géométriques. En effet, d'un point de vue macroscopique, tout se passe comme si les photons γ étaient réfléchis sur les plans cristallins, ce qui les dévie d'un angle égal à $2\theta_B$. Pour une lentille de focale f, l'angle de Bragg de l'anneau i, $\theta_{B,i}$ est lié au rayon moyen de l'anneau r_i :

$$\tan 2\theta_{B,i} = \frac{r_i}{f} \quad \Rightarrow \quad \theta_{B,i} \approx \frac{1}{2} \frac{r_i}{f} \tag{2.7}$$

L'approximation faite dans l'expression de droite est valide dans le cas de petits angles, ce qui est le cas avec des énergies supérieures à 100 keV.

L'énergie E_i diffractée par un anneau de rayon r_i est :

$$E_i = \frac{hc}{2d_{hkl,i}\sin\left(\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{r_i}{f}\right)\right)} \approx 12,3984 \frac{f}{d_{hkl,i}} [\text{keV}]$$
(2.8)

Il est possible de combiner différentes valeurs de d_{hkl} pour obtenir une bande passante de la forme souhaitée. On distingue deux types de lentilles de Laue, les lentilles à bande étroite et les lentilles à bande large.



FIG. 2.7: Principe de la lentille de Laue. Les rayon γ provenant d'une source située à l'infini sont diffractés dans le volume de cristaux disposés en anneaux concentriques vers un unique point, le point focal de la lentille.

Lentille à bande passante étroite C'est le cas du prototype de lentille CLAIRE qui a été réalisé et testé au CESR entre 1994 et 2003 (voir §2.3.2). Dans ce cas les anneaux

diffractent tous une bande passante centrée sur une unique énergie ($E_1 = E_2$ sur la figure 2.7), donnant une lentille dont la largeur de la bande passante est donnée par la moyenne de celle des anneaux (celle de l'anneau le plus interne est la plus large). Cela se traduit par une condition commune à tous les anneaux :

$$d_{hkl}\sin\theta_B = constante \tag{2.9}$$

Il vient donc la condition suivante : Pour réaliser une lentille à bande passante étroite, il faut que le produit de la distance interréticulaire par le rayon moyen de chaque anneau soit constant sur toute la lentille :

$$d_{hkl,i}r_i = constante \quad \forall i \tag{2.10}$$

Lentille à bande passante large Dans ce type de lentille, les bandes passantes des différents anneaux sont décalées les unes par rapport aux autres mais se recouvrent suffisamment pour que la couverture soit continue ($E_1 > E_2$ sur la figure 2.7). Avec les indices i des anneaux augmentant vers l'extérieur, la différence d'énergie entre deux anneaux consécutifs occupés par des cristaux du même matériau et utilisant les mêmes plans (hkl) est :

$$E_i - E_{i+1} = 12,3984 \frac{f}{d_{hkl}[\mathring{A}]} \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{r_{i+1}}\right) [\text{keV}]$$
(2.11)

$$\approx E_i \frac{r_{i+1} - r_i}{r_i}, \quad \text{pour } r_{i+1} - r_i \ll r_i \tag{2.12}$$

Par exemple, une lentille de 100 m de focale, dont les rayons compris entre 60 cm et 180 cm sont remplis de cristaux de cuivre diffractant avec leurs plans (111) couvrira la bande d'énergie comprise entre 330 keV et 990 keV.

Pour cela, cependant, il faut disposer de cristaux offrant une bande passante. Comme on peut le voir dans la formule de Bragg, à un angle d'incidence correspond une énergie diffractée. Si l'on veut que chaque cristal diffracte dans une bande passante, il faut que chaque cristal possède intrinsèquement une gamme d'orientation de ses plans cristallins. Il existe deux types de cristaux présentant une dispersion angulaire intéressante pour la réalisation d'une lentille gamma :

- les cristaux mosaïques
- les cristaux à plans courbes

Plusieurs types de cristaux mosaiques et une seule sorte de cristaux à plans courbes ont été étudiés lors de ce travail. Les résultats sont énoncés dans les deux chapitres suivants.

2.3 Evolution des lentilles de Laue

Les travaux précurseurs sur la diffraction dans les cristaux de C. G. Darwin [Darwin, 1914], et notamment dans les cristaux imparfaits [Darwin, 1922], de Gouy [1916] qui s'intéressa à la focalisation des rayons X, et de Dardord [1922] et Fermi [1923] qui chacun de leur coté mirent en application la méthode suggérée par Gouy permirent de faire

de grandes avancée vers le développement d'optiques pour les rayons X. Cependant, on était encore loin d'une application astrophysique. C'est à la fin des années soixante qu'un premier instrument à vocation astrophysique vit le jour; réalisé et testé à l'Université du Minnesota par un thésard entreprenant [Lindquist et Webber, 1968], ce télescope X utilisait une lentille faite de cristaux de sel focalisant les rayonnements dans la bande 20 - 140 keV (c.f. §2.3.1).

Plus tard, le potentiel de ce type de lentille pour des énergies plus hautes a été révélé par plusieurs équipes, notamment par Lund [1992] qui propose une étude détaillée de la conception d'un télescope γ basé sur une lentille de Laue pour la gamme 300 keV - 2 MeV. Dans ce travail, N. Lund détermine que le cuivre semble être le matériau le plus adapté pour la réalisation d'une lentille de Laue, avec éventuellement l'utilisation de cristaux d'or pour les hautes énergies. Il donne aussi la PSF de cette lentille pour des sources sur et hors de l'axe, démontrant le potentiel d'imagerie de la lentille de Laue. D'autres projets voient le jour avec notamment von Ballmoos et Smither [1994] qui proposent un concept de lentille à bande étroite centrée sur 511 keV pour étudier l'émission d'annihilation en provenance du centre galactique, depuis un vol sous ballon stratosphérique. Cette lentille qui utilise des cristaux de germanium mosaique comme matériaux diffractants, est le point de départ de ce qui deviendra la lentille CLAIRE (c.f. §2.3.2). En parallèle, des études ont été menées à l'Université de Ferrara (Italie) sur le développement d'une lentille focalisant dans la bande 60 keV - 600 keV, basée sur des cristaux de cuivre mosaïque [Pisa *et al.*, 2004].

Sur la base du cadre de la lentille CLAIRE, une lentille réglable constituée d'un anneau de cristaux de germanium mosaïque a été réalisée au CESR, en collaboration avec l'Argonne National Laboratory (Argonne, Illinois, USA). Cette lentille a démontré la faisabilité du concept en focalisant différentes raies d'énergie comprise entre 276 keV et 662 keV, le changement d'orientation des cristaux étant assuré par des vis actionnées par piezzo-électriques. Un changement d'énergie s'accompagnait d'un changement de longueur focale [Kohnle *et al.*, 1998].

La possibilité d'utiliser des cristaux alternatifs aux cristaux mosaiques pour la réalisation d'une lentille de Laue tels que des cristaux à plans courbes, ou à gradient de maille a été évoqué pour la première fois par Smither [1982]. L'option des cristaux à plans courbes produits par un alliage de métaux à gradient de concentration est étudié en détail dans cette thèse, les premiers résultats expérimentaux sont reportées dans Barrière *et al.* [2006].

2.3.1 La première lentille de Laue : focalisation X

Le premier télescope utilisant une lentille de Laue focalisait les rayons X durs de la bande 10 - 100 keV, avec une surface efficace culminant à 30 cm² entre 30 et 40 keV, ce qui représentait un gain de l'ordre de 3,5 (surface efficace / surface du spot focal). Ce télescope fut réalisé au milieu des années soixante à la school of physics and astronomy de l'Université du Minnesota par un thésard [Lindquist et Webber, 1968]. La lentille était composée de 4000 cristaux de sel (NaCl) mesurant 25,4 mm x 20,3 mm de surface et de $\sim 1^{\circ}$ de mosaicité. Les cristaux étaient répartis en 32 anneaux concentriques sur un cadre parabolique placé 1,45 m devant le détecteur. Le gros avantage des cristaux de sel est qu'ils ont une structure cristalline cubique et qu'ils clivent en parallélépipèdes selon les

plans cristallins. Ainsi, en disposant les cristaux tangentiellement au cadre (usiné avec une précision meilleure que 1°), il a été possible d'orienter les cristaux de sorte qu'ils focalisent sur le détecteur les rayonnements provenant d'une source ponctuelle située sur l'axe de visée.

La condition sur le profil du cadre pour qu'un rayon arrivant parallèle à l'axe de visée (axe z) soit réfléchi par un plan normal au cadre et perpendiculaire à un rayon vers le centre du détecteur est donnée par les deux équations suivantes :

$$\frac{dz}{dy} = \begin{cases} \tan \theta, & y \ge 0, \\ -\tan \theta, & y \le 0, \end{cases}$$
(2.13)

avec les coordonnées du point où la reflexion se produit données par

$$\left|\frac{y}{z}\right| = \tan 2\theta. \tag{2.14}$$

Les deux conditions 2.13 et 2.14 sont satisfaites par une parabole

$$z(y) = z_0 - \frac{y^2}{4z_0} = \frac{R}{2} - \frac{y^2}{2R},$$
(2.15)

avec z_0 égal à la focale de la lentille et R le rayon de courbure du cadre dans la limite $\left|\frac{y}{z}\right| \ll 1$ où le profil du cadre tend vers un arc de cercle

Au foyer le détecteur était un scintillateur NaI couplé à un photomultiplicateur, entouré d'un blindage actif en CsI. Ce télescope a effectué un vol sous ballon stratosphérique de 12h à partir de Palestine (Texas, USA) le 30 avril 1968. Plusieurs cibles astrophysiques ont été pointées, mais seule la nébuleuse du Crabe a pu être détectée avec certitude [Lindquist, 1971].

2.3.2 La lentille CLAIRE : focalisation γ

La lentille CLAIRE a été réalisée et testé au CESR entre 1995 et 2003 sous la direction de von Ballmoos *et al.* [2004]. Cette lentille comporte 556 cristaux de germanium (10 x 10 mm² et 7 x 10 mm²) de mosaicité comprise entre 1 et 2 arcmin. Les cristaux sont répartis sur 8 anneaux concentriques, chaque anneau utilisant une réflexion différente dans le but de focaliser dans une bande bande passante étroite ($\sim 3 \text{ keV}$) centrée sur 170 keV, comme l'indique l'équation 2.10 (voir le tableau 2.4). La focale de la lentille est de 2,76 m.

Chaque cristal est collé sur une plaquette d'aluminium qui est fixée sur le cadre en titane de la lentille par une vis fixe à une extrémité, et par une vis de réglage à l'autre extrémité (figure 2.8). L'orientation de chaque cristal a ainsi pu être réglée de façon indépendante. Le réglage des cristaux a été effectué sur un banc optique X dans la salle d'intégration du CESR, comportant un générateur de rayons X d'un coté et un détecteur en germanium de haute pureté de l'autre coté. Un masque permettait de sélectionner le cristal qui recevait le flux. L'orientation des cristaux a été réglée en fonction de l'énergie diffractée sur le détecteur [Halloin, 2003].

La lentille CLAIRE a été testée au sol dans plusieurs conditions, dont un test en extérieur, la lentille étant placée à 205 m d'un générateur de rayons X industriel (générateur



FIG. 2.8: La lentille CLAIRE en cours d'assemblage. On peut voir que les deux anneaux extérieurs sont vides. Pour gagner en compacité, les cristaux sont fixés sur le cadre de la lentille alternativement par l'avant et par l'arrière d'un anneau au suivant.

Anneau	Réflexion	Nbre de	Taille	Rayon moyen	$\mathbf{r}_{moy}.\mathbf{d}_{hkl}$
	hkl	$\operatorname{cristaux}$	(mm^2)	(mm)	$(\mathrm{mm.\AA})$
0	111	28	10x10	61,7	$201,\!6$
1	220	52	10x10	100,8	201,7
2	311	56	10x10	118,2	201,7
3	400	72	10x10	$142,\! 6$	201,7
4	331	80	10x7	$156,\!18$	202,7
5	422	88	10x10	$174,\!64$	201,7
6	333	96	10x7	$188,\!15$	204,9
7	440	104	10x10	$201,\!67$	201,7

TAB. 2.4: Caractéristiques dimensionnelles de la lentille CLAIRE, d'après Halloin [2003].

à tube) assurant un flux suffisant à 165 keV, l'énergie focalisée pour une source à cette distance. Ce test permit de mesurer précisément la réflectivité de la lentille à $8,5 \pm 1 \%$ et de vérifier l'accord entre les modèles et les données lors notamment d'une source hors de l'axe [von Ballmoos *et al.*, 2005a].

La lentille CLAIRE a volé deux fois sous des ballons stratosphériques, le premier vol étant un vol de validation technologique des systèmes de pointage. Le détecteur était constitué d'une matrice 3x3 de détecteurs HPGe refroidis à l'azote liquide (chaque détecteur mesurant 15x15x40mm³), entouré d'un collimateur passif. Lors du second vol, le 14 Juin 2001, la matrice était entourée d'un blindage actif en CsI, surmonté d'un collimateur lui aussi en CsI, l'ensemble reposant sur un cylindre de BGO. Ce vol eut lieu depuis Gap-Tallard (France) pour une durée au plafond de 6h. Lors de ce vol, la nébuleuse du Crabe a pu être détectée en dépit de problèmes de pointage de la nacelle [Halloin *et al.*, 2004]

Chapitre 3

Diffraction des rayons X et γ dans les cristaux

Dans ce chapitre nous allons aborder la théorie de la diffraction dans les cristaux, en commençant par le cas le plus simple, la théorie géométrique dans un cristal idéal. Nous verrons les limites de cette théorie qui ne s'applique qu'aux cristaux très fins en comparaison de la longueur d'extinction (longueur caractéristique dans un cristal qui est présentée dans ce chapitre), ce qui nous amènera à considérer les résultats de la théorie dynamique pour pouvoir aborder le cas général. Cette théorie est utilisée ici pour établir les résultats qui nous seront d'un usage permanent par la suite, i.e. comprendre et prédire la diffraction dans les cristaux mosaïques et dans les cristaux à plans courbes, ce qui revient à prédire les directions de diffraction et les intensités diffractées.

3.1 Notions utiles de cristallographie

3.1.1 Définition d'un cristal

Un cristal est un solide formé d'un empilement ordonné d'un grand nombre d'atomes, de molécules ou d'ions. Il est constitué par la répétition périodique dans les trois dimensions de l'espace d'un motif constituant un réseau, les motifs étant placés aux noeuds du réseau. Dans ce réseau, on définit la maille élémentaire comme l'ensemble minimum de noeuds permettant de reconstruire entièrement le cristal par translation selon trois vecteurs linéairement indépendants notés \vec{a} , \vec{b} , et \vec{c} (Remarque : le choix de ces trois vecteurs n'est pas unique, on peut donc définir plusieurs mailles élémentaires qui pourront ne pas présenter les mêmes symétries). Souvent pour des raisons de commodité ou pour faire ressortir la symétrie, on utilise pour décrire le cristal une maille multiple, contenant plusieurs nœuds et qui n'est donc pas élémentaire. Le volume d'une maille V_m est :

$$V_m = \vec{a} \cdot \left(\vec{b} \times \vec{c}\right) \tag{3.1}$$

Il existe 14 types de réseau différents en trois dimensions, qui constituent les réseaux de Bravais. Chacun possède des groupes d'espace et des groupes ponctuels de symétries différents. Ces 14 réseaux de Bravais sont représentés sur la figure 3.1 page 47.

3.1.2 Plans réticulaires d'un cristal

Suivant l'angle sous lequel on regarde le cristal, les points du réseau peuvent être regroupés en différentes familles de plans. Une famille de plans réticulaires est déterminée par les noeuds contenus dans le plan passant le plus près de l'origine du repère défini par les vecteurs \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} . Elle est identifiée par ses indices de Miller notés (hkl) qui sont définis comme suit :

Soit un plan coupant les 3 directions associées aux vecteurs unitaires $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ respectivement en A, B et C.

$$\begin{array}{ll} A\left(u,0,0\right) & OA = u \, a \\ B\left(0,v,0\right) \ \Rightarrow \ OB = v \, b \\ C\left(0,0,w\right) & OC = w \, c, \end{array}$$

où u, v et w sont des entiers.

En prenant 1/u, 1/v et 1/w et en les multipliant par le plus petit entier qui permet d'obtenir 3 nombres entiers, on obtient trois nombres premiers entre eux qui constituent les indices de Miller h, k et l respectivement (figure 3.2). Le fait que les indices (hkl)décrivent non pas un plan unique mais une famille de plans parallèles est dû au fait que le cristal est périodique par translation d'un nombre entier de fois $\vec{a}, \vec{b}, \text{ ou } \vec{c}$.

3.1.3 Notations

-(hkl) fait référence à une famille de plans réticulaires.



FIG. 3.1: Les 14 réseaux de Bravais. α , β et γ sont respectivement les angles entre \vec{a} et \vec{b} , \vec{b} et \vec{c} , et \vec{a} et \vec{c} .



FIG. 3.2: Exemples de plans réticulaires dans une maille cubique.

- [hkl] fait référence à la direction perpendiculaire aux plans (hkl).

-hkl fait référence à une réflexion.

Par exemple, dans le germanium on parlera des réflexions 440 et 220 sur les plans (110) (la réflexion 110 étant éteinte dans la maille diamant, c.f. page 64).

3.1.4 Le réseau réciproque

En radiocristallographie, il est utile de considérer un autre réseau que l'on appelle réseau réciproque. Il s'agit d'un concept purement géométrique (introduit par Ewald en 1921), qui n'a pas la signification physique du réseau structural, mais qui permet de considérer de façon plus pratique les plans cristallins, leurs directions et les intervalles réticulaires. A partir du réseau direct caractérisé par la base vectorielle $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, on peut construire un réseau imaginaire de points tel que chacun de ses points comporte une relation de réciprocité avec le réseau initial. La base du réseau réciproque est notée $(\vec{a^*}, \vec{b^*}, \vec{c^*})$, et se définie comme suit :

$$\vec{a^*} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V_m}, \quad \vec{b^*} = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V_m}, \quad \vec{c^*} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V_m}$$

$$(3.2)$$

Il en découle les 9 relations suivantes :

$$\begin{split} \vec{a^*}.\vec{a} &= 1 \ , \quad \vec{a^*}.\vec{b} = 0 \ , \quad \vec{a^*}.\vec{c} = 0 \\ \vec{b^*}.\vec{a} &= 0 \ , \quad \vec{b^*}.\vec{b} = 1 \ , \quad \vec{b^*}.\vec{c} = 0 \\ \vec{c^*}.\vec{a} &= 0 \ , \quad \vec{c^*}.\vec{b} = 0 \ , \quad \vec{c^*}.\vec{c} = 1 \end{split}$$

De plus, en notant V_m^* le volume de la maille dans le réseau réciproque, on montre que $V_m^* V_m = 1$.

Dans le réseau réciproque, chaque rangée de points passant par l'origine représente une famille de plans réticulaires du réseau direct. Le vecteur du réseau réciproque qui définit une rangée passant par l'origine $d_{hkl}^{\vec{*}} = h\vec{a^*} + k\vec{b^*} + l\vec{c^*}$ (avec h, k, l entiers) a donc les propriétés suivantes :

- Sa direction est normale aux plans réticulaires directs;
- Sa norme d^* est l'inverse de la distance d_{hkl} entre les plans réticulaires (dans le cas où h, k, l sont premiers entre eux).

La distance inter-réticulaire d_{hkl} est :

$$d_{hkl} = 1/d^*$$

$$= \frac{1}{\sqrt{h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hk a^* b^* \cos \gamma^* + 2kl b^* c^* \cos \alpha^* + 2hl a^* c^* \cos \beta^*}}$$

Cette relation se simplifie dans le cas d'un réseau cubique $(a^* = a^{-1}; b^* = b^{-1}; c^* = c^{-1}$ et $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$)

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \tag{3.3}$$

Le tableau 3.1 donne quelques exemples de distances inter-réticulaires.

Enfin, une propriété très importante est que les angles sont conservés lors du passage de l'espace direct à l'espace réciproque : l'angle entre deux directions dans l'espace direct reste le même dans l'espace réciproque.

Elément	Maille	a	d_{111}	d_{200}	d_{220}	d_{222}	d_{311}
Carbone	diamant	$3,\!56679$	2,05929	1,78340	1,26105	1,02924	$1,\!07543$
Aluminium	cfc	4,05000	$2,\!33827$	2,02500	$1,\!43189$	1,16913	1,22112
Silicium	diamant	$5,\!43070$	$3,\!13542$	2,71535	1,92004	1,56771	$1,\!63742$
Cuivre	cfc	$3,\!61496$	2,08710	$1,\!80748$	$1,\!27808$	1,04355	1,08995
Germanium	diamant	$5,\!65735$	$3,\!26627$	2,82868	2,00018	$1,\!63314$	1,70576
Or	cfc	4,07820	$2,\!35455$	$2,\!03910$	$1,\!44186$	$1,\!17727$	$1,\!22962$

TAB. 3.1: Type de maille, paramètre de maille (en Angström) et distances inter-réticulaires (en Angström) associées à diverses réflexions pour quelques éléments.

3.1.5 La construction d'Ewald



FIG. 3.3: Définition du vecteur de diffusion \vec{H} . $\|\vec{k}_0\| = \|\vec{k}_h\| = 1/\lambda$, $\|\vec{H}\| = 2\sin\theta/\lambda$.

P.P. Ewald a proposé une construction graphique particulièrement utile dans la recherche des directions de diffraction. Elle est basée sur la transcription géométrique des deux équations vectorielles auxquelles le vecteur diffusion \vec{H} doit satisfaire, la première de ces équations étant la définition du vecteur diffusion :

$$\vec{H} = \vec{k}_h - \vec{k}_0, \tag{3.4}$$

 \vec{k}_0 et \vec{k}_h étant respectivement les vecteurs d'onde des ondes incidentes et diffractées, avec $\|\vec{k}_0\| = \|\vec{k}_h\| = 1/\lambda$. La seconde exige que \vec{H} soit un vecteur du réseau réciproque :

$$\vec{H} = H\vec{a^*} + K\vec{b^*} + L\vec{c^*}$$
(3.5)

Avec(H, K, L) = n(h, k, l) et h, k, l premiers entre eux.

Traçons une sphère de rayon $1/\lambda$ et repérons par un rayon le vecteur direction d'incidence $\vec{k_0}$ partant du centre O pour aboutir en un point P_1 de la sphère. Tout vecteur $\vec{k_h}$


FIG. 3.4: Construction d'Ewald

sera un autre rayon touchant la sphère en un point que nous appelerons P'. On a donc $\overrightarrow{P_1P'} = \overrightarrow{H}$, ce qui signifie que \overrightarrow{H} doit aller d'un point à un autre d'une surface sphérique de rayon λ^{-1} pour être conforme à la relation (3.4). Cette surface est appelée sphère d'Ewald.

Pour prendre en compte la deuxième équation, il suffit de superposer la sphère d'Ewald au réseau réciproque (en adoptant la même échelle pour représenter a^* , b^* , c^* et λ^{-1}). En prenant le point P_1 défini précédemment comme origine du réseau réciproque, la relation (3.5) est vérifiée si le vecteur \vec{H} a son extrémité sur un noeud du réseau (Figure 3.4). Il y a donc diffraction si un noeud du réseau réciproque entre en contact avec la sphère d'Ewald. Dans ce cas, la direction de diffraction est donnée par le rayon joignant le centre de la sphère d'Ewald au point qui touche la sphère.

On s'aperçoit que pour une orientation donnée du cristal (et par conséquent du réseau réciproque) par rapport à une certaine orientation de la direction d'incidence du faisceau de rayons X (vecteur $\overrightarrow{OP_1}$ de la construction d'Ewald), le nombre de noeuds en coïncidence avec la surface sphérique est très petit, voire nul. C'est pourquoi la plupart des dispositifs expérimentaux d'étude du spectre diffracté permettent de faire tourner le cristal dans le faisceau de rayons X, de façon à trouver le bon angle d'incidence.

3.1.6 La relation de Bragg

L'équation fondamentale (3.5) régissant la diffraction dans les cristaux, qui associe le vecteur diffusion à un vecteur du réseau réciproque, est représentée par la construction d'Ewald dans l'espace réciproque, et se transpose dans l'espace direct par la relation de Bragg.

En effet, si l'on considère un vecteur du réseau réciproque $\vec{r} = h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}$ (avec *h*, *k*, *l* entiers), sa norme est $\|\vec{r}\| = 1/d_{hkl}$. On pose que l'angle entre $-\vec{k_0}$ et $\vec{k_h}$ est égal à 2θ . Lorsqu'il y a diffraction, d'après l'équation (3.5) $\|\vec{H}\| = 1/d_{HKL}$, et l'on voit sur la



FIG. 3.5: Interprétation de la relation de Bragg dans l'espace réel : Pour qu'il y ait diffraction, la différence de marche $\Delta_1 - \Delta_2$ doit être égale à un nombre de fois entier la longueur d'onde λ . Lorsque la relation de Bragg est satisfaite, d'un point de vue macroscopique, la diffraction peut être vue comme une réflexion sur les plans réticulaires.

figure 3.3 que

$$\|\vec{H}\| = 2\sin\theta / \lambda. \tag{3.6}$$

Il en découle la relation de Bragg :

$$2\,d_{HKL}\,\sin\theta = \lambda\tag{3.7}$$

Remarque : Si l'on ramène (H, K, L) a des nombre premiers entre eux avec n leur plus grand diviseur commun tel que (H, K, L) = n(h, k, l) alors la relation de Bragg s'écrit

$$2\,d_{hkl}\,\sin\theta = n\lambda\,,\tag{3.8}$$

où n est l'ordre de la diffraction. On notera cependant qu'il est souvent plus pratique de se référer à la réflexion 222 qu'à la réflexion 111 du deuxième ordre.

La relation de Bragg peut être interprétée de façon physique comme la condition pour avoir des réflexions en phases sur les plans réticulaires successifs (figure 3.5) : Pour que les ondes réfléchies par deux plans réticulaires soient en phases, la différence de trajet parcourues par ces deux ondes doit être égale à un nombre entier n de fois la longueur d'onde λ .

$$\Delta_1 - \Delta_2 = n\lambda$$

or $\Delta_1 = d_{hkl} / \sin \theta$ et $\Delta_2 = \Delta_1 \cos 2\theta$
 $\implies 2 d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$

On retrouve bien la relation de Bragg.



FIG. 3.6: Les géométries de Laue et de Bragg. Les traits dans les cristaux symbolisent les plans réticulaires. L'angle d'incidence satisfaisant la relation de Bragg est noté θ_B . α est l'angle d'asymétrie.

3.1.7 Géométries de diffraction

On distingue deux géométries de diffraction, suivant que les rayons incidents et diffractés pénètrent et sortent du cristal par la même face (Bragg) ou par les faces opposées (Laue) (figure 3.6). Le choix de la géométrie de diffraction influe sur la découpe du cristal, en particulier sur la valeur de l'angle d'asymétrie, qui est l'angle entre les plans réticulaires considérés et la face d'entrée du cristal. En règle générale si $\alpha > \theta_B$, alors on est en géométrie de Laue.

Pour une lentille gamma, on ne s'intéresse qu'à la géométrie de Laue dans le but d'utiliser toute la face d'entrée du cristal comme surface collectrice, ce qui serait bien moins efficace en géométrie de Bragg étant donné les très petits angles de Bragg (typiquement inférieur au degré) imposés par les rayonnements de haute énergie. Par exemple, pour avoir un faisceau diffracté de 1 x 1 cm en géométrie de Bragg, un cristal de cuivre suivant la réflexion 111 devrait dépasser les 30 cm de long à 100 keV, et dépasser les 3 m à 1 MeV. Cela explique le choix de la géométrie de Laue qui présente pourtant l'inconvénient d'absorber une partie du rayonnement lors de la traversée du cristal. On s'intéresse en particulier au cas Laue symétrique (représenté sur la figure 3.6) défini par $\alpha = 90^{\circ}$.

3.2 Diffraction par un réseau cristallin idéal

Dans cette section, nous allons considérer seulement les rayons X, mais les résultats finaux sur la diffraction dans les cristaux seront applicables aussi aux rayons γ ainsi qu'aux neutrons.

Dans un premier temps, nous allons nous intéresser à la diffraction des rayons X dans un cristal parfait. Bien qu'approximative¹, la théorie géométrique de la diffraction (aussi appelée théorie cinématique) offre une approche relativement intuitive de la diffraction dans les cristaux. Nous verrons ensuite la théorie dynamique qui décrit de façon plus

¹Cette théorie considère que tous les atomes du cristal reçoivent le même flux incident, ce qui est inexact puisque les atomes des couches supérieures interagissent avec l'onde incidente. Cette théorie donne cependant d'excellents résultats dans le cas de cristaux fins (relativement à la longueur d'extinction).

exacte la diffraction, mais au prix d'une complexité bien supérieure. Cette théorie est cependant nécessaire pour décrire la diffraction dans un cristal déformé (par exemple un cristal à plans réticulaires courbes).

3.2.1 Diffusion de Thomson par un électron

Soit un électron au repos de masse m_e et de charge e, placé en O. Cet électron se trouve sur le trajet d'une onde plane de rayons X se propageant selon Ox, polarisée rectilignement selon $\vec{e_z}$ et caractérisée par son vecteur champ électrique $\vec{E} = E_0 e^{2\pi i (k_0 x - \nu t)} \vec{e_z}$, $\vec{k_0} = k_0 \vec{x}$ étant le vecteur d'onde de norme $k_0 = 1/\lambda$ (figure 3.7). On néglige ici les effets relativistes et l'électron est supposé libre.

L'électron est alors soumis à la force de Lorentz $\vec{F} = e [\vec{E} + \vec{v} \times \vec{H}]$, qui peut se réduire à $\vec{F} = e \vec{E}$ car la célérité v de l'électron est petite devant celle de la lumière. Cette force produit une accélération $\vec{a} = e E/m \vec{e_z}$ ce qui fait entrer l'électron en oscillation. D'après la théorie classique de l'électromagnétisme, toute charge électrique accélérée émet du rayonnement. Thomson a montré que le champ produit est une une onde sphérique s'écrivant :

$$\vec{E}_d(R,t) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e c^2} \frac{\sin\psi}{R} E_0 e^{2\pi i \left(\vec{k}_0 \vec{R} - \nu (t - \frac{R}{c})\right)} \vec{e_\theta}$$
(3.9)

Avec :

- R la distance à l'origine dans la direction de l'observateur (direction de diffusion \overrightarrow{OM})
- $-\psi$ l'angle entre la direction d'accélération de l'électron (direction de polarisation de l'onde incidente) et la direction d'observation.
- Le terme $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e c^2}$ a la dimension d'une longueur, c'est *la longueur de diffusion* ou rayon classique de l'électron $r_e \approx 2,817940 \ 10^{-15}$ m.

Lorsqu'on se place à une distance R très supérieure à la taille de l'oscillateur, l'onde diffusée traversant une petite surface peut être assimilée à une onde plane. L'intensité diffusée est donnée par le carré de l'amplitude de l'onde :

$$I_e = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e c^2} \frac{\sin\psi}{R} E_0\right)^2 \tag{3.10}$$

$$= I_0 \left(\frac{r_e}{R}\right)^2 \sin^2 \psi \tag{3.11}$$

On remarque que cette intensité est inversement proportionnelle au carré de la masse de la particule qui diffuse. Cela veut dire que le plus léger des noyaux, le proton, ne diffuse déjà plus qu'une onde d'amplitude 1836² fois plus petite que celle d'un l'électron. On peut donc raisonnablement considérer que seuls les électrons diffusent le rayonnement.

3.2.2 Effet de la polarisation

L'amplitude de l'onde diffusée est donnée par ψ , l'angle entre la direction de polarisation de \vec{E}_0 et la direction de diffusion \overrightarrow{OM} . Nous allons exprimer ψ par les angles α et 2θ



FIG. 3.7: Diffusion de Thomson par un électron dans un repère sphérique. \overrightarrow{OM} indique la direction de diffusion (de l'observateur), ψ est l'angle entre la direction de polarisation de l'onde incidente et la direction de diffusion, 2θ est l'angle entre le faisceau incident et le faisceau diffusé. Le plan gris clair, défini par (Ox, OM) est le plan de diffusion. α marque l'angle entre le plan de diffusion et la direction de polarisation de l'onde incidente. Le trait en pointillé est l'intersection des plans gris clair et gris foncé, il représente la projection de $\vec{E_0}$ sur le plan de diffusion.

visibles sur la figure 3.7. On décompose \vec{E}_0 en $\vec{E}_{0/\!\!/}$ et $\vec{E}_{0\perp}$ respectivement dans le plan de diffusion et sur sa normale :

$$\|\vec{E}_{0\perp}\| = \|\vec{E}_0\|\sin\alpha$$
$$\|\vec{E}_{0/\!/}\| = \|\vec{E}_0\|\cos\alpha$$

La composante de $\vec{E}_{0/\!\!/}$ parallèle au plan de diffusion forme un angle de $\pi/2 - 2\theta$ avec \overrightarrow{OM} , d'où :

$$\|\vec{E}_{d\perp}\| = \|\vec{E}_{0\perp}\| \frac{r_e}{R} = \|\vec{E}_0\| \frac{r_e}{R} \sin \alpha$$
$$\|\vec{E}_{d\parallel}\| = \|\vec{E}_{0\parallel}\| \frac{r_e}{R} = \|\vec{E}_0\| \frac{r_e}{R} \cos \alpha \sin(\frac{\pi}{2} - 2\theta) = \|\vec{E}_0\| \frac{r_e}{R} \cos \alpha \cos 2\theta$$

L'amplitude totale diffusée est :

$$\|\vec{E}_d\| = \|\vec{E}_0\| \frac{r_e}{R} \sqrt{\cos^2 \alpha \, \cos^2 2\theta + \sin^2 \alpha},\tag{3.12}$$

Et l'intensité diffusée par l'électron est

$$I_e = I_0 \left(\frac{r_e}{R}\right)^2 \left(\cos^2\alpha \, \cos^2 2\theta + \sin^2\alpha\right),\tag{3.13}$$

qui se met sous la forme

$$I_e = I_0 \left(\frac{r_e}{R}\right)^2 C^2 \tag{3.14}$$

avec $C^2 = \cos^2 \alpha \, \cos^2 2\theta + \sin^2 \alpha$ le facteur de polarisation.

On calcule les valeurs de C^2 pour les trois cas caractéristiques : $\alpha = 0$, la polarisation de l'onde incidente est parallèle au plan de diffusion (π -polarisation); $\alpha = \pi/2$, l'onde est polarisée perpendiculairement au plan de diffusion (σ -polarisation). Le cas d'une onde non polarisée se résout en moyennant le facteur de polarisation par rapport à α , avec $< \cos^2 \alpha > = < \sin^2 \alpha > = 1/2$. On obtient :

$$C^{2} = \begin{cases} 1 & \sigma \text{-polarisation} \\ \cos^{2} 2\theta & \pi \text{-polarisation} \\ \frac{1+\cos^{2} 2\theta}{2} & \text{onde non polarisée} \end{cases}$$
(3.15)

Dans le cadre de la diffraction des rayons γ , la diffusion cohérente met en jeu de très petits angles de déviation du faisceau incident, typiquement inférieurs au degré. Or le facteur de polarisation dépend de cet angle de déviation, 2θ . Ainsi, la diffraction dans les cristaux n'affecte pas la polarisation de l'onde, et les effets de modulation de l'intensité en fonction de la polarisation sont négligeable pour notre application.

3.2.3 Diffusion par une distribution périodique d'électrons

Nous allons maintenant déterminer les amplitudes et les directions des ondes diffusées dans le cas d'un un milieu périodique ayant une distribution de densité électronique continue $\rho(\vec{r})$. Le nombre d'électrons dans un volume élémentaire $d\tau$ centré sur la position \vec{r} est $\rho(\vec{r})d\tau$. Ainsi l'amplitude du rayonnement diffracté par cet élément de volume est (vu depuis une distance $R \gg ||\vec{r}||$) :

$$E_0 \, \frac{r_e}{R} \, |C| \, \rho(\vec{r}) d\tau$$

Pour alléger les notations, nous posons :

$$\mathcal{A}_e = \frac{r_e}{R} \left| C \right| \exp(-2\pi i \nu t) \tag{3.16}$$

En fixant l'origine des phases sur une onde plane passant au point O, la phase de l'onde diffusée par le centre diffuseur situé au point P défini par $\vec{r} = \vec{OP}$ est $2\pi i (\vec{k_h} - \vec{k_0}) \cdot \vec{r}$ et l'amplitude diffusée par l'élément de volume autour de P est

$$\mathcal{A}_e \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{H}.\vec{r}} \, d\tau, \tag{3.17}$$

avec $\vec{H} = \vec{k}_h - \vec{k}_0$ le vecteur de diffraction².

L'amplitude totale diffractée par le milieu est

$$\mathcal{A}(\vec{H}) = \mathcal{A}_e \iiint_V \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{H} \cdot \vec{r}} d\tau$$
(3.18)

²Comme cela va être établi dans cette section, la diffusion cohérente par une distribution périodique d'électrons est à l'origine de la diffraction. On peut donc maintenant parler de vecteur de diffraction au lieu de vecteur de diffusion.

En considérant un milieu de forme définie par la fonction $y(\vec{r})$, dont la valeur vaut 1 dans le milieu et 0 à l'extérieur, l'amplitude diffusée peut être écrite comme :

$$\mathcal{A}(\vec{H}) = \mathcal{A}_e \sin \psi \, \iiint_{-\infty}^{\infty} y(\vec{r}) \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{H} \cdot \vec{r}} \, d\tau \tag{3.19}$$

Cette dernière expression montre que la distribution des amplitudes diffusées est proportionnelle à la transformée de Fourier du produit de la forme du milieu diffusif par la densité électronique. La transformée de Fourier $\mathcal{F}[y(\vec{r})\rho(\vec{r})]$ est égale au produit de convolution des transformées de Fourier de $y(\vec{r})$ et de $\rho(\vec{r})$:

$$\mathcal{A}(\vec{H}) = \mathcal{A}_e \mathcal{F}[y(\vec{r})] * \mathcal{F}[\rho(\vec{r})] = \mathcal{A}_e Y(\vec{H}) * \mathcal{A}_{\infty}(\vec{H})$$
(3.20)

avec

$$Y(\vec{H}) = \iiint_{-\infty}^{\infty} y(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{H} \cdot \vec{r}} d\tau$$
$$\mathcal{A}_{\infty}(\vec{H}) = \iiint_{-\infty}^{\infty} \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{H} \cdot \vec{r}} d\tau$$

La densité électronique est une fonction périodique de l'espace direct qui peut s'exprimer comme la convolution de la densité électronique dans une maille élémentaire du cristal, $\rho_0(\vec{r})$, par une distribution de Dirac périodique :

$$\rho(\vec{r}) = \rho_0(\vec{r}) * \sum_{i=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i), \qquad (3.21)$$

avec $\vec{r}_i = u_i \vec{a} + v_i \vec{b} + w_i \vec{c}$, et $u_i, v_i, w_i \in \mathbb{Z}$.

La transformée de Fourier d'une somme infinie de distribution de Dirac dans l'espace réel est une somme infinie de distribution de Dirac dans l'espace réciproque

$$\mathcal{F}\left[\sum_{i=-\infty}^{\infty}\delta(\vec{r}-\vec{r_i})\right] = \frac{1}{V_m}\sum_{h=-\infty}^{\infty}\delta(\vec{H}-\vec{h})$$
(3.22)

où V_m est le volume de la maille élémentaire, et la sommation est faite sur l'ensemble des vecteurs \vec{h} du réseau réciproque. il découle que la transformée de Fourier de la densité électronique est

$$\mathcal{A}_{\infty}(\vec{H}) = \frac{F(\vec{H})}{V_m} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{H} - \vec{h})$$
(3.23)

où $F(\vec{H})$ est la transformée de Fourier de $\rho_0(\vec{r})$. On voit que la distribution de l'amplitude diffusée est nulle partout à l'exception des directions pour lesquels le vecteur de diffraction \vec{H} est égal à un vecteur du réseau réciproque \vec{h} , ce qui reprend la condition de diffraction énoncée dans le §3.1.5 par l'équation 3.5. Ainsi les valeurs de $F(\vec{H})$ ne doivent être prises que pour les points appartenant au réseau réciproque, et

$$\mathcal{A}_{\infty}(\vec{H}) = \frac{1}{V_m} \sum_{h=-\infty}^{\infty} F_{hkl} \,\delta(\vec{H} - \vec{h}) \tag{3.24}$$

avec F_{hkl} le facteur de structure de la maille défini par :

$$F_{hkl} = \iiint_{-\infty}^{\infty} \rho_0(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r}} d\tau = \int_{\text{unit cell}} \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r}} d\tau$$
$$= \sum_{j=1}^n f_j e^{2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r}}$$

Dans ce calcul, la densité électronique ρ_0 est donc la somme des densité électroniques des *n* atomes constitutifs de la maille élémentaire. f_j est le facteur de diffusion atomique de l'atome *j*, aussi appelé **facteur de forme de l'atome**, car il dépend de la répartition électronique autour du noyau. Pour prendre en compte l'agitation thermique des noyaux atomiques (et par conséquent de leurs électrons), ce facteur doit être multiplié par le facteur de Debye-Waller dont la valeur au carré est noté *D*. Le facteur de structure d'une maille s'écrit donc :

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{n} \sqrt{D_j} f_j e^{2\pi i \vec{h}.\vec{r}}$$
(3.25)

Le calcul du facteur de forme atomique, du facteur de structure et du facteur de Debye-Waller sont traités dans le §3.2.5.

En remplaçant la valeur de $\mathcal{A}_\infty(\vec{H})$ dans 3.20 par l'expression 3.24 on obtient finalement

$$\mathcal{A}(\vec{H}) = \frac{\mathcal{A}_e}{V_m} Y(\vec{H}) * \sum_{\vec{h}} F_{hkl} \,\delta(\vec{H} - \vec{h})$$
$$= \frac{\mathcal{A}_e}{V_m} \sum_{\vec{h}} F_{hkl} Y(\vec{H} - \vec{h})$$
(3.26)

Il reste à estimer cette somme sur l'ensemble des vecteurs du réseau réciproques.

3.2.4 Intensité diffractée par un petit cristal - Théorie cinématique

Le raisonnement proposé dans cette section pour arriver à l'intensité diffractée par un cristal constitue la théorie cinématique ou encore théorie géométrique. Ce cheminement est donné en détail dans divers ouvrages dont [Authier, 2001].

On considère un petit cristal de forme parallélépipédique dont les plans diffractants sont parallèles à la grande face. Ce morceau de cristal contient respectivement N_1 , N_2 et N_3 mailles élémentaires dans les 3 directions perpendiculaires à ses faces, comme représenté sur la figure 3.8.

Dans le repère $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, la position \vec{r} est donnée par $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ et la fonction $y(\vec{r})$ prend la forme

$$y(\vec{r}) = \begin{vmatrix} \epsilon(u+N_1/2) - \epsilon(u-N_1/2) \\ \epsilon(v+N_2/2) - \epsilon(v-N_2/2) \\ \epsilon(w+N_3/2) - \epsilon(w-N_3/2) \end{vmatrix}$$

avec ϵ , la fonction de Heaviside. On pose que le vecteur du réseau réciproque $\vec{H} - \vec{h}$ a les coordonnées X_h , X_k et X_l dans la base du réseau réciproque $(\vec{a^*}, \vec{b^*}, \vec{c^*})$. Avec ceci, la transformée de Fourier de la fonction de forme sur la première dimension est

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\epsilon(u + N_1/2) - \epsilon(u - N_1/2) \right] \, e^{2\pi i X_h u} \, du = \frac{\sin(\pi X_h N_1)}{\pi X_h}$$

On obtient ainsi $Y(\vec{H} - \vec{h})$ dans les 3 dimensions de l'espace direct :

$$Y(\vec{H} - \vec{h}) = V_m \frac{\sin(\pi X_h N_1)}{\pi X_h} \frac{\sin(\pi X_k N_2)}{\pi X_k} \frac{\sin(\pi X_l N_3)}{\pi X_l}$$

En introduisant cette expression ainsi que la définition de \mathcal{A}_e donnée en 3.16 dans 3.26, puis en prenant la norme au carré, on obtient l'intensité diffractée par ce petit cristal :

$$I_h = I_0 \frac{r_e^2}{R^2} C^2 |F_{hkl}|^2 \frac{\sin^2(\pi X_h N_1)}{(\pi X_h)^2} \frac{\sin^2(\pi X_k N_2)}{(\pi X_k)^2} \frac{\sin^2(\pi X_l N_3)}{(\pi X_l)^2}$$
(3.27)

Nous allons à présent chercher à établir l'intensité diffractée atteignant un détecteur placé à la distance R du point éclairé par le faisceau incident en fonction de l'angle $\Delta\theta$ entre la direction satisfaisant exactement les conditions de diffraction et la direction d'incidence du faisceau (voir figure 3.8). Les ondes reçues par le détecteur sont contenues dans un cône d'angle solide $d\Omega = dS/R^2$. On se place dans le cas où l'on fait tourner le cristal sur lui même suivant un axe perpendiculaire au plan de diffusion, avec une vitesse angulaire $\omega = d(\Delta\theta)/dt$. L'énergie envoyée sur le détecteur dans le cône d'angle solide $d\Omega$ est

$$d\mathcal{E} = IdSdt$$

$$= I\frac{R^2}{\omega}d\Omega d(\Delta\theta)$$

$$= \frac{I_0}{\omega}r_e^2 C^2 |F_{hkl}|^2$$

$$\times \frac{\sin^2(\pi X_h N_1)}{(\pi X_h)^2} \frac{\sin^2(\pi X_k N_2)}{(\pi X_k)^2} \frac{\sin^2(\pi X_l N_3)}{(\pi X_l)^2} d\Omega d(\Delta\theta)$$
(3.28)

Il faut maintenant estimer les éléments d'intégration $d\Omega d(\Delta \theta)$ dans l'espace réciproque en fonction de dX_h , dX_k et dX_l . Pour cela on considère que le vecteur diffraction \overrightarrow{OH} est parallèle à l'axe $\overrightarrow{OX_l} = \overrightarrow{c^*}$, comme représenté sur la figure 3.8. Cela implique que les deux autres axes, $\overrightarrow{a^*}$ et $\overrightarrow{b^*}$ se trouvent dans un plan parallèle aux plans diffractants considérés.



FIG. 3.8: Diffraction par un cristal dans l'espace direct (à gauche) et dans l'espace réciproque (à droite). Les traits en tirets schématisent les plans diffractants considérés. Le point I est le centre de la sphère d'Ewald, \overrightarrow{OH} est le vecteur de diffraction, dS représente un élément de surface du détecteur placé à la distance R du point de cristal diffractant dans l'angle solide $d\omega$. $\vec{s_0}$ et $\vec{s_h}$ sont les vecteurs unitaires des directions d'incidence et réfléchies satisfaisant exactement les conditions de Bragg.

Evaluation de $d\Omega$. On pose dS^* un élément de surface de l'espace réciproque perpendiculaire au vecteur d'onde de l'onde diffusée $\overrightarrow{I'H'}$. Puisque $\|\overrightarrow{I'H'}\| = 1/\lambda$, on a

$$dS^* = d\Omega/\lambda^2 \tag{3.29}$$

La projection de dS^* sur le plan $(\vec{a^*}, \vec{b^*})$ est $dS * \sin \theta_B$. On peut exprimer cette surface comme une surface élémentaire de ce plan de l'espace réciproque :

$$dS^* \sin \theta_B = \frac{d\Omega}{\lambda^2} \sin \theta_B = dX_h \, dX_k \, \frac{V^*}{d_{hkl}^*},\tag{3.30}$$

avec V_m^*/d_{hkl}^* la surface unitaire du plan $(\vec{a^*}, \vec{b^*})$ et $d_{hkl}^* = 1/d_{hkl}$.

On obtient finalement :

$$d\Omega = \frac{\lambda^2}{\sin \theta_B} dX_h dX_k V_m^* d_{hkl}$$
(3.31)

Evaluation de $d(\Delta \theta)$. Lorsqu'on fait tourner le cristal, la rotation du vecteur d'onde de l'onde incidente dans l'espace réciproque engendre une variation $\overrightarrow{HH'}$ du vecteur de diffraction \overrightarrow{OH} . D'après l'équation 3.6 (et la figure 3.3 de la page 49), la norme du vecteur de diffraction est

$$OH = 2k\sin\theta_B = \frac{2}{\lambda}\sin\theta_B = \frac{1}{d_{hkl}},$$

la dernière égalité provenant de la relation de Bragg. Par dérivation, il vient

$$d(OH) = \frac{2\cos\theta_B}{\lambda} d(\Delta\theta),$$

En utilisant les coordonnées de la base de l'espace réciproque, on obtient

$$dX_l = \frac{d(OH)}{OH} = \frac{2d_{hkl}\,\cos\theta_B}{\lambda}d(\Delta\theta),\tag{3.32}$$

d'où

$$d(\Delta\theta) = \frac{\lambda}{2d_{hkl}\cos\theta_B} \, dX_l \tag{3.33}$$

(3.34)

Les équations 3.31 et 3.33 nous donnent finalement les éléments d'intégration $d\Omega d(\Delta \theta)$ dans l'espace réciproque :

$$d\Omega d(\Delta \theta) = \frac{\lambda^3 V_m^*}{2 \sin \theta_B \cos \theta_B} dX_h dX_k dX_l$$

= $\frac{\lambda^3}{V_m \sin 2\theta_B} dX_h dX_k dX_l,$ (3.35)

ce qui amène à l'expression de l'énergie en substituant dans l'équation 3.28

$$d\mathcal{E} = \frac{I_0}{\omega} \frac{r_e^2 \lambda^3}{V_m \sin 2\theta_B} C^2 |F_{hkl}|^2 \\ \times \frac{\sin^2(\pi X_h N_1)}{(\pi X_h)^2} \frac{\sin^2(\pi X_k N_2)}{(\pi X_k)^2} \frac{\sin^2(\pi X_l N_3)}{(\pi X_l)^2} dX_h dX_k dX_l$$
(3.36)

L'intégration de cette expression sur X_h , X_k , exprime l'énergie totale reçue par le détecteur pour une position donnée du cristal dans le faisceau incident (et donc pour un écart à l'angle de Bragg $\Delta\theta$ donné) :

$$\int_{X_h} \frac{\sin^2(\pi X_h N_1)}{(\pi X_h)^2} dX_h = N_1^2 \int_{X_h} \sin^2_c(\pi X_h N_1) dX_h$$

L'intégration est faite sur un intervalle beaucoup plus large que le domaine sur lequel l'intégrande est significatif (le sinus cardinal au carré devient quasi nul pour X_h supérieur à quelques fois $1/N_1$), on peut donc faire l'approximation :

$$N_1^2 \int_{X_h} \sin_c^2(\pi X_h N_1) dX_h \approx N_1^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sin_c^2(\pi X_h N_1) dX_h = N_1$$
(3.37)

Il vient donc

$$d(\Delta \mathcal{E}) = \frac{I_0}{\omega} \frac{r_e^2 \lambda^3}{V_m \sin 2\theta_B} C^2 |F_{hkl}|^2 N_1 N_2 \frac{\sin^2(\pi X_l N_3)}{(\pi X_l)^2} dX_l$$
(3.38)

A partir de cette expression, on peut obtenir l'intensité intégrée diffractée dans une direction ou la réflectivité en fonction de l'angle d'incidence d'un faisceau monochromatique parallèle (rocking curve), mais cette dernière ne présente pas d'intérêt pour nous.

3.2.4.1 Intensité et réflectivité intégrées

Nous considérons ici un cristal non absorbant entièrement baigné dans le faisceau incident. Ce cas est valable pour de très petits cristaux, il sera notamment utile pour le modèle des cristaux mosaïques. La puissance intégrée est l'intégrale de l'énergie reçue par le détecteur pendant que le cristal subit une rotation divisée par le temps

$$\mathcal{P}_{h,cin} = \omega \, \int_{X_l} d(\Delta \mathcal{E}) = \frac{r_e^2 \lambda^3}{V_m \sin 2\theta_B} \, C^2 \, |F_{hkl}|^2 \, N_1 N_2 N_3$$

Avec $\delta V = S t$ le volume de cristal diffractant, on a $N_1 N_2 N_3 = \delta V / V_m$, V_m étant le volume de la maille élémentaire. On obtient finalement :

$$\mathcal{P}_{h,cin} = I_0 \left(\frac{r_e}{V_m}\right)^2 C^2 \frac{\lambda^3 |F_{hkl}|^2}{\sin 2\theta_B} \delta V$$
(3.39)

On introduit la *longueur d'extinction*, notée Λ_0 , dont la signification physique apparaîtra dans la théorie dynamique (cf § 3.2.9).

$$\Lambda_0 = \frac{\pi V_m \cos \theta_B}{r_e \lambda |C| |F_{hkl}|} \approx \frac{\pi V_m}{r_e \lambda |C| |F_{hkl}|} \tag{3.40}$$

Il vient :

$$\mathcal{P}_{h,cin} = I_0 \, \frac{\pi^2 \lambda}{\Lambda_0^2 \sin 2\theta_B} \, \delta V \tag{3.41}$$

On remarque que cette expression est homogène à une surface, et peut être interprétée comme une section efficace de diffraction. La puissance reçue étant le produit de l'intensité par la surface, en considérant des faisceaux parfaitement parallèles (comme c'est le cas depuis le début), l'intensité intégrée est obtenue en divisant par la surface de la section du faisceau $S \cos \theta_B$:

$$I_{h,cin} = I_0 \frac{\pi^2 \lambda}{\Lambda_0^2 \sin 2\theta_B} \frac{t}{\cos \theta_B}$$
(3.42)

Finalement, la réflectivité intégrée est le rapport de l'intensité intégrée diffractée sur l'intensité incidente. La théorie cinématique prédit qu'une couche d'épaisseur t de cristal non absorbant aura une réflectivité intégrée

$$R_{cin} = \frac{\pi^2 \lambda}{\Lambda_0^2 \sin 2\theta_B} \frac{t}{\cos \theta_B},\tag{3.43}$$

Qui peut se mettre sous la forme

$$R_{cin} = Q_{cin} \frac{t}{\cos \theta_B} \tag{3.44}$$

avec

$$Q_{cin} = \frac{\pi^2 \lambda}{\Lambda_0^2 \sin 2\theta_B} = \frac{\pi^2 d_{hkl}}{\Lambda_0^2 \cos \theta_B}$$
(3.45)

On rappelle que dans ces formules,

- $-V_m$ est le volume de la maille élémentaire,
- $-r_e$ est le rayon classique de l'électron,
- $-\lambda$ est la longueur d'onde du rayonnement considéré (incident et diffracté),
- -C est le facteur de polarisation,
- F_{hkl} est le facteur de structure du cristal pour les plans (hkl) incluant le facteur de Debye-Waller
- $-I_0$ est l'intensité du faisceau incident,
- -t est l'épaisseur du cristal,
- $-\theta_B$ est l'angle de Bragg (angle d'incidence sur les plans réticulaires satisfaisant exactement la condition de diffraction).

3.2.5 Calcul du facteur de structure - Effet de l'agitation thermique

Le rôle du facteur de structure est de moduler l'intensité diffractée par les différentes réflexions autorisées par la relation de Bragg. Comme nous avons vu au §3.2.3 la définition du facteur de structure F_{hkl} pour une maille comportant n atomes est

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{n} \sqrt{D_j} f_j \, e^{2\pi i \vec{h}.\vec{r}}$$
(3.46)

avec f_j le facteur de forme atomique de l'atome j, $\sqrt{D_j}$ son facteur de Debye-Waller, et $\vec{h} = \vec{H}$ puisqu'on ne s'intéresse qu'aux cas où les conditions de diffraction sont satisfaites.

Facteur de forme atomique. Ce facteur peut être calculé en considérant une distribution électronique à symétrie sphérique (donc en négligeant l'influence des liaisons chimiques). Pour un même nombre d'électrons, on montre que le facteur de forme décroît d'autant plus rapidement que la répartition électronique $\rho(r)$ est moins dense. Si l'on compare le facteur de forme de deux atomes i et j différents, on a approximativement :

$$\frac{f_i}{f_j} \approx \frac{Z_i}{Z_j}$$

La valeur de f est obtenue par la formule

$$f = c + \sum_{i=1}^{4} a_i \, e^{-b_i \left(\frac{\sin\theta_B}{\lambda_0}\right)^2},$$
(3.47)

où θ_B est l'angle d'incidence du faisceau de longueur d'onde λ_0 sur les plans diffractants. Les coefficients c, a_i et b_i sont tabulés dans *l'International Tables for Crystallography* [Prince, 2004]. Un exemple de ces coefficients est montré dans le tableau 3.2.

Facteur de Debye-Waller Le facteur de Debye-Waller est un terme correctif qui s'applique au facteur de forme atomique pour prendre en compte les vibrations des atomes autour de leur position d'équilibre. L'amplitude de ces vibrations augmente avec la température du cristal ce qui a pour effet de diminuer l'intensité des faisceaux diffractés,

Element	a_1	a_2	a_3	a_4	c	b_1	b_2	b_3	b_4
Carbone	2,3100	1,0200	1,5886	0,8650	0,21560	20,8439	$10,\!2075$	0,5687	$51,\!6512$
Aluminium	$6,\!4202$	1,9002	$1,\!5936$	1,9646	$1,\!1151$	3,0387	0,74260	$31,\!547$	85,088
Silicium	$5,\!6627$	$3,\!0716$	$2,\!6245$	1,3932	$1,\!2471$	$2,\!6652$	$38,\!6634$	0,9169	$93,\!5458$
Cuivre	$13,\!3380$	$7,\!1676$	$5,\!6158$	$1,\!6735$	$1,\!1910$	$3,\!5828$	$0,\!2470$	$11,\!3966$	$64,\!8126$
Germanium	16,0816	$6,\!3747$	3,7068	$3,\!6830$	2,1313	2,8509	$0,\!2516$	$11,\!4468$	54,7625
Or	$16,\!8819$	$18,\!5913$	$25,\!5582$	$5,\!8600$	$12,\!0658$	$0,\!461100$	8,62160	$1,\!48260$	$36,\!3956$

TAB. 3.2: Coefficients de diffusion atomique, en $Å^2$

effet d'autant plus sensible que l'ordre de diffraction est élevé. Contrairement à ce que l'on pourrait penser, les vibrations du cristal ne jouent pas sur la largeur des pics de diffraction.

Si l'on considère que la position $\vec{r_0}$ d'un atome de la maille contient un terme variant avec le temps

$$\vec{r}(t) = \vec{r_0} + \vec{\Delta r}(t)$$
 (3.48)

et que chaque atome subit des fluctuations indépendantes autour de son point d'équilibre, alors l'expression 3.46 du facteur de structure se réécrit :

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{n} f_j e^{-2\pi i \vec{H} \cdot \vec{r_0}} \langle e^{-2\pi i \vec{H} \cdot \vec{\Delta r}(t)} \rangle$$
(3.49)

Du fait que l'amplitude des vibrations atomiques est supposée petite devant la longueur d'onde incidente, on peut développer le dernier terme en série :

$$\langle e^{-2\pi i \vec{H}.\vec{\Delta r}(t)} \rangle = 1 + 2\pi i \langle \vec{H}.\vec{\Delta r}(t) \rangle - \frac{4\pi^2}{2} \langle \left(\vec{H}.\vec{\Delta r}(t) \right)^2 \rangle + \dots$$
(3.50)

Le deuxième terme de cette série est nul du fait des mouvements aléatoires des atomes. De plus,

$$\langle \left(\vec{H}.\vec{\Delta r}(t)\right)^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle \Delta r(t)^2 \rangle \langle h^2 \rangle = \frac{1}{3} \Delta r_m^2 H^2 \tag{3.51}$$

Le facteur $\frac{1}{3}$ apparaît quand on fait la moyenne géométrique dans l'espace à trois dimensions, car seule la composante de $\vec{\Delta r}$ colinéaire avec \vec{H} intervient. On a donc

$$\langle e^{-2\pi i \vec{H}.\vec{\Delta r}(t)} \rangle = 1 - \frac{4\pi^2}{6} \Delta r_m^2 H^2 \approx e^{-\frac{4\pi^2}{6} \Delta r_m^2 H^2}$$
(3.52)

Généralement $\langle e^{-2\pi i \vec{H}.\vec{\Delta r}(t)} \rangle$ se met sous la forme e^{-M} avec

$$M = \frac{8\pi^2 \Delta r_m^2}{3} \frac{\sin^2 \theta_B}{\lambda^2}, \quad \text{en utilisant 3.6}$$
(3.53)

Pour un atome, l'intensité du faisce au cohérent diffusé est diminuée du facteur D :

$$D = e^{-2M} = e^{-\frac{16\pi^2 \Delta r_m^2}{3} \frac{\sin^2 \theta_B}{\lambda^2}}$$
(3.54)

Ce facteur est d'autant plus important que l'angle θ est grand, ce qui explique que pour une même longueur d'onde diffractée, les ordres de diffraction plus élevés soient plus fortement atténués.

 Δr_m^2 peut être évalué d'après la formule [Halloin et Bastie, 2005]

$$\Delta r_m^2 \approx \frac{9h^2 \mathcal{N}_a}{4\pi^2 M_a k_B \Theta} \left(\frac{T}{\Theta} + \frac{1}{4}e^{4\frac{T}{\Theta}}\right) \tag{3.55}$$

où h est la constante de Planck, \mathcal{N}_a le nombre d'Avogadro, M_a la masse molaire, k_B la constante de Boltzman, Θ la température de Debye, T la température du cristal.

La température de Debye et le facteur de Debye pour différentes réflexions à 500 keV sont reportés dans le tableau 3.3 pour quelques éléments.

	Θ (K)	D_{111}	D_{220}	$D F_{111} ^2$	$D F_{220} ^2$
Silicium	645	0,9841	$0,\!9583$	3394	4605
Cuivre	343	0,9492	0,8701	7402	3921
Germanium	374	0,9844	0,9589	23591	34752
Or	165	0,9365	0,8395	65752	42253

TAB. 3.3: Température de Debye (d'après Kittel [1972], page 219), facteur de Debye pour T = 300 K, et facteurs de structure pour les réflexions 111 et 220 à 500 keV

Facteur de structure Dans l'équation 3.46, $\vec{H} = h\vec{a^*} + b\vec{b^*} + c\vec{c^*}$ est un vecteur du réseau réciproque et $\vec{r_i} = u_j\vec{a} + v_j\vec{b} + w_j\vec{c}$ pointe la position de l'atome j dans la maille élémentaire. Cette équation devient

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{n} \sqrt{D_j} f_j \, e^{2\pi i (hu_j + kv_j + lw_j)}$$
(3.56)

Dans le cas où tous les atomes de la maille sont identiques, on peut sortir le facteur de forme atomique de la somme. On peut alors l'évaluer très facilement en fonction du type de maille. Par exemple, pour une maille cubique à face centrée (cas du cuivre) les cordonnées des 4 atomes de la maille sont reportées dans le tableau 3.4, et la somme prend la valeur :

$$G_{cfc} = \sum_{j=1}^{4} e^{2\pi i (hu_j + kv_j + lw_j)} = 1 + \cos \pi (h+k) + \cos \pi (h+l) + \cos \pi (k+l)$$
$$= \begin{cases} 4 & \text{si } h, k, l \text{ de même parité} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$
(3.57)

Un autre exemple que l'on rencontrera couramment est la maille diamant (cas du silicium et du germanium), que l'on peut voir comme l'assemblage de deux mailles cubiques

u	v	W
0	0	0
0	$_{0,5}$	$_{0,5}$
0,5	0	0,5
$0,\!5$	0,5	0

TAB. 3.4: Coordonnées des atomes dans une maille cubique face centrée (cfc)

faces centrées décalées l'une par rapport à l'autre de $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, ou plus simplement d'un motif constitué de deux atomes placés en (0,0,0) et $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ disposé aux noeuds d'un réseau cubique à faces centrées. Le facteur de structure se calcule donc comme suit :

$$G_{diamant} = G_{cfc} \left| 1 + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} \right| \\ = \begin{cases} 4\sqrt{2} & \text{si } h, k, l \text{ impairs} \\ 8 & \text{si } h, k, l \text{ pairs et } h+k+l = 0 \ [4] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$
(3.58)

3.2.6 Théorie dynamique de la diffraction

La théorie géométrique de la diffraction énoncée précédemment n'est physiquement pas correcte pour plusieurs raisons :

- 1. Le principe de conservation d'énergie n'est pas respecté. En effet, comme l'équation 3.42 l'indique, l'intensité diffractée par un cristal est proportionnelle à son épaisseur, et donc l'intensité diffractée tend vers l'infini quand l'épaisseur tend vers l'infini. Cela est dû au fait que chaque centre diffuseur est supposé recevoir une onde incidente de même amplitude, quelle que soit sa profondeur dans le cristal. La théorie cinématique néglige la diffraction dans les couches supérieures du cristal et n'est donc valable que dans le cas d'un cristal très fin, d'épaisseur très inférieure à la longueur d'extinction donnée en 3.40.
- 2. Les interférences entre le faisceau incident et le faisceau diffracté ne sont pas prises en compte.
- 3. Le domaine de réflexion est inversement proportionnel à la taille du cristal. Pour un cristal infiniment grand (e.g. pour un cristal dont les dimensions dépassent la longueur d'extinction) et périodique, ce domaine tends vers un Dirac, ce qui se traduit dans l'espace réciproque par un point. Cela signifie qu'il ne peut y avoir diffraction que lorsque la relation de Bragg est précisément satisfaite, ce qui se révèle être faux dans la réalité.

Darwin, avec son article de 1914 est le premier à avoir remis en cause la théorie géométrique. Cependant le formalisme de sa théorie ne la rend pas pratique à utiliser dans tous les cas. C'est Ewald, qui introduit le premier les concepts utilisés aujoud'hui pour la description de la propagation des ondes dans un cristal [Ewald, 1917]. Notamment, il introduit le concept de champ d'onde : il décrit le champ électromagnétique se propageant dans le cristal en excitant les dipôles (centre diffuseurs) comme une somme d'ondes planes

dont les vecteurs d'onde se déduisent les uns des autres par translation dans le réseau réciproque.

Un champ d'onde (parfois appelé onde d'Ewald) est caractérisé par son tiepoint³ P qui est l'extrémité commune des vecteurs d'onde des différentes ondes planes le composant. Le but de cette théorie est de déterminer les positions possibles pour les tiepoints, et donc de décrire les champs d'onde se propageant dans le cristal avec leur indice de réfraction et leur amplitude.

Le but ici n'est pas d'énoncer en détail toute la théorie dynamique qui est assez complexe, mais plutôt d'en énoncer les principes directeurs et les résultats ayant une utilité dans le cas d'une lentille de Laue. Le lecteur curieux trouvera une description très poussée de cette théorie dans [Authier, 2001].

3.2.7 La surface de dispersion

La surface de dispersion est une notion qui sera utile à la compréhension de la diffraction dans les cristaux à plans courbes.



FIG. 3.9: Condition de diffraction selon la théorie cinématique dans l'espace réciproque. \vec{OH} est un vecteur du réseau réciproque, $\vec{OL}_a = \vec{k_0}$ est le vecteur d'onde de l'onde incidente, et $\vec{HL}_a = \vec{k_h}$ est l'onde réfléchie ($\|\vec{OL}_a\| = \|\vec{HL}_a\| = 1/\lambda$), le point de Laue L_a marquant l'exacte condition de Bragg. \vec{OM} est une onde incidente qui ne satisfait pas la condition de Bragg.

Les ondes se propageant dans la matière interagissent avec ses constituants, ce qui explique l'indice de réfraction n. Pour les rayons X et γ , cet indice est légèrement inférieur à 1. Pour comprendre les fondements de la théorie dynamique, il faut prendre en compte cet indice, bien que dans la pratique, on pourra par la suite le négliger. On peut représenter ce concept dans l'espace réciproque à partir de la construction d'Ewald. La figure 3.9 montre comment on passe de la sphère d'Ewald à la représentation de la condition de

³Parfois appelé 'point caractéristique' en français

Bragg à partir de deux noeuds du réseau réciproque. Le point de Laue L_a est le centre de la sphère d'Ewald, la position satisfaisant exactement la condition de Bragg. De fait le nombre d'onde des ondes se propageant dans le cristal est nk < k, ce qui fait que la condition de diffraction exacte est en fait déportée du point de Laue L_a , l'intersection des sphères de rayon k, vers le point de Lorentz L_o , l'intersection des sphères de rayon nk(figures 3.9 et 3.10).



FIG. 3.10: Influence de l'indice de réfraction du cristal sur la condition de diffraction dans l'espace réciproque. La condition de Bragg n'est en fait pas satisfaite exactement au point de Laue L_a (sphères de rayon k) mais au point de Lorentz noté L_o (sphères de rayon nk).



FIG. 3.11: La surface de dispersion est cette surface qui connecte les deux sphères. Il y a diffraction lorsque le point P se trouve sur cette surface. L'onde réfractée coexiste alors avec l'onde réfléchie, chacune ayant des nombres d'onde légèrement différents de nk.

Contrairement à ce que dit la théorie cinématique, un cristal parfait semi-infini (cas idéal) possède en fait un intervalle angulaire sur lequel un faisceau diffracté peut se former. On parle d'un *domaine de réflexion*. Pour chaque position sur ce domaine, l'onde réfractée (assimilable à l'onde directe) de vecteur d'onde $\vec{k}_0 = \overrightarrow{OP}$ coexiste avec l'onde réfléchie $\vec{k}_h = \overrightarrow{HP}$.

Le domaine de réflexion se situe à proximité du point de Lorentz L_o , sur une surface connectant les deux sphères (figure 3.11). Lorsque le point P se trouve loin de la zone de connexion, il n'y a qu'une onde se propageant dans le cristal, mais lorsque le point P se trouve sur la zone de connexion, deux ondes coexistent dans le cristal. Cette surface qui est constituée de deux feuilles, s'appelle *la surface de dispersion*. Lorsque le point P s'y trouve, les nombres d'onde des ondes réfractée et réfléchie ne sont pas strictement égaux, mais très proches de nk. Ewald nomma le point P 'tiepoint', que l'on peut traduire par 'point d'attache' ou 'point caractéristique' (on conservera l'expression de Ewald dans la suite). La largeur angulaire du domaine de réflexion (égale à la largeur de la rocking curve) est donnée dans l'espace réciproque par la largeur de cette surface de connexion.

La surface de dispersion est constituée de deux hyperboles se situant autour du point L_o , dont la distance minimum est donné par l'inverse de la longueur d'extinction. Par la suite nous allons zoomer sur la région de l'espace réciproque contenant les surfaces de dispersion. Du fait que les sphères ont pour rayon n/λ , elles sont en fait bien plus grandes que la zone contenant la surface de dispersion. C'est pourquoi, dans les schémas suivants elles sont représentées par leurs tangentes nommées T_h et T_0 .

3.2.8 Approche qualitative de la théorie dynamique



FIG. 3.12: Vue schématique de la surface de dispersion et des conditions aux limites dans le cas Laue symétrique. O est l'origine du réseau réciproque et \vec{OH} un vecteur du réseau réciproque. $\vec{s_0}$ et $\vec{s_h}$ sont les vecteurs unitaires dans les directions des faisceaux incidents et réfléchis. \vec{MO} représente le vecteur d'onde de l'onde incidente, L_a et L_o les points de Laue et de Lorentz. $k\Delta\theta$ correspond à l'écart entre la direction du faisceau incident et celle satisfaisant exactement la condition de Bragg, \vec{k} étant le vecteur d'onde dans le vide. $\vec{S_1}$ et $\vec{S_2}$ sont les vecteurs de Poynting aux tiepoints P_1 et P_2 situés sur les surfaces de dispersion. Adapté de Keitel *et al.* [1999].

On considère la diffraction de rayons X dans un cristal parfait, en géométrie de Laue

symétrique. Une onde plane incidente de vecteur d'onde \overrightarrow{MO} fait un angle $\Delta\theta$ avec la direction satisfaisant exactement la condition de Bragg $\overrightarrow{L_aO}$. La distance L_aM est donc $k\Delta\theta$, avec k le nombre d'onde de l'onde incidente dans le vide. Cette onde excite dans le cristal deux champs d'onde dont les tiepoints P_1 et P_2 sont la projection du point M selon la normale à la surface du cristal \vec{n} sur les deux branches de la surface de dispersion.

Dans le cristal, les champs d'onde se propagent en lignes droites parallèles aux vecteurs de Poynting $\vec{S_1}$ et $\vec{S_2}$, respectivement perpendiculaires à la surface de dispersion en P_1 et P_2 et symétriques par rapport aux plans diffractants (figure 3.12). Le vecteur de Poynting $\vec{S_i}$ (i = 1, 2) est proportionnel à :

$$\vec{S}_i \propto (|D_{0i}|^2 \vec{s}_0 + |D_{hi}|^2 \vec{s}_h), \tag{3.59}$$

où D_{0i} et D_{hi} représentent les amplitudes des ondes formant le champ d'onde *i*, et $\vec{s_0}$ et $\vec{s_h}$ sont respectivement les vecteurs unitaires selon les directions incidente et réfléchie.

Lors du passage de la surface d'entrée du cristal, l'onde incidente se divise en deux champs d'ondes dont les caractéristiques résultent des conditions aux limites appliquées au vecteurs champs électriques. Le champ d'onde dont le vecteur de Poynting est le plus proche de $\vec{s_0}$ a l'intensité la plus importante. Le rapport des intensités des deux champs d'onde augmente lorsque l'angle entre le vecteur de Poynting et les plans diffractants augmente : Lorsque $\Delta \theta$ est grand, toute l'intensité va dans le champ d'onde dont la direction de propagation est proche de $\vec{s_0}$.

A l'interface de sortie du cristal, chaque champ d'onde se divise en une onde réfléchie et une onde transmise. A nouveau, leurs intensités sont données par les conditions aux limites. Plus le vecteur de Poynting est proche de $\vec{s_h}$ plus l'intensité réfléchie est grande (ou inversement si le vecteur de Poynting est plus proche de $\vec{s_0}$, l'intensité transmise est la plus importante).

Lorsque l'on fait tourner le cristal sur lui même, le point M se déplace le long de la ligne T'_0 qui passe par le point de Laue L_a , point qui correspond à l'exacte condition de Bragg (vu depuis l'extérieur du cristal). Les tiepoints P_1 et P_2 se déplacent sur les surfaces de dispersion en passant par leur centre. Pour une onde incidente loin de la condition de Bragg, les vecteurs de Poynting $\vec{S_1}$ et $\vec{S_2}$ sont quasiment parallèles à $\vec{s_0}$ et $\vec{s_h}$ d'un coté du pic de Bragg et parallèles à $\vec{s_h}$ et $\vec{s_0}$ de l'autre coté. Dans les deux cas, toute l'intensité est transférée au champ d'onde parallèle à $\vec{s_0}$, ce qui implique que le vecteur de Poynting est parallèle à $\vec{s_0}$ à l'interface de sortie et donc on obtient seulement une onde transmise. C'est bien sûr un résultat attendu puique loin de la condition de Bragg, il n'y a pas de diffraction et le faisceau qui traverse le cristal est seulement affecté par l'absorption normale.

3.2.9 Grandeurs caractéristiques

La longueur d'extinction Λ_0 est l'épaisseur de cristal à laquelle le faisceau réfléchi est complètement éteint au profit du faisceau réfracté (faisceau direct). En effet, lorsque les ondes réfléchies et réfractée coexistent, elles interfèrent et échangent de l'énergie tout au long de leur propagation dans le cristal. Ce phénomène est connu sous le nom de Pendellösung (cf. \S 3.2.11).

$$\Lambda_0 = \frac{\pi V_m \cos \theta_B}{r_e \lambda |C| |F_{hkl}|} \approx \frac{\pi V_m}{r_e \lambda |C| |F_{hkl}|} \tag{3.60}$$

L'approximation $\cos \theta \approx 1$ est parfaitement justifiée pour des énergies supérieures à 200 keV comme c'est le cas dans cette étude : $1 - \cos \theta < 2 \, 10^{-4}$ dans tous les cas.

Remarquons aussi que la plus petite distance entre les deux surfaces de dispersions dans l'espace réciproque est égale à l'inverse de la longueur d'extinction.

La largeur de Darwin, $2\delta_w$, est la largeur à mi-hauteur de la rocking curve d'un cristal idéal (parfait et infiniment périodique). C'est donc la largeur angulaire du domaine de réflexion.

$$\delta_w = \frac{d_{hkl}}{\Lambda_0} \tag{3.61}$$

A partir de là, on définit deux grandeurs sans dimensions utiles à la description de la théorie dynamique : le paramètre de déviation, qui dans le cas Laue symétrique s'écrit

$$\eta = \frac{\Delta\theta}{\delta_w},\tag{3.62}$$

avec $\Delta \theta$ l'écart à l'exact angle de Bragg. Le paramètre de déviation varie de -1 à 1 sur le domaine de réflexion.

Le paramètre A défini par, le rapport de π fois l'épaisseur du cristal sur la longueur d'extinction :

$$A = \frac{\pi t}{\Lambda_0} \tag{3.63}$$

3.2.10 Réflectivité différentielle

La réflectivité différentielle d'un cristal mince (dont on néglige l'absorption, i.e. lorsque $\mu t \ll 1$, avec μ le coefficient d'absorption linéaire), dans le cas Laue symétrique est donnée en théorie dynamique par :

$$R(\eta) = \frac{I_h^t(\eta)}{I_0^0} = \frac{\sin^2\left(\pi t \,\frac{\sqrt{1+\eta^2}}{\Lambda_0}\right)}{(1+\eta^2)} \tag{3.64}$$

La figure 3.13 montre la courbe de réflectivité en fonction de l'angle d'incidence du faisceau (assimilable à une rocking curve) dans le cas d'un cristal de silicium pour un faisceau monochromatique et parallèle de 300 keV. Deux cas sont représentés; dans le premier, l'épaisseur du cristal est égale à la longueur d'extinction, alors que dans le deuxième l'épaisseur est égale à la demi-longueur d'extinction. On voit clairement que dans le premier cas, le pic central est complètement éteint alors que le dans le second, la réflectivité atteint quasiment 100 %. La largeur à mi-hauteur de cette courbe de diffraction, moyennée



FIG. 3.13: Rocking curve (réflectivité en fonction de l'angle d'incidence) sur la réflexion Si220 d'un cristal parfait. E = 300 keV, Λ_0 = 630 μ m. La largeur à mi-hauteur des courbes est donnée par la largeur de Darwin : $2\delta_w = 0, 126$ arcsec. Ces oscillations sont parfois appelées "Pendellösung d'orientation" (par opposition au Pendellösung d'égal épaisseur présenté sur la figure 3.14).

sur les oscillations du Pendellösung (Pendellösung d'orientation dans ce cas), est donnée par la largeur de Darwin $2\delta_w$. Dans le cas présent, la FWHM est égale à 0,126 arcsec.

Le rapport des intensités des faisceaux réfracté (faisceau transmis) et incident (la transmissivité?) est donné par :

$$T(\eta) = \frac{I_0^t(\eta)}{I_0^0} = \frac{\eta^2 + \cos^2\left(\pi t \,\frac{\sqrt{1+\eta^2}}{\Lambda_0}\right)}{(1+\eta^2)} \tag{3.65}$$

On vérifie que la conservation d'énergie est respectée : $R(\eta) + T(\eta) = 1$.

3.2.11 Intensité et réflectivité intégrée

L'intensité intégrée est l'intégrale de la courbe de diffraction angulaire présentée en figure 3.13. La théorie dynamique donne l'expression suivante pour l'intensité intégrée diffractée par un cristal dont on néglige l'absorption :

$$I_{h,\,dyn} = I_0 \frac{\pi |p|}{2\sin 2\theta_B} \frac{\lambda}{\Lambda_0} B_0(2A) \tag{3.66}$$

Avec

$$B_0(2A) = \int_0^{2A} J_0(z) dz \tag{3.67}$$

où $J_0(z)$ est la fonction de Bessel d'ordre 0.

La figure 3.14 représente les variations de $B_0(2A)$ en fonction de t/Λ_0 . Sa valeur oscille autour de 1 quand l'épaisseur du cristal augmente et devient égale à 1 quand l'épaisseur tend vers l'infini. Ces oscillations, appelées Pendellösung (ou Pendellösung d'égale épaisseur, pour les différencier du Pendellösung d'orientation), sont dues aux interférences entre l'onde réfractée et l'onde réfléchie. On voit sur le graphique que la période des oscillations est égale à la longueur d'extinction Λ_0 (d'où le nom...), avec un minimum tous les Λ_0 .



FIG. 3.14: Fonction $B_0(2A)$: Effet du Pendellösung sur l'intensité intégrée

Lorsque A tend vers 0, i.e. lorsque $t \ll \Lambda_0$, la fonction $B_0(2A)$ tend vers 2A. Dans ces conditions on remarque que

$$I_{h, dyn} = I_{h, cin}, \quad \text{avec} \quad t \ll \Lambda_0$$

Ainsi la théorie cinématique peut être vue comme une limite de la théorie dynamique pour les cristaux très fins. Cependant la notion de finesse est à rapporter à la longueur d'extinction qui est proportionnelle à l'énergie. Des exemples de longueurs d'extinction sont reportés dans les tableaux 3.5, 3.6 et 3.7. Comme on le constate, ces valeurs deviennent rapidement importantes lorsque l'énergie et les indices de Miller de la réflexion augmentent. Il sera donc préférable d'utiliser la théorie dynamique.

$200 \ \mathrm{keV}$	111	200	220	222	311
Silicium	$494,\!5$		424,5		$642,\!9$
Cuivre	$98,\!8$	106, 1	$135,\!8$	$165,\!8$	158,2
Germanium	212,0		174,7		264,9
Or	$47,\! 6$	50,1	$59,\!4$	68,1	$65,\!9$

TAB. 3.5: Longueurs d'extinction (en μ m) pour différents éléments et différentes réflexions pour un faisceau non polarisé de 200 keV, le cristal étant à 300 K.

Pour les applications numériques, $B_0(x)$ peut se mettre sous forme polynomiale (avec une précision absolue meilleure que 10^{-4}) [Halloin et Bastie, 2005] :

$$B_{0}(x) = \begin{cases} \frac{xN(x^{2})}{D(x^{2})} & \text{si } x \leq 8\\ 1 + \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[P\left(\left(\frac{8}{x}\right)^{2}\right) \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{8}{x}Q\left(\left(\frac{8}{x}\right)^{2}\right) \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \right] & \text{si } x > 8 \end{cases}$$
(3.68)

où N(x), D(x), P(x) et Q(x) sont des polynômes de la forme $\sum_{i=0}^{5} a_i x_i$. Les coefficients a_i sont donnés dans le tableau 3.8.

$500 \ \mathrm{keV}$	111	200	220	222	311
Silicium	1236,1		1061,1		1607,0
Cuivre	246,9	$265,\!3$	339,2	414,1	$395,\!3$
Germanium	530,0		436,7		662,0
Or	$118,\!9$	$125,\!3$	148,4	170,2	$164,\!8$

TAB. 3.6: Longueurs d'extinction (en μ m) pour différents éléments et différentes réflexions pour un faisceau non polarisé de 500 keV, le cristal étant à 300 K.

900 keV	111	200	220	222	311
Silicium	$2224,\!9$		1910,0		2892,5
Cuivre	444,4	477,5	610,5	745,4	711,5
Germanium	$954,\! 0$		786,1		$1191,\!5$
Or	214,1	$225,\!4$	267,0	306,2	296,5

TAB. 3.7: Longueurs d'extinction (en μ m) pour différents éléments et différentes réflexions pour un faisceau non polarisé de 900 keV, le cristal étant à 300 K.

Enfin, la réflectivité intégrée $R_{dyn} = I_{h,dyn}/I_0$ peut se mettre sous la forme :

$$R_{dyn} = Q_{dyn} \frac{t}{\cos \theta_B}$$
$$= Q_{cin} f(A) \frac{t}{\cos \theta_B}$$
(3.69)

[Zachariasen, 1945] donne l'expression de f(A) dans le cas Laue symétrique :

$$f(A) = \frac{B_0(2A) + |\cos 2\theta_B| B_0(2A |\cos 2\theta_B|)}{A(1 + \cos^2 \theta_B)}$$
(3.70)

$$\approx \frac{B_0(2A)}{2A} \tag{3.71}$$

La théorie dynamique donne pour la réflectivité d'un cristal non absorbant d'épaisseur t l'expression :

$$R_{dyn} \approx Q_{dyn} t, \tag{3.72}$$

 avec

$$Q_{dyn} = Q_{cin} \frac{B_0(2A)}{2A} \tag{3.73}$$

$$= \frac{\pi^2 d_{hkl}}{\Lambda_0^2 \cos \theta_B} \frac{B_0(2A)}{2A} \tag{3.74}$$

$$= \frac{\pi d_{hkl}}{\Lambda_0 2 \cos \theta_B} \frac{B_0(2A)}{t} \tag{3.75}$$

avec l'expression de Q_{cin} établie page 61, et l'évolution de la fonction $B_0(2A)$ montrée sur la figure 3.14. On remarque que pour $t \ll \lambda_0$, la valeur de $B_0(2A)$ est proportionnelle à t, de sorte que Q_{dyn} est constant et égal à Q_{cin} sur ce domaine.

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
N(x)	144725	$15706,\!9297$	-73,034996	$-33,\!49237$	1,30278	-0,0081205
D(x)	144725	$27781,\!8340$	$1779,\!3622$	$39,\!6246$	0,323458	0,0087508
P(x)	$1,\!0$	-0,015928	0,00334056	-0,00309143	0,00172450	0
Q(x)	$0,\!0781342$	-0,0050871	$0,\!0010301$	-0,0000876611	0,0000806711	0

TAB. 3.8: Coefficients polynomiaux de la fonction $B_0(x)$.

3.2.11.1 Influence de la polarisation?

La polarisation intervient dans l'intensité intégrée par le biais du facteur de polarisation C dont les différentes expressions sont explicitées en 3.15 page 55. Ce facteur intervient aussi dans le calcul de la longueur d'extinction, mais aux énergies supérieures à 100 keV, la différence entre π -polarisation et σ -polarisation devient complètement négligeable. La polarisation de l'onde incidente n'a donc aucun effet sensible sur l'intensité diffractée aux énergies qui nous intéressent.

3.3 Diffraction dans les cristaux mosaïques

Les théories que nous avons vues jusqu'à présent décrivent la diffraction dans les cristaux parfaits. Or comme nous allons le voir dans le §4.2, ce type de cristaux n'est pas idéal pour une lentille de Laue, il est nécessaire d'avoir une bande passante, un domaine de diffraction de plusieurs dizaines de secondes d'arc pour que le télescope soit utilisable. Les cristaux mosaïques constituent une option pour obtenir cet effet.

3.3.1 Le modèle de Darwin

Un cristal mosaïque est un monocristal dont le réseau n'est pas parfait. Sa structure contient plusieurs types de défauts, déplacements, dislocations, impuretés, etc..., qui déforment la maille. En fait la majorité des cristaux macroscopiques (de taille supérieure à \sim 1 mm) sont mieux décrits par le modèle de Darwin que par la théorie dynamique pure. Darwin [1914, 1922] a proposé un modèle relativement simple pour décrire ces cristaux : il les représente comme un agrégat de petits cristaux parfaits, *les cristallites*, légèrement désorientées les unes par rapport aux autres selon une loi de distribution généralement considéré gaussienne (figure 3.15). Ainsi chaque cristallite diffracte une portion du faisceau (une portion angulaire si le faisceau est monochromatique divergent, ou une portion spectrale si le faisceau est polychromatique parallèle) sans relation de phase avec les faisceaux diffractés par les cristallites adjacentes, ce qui fait que chaque cristallite peut être vue comme un cristal indépendant. Dans ce cas, les intensités diffractées par l'ensemble des cristallites s'additionnent.

On prend pour la distribution angulaire des cristallites une fonction d'erreur gaus-



FIG. 3.15: Représentation d'un cristal mosaïque dans le modèle de Darwin.

sienne.

$$W(\Delta\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\eta} e^{-\frac{\Delta\theta^2}{2\eta^2}} = 2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\Omega} e^{-\ln(2)\left(\frac{\Delta\theta}{\Omega/2}\right)^2}$$
(3.76)

Où Ω est la mosaicité, la largeur à mi-hauteur (FWHM) de cette distribution :

$$\Omega = 2\sqrt{2\ln 2}\,\eta\tag{3.77}$$

Implicitement ce modèle implique de faire les hypothèses suivantes :

- 1. Le nombre de cristallites traversées est suffisamment grand pour que la distribution soit une fonction continue.
- 2. La distribution est supposée à symétrie cylindrique.
- 3. Toutes les cristallites sont identiques, d'épaisseur t_0 .
- 4. Les cristallites sont si petites que l'absorption y est négligeable : $\mu t_0 \ll 1$

3.3.2 Réflectivité d'un cristal mosaïque

Le traitement de la diffraction dans un cristal mosaique selon le modèle de Darwin est donné en détail dans Zachariasen [1945]. Le cristal considéré est une plaque d'épaisseur T_0 aux faces parallèles et d'extension latérales infinies. Les cristallites qui le constituent sont des petits parallélépipèdes quasiment alignés avec les surfaces du cristal, ayant toutes la même épaisseurs t_0 . Le plan moyen est perpendiculaire aux faces d'entrée et de sortie du cristal (cas Laue symétrique). La puissance diffractée par une cristallite est $\mathcal{P}_h(\theta'_i - \theta'_B)$, avec θ'_i l'angle d'incidence du faisceau sur les plans diffractants de la cristallite qui est relié à θ_i , l'angle d'incidence du faisceau sur le plan moyen par : $\theta'_i = \theta_i + \Delta \theta$. La même relation s'écrit avec l'angle de Bragg : $\theta'_B = \theta_B + \Delta \theta$. \mathcal{P} exprime donc la puissance diffractée dans un cristal parfait.

La réflectivité d'une couche d'épaisseur dT contient dT/t_0 cristallites est alors donnée par :

$$\int W(\Delta\theta) \, \frac{\mathcal{P}_h(\theta_i - \theta'_B + \Delta\theta)}{\mathcal{P}_0} \, d(\theta_i) \tag{3.78}$$

En supposant que la largeur angulaire de diffraction d'une cristallite (largeur de Darwin) est très petite devant la mosaïcité, on peut considérer que $W(\Delta\theta)$ est constant dans l'intégrale autour de la position $\Delta \theta = \theta_i - \theta'_B$. Cette hypothèse est validée dans notre cas, car nous nous intéresserons principalement à des mosaicités de ~ 30 arcsec, or la largeur de Darwin est de l'ordre de ~ 1 arcsec.

On obtient donc :

$$\int W(\Delta\theta) \, \frac{\mathcal{P}_h(\theta_i - \theta'_B + \Delta\theta)}{\mathcal{P}_0} \, d(\theta_i) \approx W(\Delta\theta)R \tag{3.79}$$

Ou R est la réflectivité intégrée d'une cristallite. La réflectivité, σ , d'une épaisseur dT de cristal s'écrit donc

$$\sigma dT = W(\Delta \theta) R \frac{dT}{t_0} \tag{3.80}$$

Dans le cas $t_0 \ll \Lambda_0$ on peut utiliser pour R l'expression 3.44 donnée par la théorie cinématique, sinon il faut utiliser l'expression 3.72 de la théorie dynamique. Avec la théorie dynamique, on obtient :

$$\sigma dT = W(\Delta \theta) Q_{dyn} \, dT \tag{3.81}$$

Nous allons maintenant considérer les variations de puissance des faisceaux direct $\mathcal{P}_0(T)$ et diffracté $\mathcal{P}_h(T)$. En traversant une couche de cristal dT, le faisceau incident va être atténué par l'absorption (coefficient μ) et par la diffraction (coefficient σ) qui envoie de la puissance dans le faisceau diffracté. La faisceau diffracté subi exactement les mêmes atténuations, étant entendu qu'un faisceau diffracté deux fois revient dans sa direction d'origine.

Ainsi nous arrivons aux équations suivantes (cas Laue symétrique) :

$$d\mathcal{P}_{0} = -\mathcal{P}_{0} \mu \frac{dT}{\cos \theta_{B}} - \mathcal{P}_{0} \sigma dT + \mathcal{P}_{h} dT\sigma$$
$$d\mathcal{P}_{h} = -\mathcal{P}_{h} \mu \frac{dT}{\cos \theta_{B}} - \mathcal{P}_{h} \sigma dT + \mathcal{P}_{0} dT\sigma$$

Les conditions aux limites étant :

- La puissance incidente $\mathcal{P}_0(T=0)$ est connue
- La puissance diffractée est nulle à la surface d'entrée $\mathcal{P}_h(T=0)=0$

Ces équations s'intègrent pour donner la réflectivité

$$R_{mos} = \frac{\mathcal{P}_h(T_0)}{\mathcal{P}_0(0)} = \sinh(\sigma T_0) e^{-\left(\frac{mu}{\cos\theta_B} + \sigma\right)T_0}$$
$$= \frac{1}{2} \left(1 - e^{-2\sigma T_0}\right) e^{-\mu \frac{T_0}{\cos\theta_B}}, \qquad (3.82)$$

et le rapport de la puissance transmise sur la puissance incidente

$$\frac{\mathcal{P}_0(T_0)}{\mathcal{P}_0(0)} = \cosh(\sigma T_0) e^{-\left(\frac{mu}{\cos\theta_B} + \sigma\right)T_0}$$
$$= \frac{1}{2} \left(1 + e^{-2\sigma T_0}\right) e^{-\mu \frac{T_0}{\cos\theta_B}}.$$
(3.83)

3.3.3 Extinction primaire et secondaire

Comme cela a déjà été mentionné, lorsque la taille des cristallites devient supérieure à ~ $\Lambda_0/10$, la théorie géométrique ne s'applique plus et il faut alors considérer la théorie dynamique. Or la théorie dynamique prédit que de l'interaction entre les faisceaux direct et réfléchi va résulter une extinction du faisceau réfléchi (le Pendellösung). Cet effet est appelé *extinction primaire* (c.f. figure 3.14), il a lieu au sein de chaque cristallite.

Lors de la traversée du cristal, le faisceau 'voit' un grand nombre de cristallites. Si celles-ci sont suffisamment désorientées pour que l'écart angulaire entre leurs plans soit supérieur à la largeur de Darwin, alors chaque cristallite diffracte une portion différente du faisceau⁴. Dans ce cas l'intensité totale diffractée est la somme des intensités diffractées par les cristallites. Cependant si deux cristallites successives ont des orientations quasi parallèles, alors la première va enlever de l'intensité au faisceau qui arrive sur la suivante. Ce phénomène est appelé *extinction secondaire*. Il apparaît d'un point de vue macroscopique dans le cristal et est pris en compte dans la théorie exposée plus tôt.

Un cristal mosaïque dont les cristallites sont suffisamment petites pour que la théorie géométrique s'applique et dont les cristallites sont suffisamment désorientées pour que l'extinction secondaire y soit nulle est appelé cristal *idéalement imparfait*.

3.3.4 Courbes de diffraction

Dans la pratique, deux cas se présentent :

- Soit on réalise une rocking curve, ce qui nécessite de faire tourner le cristal dans un faisceau monochromatique (rayonnement synchrotron diffracté par un cristal parfait, ou raie gamma nucléaire), auquel cas on mesure l'intensité diffractée en fonction de l'angle d'incidence du faisceau sur les plans cristallins.
- Soit on place le cristal dans un faisceau polychromatique, ce qui peut se faire à l'aide d'un générateur de rayons X à tube (un faisceau d'électrons accélérés sont arrêtés dans une cible en tungstène, et émettent du rayonnement de freinage), auquel cas on mesure soit l'intensité en fonction de l'énergie diffractée, ce qui nécessite un spectromètre, soit l'intensité en fonction de la position sur le détecteur, ce qui nécessite une caméra. mais surtout c'est le cas de la lentille γ .

De ces deux options, c'est la première qui permet d'obtenir la meilleure caractérisation des cristaux car elle ne nécessite qu'un compteur (et un faisceau monochromatique!), et ne met pas en jeu la résolution du détecteur (spatiale ou spectrale). Cependant il faut noter que le deuxième cas correspond à l'utilisation des cristaux sur une lentille de Laue.

Lorsqu'on étudie des cristaux, on réalise des rocking curves et lorsqu'on simule une lentille, on calcule le spectre et la distribution spatiale des photons diffractés. Ces trois courbes sont reliées les unes aux autres.

On pose :

$$\alpha = 2W(0)QT_0 = 4\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}\frac{QT_0}{\Omega},$$
(3.84)

⁴la notion de portion de faisceau est explicité au début du §3.3.1

 et

$$u = \frac{\Delta\theta}{\Omega/2}$$

On rappelle que dans cette expression Q est l'intégrale du profile de diffraction d'une cristallite (sa réflectivité intégrée) divisé par l'épaisseur de la cristallite t_0 . Dans le cas où $t_0 \ll \Lambda_0$, Q_{dyn} devient égal à Q_{cin} . Cependant lorsque ce n'est pas le cas, il faut prendre le résultat de la théorie dynamique pour calculer Q (c.f. equation 3.75).

On trouve pour la réflectivité, la largeur à mi-hauteur de la courbe de diffraction et la réflectivité maximale :

$$R_{mos} = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\alpha \, e^{-\ln(2) \, u^2}} \right) \, e^{-\mu \, T_0} \tag{3.85}$$

$$\Delta u_{fwhm} = 2 \sqrt{\frac{-\ln\left(-\frac{1}{\alpha}\ln\left(\frac{1}{2}\left(1+e^{-\alpha}\right)\right)\right)}{\ln 2}}$$
(3.86)

$$R_{mos}^{max} = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\alpha} \right) e^{-\mu T_0}$$
(3.87)

Une bonne approximation pour la réflectivité intégrée (intégrale de la courbe de diffraction) consiste à prendre le produit de la largeur à mi-hauteur de la courbe de diffraction par sa hauteur, la réflectivité au pic :

$$R_{mos}^{int} = \left(1 - e^{-\alpha}\right) \sqrt{\frac{-\ln\left(-\frac{1}{\alpha}\ln\left(\frac{1}{2}\left(1 + e^{-\alpha}\right)\right)\right)}{\ln 2}} e^{-\mu T_0}$$
(3.88)

u étant sans unité, on peut très facilement obtenir la courbe de diffraction en fonction de la longueur d'onde λ , de l'énergie E ou encore de l'extension spatiale x (profil d'intensité du faisceau diffracté, f étant la distance entre le cristal et le plan sur lequel on projette le faisceau diffracté) en utilisant la relation de Bragg 3.7 et la relation 2.7 :

$$u = \frac{\Delta\theta}{\Omega/2} = -\frac{\Delta\lambda}{\Omega \, d_{hkl}} = \frac{2\theta_B}{\Omega E} \, \Delta E = \frac{hc}{\Omega \, d_{hkl} \, E^2} \, \Delta E = \frac{\Delta x}{\Omega \, f} \tag{3.89}$$

$$\Delta E_{fwhm} = \frac{\Omega E}{2\theta_B} \Delta u_{fwhm} \tag{3.90}$$

$$\Delta \theta_{fwhm} = \frac{\Omega}{2} \Delta u_{fwhm} \tag{3.91}$$

$$\Delta x_{fwhm} = \Omega f \Delta u_{fwhm} \tag{3.92}$$

La figure 3.16 montre le profil de la courbe de diffraction d'un cristal mosaïque pour diverses valeurs de α . La plupart du temps, la forme de la courbe de diffraction est dominée par la fonction de distribution angulaire des cristallites (une gaussiènne dans le cas présent), sauf lorsque α devient largement supérieur à 1.

Remarque : La courbe obtenue pour $\alpha = 10$ dans la figure 3.16 pourrait paraître plus intéressante que les autres, mais en fait, son intégrale est beaucoup plus petite du fait qu'elle est obtenue en utilisant un cristal très épais par rapport à sa mosaïcité, ce qui implique une forte absorption (et donc un rapport intensité intégrée sur masse très défavorable pour une application spatiale)

Le tableau 3.9 donne des exemples de valeurs de α pour divers couples mosaicitéépaisseur du de la réflexion Cu111. Le calcul de la FWHM de la courbe de diffraction résultante est donné dans diverses unités. On remarque que l'approximation $\Delta \theta_{fwhm} \approx \Omega$ n'est valable que pour les cristaux très fins par rapport à l'épaisseur optimale correspondant à leur mosaicité, caractérisés par $\alpha \ll 1$. Dans le cas général, il faudra donc utiliser l'expression 3.86 pour évaluer la bande passante d'un cristal.



FIG. 3.16: Forme des courbes de diffraction pour diverses valeurs de α . A droite est représentée la réflectivité divisée par le facteur d'absorption $\exp(-\mu T_0)$, et normailsée à 1. A gauche, trois exemples concrets montre les courbes de réflectivité pour des valeurs de α proches de celles utilisées pour les courbes de droite. Les paramètres cristallins utilisés pour réaliser ces courbes sont détaillés dans le tableau 3.9.

m	T_0	α	Δu_{fwhm}	ΔE_{fwhm}	$\Delta \theta_{fwhm}$	Δx_{fwhm}
(arcsec)	(mm)			(keV)	(arcsec)	(mm)
30	1	0,408	2,149	$13,\!15$	$32,\!23$	$31,\!25$
30	5	2,040	2,711	$16,\!60$	$40,\!67$	$39,\!43$
30	20	$8,\!158$	3,772	$23,\!09$	$56,\!58$	$54,\!87$

TAB. 3.9: Exemple de valeur de α et FWHM de la courbe de diffraction dans différentes unités pour différents couples mosaïcité - épaisseur . Les calculs sont effectués avec les paramètres suivants : Cu111; E = 500 keV; $t_0 = 40 \ \mu m$; $f = 100 \ m$; $T_{exp} = 300 \ K$.

La figure 3.17 contient trois graphiques montrant l'évolution de α en fonction de l'énergie diffractée, de la mosaicité et de la longueur des cristallites. La réflexion considérée est Cu111, dont les paramètres de base (lorsqu'ils ne varient pas) sont : E = 500 keV, $\Omega = 30$ arcsec, $t_0 = 40 \,\mu m$. L'épaisseur du cristal simulé est optimisée pour chaque vecteur (E, Ω, t_0) suivant la formule 4.16 de la page 105, avec une limite inférieure fixée à 2 mm. Dans ces conditions, α reste sur l'intervalle [0,5;4] quels que soient les paramètres de cristal et de diffraction.

La figure 3.18 montre l'efficacité de diffraction d'un cristal mosaïque suivant la valeur de α . L'efficacité de diffraction se définie comme le rapport de l'intensité diffractée sur l'intensité transmise lorsqu'il n'y a pas de diffraction. C'est en fait la réflectivité sans le terme d'absorption linéaire. Dans le cas d'un cristal mosaïque, l'efficacité de diffraction maximum est limitée à 50%.



FIG. 3.17: Evolution du paramètre α en fonction de l'énergie, de la mosaïcité et de la longueur des cristallites. Les valeurs fixes sont : réflexion : Cu111, E = 500 keV, $\Omega = 30$ arcsec, $t_0 = 40 \,\mu m$. Pour chaque valeur de (E, Ω, t_0) , l'épaisseur est optimisée (c.f. texte).



FIG. 3.18: Efficacité de diffraction maximum (au pic) et intégrée en fonction de α .

3.4 Diffraction dans les cristaux à plans cristallins courbes

Les cristaux à plans courbes représentent une alternative très intéressante aux cristaux mosaïques pour obtenir une bande passante supérieure à celle proposée par les cristaux idéaux. Les cristaux auxquels nous allons nous intéresser maintenant ont des plans cristallins présentant une courbure qui sera sphérique dans notre cas. Cette courbure permet d'offrir au faisceau incident une distribution d'orientation des plans diffractants caractérisée par une fonction créneau. Ceci constitue le premier atout de ce type de cristaux. Lorsqu'on envoie un faisceau polychromatique parallèle sur le cristal, le faisceau diffracté aura un spectre en énergie de forme carrée (centré sur l'énergie correspondant à l'angle d'incidence sur le plan moyen), et surtout une extension spatiale carrée elle aussi. Dans le cadre d'une lentille de Laue, la dispersion des photons sur le plan de détection est alors limitée comparé au cas où l'on utilise des cristaux mosaïques. Comme nous allons le voir, ces cristaux présentent donc des avantages par rapport aux cristaux mosaïques, mais aussi des inconvénients.

3.4.1 Obtenir des cristaux à plans diffractants courbes

Il existe 3 approches pour obtenir des cristaux à plans courbes :

1. Gradient thermique. L'application d'un gradient thermique sur un cristal parfait entraîne une dilatation différentielle entre l'extrémité froide et l'extrémité chaude. En conséquence, les plans atomiques prennent une courbure sphérique, le coté convexe vers l'extrémité chaude. L'avantage de cette méthode est qu'elle produit une courbure très propre des plans, ce qui mène à de bons résultats, comme indiqué dans [Smither *et al.*, 2005b]. Cependant l'inconvénient est qu'elle nécessite un dispositif important autour du cristal pour maintenir le gradient thermique, sans parler de l'énergie consommée. Ces deux points sont rédhibitoires pour la fabrication d'une lentille γ spatiale dont les contraintes majeures sont le poids, et la surface efficace (qui est reliée à la surface de cristaux collectant les photons de la source).

2. Courbure élastique. Courber un cristal parfait dans le but d'élargir sa bande passante est une méthode courante dans les synchrotrons pour obtenir plus de flux autour d'une énergie donnée (nous avons utilisé un cristal de germanium courbé à l'ESRF pour l'une des expériences, cf. chapitre suivant). A l'aide d'un dispositif complexe il est possible d'obtenir une courbure (cylindrique) très pure, qui donne une bande passante idéale. Cependant, cette méthode a en commun avec la précédente de nécessiter un appareillage lourd et encombrant, ce qui est absolument impossible à concilier avec les contraintes d'une lentille γ spatiale. Il est possible de courber de façon élastique un cristal en le collant sur un support, mais pour une lentille de Laue, la géométrie ne s'y prête pas bien (voir figure 3.19).

Une possibilité toutefois pourrait être d'obtenir cette déformation plastique par collage, mais cette idée n'a pas été exploitée au cours de ce travail.

3. Gradient de concentration. Un alliage binaire cristallin dont la concentration des constituants varie le long de l'axe de croissance provoque une courbure sphérique des plans cristallins perpendiculaires au gradient de concentration. C'est particulièrement vrai dans le cas ou les deux constituants sont des atomes de tailles différentes, comme par exemple le silicium et le germanium. C'est la méthode que nous avons choisi car c'est la seule qui produise une courbure intrinsèque au cristal. Une fois les cristaux produits et découpés, ils ne nécessitent plus aucun dispositif extérieur pour conserver la courbure de leurs plans. Nous verrons dans le §4.3.3, comment ces cristaux sont produits, dans l'immédiat, nous allons nous intéresser aux calculs de l'intensité diffractée et de la réflectivité.

3.4.2 Intensité diffractée : Extension de la théorie PPK

Cette partie s'appuie sur les travaux publiés par [Malgrange, 2002] et [Keitel *et al.*, 1999] ainsi que sur les résultats énoncés dans [Authier, 2001].

La diffraction des rayons X dans les cristaux courbes est un cas particulier de la diffraction dans les cristaux déformés. Penning et Polder [1961] et Kato [1963, 1964a,b] ont développé indépendamment une théorie d'optique géométrique de la propagation des rayons X dans les cristaux déformés. Leurs théories mènent au même résultat que l'on appelle théorie PPK ou théorie géométrique. Ils ont montré que les champs d'onde, qui se propagent en ligne droite dans les cristaux parfaits, suivent des trajectoires courbes dans les cristaux déformés tout comme la lumière se propageant dans un milieu à gradient d'indice de réfraction.

Par la suite on considère un cristal d'épaisseur T_0 en géométrie Laue symétrique. On place l'axe z perpendiculaire à la surface, positif en s'enfonçant dans le cristal.

La théorie PPK introduit le gradient de contrainte β , paramètre qui décrit la déformation des plans diffractants :

$$\beta = \frac{\Lambda_0}{\cos^2 \theta_B} \frac{\partial^2 \vec{h}. \vec{u}}{\partial s_0 \, \partial s_h}.$$
(3.93)



FIG. 3.19: Positionnement d'un cristal à plan courbe pour réaliser une lentille de Laue. Les plans diffractants sont symbolisés par les tirets, le faisceau incident faisant un angle de θ_B avec le plan moyen (en tiret point).

 \vec{u} est le vecteur déplacement de l'atome par rapport à sa position idéale, \vec{h} le vecteur du réseau réciproque, et $\vec{s_0}$ et $\vec{s_h}$ sont respectivement les vecteurs unitaires dans les directions des faisceaux incidents et réfléchis. On remarque que β est proportionnel à la longueur d'extinction Λ_0 , i.e. proportionnel à l'énergie du faisceau incident. En conséquence, un cristal relativement parfait peut se comporter comme un cristal fortement déformé à plus haute énergie, effet que l'on a pu constater au cours des expériences présentées dans le chapitre suivant.

Du fait que l'on se place en géométrie de Laue symétrique, et que l'angle θ_B est petit, on a :

$$\frac{\partial^2 \vec{h}.\vec{u}}{\partial s_0 \,\partial s_h} = \cos^2 \theta_B \frac{\partial^2 \vec{h}.\vec{u}}{\partial z^2} - \sin^2 \theta_B \frac{\partial^2 \vec{h}.\vec{u}}{\partial z^2}$$
$$\approx \cos^2 \theta_B \frac{\partial^2 \vec{h}.\vec{u}}{\partial z^2} \tag{3.94}$$

D'autre part, selon la théorie PPK, à une profondeur z dans le cristal, $\eta(z)$, le paramètre de déviation défini en 3.62, prend la valeur :

$$\eta(z) = \eta_i + \beta z$$

La variation de η sur l'épaisseur du cristal vaut $\Omega = \beta T_0$, ce qui donne la valeur angulaire

$$\Omega = \beta T_0 \delta_w. \tag{3.95}$$

 Ω , la largeur angulaire du domaine de réflexion est l'équivalent de la mosaicité dans un

cristal à plans courbes⁵. En utilisant les équations 3.93 et 3.94 on ré-écrit Ω :

$$\Omega = \Lambda_0 T_0 \delta_w \, \frac{\partial^2 \vec{h}. \vec{u}}{\partial z^2} \tag{3.96}$$

Sous cette forme, on constate que la valeur de Ω est indépendante de l'énergie. Ω , qui est accessible par la mesure de la FWHM de la rocking curve, ne dépend que de la courbure des plans et de l'épaisseur du cristal.

Dans le cas d'un alliage $\operatorname{Si}_{1-x}\operatorname{Ge}_x$ où x varie le long de l'axe de croissance, Smither et al. [2005a] donnent une formule permettant de relier le gradient de concentration en germanium C_{Ge} au rayon de courbure des plans cristallins R_c (valable uniquement pour les faibles concentrations en germanium) :

$$R_c \approx \frac{2500}{\nabla C_{Ge}} = \frac{T_0}{\Omega} \tag{3.97}$$

avec C_{Ge} en pourcentage atomique. Ainsi on peut relier facilement la largeur angulaire du domaine de réflexion (mesuré en faisant une rocking curve) au gradient de concentration en germanium dans le cristal. Connaissant la valeur de Ω , il est possible d'évaluer le gradient de contrainte β à l'aide de l'équation 3.95 :

$$\beta = \frac{\Omega}{T_0 \delta_w} \tag{3.98}$$

La théorie PPK ne convient plus lorsque le gradient de contrainte devient trop important. Authier et Balibar [1970] ont montré qu'elle est valide tant que la variation d'orientation des plans diffractants sur une distance égale à la longueur d'extinction reste très inférieure à la largeur de Darwin. Si cette condition n'est pas remplie, un nouveau champ d'onde se crée à l'endroit où la trajectoire des faisceaux est parallèle aux plans diffractants, enlevant de l'intensité au faisceau réfléchi. On montre que cela se produit lorsque β dépasse la valeur critique β_c :

$$|\beta| > \beta_c \qquad \text{avec } \beta_c = \frac{\pi}{2\Lambda_0}$$

$$(3.99)$$

En géométrie de Laue et dans le cas d'un gradient de contrainte constant, la fraction de l'intensité qui est transférée au nouveau champ d'onde est égale à [Balibar *et al.*, 1983]

$$\exp(-2\pi\beta_c/|\beta|) \tag{3.100}$$

Il est intéressant de noter que

$$\beta_c/|\beta| = \frac{\pi d_{hkl}T_0}{2\Omega \Lambda_0^2} \propto \lambda^2 |F_{hkl}|^2, \qquad (3.101)$$

⁵Par commodité, on continuera a parler de mosaïcité pour décrire ω , bien ces cristaux n'ont rien à voir avec des cristaux mosaïques

i.e. lorsque la condition $|\beta| > \beta_c$ est satisfaite, l'intensité transférée dans le nouveau champs d'onde (donc enlevée du faisceau diffracté) augmente fortement avec l'énergie du faisceau incident, et diminue lorsque le facteur de structure augmente.

L'intensité du faisceau réfléchi qui sort du cristal est donc [Keitel et al., 1999] :

$$I_h = I_0 \left(1 - e^{-2\pi \frac{\beta_c}{|\beta|}} \right) e^{-\frac{\mu T_0}{\cos \theta_B}}$$
(3.102)

On définit aussi une variable nommée α qui est égale au produit de la courbure des plans cristallins par la longueur d'extinction divisé par la largeur de Darwin :

$$\alpha = \frac{\partial \theta / \partial T \Lambda_0}{\delta_w} = \frac{\Omega \Lambda_0}{T_0 \delta_w} = \frac{\Omega \Lambda_0^2}{T_0 d_{hkl}} = \frac{pi}{2} \frac{|\beta|}{\beta_c}$$
(3.103)

 α exprime la déviation angulaire des plans cristallins sur une longueur d'extinction en unité de largeur de Darwin. La condition pour qu'un nouveau champ d'onde soit créé (et donc que l'expression 3.102 soit valide) peut se ré-écrire :

$$\alpha > \pi/2 \tag{3.104}$$

L'intensité diffractée est alors

$$I_h = I_0 \,\left(1 - e^{-\frac{\pi^2}{\alpha}}\right) \, e^{-\frac{\mu \, T_0}{\cos \theta_B}} \tag{3.105}$$

3.4.3 Interprétation au travers du concept de surface de dispersion

Dans le cas d'un cristal faiblement déformé, la théorie PPK démontre que les trajets des champs d'onde dans le cristal sont courbes, ce qui est dû au déplacement des tiepoints sur les surfaces de dispersion depuis les points P_i à l'interface d'entrée du cristal jusqu'aux points P'_i $(i \in [1, 2])$ à l'interface de sortie.

Pour des distorsions qui restent dans la limite $|\beta| < \beta_c$, ce qui arrive dans les cristaux quasiment parfait pour des photons de haute énergie, la courbure de la trajectoire est beaucoup plus importante car le diamètre de la surface de dispersion est plus petit (grandeur égale à l'inverse de la longueur d'extinction), i.e. l'intervalle d'angles sur lequel la surface de dispersion dévie significativement des asymptotes perpendiculaires à $\vec{s_0}$ et $\vec{s_h}$ est beaucoup plus petit.

La déviation du faisceau apparaît donc comme un noeud sur la trajectoire (figure 3.20). Les conditions aux limites peuvent être appliquées aux interfaces d'entrée et de sortie de la même façon que dans le cas d'un cristal parfait : A l'entrée dans le cristal, un champ d'onde se propage suivant $\vec{s_0}$ et l'autre suivant $\vec{s_h}$, toute l'intensité étant transférée au premier. Au cours de la propagation de ce champ d'onde, le tiepoint se déplace le long de la surface de dispersion, et à la sortie du cristal le champ d'onde se propage suivant $\vec{s_h}$, ce qui signifie que toute l'intensité est transférée au faisceau réfléchi (en négligeant l'absorption).

Cependant dans le cas $|\beta| > \beta_c$ lorsque le tiepoint de la branche 1 de la surface de dispersion (correspondant au champs d'onde principal) arrive au niveau du point A_{o1} ,


FIG. 3.20: **Haut** : représentation schématique de la surface de dispersion lorsqu'un faisceau incident vient exciter le tiepoint de la branche 1 en P_1 . Du fait que les plans soient courbes, au cours de la traversée du cristal, ce tiepoint va glisser de P_1 jusqu'à la position P'_1 . Si le gradient de contrainte $|\beta|$ est supérieur à la valeur critique β_c , lorsque le tiepoint passe au niveau de A_{o1} (lorsque le vecteur de Poynting est parallèle aux plans diffractants), un transfert d'énergie se fait vers un nouveau champ d'onde dont le tiepoint est situé sur la branche 2 de la surface de dispersion. Ce phénomène enlève de l'intensité au faisceau réfléchi. **Bas** : vue dans l'espace direct du trajet des champs d'onde dans le cristal. Le virage est sec car à haute énergie, le diamètre de la surface de dispersion est petit (égal à l'inverse de la longueur d'extinction). Adapté de Authier [2001].

un nouveau champs d'onde est créé qui va emporter une partie de l'intensité (voir figure 3.20). A la sortie du cristal, ce champs d'onde nouvellement créé contribue au faisceau transmis, ce qui diminue l'intensité du faisceau réfléchi. Ce transfert d'énergie entre les champs d'onde est appelé transfert inter-branche (*inter-branch scattering* en anglais). Il a lieu à l'endroit où la trajectoire du champ d'onde principal fait un virage, lorsque le vecteur de Poynting est parallèle aux plans diffractants.

3.4.4 Calcul de F_{hkl} et d_{hkl} dans le cas d'un alliage binaire

Dans le cas d'un alliage binaire cristallin $A_{1-x}B_x$ dont l'un des composant est très majoritaire ($x \ll 1$), le facteur de structure peut être calculé en prenant le réseau cristallin de l'élément majoritaire et une valeur moyenne du facteur de forme atomique :

$$F_{hkl} = \langle f \rangle F_{hkl} = \sum_{j=1}^{n} e^{-2\pi i (hu_j + kv_j + lw_j)}$$
(3.106)

avec $\langle f \rangle = (1 - x)f_A + xf_B$, f_A et f_B étant respectivement les facteurs de forme atomiques des éléments A et B.

De la même façon, on détermine la distance inter-réticulaire des plans diffractants en prenant la moyenne pondérée des d_{hkl} des éléments présents :

$$d_{hkl,AB} = (1-x)d_{hkl,A} + xd_{hkl,B}$$
(3.107)

3.4.5 Courbes de diffraction

La courbe de diffraction d'un cristal à plans courbe est une fonction créneau, dont la hauteur du plateau est donnée par l'équation 3.102 et la largeur angulaire par Ω .

Pour obtenir la largeur de la bande passante en énergie ou la largeur de la distribution spatiale du faisceau diffracté, on se base sur les formules données en 3.89 :

$$\frac{\Delta\theta}{\Omega} = -\frac{\Delta\lambda}{2\Omega \, d_{hkl}} = \frac{\theta_B}{\Omega E} \, \Delta E = \frac{hC}{2\Omega \, d_{hkl} \, E^2} \, \Delta E = \frac{\Delta x}{2\Omega \, f} \tag{3.108}$$

Chapitre 4

Présentation et étude théorique des cristaux mesurés

Dans ce chapitre, après avoir décrit les spécifications sur les cristaux pour une lentille de Laue, nous allons voir quels sont les candidats que nous avons pu étudier expérimentalement au cours de cette étude. Une présentation de ces cristaux est tout d'abord donnée avec en particulier leur mode et lieu de production. Les théories de la diffraction dans les divers types de cristaux que nous avons vues au chapitre précédent seront appliquées à ces cas concrets pour calculer leurs performances théoriques en fonction des divers paramètres qui s'y appliquent. Mais avant tout, nous allons établir un moyen de comparer les performances des cristaux, le facteur de mérite.

4.1 Facteur de mérite

Pour pouvoir comparer différents cristaux entre eux, il faut définir un critère d'évaluation, un facteur de mérite. Cependant, cela ne peut se faire sans avoir en tête l'application pour laquelle les cristaux vont être utilisés. Par exemple, si l'on cherchait seulement à diffracter le plus de photons possibles, alors la réflectivité intégrée ferait un excellent facteur de mérite. Dans le cas présent, les cristaux sont des éléments diffractants au sein d'une lentille. L'objectif de cette lentille est de réaliser un télescope dont la sensibilité¹ est la plus élevée possible. Ou encore, pour une source ayant un flux donné, l'objectif est de réaliser la détection la plus significative possible. Cela implique que la lentille doit :

- Maximiser la fraction du flux reçu de la source qui est dévié vers le détecteur.

– Minimiser l'étalement du point focal (la PSF).

Le facteur de mérite des cristaux doit être représentatif de ces objectifs.

Pour une source ponctuelle placée sur l'axe de visée, le spot focal ou PSF présente une symétrie cylindrique dont l'axe est l'axe de visée de la lentille. Quel que soit le type de spectre émis par la source, maximiser la significativité de détection (dont le calcul détaillé est présenté en annexe D) revient à maximiser

$$\frac{A_l \,\epsilon_{sf}}{\sqrt{A_{on}}} \propto \frac{S_{in}}{r_{in}} \tag{4.1}$$

avec :

- $-A_{on}$: Surface du détecteur sur laquelle le signal est intégré.
- $-A_l$: Surface efficace de la lentille à l'énergie considérée.
- $-S_{in}$: Nombre de coups intégrés sur la surface A_{on}
- $-\epsilon_{sf}$: Rapport S_{in} sur le nombre total de photons diffractés.
- $-r_{in}$: rayon du cercle délimitant la surface A_{on}

La PSF ayant une symétrie cylindrique, la surface A_{on} est un disque dont le rayon est noté r_{in} . Le profil de la PSF pouvant prendre plutôt une forme gaussiènne ou plutôt une forme de créneau en fonction de la nature des cristaux, de leur mosaïcité, de leur section, et de la longueur focale, il est important de ne pas simplement se fixer un pourcentage du signal à prendre en compte pour déterminer la surface A_{on} . Pour chaque cas la surface retenue est celle qui maximise le rapport S_{in}/r_{in} . Déterminer les valeurs optimales r_{in}^{opt} et S_{in}^{opt} implique de calculer la PSF, ce qui a été possible grâce au code présenté dans le paragraphe 6.1.

Lors du design d'une lentille, deux cas peuvent se présenter :

- La masse allouée aux cristaux représente la contrainte majeure.
- La masse de cristaux n'est pas une contrainte, ou bien, la surface allouée aux cristaux représente la contrainte majeure.

Dans le premier cas, le facteur de mérite devra être proportionnel à la significativité de détection et inversement proportionnel à la masse de cristaux. Dans le second cas, seule la

 $^{^{1}}$ La sensibilité est caractérisée par le plus petit flux détectable avec une significativité donnée. Par conséquent une grande sensibilité correspond à un petite flux détectable, c.f. annexe D

significativité de détection est à maximiser. Ainsi, si la masse est déterminante, le facteur de mérite est défini par :

$$FM^m = \frac{S_{in}^{opt}}{r_{in}^{opt}M_{crist}},\tag{4.2}$$

sinon le facteur de mérite s'écrit :

$$FM = \frac{S_{in}^{opt}}{r_{in}^{opt}} \tag{4.3}$$

Pour une bande d'énergie donnée, le but sera donc de réaliser une lentille maximisant FM^m ou FM suivant que la masse allouée au cristaux est une contrainte ou non. les facteurs de mérite étant calculés à partir des performances globales d'une lentille, on peut les utiliser pour optimiser tous les paramètres : longueur focale, type de cristaux, réflexion, taille de cristaux, mosaicité, ...

Dans l'ordre des optimisations, on essaiera d'abord de maximiser FM; si les paramètres de la lentilles correspondant au maximum de FM sont atteints alors que la masse totale n'excède pas la limite (il y a toujours une limite de masse dans un projet spatial...), alors on les conserve. Si par contre la limite de masse est dépassée, il faudra recommencer l'optimisation en considérant cette fois FM^m comme facteur de mérite.

On voit ici qu'on ne peut comparer les cristaux que dans le cadre du design d'une lentille donnée. Cette comparaison sera donc faite dans le chapitre 6, lors du design de la lentille du Gamma-Ray Imager.

4.2 Spécifications des cristaux pour lentille de Laue

Comme nous le verrons dans le chapitre 6, une lentille gamma spatiale nécessite entre 100 et 300 kg de cristaux découpés en petits éléments de dimensions de l'ordre du cm². Cela peut représenter entre 5000 et 50000 éléments, qui doivent pouvoir être produits, orientés, découpés et montés dans des délais et coûts raisonnables. Bien que l'on soit conscient de l'enjeu final, le premier critère de choix pour la présente étude est de trouver les cristaux qui diffractent le plus efficacement.

4.2.1 Choix des matériaux

Le choix des matériaux diffractants est de première importance, mais il est soumis à de nombreuses contraintes, dont les premières sont les plus évidentes :

- 1. Le matériau doit exister de façon stable sous forme cristalline à température ambiante.
- 2. Il doit être assez dur et mécaniquement robuste pour être manipulé et orienté avec précision sans se dégrader, et ne pas s'altérer avec le temps.
- 3. Il doit être disponible en grande quantité (plusieurs centaine de kilogrammes) à un prix raisonnable.
- 4. La qualité cristalline doit être constante et reproductible en grande quantité.

5. Enfin, le cristal doit présenter un domaine de diffraction adapté à la réalisation d'une lentille de Laue (c.f. § suivant).

Dans un premier temps, on ne considère que les éléments purs. Les trois premières contraintes permettent déjà d'éliminer une grande partie du tableau périodique des éléments. La figure 4.1 représente la densité électronique des éléments dans l'état solide cristallin. On a vu dans le chapitre précédent que la densité électronique joue directement sur l'intensité diffractée par le biais du facteur de structure (qui fait intervenir le facteur de forme atomique). Donc plus la densité électronique est importante, et plus le cristal sera efficace pour diffracter. Sur le figure 4.1, les points noirs représentent les éléments qui satisfont les trois premières contraintes.



FIG. 4.1: Densité électronique des éléments purs dans l'état cristallin. Les cercles pleins représentent les éléments qui satisfont les conditions 1, 2 et 3 sur le choix des matériaux. D'après Kittel [1972], p. 37.

Cependant, s'intéresser à la densité électronique ne permet pas de connaître de manière quantitative la faculté qu'à un cristal à diffracter les rayonnements. La figure 4.2 montre le pouvoir de diffraction de quelques cristaux usuels en diffraction (source code XOP, M. Sanchez del Rio, ESRF) et quelques cristaux d'intérêt particulier pour une lentille gamma : le rhodium, l'argent, le tantale, le tungstène et l'or. Le pouvoir de diffraction est défini comme le facteur de structure divisé par le volume de la maille cristalline. Cette valeur est proportionnelle à l'inverse de la longueur d'extinction pour une longueur d'onde donnée.

On constate que le cuivre est le meilleur des cristaux 'usuels'. Viennent ensuite à égalité le germanium, le GaAs, l'InP, l'InAs et l'InSb. Les cinq matériaux rajoutés sont



FIG. 4.2: Pouvoir de diffraction de différents cristaux usuels en diffraction, et de matériaux potentiellement intéressants pour la réalisation d'un lentille gamma. Les facteurs de structure $|F_{hkl}|$ sont calculés pour les réflexions 111 à l'exception du SiC où la réflexion 220 est représentée (structure hexagonale compacte). Les cristaux sont classés par numéro atomique moyen croissant. Source : code XOP (ESRF, M. Sanchez del Rio). Les réflexions Rh111, Ag111, Ta200, W200 et Au111 ont été ajoutés à cette liste pour comparaison.

les vainqueurs, avec l'or, le tungstène et le tantale suivis de l'argent et du rhodium. Ces cinq matériaux n'ont pas été étudiés lors de ce travail, mais étant donné leur potentiel, il serait intéressant de chercher des producteurs capables de fournir les quantités demandées avec une reproductibilité satisfaisante.

4.2.2 Largeur du domaine de diffraction

Il y a plusieurs façons de disposer les cristaux sur une lentille, dont les plus évidentes sont en spirale ou en cercles concentriques. La deuxième méthode est celle que nous avons choisie car elle procure une symétrie qui simplifie la conception et la réalisation (possibilité de segmenter la lentille en plusieurs quartiers identiques). De cette géométrie naît la limite inférieure sur la largeur du domaine de diffraction (mosaïcité) : il faut que deux anneaux adjacents centrés sur les rayons r_i et r_{i+1} (avec $r_i < r_{i+1}$) produisent des bandes passantes spectrales suffisamment larges pour assurer une couverture en énergie continue :

$$E_i - E_{i+1} \le \Delta E_{fwhm} \tag{4.4}$$

Dans le cas de cristaux mosaïques, à l'aide des équations 2.12, 3.86 et 3.89, cette condition devient :

$$\Omega \geq \frac{r_{i+1} - r_i}{f \,\Delta u_{fwhm}} \tag{4.5}$$

$$\geq \frac{r_{i+1} - r_i}{2f\sqrt{\frac{-\ln\left(-\frac{1}{\alpha}\ln\left(\frac{1}{2}(1+e^{-\alpha})\right)\right)}{\ln 2}}}$$
(4.6)

où α est défini à la page 77 par l'expression 3.84.

Dans le cas de cristaux à plans courbes, la condition est

$$\Omega \ge \frac{r_{i+1} - r_i}{2f} \tag{4.7}$$

Ces expressions nous donnent la mosaïcité minimum en fonction de la taille radiale des cristaux et de la focale de la lentille. Etant donné que l'on cherche à obtenir la surface collectrice la plus grande possible, la taille radiale des cristaux T_{rad} est donnée par :

$$r_{i+1} - r_i = T_{rad} + \delta r, \tag{4.8}$$

avec δr l'interstice entre deux anneaux de cristaux (nécessaire pour le montage, la résistance aux vibrations ainsi qu'aux dilatations thermiques). Des exemples sont donnés dans le tableau 4.1. Comme on peut le constater, les bornes inférieures de mosaïcités acceptables sont assez basses.

f (m)	86		100	
$T_{rad} (\mathrm{mm})$	15	10	15	10
Ω_{mos} (arcsec)	13,8	9,3	11,8	8,0
Ω_{courbe} (arcsec)	$18,\! 6$	$12,\! 6$	$16,\! 0$	$10,\!8$

TAB. 4.1: Exemples de valeurs de mosaicité minimum pour produire une bande passante continue (dont le niveau est égal à la valeur au pic de la surface efficace d'un anneau). Calculs effectués pour $\alpha = 2$, ce qui donne $\Delta u_{fwhm} \approx 2,70$.

Il n'y pas de limite théorique maximum à la mosaïcité souhaitable pour les cristaux, seulement le fait que plus la mosaïcité est grande et plus on diminue la sensibilité idéale, comme nous le verrons dans le chapitre 6. En effet, plus la mosaïcité est grande et plus la PSF de la lentille s'élargit. Cependant, plus la mosaïcité est faible et plus il sera difficile d'atteindre les performances idéales, dû aux contraintes sur la précision d'orientation qui en découlent. La mosaïcité idéale est donc un compromis entre performances et réalisme (peut-on demander que chaque cristal soit orienté à mieux que 1 arcsec par rapport à l'axe de visée de la lentille??).

Les cristaux sélectionnés devront donc être disponibles avec une mosaicité entre 10 arcsec et 1 arcmin, l'idéal étant de pouvoir choisir dans cette plage et d'obtenir une reproductibilité à \pm 10% de la valeur choisie².

²Cette valeur de 10% est pour l'instant arbitraire, une étude quantitative est actuellement en cours.

4.2.3 Structure cristalline

Il n'y a que deux types de structures permettant d'obtenir la mosaïcité souhaitée; la structure mosaïque et la structure 'à plans courbes' (le désordre face à l'ordre...). Nous allons les comparer au moyen du facteur de mérite défini à la section 4.1. Pour maximiser le facteur de mérite, on cherche à produire un spot focal le plus compact possible. Pour cela les cristaux à plans courbes ont un avantage, l'image qu'ils produisent sur le plan de détection est la convolution de deux fonctions 'créneau', la distribution angulaire des plans diffractants et l'extension radiale du cristal, alors que les cristaux mosaïques produisent une empreinte dont le profil est la convolution d'une pseudo-gaussiènne par un créneau, ce qui donne à nouveau une pseudo-gaussiènne. La figure 4.3 montre les empreintes (distribution spatiale des photons diffractés) produites sur le plan focal par un cristal mosaïque et un cristal à plans courbes.

Pour que la comparaison ne soit pas biaisée, il s'agit dans les deux cas de germanium 111 focalisant une énergie centrée sur 500 keV. Dans les deux cas, les cristaux ont une section de 15x15 mm² et une mosaïcité égale à 30 arcsec, ils diffractent une bande passante centrée sur 500 keV depuis un anneau de 759,2 mm de rayon situé à 100 m du plan focal. Les épaisseurs sont optimisées selon les formules données aux sections 4.4.1.1 et 4.4.2.1 : 10,1 mm pour le cristal mosaïque, et 13,3 mm pour le cristal à plans courbes.



FIG. 4.3: Empreintes d'un cristal de Ge 111 mosaïque (à gauche) et à plans courbes (à droite) (voir les détails dans le texte).

Comme expliqué plus tôt, on voit que la figure produite par le cristal à plans courbes est moins étalée. Cela se retrouve sur la figure 4.4 qui montre deux PSF obtenues par deux 'lentilles' identiques (constituées d'un seul anneau comportant 304 cristaux de germanium) dont la seule différence est la structure cristalline des cristaux. Le tableau 4.2 présente une comparaison quantitative des figures présentées en 4.4.

L'annexe D présente la méthode utilisée pour estimer la sensibilité d'un télescope utilisant une lentille de Laue. On voit que dans tous les cas, maximiser la sensibilité (ce



FIG. 4.4: Comparaison entre le spot focal produit par un anneau de cristaux mosaïques et celui produit par le même anneau contenant des cristaux à plans courbes. Tout est identique au cas présenté en figure 4.3 à l'exception que dans le cas présent, 304 cristaux remplissent l'anneau. Le rayon optimale r_{in}^{opt} à prendre en compte pour optimiser le niveau de détection est représenté par le cercle noir.

qui signifie minimiser le flux minimum détectable $f_{n_{\sigma}}$), revient à minimiser

$$\frac{\sqrt{A_{on}}}{A_l^m \epsilon_{sf}} \propto \frac{r_{in}^{opt}}{S_{in}^{opt}} \tag{4.9}$$

où S_{in} est le nombre de coups de signal encerclés dans le périmètre de rayon r_{opt} sur le détecteur.

Comme on peut le constater sur cet exemple, les cristaux à plans courbes sont plus performants pour la réalisation d'une lentille de Laue que les cristaux mosaïques, ils seront donc choisis préférentiellement.

4.3 Présentation des différents cristaux étudiés

Quatre types de cristaux ont été étudiés lors des différentes campagnes de mesures :

- du cuivre mosaique,
- du germanium mosaique,
- du silicium germanium à gradient de concentration : $Si_{1-x}Ge_x$, x augmentant le long de l'axe de croissance,
- des empilements de wafers de silicium et de germanium.

4.3.1 Le cuivre

Les cristaux de cuivre que nous avons étudiés sont produits par le groupe monochromateur de l'Institut Laue Langevin (ILL, Grenoble) dirigé par P. Courtois. L'ILL est un institut qui a pour but de mettre à la disposition de la communauté scientifique des

	Cristaux	Cristaux	Différence
	mosaïques	à plans courbes	(%)
Nbre de coups total (cps)	4601	6066	$31,\!8$
Surface efficace au pic (cm^2)	173,5	$287,\!9$	66,0
r_{in}^{opt} (cm)	$1,\!22$	$1,\!12$	- 8,2
S_{in}^{opt} (cps)	2575	4135	$60,\!6$
ϵ_{sf}	$0,\!537$	$0,\!653$	$21,\!6$
M_{crist} (kg)	$3,\!68$	$4,\!83$	$31,\!25$
FM	$2111,\!6$	$3691,\!9$	74,9
FM^m	$573,\!5$	764, 4	$33,\!3$

TAB. 4.2: Analyse quantitative des simulations montrées en figure 4.4. Les termes sont explicités dans la section 4.1.

faisceaux de neutrons. C'est dans ce cadre qu'a été créé le groupe monochromateur qui s'est équipé ou a directement développé les méthodes de croissance, de caractérisation, d'orientation et de découpe des cristaux de cuivre. Ces cristaux de cuivre ultra-purs sont utilisés pour la réalisation des monochromateurs à neutrons, qui sont en fait une sorte de lentille de Laue (voir figure 4.5) dont les contraintes seraient très relâchées : la mosaïcité souhaitée est de plusieurs dizaines de minutes d'arc.



FIG. 4.5: Monochromateur à neutrons fait de cristaux de cuivre à l'Institut Laue Langevin.

Le cuivre cristallin est obtenu par la méthode Bridgman : Un creuset en forme de 'bouteille à l'envers' contenant un germe cristallin au fond est rempli de cuivre pur en granule. Ce creuset est placé dans un four permettant d'obtenir un gradient de température vertical. La température de fusion du cuivre est d'abord atteinte en haut, puis descendue jusqu'à la limite du germe. Toute la matière est alors liquide à l'exception du germe. Le niveau de la température de fusion est alors remonté très lentement, ce qui provoque la cristallisation à partir du germe. C'est donc l'orientation des plans cristallins dans le germe qui détermine l'orientation du cristal.





FIG. 4.6: Droite : four Bridgman à l'ILL. Gauche : Boule de cuivre cristallin de 8 cm de diamètre et 18 cm de haut. L'extrémité où se trouvait le germe a été coupée.

4.3.2 Le germanium

Les cristaux de germanium mosaïque qui ont pu être mesurés proviennent de l'anneau 0 de la lentille CLAIRE. Il s'agit en fait de $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ où $x \sim 1 \%$. Ces cristaux ont été développés et produits à l'Institut für KristallZüchtung (IKZ, Berlin), en collaboration avec l'ILL et le CESR (c.f. Laporte [2000]).

Les cristaux de germanium purs sont obtenus par la méthode de Czochralski. Cela consiste à placer dans un creuset en rotation la matière à cristalliser, qui est chauffée jusqu'à dépasser son point de fusion. Ensuite un germe accroché à une tige filetée descend jusqu'à tremper dans le bain de matière liquide, et est ensuite remonté lentement. La cristallisation se produit à l'interface liquide-solide. Le germanium a tendance à cristalliser de façon parfaite, ce qui n'était pas souhaitable pour la lentille CLAIRE (valeur de mosaïcité souhaitée comprise entre 20 arcsec et 1 arcmin).

Une méthode de croissance originale a alors été développée à l'IKZ, basée sur l'ajout de silicium en faible quantité dans le germanium pour perturber la maille cristalline. Le silicium n'a pas de limite de solubilité dans le germanium, cela signifie qu'il est possible de réaliser des alliages ayant n'importe quelle concentration, depuis le silicium pur jusqu'au germanium pur. Le problème est que le silicium à une plus grande solubilité en phase solide que le germanium, ce qui fait qu'il passe préférentiellement dans le cristal appauvrissant le bain en silicium et créant un gradient de concentration dans le cristal.

Pour les cristaux de CLAIRE, un remplissage continu en silicium dans le bain a été mis en place de façon à palier cet effet 'parasite' [Laporte, 2000; Abrosimov *et al.*, 1997], ce qui a permis de produire de nombreuses boules de $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ dont environ 50 % du volume était de qualité exploitable pour la lentille CLAIRE. La durée de croissance d'une boule était de environ 30h, pour un volume de ~ 150 cm³.

4.3.3 Le silicium-germanium

Le silicium-germanium à gradient de concentration que nous avons mesuré est produit à l'IKZ. Il est obtenu par la méthode de Czochralski en plaçant dès le début la totalité de la matière à cristalliser dans le creuset. Comme expliqué précédemment, le silicium passant préférentiellement dans la phase solide, la concentration en germanium augmente dans le bain au fil de la croissance du cristal, ce qui créé un gradient de concentration dans le cristal, parallèle à son axe de croissance, le début du cristal étant plus riche en silicium que la fin.

L'évolution de la concentration dans le cristal est donné par la loi de Scheil-Pfann :

$$C_{Ge}^{s} = k C_{0,Ge} (1-g)^{k-1}, (4.10)$$

avec $C_{0,Ge}$ la concentration initiale de germanium, g la fraction massique solidifiée, et k le coefficient de ségrégation. k est supposé décroître linéairement de 0,4 à 0,3 quand la fraction solide g augmente de 0 à 1 [Abrosimov *et al.*, 1996].

La concentration en germanium dans la phase liquide est reliée à celle en phase solide par :

$$C_{Ge}^s = k C_{Ge}^l \tag{4.11}$$

Du fait que les atomes de germanium sont plus gros que les atomes de silicium (distance entre plus proches voisin de 2,45 Å pour le Ge contre 2,35 Å pour le Si), l'augmentation de la concentration de germanium dans le cristal de silicium déforme progressivement les plans, comme illustré sur la figure 4.7. En conséquence, les plans perpendiculaires à l'axe de croissance prennent une courbure sphérique.

Cette courbure peut être reliée au gradient de concentration par la formule [Smither *et al.*, 2005a] (valide dans la limite d'une faible concentration de germanium)

$$\nabla C_{Ge}[at.\%\,\mathrm{cm}^{-1}] = \frac{25}{R_c[\mathrm{m}]} \tag{4.12}$$

où le gradient de concentration est exprimé en pourcentage atomique par centimètre et le rayon de courbure des plans R_c est en mètres. La mosaïcité³ du cristal étant reliée à la courbure des plans par $\Omega = c_c T_0 = T_0/R_c$, pour avoir un cristal dont la bande passante est homogène en tout point, il faut que le gradient de concentration soit constant dans le cristal. Pour cela, l'IKZ a développé une méthode de croissance cristalline faisant varier le diamètre de la boule. La figure 4.8 montre une de ces boules.

4.3.4 Les empilements de wafers

Dans la recherche du cristal idéal, une nouvelle voie a été explorée : réaliser un cristal composite fait d'un empilement de wafers⁴ dont l'épaisseur est optimisée en fonction de

³Comme cela a déjà été mentionné, par abus de langage, on nommera la FWHM de la distribution angulaire des plans diffractants 'mosaïcité', même si il est clair que les cristaux à plans courbes n'ont pas la structure mosaïque.

⁴Le terme wafer désigne une tranche de cristal semi-conducteur très fine utilisé dans le domaine de la micro-électronique comme substrat pour réaliser des circuits intégrés.



FIG. 4.7: Gauche : Schéma d'une boule de $Si_{1-x}Ge_x$ à gradient de concentration, x augmentant vers le bas. Dû à l'augmentation de la concentration en germanium, les plans parallèles à l'axe de croissance divergent, ce qui implique que ceux qui sont perpendiculaires (les plans (111) sur cet exemple) présentent une courbure sphérique. Droite : un four de croissance Czochralski à l'IKZ.



FIG. 4.8: Boule de SiGe à gradient de concentration constant produite à l'IKZ. Le trait bleu représente le profil idéal pour obtenir un gradient de concentration constant. Source : N. Abrosimov, IKZ.

l'énergie que l'on cherche à diffracter. Le but est d'obtenir le même effet que dans les cristaux à plans courbes : chaque wafer diffracte une portion (angulaire ou spectrale) du faisceau, qui ne pourra plus être rediffractée par la suite. Pour cela il faut que chaque wafer soit légèrement désorienté par rapport aux autres, l'idéal étant que la désorientation entre chaque wafer soit égale à la largeur de Darwin (la largeur de Darwin, notée $2\delta_w$, est égale à la FWHM du domaine de réflexion d'un cristal parfait).

L'idée provient du fait que les cristaux parfait de silicium et de germanium sont couramment produits alors que les cristaux mosaïques, qui ont par ailleurs le gros inconvénient d'avoir une efficacité de diffraction limitée à 50 %, sont difficiles à obtenir de façon reproductible. On fabrique donc une sorte de super-cristal mosaïque, dont on choisi la taille des "cristallites", à base de cristaux parfaits. Le schéma 4.9 montre le cas idéal, les wafers sont parfaitement ordonnés et ont un écart angulaire constant entre eux. Ainsi la bande passante créée est carrée, et l'efficacité de diffraction égale à celle d'un cristal parfait.



FIG. 4.9: Empilement de wafers idéal. L'écart angulaire entre chaque wafer est régulier et égal à la largeur de Darwin. Dans ce cas, la mosaicité est définie par le nombre de wafers.

Plusieurs essais ont été réalisés, d'abord en utilisant des wafers de silicium produits et découpés par l'entreprise Siltronix, puis avec du germanium produit à l'IKZ et découpé en wafers par Siltronix. Les wafers ont été livrés par série : une série provient d'un unique cristal, ses wafers ont été numérotés pour être conservés dans l'ordre initial dans le but que les défauts de découpes se compensent d'un wafer au suivant (voir figure 4.10. Les wafers sont bruts de découpe.

Les empilements ont été réalisés en salle blanche du CESR (classe 100). Les wafers sont manipulés avec des gants sans talc, ou avec une pince en plastique. Avant d'être empilés, les wafers sont dépoussiérés à l'air sec.

Le tableau 4.3 présente les différents wafers que nous nous sommes procurés. La figure 4.10 montre les spécifications pour la découpe de wafers. Ces wafers ont été utilisés pour créer différents assemblages dans des supports en aluminium que l'on peut voir sur la figure 4.11. Puis dans un deuxième temps, ils ont été modifiés : tous les wafers en germanium ont été partiellement attaqués à l'acide pour enlever les couches superficielles qui auraient pu être perturbées par la découpe. La partie attaquée à l'acide ne représente qu'une hauteur de 7 mm en partant du coté opposé au plus grand méplat, de façon à ce que l'on puisse toujours reconstituer l'ordre du cristal original, avec les défauts de découpes complémentaires entres deux wafers successifs. Les empilements ont à nouveau été faits dans les supports en aluminium.

Matériau	Nombre	Epaisseur	Diamètre
		(mm)	(mm)
Ge	27	$0,\!3$	25,4
Ge	17	0,5	25,4
Si	30	0,25	50,8
Si	15	$0,\!5$	50,8

TAB. 4.3: Inventaire des wafers à disposition

Les wafers de Silicium de 0,5 mm d'épaisseur ont été découpés pour extraire de chacun quatre morceaux de 1 cm de coté. Plusieurs empilements de quatre plaquettes ont été réalisés suivant des techniques différentes dans un but prospectif. Les résultats sont présentés dans le chapitre suivant.



FIG. 4.10: Spécifications pour la découpe des wafers de silicium. Le principe est le même pour la découpe des wafers de germanium, sauf que toutes les dimensions sont divisées par deux (en raison du coût).





FIG. 4.11: Wafers de silicium en cours d'empilement dans leur support en aluminium. Le support a été dessiné à l'ILL par Bernard Hamelin. Il comprend trois vis de serrage avec ressorts, et les deux cotés sont évidés au niveau des wafers pour limiter l'absorption lors des mesures aux rayons X.

4.4 Etude théorique

Nous allons maintenant voir le comportement des différents cristaux en fonction de leurs paramètres principaux. Dans le cas d'un cristal mosaïque, pour une réflexion (hkl) et une énergie donnée, les paramètres qui influent sur la réflectivité sont :

- La taille des cristallites t_0
- La mosaicité Ω
- L'épaisseur T_0

Pour un cristal à plans courbes, ces paramètres sont :

- La mosaicité Ω
- L'épaisseur T_0

Le paramètre déterminant la réflectivité d'un cristal à plans courbes est en fait la courbure des plans diffractants c_c , mais comme on se place dans le cas (idéal) où la courbure est uniforme, elle est reliée à la mosaïcité et à l'épaisseur par $c_c = \Omega/T_0$.

Comme cela a été mentionné au début de ce chapitre, le but de cette étude est de réaliser une lentille de Laue, et donc on ne cherche pas seulement à maximiser la réflectivité des cristaux, mais plutôt à optimiser la sensibilité de l'instrument, ce qui est caractérisé par le facteur de mérite. Cependant, le but de cette section est de voir le comportement théorique des cristaux, plus que de les comparer entre eux, c'est pourquoi on va s'attacher à la réflectivité.

4.4.1 Cristaux mosaiques

4.4.1.1 Epaisseur optimale - Réflectivité en fonction de l'épaisseur

On cherche ici à optimiser l'épaisseur d'un cristal en fonction de sa mosaicité et de la taille de ses cristallites pour une énergie donnée. On se base sur l'expression de la réflectivité au pic donnée en 3.87 page 78 :

$$R_{mos}^{max} = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\alpha} \right) e^{-\mu T_0}$$
(4.13)

$$= \frac{1}{2} \left(1 - e^{-2W(0)Q_{dyn}T_0} \right) e^{-\mu T_0}$$
(4.14)

$$\frac{\mathrm{d}R_{mos}^{max}}{\mathrm{d}T_0} = 0 \iff T_0 = \frac{\ln\left(\frac{2W(0)Q_{dyn}}{\mu} + 1\right)}{2W(0)Q_{dyn}} \tag{4.15}$$

En utilisant les expressions de W(0) et de Q_{dyn} données respectivement aux pages 75 et 73, on obtient

$$T_{0} = \frac{1}{\mu} \frac{\ln\left(4\sqrt{\ln 2} \pi^{3/2} \frac{d_{hkl}}{\Omega \mu \Lambda_{0}^{2} \cos \theta_{B}} f(A) + 1\right)}{4\sqrt{\ln 2} \pi^{3/2} \frac{d_{hkl}}{\Omega \mu \Lambda_{0}^{2} \cos \theta_{B}} f(A)}$$

$$\approx \frac{1}{\mu} \frac{\ln\left(4\sqrt{\ln 2} \pi^{3/2} \frac{d_{hkl}}{\Omega \mu \Lambda_{0}^{2}} f(A) + 1\right)}{4\sqrt{\ln 2} \pi^{3/2} \frac{d_{hkl}}{\Omega \mu \Lambda_{0}^{2}} f(A)}$$
(4.16)

La taille des cristallites intervient dans f(A) qui est définie page 73. La fonction f(A) tend vers 1 lorsque la taille des cristallites est très petite devant la longueur d'extinction.



FIG. 4.12: Réflectivité au pic en fonction de l'épaisseur d'un cristal de cuivre pour les réflexions 111 et 200 à 500 keV. A gauche la mosaicité est fixée à 30 arcsec et l'on voit l'influence de la taille des cristallites. A droite, la taille des cristallites est fixée à 40 μ m et l'on voit l'influence de la mosaïcité. Sur chaque courbe, les losanges et les étoiles indiquent respectivement l'épaisseur donnant le maximum et 99% du maximum de réflectivité.

On peut voir sur les figures 4.12 l'évolution de l'épaisseur optimale du Cu pour les réflexions 111 et 200 à 500 keV en fonction de la mosaïcité et de la taille des cristallites. On remarque notamment l'importance primordiale de la taille des cristallites sur la réflectivité : lorsque elles sont épaisses, l'épaisseur optimale du cristal est plus grande, impliquant que le cristal est plus lourd et a une moins bonne réflectivité. La taille des cristallites est à comparer avec les longueurs d'extinction à 500 keV $\Lambda_{0,Cu111} = 246\mu m$ et $\Lambda_{0,Cu200} = 265\mu m$. On obtient sensiblement le même effet avec la mosaicité : plus elle est importante et plus le cristal doit être épais, ce qui engendre une baisse de la réflectivité au pic.

L'autre point à remarquer est que ces courbes présentent un maximum relativement plat. On voit qu'en prenant l'épaisseur correspondant à 99% de la réflectivité maximum, on peut économiser jusqu'à 15% d'épaisseur (et donc de masse).

La figure 4.13 montre l'épaisseur optimale du Cu pour les réflexions 111 et 200 en fonction de l'énergie. Encore une fois on remarque l'importance de la taille des cristallites : lorsque celles-ci sont épaisses, la courbe fait des vagues dû aux effets du Pendellösung.(



FIG. 4.13: Epaisseur optimale en fonction de l'énergie pour des cristaux de cuivre selon les réflexions 111 et 200. La forme des courbes sur le graphique de gauche s'explique par le Pendellösung dans les cristallites, lorsque leur longueur s'approche de la longueur d'extinction.

4.4.1.2 Réflectivité en fonction de la mosaicité



FIG. 4.14: Réflectivité au pic en fonction de la mosaïcité dans le cas de cristaux de cuivre pour les réflexions 111 et 200 à 500 keV (graphique de gauche) et à 850 keV (graphique de droite). Pour chaque valeur de mosaicité l'épaisseur du cristal est optimisée.

En se basant toujours sur les exemples de cristaux de cuivre utilisant les réflexions 111 et 200, on regarde maintenant l'influence de la mosaïcité sur la réflectivité au pic des cristaux. La figure 4.14 présente la réflectivité au pic en fonction de la mosaïcité. Pour chaque valeur de mosaïcité, l'épaisseur du cristal est optimisée en utilisant la formule 4.16. On voit que la valeur au pic diminue de façon importante lorsque la mosaïcité augmente.

Sur la figure 4.15 est présentée la réflectivité intégrée sur la bande passante du cristal. Pour cela, on suppose un cristal de 1 cm^2 , qui reçoit un flux monochromatique divergent de 1 photon/cm²/arcsec. La réflectivité intégrée représente donc un nombre de photons diffractés. Bien entendu, l'augmentation de la mosaïcité entraîne une augmentation du signal diffracté (mais au prix d'un étalement sur le plan focal, c.f. chapitre 6 pour une optimisation de la mosaïcité en fonction du facteur de mérite). On remarque sur l'ensemble de ces courbes qu'il est primordial de se placer dans le cas des cristaux idéalement imparfaits pour conserver une bonne efficacité : On voit clairement l'influence de la taille des cristallites, surtout à plus basse énergie (graphique de gauche) ou le nombre de photons diffractés varie quasiment d'un facteur 20 lorsque la taille des cristallites passe de 10 à 200 μ m.



FIG. 4.15: Réflectivité intégrée sur la bande passante angulaire du cristal (en coups) en fonction de la mosaïcité dans le cas de cristaux de cuivre selon les réflexions 111 et 200 à 500 et 850 keV (respectivement à gauche et à droite). Pour chaque valeur de mosaicité l'épaisseur du cristal est optimisée.

4.4.1.3 Réflectivité en fonction de l'énergie

Le graphique 4.16 présente la réflectivité au pic en fonction de l'énergie diffractée, toujours dans le cas de cristaux de cuivre selon les réflexions 111 et 200. Sur ces courbes, l'influence de la taille des cristallites est à nouveau de premier ordre, notamment avec l'apparition d'effets liés au Pendellösung lorsque la taille des cristallites approche de la longueur d'extinction. Avec des cristaux dont l'épaisseur minimum est limitée à 2 mm, ce qui est peut être déjà trop fin pour le cuivre compte tenu de sa ductilité, la réflectivité au pic maximum dans le cas d'un cristal idéalement imparfait de 30 arcsec de mosaïcité diffractant selon la réflexion 111 est de ~ 37%, à 250 keV. Cette réflectivité tombe à 30% à 500 keV. Ce résultat reste extremement bon, même s'il faut bien garder en tête que c'est dans un cas quasi idéal où l'épaisseur moyenne des cristallites est de 40 μ m.



FIG. 4.16: Réflectivité au pic en fonction de l'énergie diffractée dans le cas de cristaux de cuivre selon les réflexions 111 et 200. Pour chaque énergie l'épaisseur du cristal est optimisée.

4.4.2 Cristaux à plans courbes

4.4.2.1 Epaisseur optimale - Réflectivité en fonction de l'épaisseur

Dans cette section, nous allons établir l'épaisseur optimale d'un cristal en fonction de la mosaicité Ω et de l'énergie E. Le but est de déterminer la courbure des plans cristallins qui maximise la réflectivité du cristal (en tenant compte de l'absorption dans le cristal). Pour cela, on se base sur l'expression 3.105 que l'on rappelle ici :

$$I_h = I_0 \left(1 - e^{-\frac{\pi^2}{\alpha}}\right) e^{-\frac{\mu T_0}{\cos \theta_B}}$$
$$= I_0 \left(1 - e^{-\frac{\pi^2 T_0 d_{hkl}}{\Omega \Lambda_0^2}}\right) e^{-\frac{\mu T_0}{\cos \theta_B}}$$

Etant donné que l'on considère un cristal dont la courbure des plans c_c est uniforme, On peut la relier à la mosaicité et l'épaisseur :

$$c_c = \frac{1}{R_c} = \frac{\Omega}{T_0} \tag{4.17}$$

On obtient pour l'intensité diffractée

$$I_{h} = I_{0} \left(1 - e^{-\frac{\pi^{2} d_{hkl}}{c_{c} \Lambda_{0}^{2}}} \right) e^{-\frac{\mu \Omega}{c_{c} \cos \theta_{B}}}$$
(4.18)

On pose

$$M = \frac{\pi^2 d_{hkl}}{\Lambda_0^2} \quad \text{et} \quad N = \frac{\mu \Omega}{\cos \theta_B}$$
(4.19)

On obtient alors la courbure maximisant la réflectivité en résolvant l'équation :

$$\frac{\mathrm{d}I_h}{\mathrm{d}c_c} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}c_c} \left[\left(1 - e^{-\frac{M}{c_c}} \right) e^{-\frac{N}{c_c}} \right] = 0 \tag{4.20}$$

$$\Leftrightarrow \quad c_{c,\Omega}^{opt} = \frac{M}{\ln\left(1 + \frac{M}{N}\right)} \tag{4.21}$$

En utilisant la formule 4.17, on obtient l'épaisseur en fonction de l'énergie et de la mosaicité :

$$T_0(\Omega, E) = \frac{\Omega \ln\left(1 + \frac{M}{N}\right)}{M} \tag{4.22}$$

Le gradient de concentration permettant de réaliser cette courbure peut être estimé dans le cas d'un cristal $Si_{1-x}Ge_x$ à l'aide de l'expression 3.97 mentionnée en page 84.

Dans la suite nous étudions la réflectivité des cristaux à plans courbes en se basant sur les exemples du germanium (dont nous ne disposons pas) et du silicium. Les cristaux modélisés sont purs, ce qui constitue une bonne approximation des cristaux réels que nous avons mesurés, en ce qui concerne le silicium.

La figure 4.17 (à gauche) montre la réflectivité au pic en fonction de l'épaisseur pour une énergie de 300 keV. Alors que le maximum de réflectivité est relativement plat dans le cas du silicium, il est beaucoup plus piqué pour le germanium. Dans le cas du silicium, comme avec les cristaux mosaïques, on gagne jusqu'à 15% en épaisseur (et donc en masse) en prenant l'épaisseur donnant 99% de la réflectivité maximum.



FIG. 4.17: Influence de l'épaisseur (gauche) et épaisseur optimisant la réflectivité au pic (droite) dans le cas de cristaux de Si et Ge ayant des plans courbes(réflexion 111) pour les mosaîcités de15, 30 et 45 arcsec. Les losanges et les étoiles indiquent respectivement l'épaisseur donnant le maximum et 99% du maximum de réflectivité.

La figure 4.17 (à droite) montre le résultat du calcul précédent; l'épaisseur optimale en fonction de l'énergie pour diverses mosaïcités. On voit que le silicium arrive vite à saturation aux énergies qui nous intéressent avec une épaisseur optimale dépassant les 30 mm avant 400 keV (pour $\Omega = 30$ arcsec). Le germanium, quant à lui, semble beaucoup mieux adapté avec des épaisseurs optimales qui restent inférieures à 25 mm jusqu'à 1 MeV.

4.4.2.2 Réflectivité en fonction de la mosaicité

La figure 4.18 montre la réflectivité au pic (plateau) en fonction de la mosaïcité du cristal. Pour chaque valeur de mosaïcité et d'énergie, l'épaisseur du cristal est optimisée selon la formule 4.22. Comme précédemment, on remarque d'abord que les courbes dépassent largement la limite de réflectivité à 50% imposée aux cristaux mosaïques. On voit aussi que la réflectivité diminue assez rapidement avec la mosaïcité. Pour 30 arcsec, le silicium ne semble réellement intéressant qu'à basse énergie (la courbe en trait plein représente la réflectivité à 300 keV).



FIG. 4.18: Réflectivité en fonction de la mosaicité pour des cristaux de Si et Ge à plans courbes, selon la réflexion 111. Pour chaque valeur de mosaicité, l'épaisseur est optimisée.

4.4.2.3 Réflectivité en fonction de l'énergie

La figure 4.19 montre la réflectivité de cristaux de Si et Ge à plans courbes (réflexion 111) en fonction de l'énergie et pour diverses valeurs de mosaïcité. De même que pour la courbe précédente, l'épaisseur du cristal est optimisée selon la formule 4.22 pour chaque couple (E, Ω) . Si on fixe la limite d'intéret à 30% pour un cristal de 30 arcsec de mosaicité, alors on voit sur ce graphique que le silicium n'est plus intéressant au delà de 340 keV. Par contre on ne peut s'empêcher de remarquer que le germanium dépasse les 35% de réflectivité à 511 keV.



FIG. 4.19: Réflectivité de cristaux de Si et Ge à plans courbes selon la réflexion 111 en fonction de l'énergie. Pour chaque valeur de mosaicité, l'épaisseur est optimisée.

4.4.3 Empilement de wafers

4.4.3.1 Epaisseur optimale

L'épaisseur optimisant la réflectivité au pic d'un cristal parfait est la demi longueur d'extinction, ou en deuxième choix (si la première valeur est trop petite pour se tenir mécaniquement) 1,5 fois la longueur d'extinction. Dans le deuxième cas, la réflectivité au pic est quasiment identique au cas optimal, mais lorsqu'on considère un grand nombre de wafers empilés, l'absorption linéaire fait la différence.

$$t_0 = \frac{\Lambda_0}{2} \tag{4.23}$$

Les valeurs optimales de t_0 sont tracées en fonction de l'énergie dans la figure 4.20. Les wafers deviennent extrêmement fragiles et difficiles à manipuler lorsque leur épaisseur descend en deçà de 200 μ m. En considérant l'épaisseur minimum optimale $t_0 = 0, 5\Lambda_0$, et la réflexion 111, l'énergie seuil d'utilisation du silicium est environ 160 keV et celle du germanium est environ 380 keV.



FIG. 4.20: Epaisseur optimisant la réflectivité au pic pour un cristal parfait de Si ou de Ge.

4.4.3.2 Réflectivité en fonction de l'énergie

Voyons maintenant le potentiel de réflectivité des cristaux parfaits; le graphique 4.21 montre la réflectivité en fonction de l'énergie pour les wafers dont nous disposons. L'effet du Pendellösung est flagrant dû à la variation de la longueur d'extinction avec l'énergie, ce qui entraîne une variation du rapport t_0/Λ_0 . Pour certaines énergies, la réflexion est complètement éteinte, alors que pour d'autres la réflectivité approche les 100 %.

Le potentiel des wafers semble intéressant à haute énergie, notamment ceux en germanium. Cependant la bande passante offerte se réduit fortement avec l'énergie, comme on peut le constater sur la figure 4.22 qui montre la largeur de Darwin du silicium et du germanium en fonction de l'énergie. La FWHM de la courbe de diffraction d'un cristal parfait est égale à la largeur de Darwin. Cela signifie que pour réaliser une bande passante de 30 arcsec, avec des wafers en germanium, à 500 keV, il faudrait réaliser un empilement *idéal* de environ 250 wafers! (chaque wafer présentant un écart angulaire de $2\delta_W$ avec ses voisins). Avec des wafers de Ge (réflexion 220) d'épaisseur optimale de 250μ m, cela représente une épaisseur totale de 62,5 mm, soit un coefficient de transmission de 0,070.... bref absolument pas un progrès par rapport aux cristaux mosaïques!



FIG. 4.21: Réflectivité maximum du pic central en fonction de l'énergie pour les différents wafers dont nous disposons. L'effet du Pendellösung est ici pleinement visible du fait que la longueur d'extinction varie avec l'énergie.

Le graphique de gauche de la figure 4.23 est construit sur la base de ce raisonnement (empilement idéal, constitué de wafers dont l'épaisseur est optimisée en fonction de l'énergie) pour tenter de cerner dans quels cas ces cristaux composites pourraient être intéressants. Il faut noter que plus le cristal présente un pouvoir de diffraction élevé et plus sa largeur de Darwin est importante à énergie constante (voir figure 4.22). Cela nous renvoie au graphique 4.1, mais avec l'avantage que cette fois, on ne cherche plus un cristal mosaïque idéalement imparfait ou ayant des plans courbes, mais simplement un cristal présentant peu de défauts, ce qui est beaucoup plus facile à réaliser. Un empilement de wafers dont chacun présente une bande passante de plus de 1 arcsec commencerait à être réellement intéressant.

Si l'on fixe comme condition qu'un empilement *ideal* reproduisant une mosaicité de 30 arcsec doit atteindre 30% de réflectivité au minimum, alors un empilement constitué de wafers de Si (réflexion 220) ne sera utilisable que jusqu'à 240 keV. Cette énergie seuil est portée à 450 keV pour un empilement de wafers de Ge selon la réflexion 2220. Mais en fait, le facteur le plus limitant est d'ordre pratique, si on fixe une limite de 50 wafers par empilement, alors on élimine complètement le silicium, et on peut monter jusqu'à 160 keV pour un empilement de de wafers de Ge de 30 arcsec ou à 240 keV pour un empilement de 20 arcsec. A noter tout de même que dans ce dernier cas, la réflectivité approcherait (toujours dans le cas idéal) les 70%. Cependant, cet empilement n'est pas réalisable, car il nécessiterait des wafers beaucoup trop fins, de l'ordre de 100 μ m (figure 4.20).

On voit donc que cette technique de cristaux composites ne peux pas être utile pour une lentille de Laue opérant dans le domaine γ nucléaire, du moins avec le silicium ou le germanium.



FIG. 4.23: Gauche : Réflectivité en fonction de l'énergie pour divers empilements idéaux de wafers (voir texte). Droite nombre de wafers nécessaires pour atteindre les performances du graphique de gauche.

4.5 Conclusion du chapitre

Nous avons présenté et étudié théoriquement les différents cristaux qui ont été mesurés durant cette thèse (à l'exception du germanium à plans courbes qui est encore au stade de l'étude de faisabilité à ce jour). Avant de découvrir les résultats expérimentaux, on voit déjà quels sont les candidats les plus intéressants : Les empilements de wafers semblent disqualifiés avant même de commencer. Nous verrons tout de même quelques résultats expérimentaux qui confirment que cette voie est difficile sinon sans issue. Les cristaux à plans courbes ont un grand potentiel pour réaliser une lentille de Laue, mais le Si_{1-x}Ge_x, l'unique sorte dont nous avons pu disposer pour des mesures, a montré qu'il ne peut être efficace pour nous au-delà de 340 keV. Enfin, les cristaux mosaïques, comme le cuivre et le germanium, présentent quant à eux des performances théoriques moindres, avec une réflectivité plus faible et un étalement des photons sur le plan de détection plus important que les autres types de cristaux. Cependant, ils sont les seuls à être disponibles aujourd'hui avec une relativement bonne reproductibilité, que nous avons pu caractériser au cours de nos mesures.

Chapitre 5

Résultats expérimentaux

Au cours de cette thèse, trois expériences à l'ESRF et une expérience à l'ILL ont été conduites (c.f. liste des expériences en Annexe B). L'accès à ces grands instruments (soumis à proposition) a permis de faire des mesures quantitatives précises de différents échantillons aux énergies adaptées aux objectifs des cristaux. La liste de tous les échantillons mesurés est présentée en Annexe C. Nous allons tout d'abord voir les dispositifs expérimentaux utilisés avant de voir les résultats obtenus sur chacun des cristaux. Les expériences sont relatées sous forme de compte rendu, avec pour chaque échantillon (ou groupe d'échantillon ayant des points communs) une présentation, une analyse des résultats et les conclusions que l'on peut en tirer. A la fin du chapitre, la conclusion reprend les points les plus importants et dresse l'état de l'art des différents cristaux étudiés pour la réalisation d'une lentille de Laue.

5.1 Expériences

5.1.1 Nature des mesures

La caractérisation des cristaux nécessite des rayons X ou gamma qui vont pénétrer dans le cristal et, par diffraction, nous informer sur sa structure cristalline. Du point de vue de l'astronomie γ , on s'intéresse à trois caractéristiques : la mosaïcité, l'efficacité de diffraction, et l'homogénéité. Pour atteindre ces valeurs, on effectue des 'rocking curves' (notée RC). Une RC est une courbe d'intensité en fonction de l'angle entre le faisceau incident et les plans cristallins de l'échantillon. Dans le cas idéal, cela nécessite un faisceau monochromatique et non divergent. L'intensité du faisceau est mesurée par un détecteur qui est alors utilisé comme un simple compteur dans une bande de canaux centrée sur l'énergie du faisceau incident. Le détecteur peut être positionné dans l'axe du faisceau incident, auquel cas on a une RC en transmission (RCtrans), ou bien dans le faisceau diffracté, ce qui conduit à une RC en diffraction (RCdiffr). La résolution de la mesure dépend à la fois de la monochromaticité du faisceau et de sa divergence : plus le faisceau est monochromatique et parallèle, plus la mesure est précise et facile à interpréter puisqu'elle est peu convoluée.



FIG. 5.1: Schémas de rocking curves en réflexion et transmission.

La RCdiffr et RCtrans sont complémentaires : les photons diffractés sont enlevés du faisceau transmis pour être envoyés dans le faisceau diffracté. Elles sont aussi complémentaires dans les informations qu'elles apportent :

– La RCtrans contient à la fois l'intensité du faisceau lorsqu'il n'y a pas de diffraction et lorsqu'il y a diffraction. Cela permet de remonter à l'efficacité de diffraction du cristal. L'efficacité de diffraction se différencie de la réflectivité par le fait qu'elle n'inclue pas l'absorption dans le cristal. La forme du pic (qui est une vallée dans ce cas) nous informe aussi sur la mosaïcité et la distribution angulaire des plans diffractants. Cependant, il arrive fréquemment que plusieurs plans diffractants contribuent simultanément à la diffraction, ce qui fausse la mesure (la probabilité d'avoir une réflexion multiple augmente avec l'énergie). Dans ce cas, des faisceaux diffractés sont envoyés dans plusieurs directions. C'est pourquoi il est nécessaire de vérifier que la RCdiffr est bien complémentaire de la RCtrans. – La RCdiffr est un pic dont la forme nous renseigne sur la distribution angulaire des plans diffractants au sein de l'échantillon. Elle est généralement beaucoup plus propre que la RCtrans et donc se prête mieux à la détermination de la mosaïcité.

5.1.2 Traitement des données

Après avoir apparié les RCdiffr et les RCtrans correspondant au même point de mesure sur le cristal, on les normalise au niveau de la RCtrans à l'extérieur de la 'vallée' de diffraction. Ainsi la valeur au pic de la RCdiffr indique directement l'efficacité de diffraction, de même que le fond de la vallée de la RCtrans indique 1 moins l'efficacité de diffraction. On détermine ensuite la réflectivité en appliquant le coefficient de transmission de l'échantillon (calculé en fonction de l'énergie de mesure, du matériau cristallin et de son épaisseur) à l'efficacité de diffraction.

Pour les cristaux mosaïques, le modèle de Darwin utilisant la théorie dynamique est ajusté sur les données de façon à extraire la mosaïcité et la longueur moyenne des cristallites. On en profite pour noter l'efficacité de diffraction au pic de la courbe ajustée que l'on compare à l'efficacité de diffraction au pic maximum mesurée. L'écart entre ces deux valeurs est un indicateur de l'accord entre le modèle et les données (en plus du χ^2 réduit).

Les résultats sont présentés sous forme de tableau. Les valeurs sont des moyennes sur les différents points de mesures (incluant les rocking curves en transmission et en diffraction), et leurs incertitudes sont l'écart type sur l'ensemble des mesures.

5.1.3 Configuration expérimentale à l'ESRF

L'ESRF est un synchrotron de troisième génération; des paquets d'électrons circulent avec une énergie de 6 GeV dans un anneau de stockage de 844 m de circonférence. Deux sortes d'éléments magnétiques disposés tout au long de cet anneau permettent de produire les rayonnements : les aimants de courbure, qui permettent d'incurver la trajectoire des électrons, et les onduleurs disposés sur des sections droites. La perturbation de la trajectoire des électrons par ces éléments engendre l'émission d'un spectre continu, tangentiellement à la trajectoire des électrons. Les faisceaux de photons ainsi produits sortent de l'anneau de stockage au niveau des aimants de courbures pour produire une ligne de lumière (beamline).

Notre expérience s'est tenue sur la ligne ID15A, ligne équipée d'éléments magnétiques générant un spectre d'énergie s'étendant au delà de 800 keV, mais à haute énergie le flux diminue rapidement. Un monochromateur situé dans la cabine optique permet de sélectionner une énergie. La résolution en énergie dépend du nombre de réflexions (simple ou double), des réflexions utilisées¹, de la qualité du cristal qui sert de monochromateur et de la courbure qui lui est appliquée. Au cours des différentes expériences, des énergies proches de 300 keV, 400 keV, 500 keV et 700 keV ont été utilisées. La figure 5.2 représente la configuration utilisée en septembre 2006 : un monochromateur constitué de deux cristaux de germanium courbés, diffractant suivant les plans (711) en géométrie de Laue. Le détecteur est un germanium coaxial de 1 pouce de diamètre et 3 cm d'épaisseur,

¹La largeur de Darwin associée à une réflexion ayant de grands indices de Miller (711 par exemple) est plus fine que celle associée à une réflexion ayant de plus petits indices (111 par exemple).

refroidi à 77 K par de l'azote liquide. Il peut être placé soit dans le faisceau transmis, soit dans le faisceau diffracté. L'échantillon est monté sur une tour constituée de platines de translation selon x, y et z, de deux berceaux d'axes x et y et d'un goniomètre d'axe z permettant de réaliser les RC. Tous les déplacements et rotations des échantillons, détecteurs et monochromateurs sont motorisés et sont pilotés depuis le poste de contrôle se situant à l'extérieur de la cabine d'expérience. L'échantillon est maintenu en place durant la mesure par un support aspirant (voir figure 5.3) qui a été conçu et réalisé au CESR, sur des conseils de l'ILL. Ce support permet de maintenir parfaitement des échantillons de taille variable et de changer rapidement et simplement d'échantillon.



FIG. 5.2: Configuration expérimentale à l'ESRF lors de l'expérience de septembre 2006. L'ensemble détecteur + collimateur peut se placer soit dans le faisceau transmis, soit dans le faisceau diffracté.

5.1.4 Configuration expérimentale à l'ILL

A l'ILL, la source des rayonnements est un réacteur nucléaire. La fission de l'uranium 235 entraîne une réaction en chaîne qui s'auto-entretient et génère un flux important de neutrons dans toutes les directions. Les neutrons ainsi produits peuvent être utilisés directement (ce qui est le but premier de l'institut), ou bien servent à produire des rayons gamma. C'est le principe des lignes GAMS 4 et 5 (Gamma Spectrometres) : une cible est introduite près du cœur du réacteur et, par capture neutronique, des raies γ nucléaires sont émises. Pour l'expérience de mai 2007, deux cibles constituées d'erbium et d'un composé chloré ont été introduites près du cœur du réacteur, ce qui nous a permis d'avoir des raies (très monochromatiques, $\Delta E/E \sim 10^{-6}$) à 184,285, 517,0696 et 815,986 keV.

Les spectromètres GAMS sont des instruments de grande précision, avec des goniomètres dont les angles sont lus par interférométrie, placé dans un environnement à température contrôlée et vibrations limitées. La résolution angulaire peut atteindre 0,002 arcsec.



FIG. 5.3: Photo de droite : Cristal SiGe19 monté sur le porte échantillon aspirant. Deux vis bouchent les trous non utilisés pour cet échantillon. La pompe à vide est reliée au dispositif par le tuyau que l'on aperçoit sur la droite. Photo de gauche : Vue d'ensemble de la cabine d'expérience, avec le faisceau matérialisé par la flèche rouge. Le faisceau monochromatique sort de la cabine optique par la trappe que l'on aperçoit sur le mur du fond, traverse l'échantillon (entouré en rouge) et entre dans le collimateur du détecteur constitué de deux fentes séparées par un tube, avant d'arriver sur le détecteur que l'on voit au premier plan surmonté de son réservoir d'azote liquide.



FIG. 5.4: Configuration expérimentale à l'ILL lors de l'expérience sur le spectrometre GAMS 4 en mai 2007. De même qu'à l'ESRF, l'ensemble détecteur + collimateur peut se placer soit dans le faisceau transmis, soit dans le faisceau diffracté.

Pour s'affranchir de la divergence du faisceau, une première réflexion est faite sur un monochromateur qui va limiter la divergence du faisceau à deux fois la largeur de Darwin (FWHM). Dans notre cas, pour gagner du flux, on utilise comme monochromateur un cristal de Quartz (100) de environ 2 arcsec de mosaïcité, ce qui nous donne un faisceau de 2 arcsec de divergence FWHM. On est donc très loin d'exploiter cet instrument au maximum...



FIG. 5.5: A gauche : détecteur HPGe caché sous son château de plomb et relié à son réservoir d'azote liquide, en face d'un collimateur et de la 'tente' isotherme abritant la table de l'interféromètre. A droite : A l'intérieur de la 'tente', la table de l'interféromètre et un collimateur. Sur cette image, le faisceau arrive de la droite.

Pour scanner un échantillon, on définit une collimation en plaçant des blocs de plomb sur le goniomètre porte-échantillon, devant l'échantillon. Cette méthode n'est évidemment pas très précise, ce qui limite la section minimum du faisceau que nous pouvons obtenir. De plus, le flux relativement faible nous impose d'augmenter la taille du faisceau, de façon à pouvoir réaliser une rocking curve en moins de 30 minutes. Ainsi l'ILL permet d'obtenir des raies très monochromatiques à haute énergie (des raies à plus haute énergie que ce que nous avons utilisé sont possibles, il suffit de choisir le matériau cible en conséquence), mais le flux reste limité et les instruments GAMS ne sont pas conçus pour scanner un échantillon en différents points.

5.2 Résultats expérimentaux sur le cuivre

Au cours de cette thèse, les différents échantillons de cuivre cristallin qui ont pu être étudiés proviennent de deux boules. La première porte le numéro 805 et a été produite en avril 2003 dans le cadre des activités régulières de l'ILL, i.e. la réalisation de monochromateurs pour neutrons. La deuxième, portant le numéro 834 a été produite en juin 2005, dans le but de réduire le plus possible la mosaïcité. Nous allons voir au travers de quelques échantillons la qualité de ces deux boules, en commençant par la n° 805. Nous nous attacherons ensuite plus longuement à deux échantillons extraits de la boule 834. La liste complète des échantillons et des mesures qu'ils ont subies est présentée en annexe C.



FIG. 5.6: Vue de l'interféromètre de GAMS 4. Dans l'ordre de traversée par le faisceau se trouve, sur le goniomètre de gauche, le cristal de quartz, puis les deux fentes, puis sur le goniomètre de droite qui accueille notre porte échantillon aspirant.

5.2.1 Cuivre mosaïque : Echantillons de la boule 805

5.2.1.1 Objectifs

L'objectifs de ces mesures est de se donner un aperçu de la qualité des cristaux de cuivre existants et de vérifier l'accord du modèle de Darwin avec les performances mesurées. Parmi les quatre échantillons disponibles pour cette première série de mesures, le cristal Cu 805.23 a été découpé en escalier (dans le but de présenter différentes épaisseurs) après avoir été caractérisé une première fois.



FIG. 5.7: Echantillon Cu805.23après sa découpe

5.2.1.2 Configuration expérimentale

Ces mesures ont été réalisées à l'ESRF en deux phases; la première s'est déroulée en novembre 2005 et la seconde en septembre 2006. La première partie de ces mesures
a été notre toute première expérience à l'ESRF. La configuration expérimentale n'était pas encore optimale, avec un monochromateur en silicium à simple réflexion 111 placé dans la cabine d'expérience, ce qui générait un important bruit de fond. Malgré cela, des mesures ont pu être conduites avec un faisceau d'excellente qualité, de 0,02 mm x 0,1 mm de section et 0,16 arcsec de divergence (donné par la largeur de Darwin du silicium à 292 keV, l'énergie sélectionnée pour cette première expérience).

En septembre 2006, la configuration utilisée était celle qui est présentée sur le schéma 5.2. Les mesures ont été réalisées avec un faisceau de 0,7 mm x 2 mm de section (respectivement dans le plan de diffraction et perpendiculairement), ce qui offrait une divergence de 2,5 arcsec, soit une résolution adaptée à nos mesures. Dans cette configuration, les énergies 297 keV, 489 keV et 698 keV ont pu être sélectionnées.

Cristal	Cu 805.11.1	Cu 805.11.3	Cu 805.3	$Cu \ 805.23$
Réflexion hkl	200	200	220	220
Epaisseur (mm)	3,75	$5,\!65$	10,0	$9,\!54$
Energie (keV)	292	292	297	489
Nbre de points	1(2)	1(2)	21	6
$\Omega (arcsec)$	50 ± 8	78 ± 4	175 ± 45	25 ± 7
$t_0 \; (\mu \mathrm{m})$	39 ± 1	53 ± 16	52 ± 9	90 ± 16
Eff. de diffraction (fit)	$0{,}42\pm0{,}02$	$0,\!38\pm0,\!05$	$0{,}34\pm0{,}03$	$0,\!37\pm0,\!04$
Eff. de diffraction (max)	$0{,}47\pm0{,}03$	$0{,}51\pm0{,}02$	$0{,}44\pm0{,}04$	$0{,}42\pm0{,}03$
Réflectivité (fit)	$0,\!29\pm0,\!01$	$0{,}22\pm0{,}03$	$0{,}13\pm0{,}01$	$0{,}19\pm0{,}02$
Réflectivité (max)	$0{,}33\pm0{,}02$	$0{,}30\pm0{,}01$	$0{,}17\pm0{,}01$	$0{,}21\pm0{,}02$
$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$0,\!79\pm0,\!02$	$1{,}07\pm0{,}32$	$0{,}81\pm0{,}14$	$0,85 \pm 0,15$

5.2.1.3 Résultats expérimentaux - Analyse

TAB. 5.1: Résultats des mesures et analyses de quatre échantillons issus de la boule de cuivre n° 805. Les valeurs marquées '(fit)' proviennent de l'ajustement du modèle de Darwin alors que les valeurs marquées '(max)' sont les valeurs maximum mesurées. Sur la ligne 'Nbre de points', la valeur entre parenthèses indique le nombre de RC enregistrées sur le cristal alors que le chiffre principal indique le nombre d'emplacements de mesure sur le cristal. La valeur du paramètre A est calculée pour pouvoir relativiser la taille des cristallites.

Une synthèse des mesures et des résultats pour les quatre échantillons est présentée dans le tableau 5.1. Les cristaux Cu 805.11.1 et Cu 805.11.3 démontrent qu'il existe des cristaux de relativement faible mosaïcité avec une très faible épaisseur moyenne de cristallite, ce qui offre des performances maximum : on relève une réflectivité au pic comprise entre 29% et 33% pour le Cu 805.11.1, ce qui est excellent. La différence entre l'efficacité au pic du modèle ajusté et celle mesurée traduit le désaccord entre le modèle et les courbes enregistrées. On note par exemple une différence importante pour le cristal Cu 805.11.3. Cela se comprend tout de suite lorsqu'on regarde les RC de la figure 5.8. Dans ce cas, le cristal est quasiment polycristallin avec deux grains, dont un de meilleur qualité que l'autre, ce qui arrive en fait assez fréquemment. Cela biaise l'analyse par l'ajustement du modèle de Darwin, car on se retrouve avec une efficacité de diffraction au pic mesurée complètement incompatible avec les valeurs de mosaïcités et d'épaisseur de cristallite déduites.



FIG. 5.8: Gauche :Homogénéité de l'échantillon Cu 805.23 (avant découpe en escalier) selon la réflexion 220, mesuré dans un faisceau de 489 keV : mosaïcité en fonction de la position sur le cristal (l'axe Y désigne l'axe de croissance). Droite : Rocking curves en diffraction et transmission du cristal Cu 805.11.3, avec en trait plein, le modèle de Darwin qui ne s'ajuste vraiment pas bien dans ce cas.

L'échantillon Cu 805.3 provient de l'extrémité de la boule la plus proche du cône, une zone de transition entre le germe, de plusieurs minutes d'arc de mosaïcité, et le corps de la boule sensé être homogène avec une faible mosaïcité. Le fait que le cristal soit très épais pour l'énergie à laquelle il est mesuré introduit un biais dans l'évaluation de la mosaïcité, mais cela ne suffit pas à expliquer cette forte valeur. On voit avec cet échantillon que la mosaïcité dans une boule peut varier fortement d'un point à un autre, et que la partie utile ne représente jamais l'intégralité du volume. De plus, l'importante barre d'erreur attachée à cette forte mosaïcité indique une mauvaise homogénéité.

Le cristal Cu 805.23 n'était pas encore découpé en escalier pour la série de mesure rapportée dans le tableau 5.1. On constate que sa mosaïcité est très faible, exactement dans l'intervalle souhaité pour la réalisation d'une lentille de Laue. Sa longueur moyenne de cristallites est plus importante que pour les autres cristaux, mais cela reste dans une limite acceptable aux vues de ses excellentes performances : son efficacité de diffraction au pic mesurée (moyennée sur les six points de mesures) vaut 0,42. Sa réflectivité n'est cependant pas exessivement élevée, dû au fait que cet échantillon est trop épais pour sa mosaïcité et l'énergie à laquelle il est mesuré : à 489 keV, pour le couple ($\Omega = 27$ ", $t_0 = 90\mu$ m), l'épaisseur optimale théorique d'un cristal de Cu pour la réflexion 220 est de 7,7 mm. L'homogénéité de l'échantillon est tracée sur la figure 5.8 : on voit que la mosaïcité varie en fonction de la position le long de l'axe de croissance du cristal avec une amplitude de 20 arcsec autour d'une valeur moyenne de 27 arcsec.

Malgré cette forte variation de mosaïcité, ce cristal a été découpé en escalier (c.f. figure 5.7) puis re-mesuré sur 2 lignes de 10 points selon la réflexion 220 à 489 keV. La figure 5.9 montre la réflectivité en fonction de l'épaisseur, avec pour comparaison une courbe théorique dont les paramètres sont : $\Omega = 30^{\circ}$, $t_0 = 40 \mu$ m. La courbe théorique ne s'accorde pas du tout avec les mesures, ce qui s'explique par la variation de la mosaïcité



FIG. 5.9: Cristal Cu805.23, réflexion 220, mesures à 489 keV : Réflectivité en fonction de l'épaisseur mesuré sur 2 lignes de points le long du cristal. Le modèle tracé en trait plein noir considère une mosaïcité de 30 arcsec et une longueur moyenne de cristallites de 40 μ m. Le losange indique sa valeur maximum.

dans l'échantillon.

5.2.1.4 Conclusion des mesures sur les échantillons de la boule n° 805

Différents points ressortent de ces mesures :

- Un échantillon dont la mosaïcité moyenne est 27 arcsec a été mesuré, ce qui prouve que nos spécifications sont réalisables.
- Tous les échantillons mesurés ont des longueurs moyennes de cristallites inférieures à 100 μ m, ce qui est signe de qualité pour l'utilisation sur une lentille de Laue.
- On remarque que l'échantillon ayant la plus faible mosaïcité est aussi celui dont la taille moyenne des cristallites est la plus grande, et que c'est l'échantillon qui a été mesuré avec la plus haute énergie (à recouper avec les résultats des échantillons suivants).
- L'homogénéité des cristaux mesurés n'est pas satisfaisante avec des dispersions trop importantes dans les échantillons, et des variations importantes entre échantillons provenant tous de la même boule.
- Il est important de bien évaluer la mosaïcité des cristaux avant de les découper, de façon à déterminer au mieux leur épaisseur optimale.
- On voit qu'il est parfois difficile d'ajuster le modèle de Darwin sur des données prises en un point donné.

5.2.2 Cuivre mosaïque : échantillon Cu834.31

5.2.2.1 Présentation de l'échantillon et objectifs

L'objectif de ces mesures est d'évaluer l'homogénéité du cristal et l'accord des mesures avec les prédictions théoriques. De plus, on s'intéresse dans cette expérience à l'influence du traitement de surface à l'acide (communément appelé 'attaque acide') qui est systématiquement appliqué aux cristaux après leur découpe. Le cristal, découpé par électro-érosion à l'ILL avec la machine du groupe monochromateur, est mesuré une première fois étant brut de découpe, puis les couches superficielles du cristal sont enlevées par attaque acide, et le cristal est mesuré une seconde fois dans des conditions identiques à la première série de mesures. Ce traitement à l'acide a été réalisé à l'ILL, au sein du groupe monochromateur à l'aide d'une solution d'acide nitrique (HNO₃).



FIG. 5.10: Echantillon Cu 834.31. Les dimensions indiquées en noir correspondent au cristal avant son attaque acide. Les rectangles rouges représentent les zones mesurées.

5.2.2.2 Configuration expérimentale

Les mesures ont été effectuées sur GAMS 4 à l'ILL en Mai 2007. Des collimateurs en plomb définissent un faisceau rectangulaire de 2 mm x 11 mm respectivement dans le plan de diffraction et perpendiculairement. Le faisceau incident a les caractéristiques suivantes : sa monochromaticité ($\Delta E/E$) est de l'ordre de 10^{-6} et il présente une divergence angulaire FWHM de ~ 2 arcsec. La table de l'interféromètre étant très fragile et sensible, pour cette série de mesure il n'a pas été possible d'insérer de table de déplacement sur le goniomètre accueillant notre échantillon. On déplace la zone éclairée par le faisceau sur la surface du cristal en effectuant une rotation de la table de l'interféromètre selon l'axe du goniomètre porte-monochromateur, comme représenté sur la figure 5.11.

5.2.2.3 Résultats expérimentaux - Analyse

Le tableau 5.2 présente une synthèse des résultats obtenus avec l'échantillon Cu 834.31 et toutes les RC de ce cristal sont présentées en annexe E.

La mosaicité des plans (110) déduite des mesures en diffraction à 815 keV varie de 45 arcsec à 90 arcsec sur l'ensemble du cristal (figure 5.12). Cependant on voit nettement



FIG. 5.11: Déplacement de la zone de mesure sur le cristal Cu 834.31 sur l'instrument GAMS 4.

des effets de bords, probablement dus à la découpe de l'échantillon, qui induisent une dégradation de la mosaïcité moyenne. Si on ne regarde que la partie centrale du cristal, de -6 à +6 mm, alors la mosaicité (avant le traitement à l'acide) est de 50 ± 5 arcsec, la variation maximale étant de 9 arcsec. Mais cela a t-il un sens? Non car dans une lentille gamma, la totalité de la surface des cristaux doit diffracter. Ainsi en prenant tous les points de mesure, la mosaicité devient 52 ± 13 arcsec, avec une variation maximum de 40 arcsec, ce qui fait que l'homogénéité du cristal n'est pas vraiment satisfaisante.

En comparant les résultats obtenus à 815 keV selon les réflexions 111 et 220 après l'attaque acide, la première chose que l'on remarque est qu'il y a quasiment un facteur deux entre la mosaïcité des plans (110) et celle des plans (111). Cela illustre un phénomène que l'on retrouve assez fréquemment avec les cristaux mosaïques : l'anisotropie de la mosaïcité.



FIG. 5.12: Résultats des rockings curves mesurées en diffraction uniquement. Cristal Cu 834.31 selon la réflexion 220 à 815 keV. Gauche : Mosaïcité VS position sur le cristal. Droite : Efficacité de diffraction au pic VS position sur le cristal. Dans les deux cas, les résultats avant et après le traitement de surface à l'acide (etching) sont montrés.

D'autre part, on constate aussi que la mosaïcité des plans (110) varie entre les mesures

Réflexion (hkl)	111	220	220	220	220
Energie (keV)	815	815	815	184	184
Epaisseur (mm)	19,2	10,8	10,3	10,8	10,3
Etat de surface	acide	\mathbf{brut}	acide	\mathbf{brut}	acide
Nbre de points	1(2)	10(20)	10(20)	1(2)	1(2)
$\Omega (arcsec)$	88 ± 6	52 ± 13	52 ± 16	79 ± 23	74 ± 8
$t_0 \; (\mu \mathrm{m})$	140 ± 29	207 ± 32	192 ± 42	72 ± 7	72 ± 3
Eff. diffraction (fit)	$0,26 \pm 0,04$	$0{,}10\pm0{,}02$	$0{,}10\pm0{,}02$	$0,\!38\pm0,\!01$	$0{,}38\pm0{,}03$
Eff. diffraction (max)	$0,\!37\pm0,\!02$	$0{,}14\pm0{,}03$	$0{,}13\pm0{,}03$	$0,\!50\pm0,\!07$	$0{,}48\pm0{,}03$
Réflectivité (fit)	$0,\!08\pm0,\!01$	$0,\!05\pm0,\!01$	$0,\!06\pm0,\!01$	$0,\!09\pm0,\!01$	$0{,}09\pm0{,}01$
Réflectivité (max)	$0{,}12\pm0{,}01$	$0{,}07\pm0{,}02$	$0{,}07\pm0{,}01$	$0{,}11\pm0{,}02$	$0{,}12\pm0{,}01$
$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$1,09 \pm 0,23$	$1{,}18\pm0{,}18$	$1,\!09\pm0,\!24$	$1,\!81 \pm 0,\!18$	$1{,}81\pm0{,}08$

TAB. 5.2: Mesures sur le cristal 834.31. La mention "acide" indique que le cristal a été traité à l'acide pour retirer ses couches externes, alors que la mention "brut" indique que le cristal est brut de découpe. Comme précédemment, le paramètre A est calculé pour pouvoir relativiser la taille des cristallites.



Angle d'incidence: $\theta - \theta_{\mathsf{B}}$ (arcsec) FIG. 5.13: Rocking curves moyennées sur les 10 points de mesures du cristal Cu 834.31, à 815 keV selon la réflexion 220. Les courbes rouges montrent l'ajustement du modèle de Darwin, la courbe bleu montre le modèle de Darwin utilisant les mêmes paramètres mais une longueur de cristallites négligeable. La courbe bleue représente donc l'efficacité de diffraction maximum pour cette réflexion à cette énergie avec cette mosaïcité.

à 815 keV et celles à 184 keV. Ce phénomène s'explique en considérant les processus d'extinction dans le cristal (extinction primaire et secondaire) : la longueur d'extinction Λ_0 augmente avec l'énergie, ce qui fait qu'une partie des 'défauts' (dislocations, impuretés, ...) actifs à faible énergie perdent de l'influence lorsque l'énergie augmente; leur 'longueur' t_0 devient négligeable devant la longueur d'extinction, ce qui les fait passer dans un régime où l'intensité qu'ils diffractent est proportionnelle à t_0/Λ_0 , qui finit par tendre vers zéro (c.f. 3.14). Cela implique que la distribution angulaire des cristallites perd ses ailes, et que le pic s'affine. A cela s'ajoute le fait que l'extinction primaire dans les cristallites augmente à basse énergie ce qui a pour conséquence de diminuer l'efficacité de diffraction au pic, et donc d'élargir le pic à mi-hauteur.

Une autre chose que l'on remarque est la longueur importante des cristallites déduite des mesures à 815 keV selon les plans (110), ce qui donne une valeur de A proche de 1, et en conséquence une efficacité de diffraction inférieur au maximum potentiel (figures 5.13 et 5.14). La variation de t_0 que l'on note entre les plans (111) et (110) pourrait être interprétée comme une anisotropie (associée à celle de la mosaïcité), encore que l'on manque de statistique et que l'écart soit à peine significatif. Par contre, les valeurs de t_0 des plans (110) diminuent franchement lorsqu'on passe de 815 keV à 184 keV. Cette variation est problématique : ce résultat n'est pas très physique puisque si l'on s'en tient au modèle de Darwin les cristallites ont une signification physique et ne dépendent donc pas de l'énergie de mesure.

Cela peut s'expliquer si l'on considère que le cristal est constitué non pas de cristallites ayant toutes la même taille comme le propose le modèle de Darwin, mais d'une distribution autour de la valeur moyenne. Ainsi, à basse énergie les petites cristallites ont un rôle visible ce qui fait que le pic est large et de relativement bonne efficacité. Ajusté par le modèle de Darwin, on trouve une mosaïcité importante et une longueur moyenne de cristallites assez faible. Au contraire, à haute énergie, seules les plus grandes cristallites ont de l'influence, ce qui a pour conséquences d'affiner le pic, mais aussi de limiter l'efficacité de diffraction puisque l'épaisseur des cristallites donne un facteur A proche de l'unité. Cela nous amène à penser que les mesures à haute énergie mettent en valeur les plus épaisses cristallites parmi une population présentant probablement une distribution continue gaussienne d'épaisseurs. On arriverait donc aux limites du modèle de Darwin, dû au fait que toutes les cristallites n'ont pas la même taille dans le cristal et que les plus petites d'entre elle n'ont d'influence qu'à basse énergie.

Au delà de ce problème, les valeurs de longueur de cristallites déduites des mesures traduisent dans l'ensemble le fait que l'efficacité de diffraction n'atteint pas son maximum potentiel, ce qui est assez négatif pour notre application.

Enfin, comme le tableau 5.2 l'indique, le traitement à l'acide qu'a subi le cristal n'a eu aucune influence significative sur la réflexion 220, tant à 815 keV qu'à 184 keV. La mesure sur les plans (111) n'a pas pu être faite avant le passage à l'acide, nous ne pouvons donc pas conclure sur ces plans. Des tests plus approfondis sur un échantillon statistique de cristaux seraient à faire pour pouvoir tirer des conclusions fermes. En effet, les conditions de découpe de ce cristal n'ont malheureusement pas été consignées, et il semble que 2 machines aient été utilisées (d'après P. Courtois de L'ILL).



FIG. 5.14: Cristal Cu 834.31, E = 815 keV. Efficacité de diffraction au pic mesurées (vert et jaune) et ajustées (rouge et bleu) comparées à la courbe du maximum théorique en fonction de la mosaïcité (obtenue en considérant la taille des cristallites négligeable devant la longueur d'extinction). Les mesures selon la réflexion 220 sont représentées à gauche, (le calcul théorique considère un cristal de 10,3 mm), alors que les mesures selon la réflexion 111 sont présentées à droite (cristal de 19,2 mm d'épaisseur).

La Figure 5.14 montre les performances du cristal comparées au maximum théorique (cas de la théorie cinétique où la taille des cristallites est négligeable devant la longueur d'extinction). Deux séries de points sont représentées sur ces graphiques, l'efficacité au pic mesurée (en vert et jaune) et l'efficacité au pic extraite de l'ajustement (en bleu et rouge). On constate que les valeurs ajustées sont en dessous du maximum théorique, ce qui est normal puisque la taille des cristallites n'est pas négligeable devant la longueur d'extinction (facteur A proche de 1). Par contre, les valeurs au pic mesurées sont parfois supérieures à la courbe théorique, ce qui s'explique par une surestimation de la mosaicité (ce qui décale les points expérimentaux vers la droite). Les pics de diffraction n'étant pas réguliers (voir Annexe E), il arrive qu'une couche du cristal soit de faible mosaicité et présente une forte efficacité de diffraction alors que le reste de la partie éclairée par le faisceau contient plus de défauts. Pourtant l'estimation de la mosaicité se fait sur l'ensemble de l'épaisseur de la zone éclairée (on ajuste le modèle sur l'ensemble de la rocking curve, et pas seulement sur la partie fine du pic), ce qui conduit à associer une grande mosaicité avec une bonne efficacité alors qu'en fait tout se passe comme si l'on avait deux cristaux indépendants juxtaposés. C'est aussi ce phénomène qui conduit à la différence entre le maximum mesuré et celui extrait du modèle ajusté.

5.2.2.4 Conclusion des mesures sur le cristal Cu834.31

Cette série de mesures a été riche d'enseignements, notamment grâce au fait que les mêmes réflexions ont été mesurées à différentes énergies.

- L'échantillon a une mosaïcité de l'ordre de 1 arcmin selon les plans (110), mais elle n'est pas uniforme, probablement à cause de la découpe. On note d'ailleurs que le traitement à l'acide n'a en rien réglé ce problème.
- La mosaïcité dans les cristaux peut être anisotrope prenant des valeurs différentes suivant les plans étudiés.

- La mosaïcité déduite de l'ajustement du modèle de Darwin diminue lorsque l'énergie du faisceau augmente.
- La taille des cristallites déduite de la réflexion 220 à 815 keV est de l'ordre de 200 μ m alors qu'elle n'est que de 70 μ m à 184 keV. Ce point associé au précédent est interprété comme la révélation du fait que le cristal se compose de cristallites de tailles différentes, dont l'importance de la contribution à la diffraction du cristal varie en fonction de l'énergie diffractée.
- Une conséquence des deux points précédents est qu'il faut mesurer les cristaux à une énergie proche de celle pour laquelle ils seront utilisés pour connaître leur caractéristiques 'utiles'. Le modèle de Darwin (le seul actuellement utilisable) ajustée sur une mesure ne permet pas d'extrapoler les caractéristiques d'un cristal à une autre énergie que celle et encore moins pour une autre réflexion. Cela montre les limites de ce modèle qui suppose que toutes les cristallites sont de tailles égales.
- Comme nous l'avions déjà constaté avec les mesures sur la boule n° 805, même à une énergie fixée, le modèle de Darwin représente bien les mesures en moyenne, mais ne reproduit jamais parfaitement une rocking curve donnée (voir annexe E).
- Enfin, on a montré qu'il n'est pas forcément nécessaire d'appliquer un traitement chimique au cristal après sa découpe.

5.2.3 Cuivre mosaïque - échantillons Cu834.21 et Cu834.22

5.2.3.1 Présentation des échantillons et objectifs

L'objectif de ces mesures est de déterminer la qualité du cristal (mosaïcité, efficacité de diffraction) en différents points et en fonction de son épaisseur. Ainsi son homogénéité et l'accord avec les prévisions théorique peuvent être vérifiés. Pour cela nous disposons de 2 cristaux découpés en escalier présentant 7 épaisseurs différentes comme on peut le voir sur la figure 5.15. Le cristal a été produit, orienté et découpé à l'ILL. Un traitement à l'acide a ensuite enlevé environ 0,3 mm d'épaisseur sur chaque face. Les réflexions 111 et 220 peuvent être utilisés selon les différentes épaisseurs.



FIG. 5.15: Echantillons Cu 834.21 et 834.22. Sur l'image de droite, les étoiles représentent les points de mesures réalisés à l'ESRF en février 2007 : en rouge, les mesures à 498 keV et en jaune, les mesures à 698 keV.

5.2.3.2 Configuration expérimentale

Ces cristaux ont été mesurés à deux reprises :

- selon les plans (111) à l'ESRF en février 2007 (les points de mesure sont représentés sur l'image de droite de la figure 5.15). Le faisceau avait une section rectangulaire de 0,2 mm x 0,6 mm respectivement dans le plan de diffraction et perpendiculairement. Sa divergence était de 0,72 arcsec, et sa monochomaticité ($\Delta E/E$) de l'ordre de 10^{-3} , obtenue par la réflexion 111 en géométrie de Laue dans un cristal de Si courbé mécaniquement. Deux énergies ont été réglées : 498 keV et 698 keV.
- selon les plans (110) à l'ILL en Mai 2007, où seul le cristal le plus épais a été mesuré.
 Quatre points de mesures ont été réalisés sur chaque marche du cristal, le faisceau ayant une section de 3,5 mm x 4 mm respectivement dans le plan de diffraction et perpendiculairement. La divergence du faisceau est donnée par le monochromateur, elle était donc de 2 arcsec (monochromateur en quartz (100)). L'énergie selectionnée était de 815,986 keV.

5.2.3.3 Résultats expérimentaux - Analyse

Au total, 89 rocking curves ont été enregistrées sur ces deux cristaux. Les résultats sont présentés dans le tableau 5.3 et les rocking curves sont montrées dans l'annexe E.

Seules les mesures à 489 keV ont été faites sur toutes les marches du cristal, cependant on s'est vite rendu compte que les deux marches les plus fines (2,4 mm et 4,4 mm) ne produisaient pas de données exploitables, comme on peut le constater en regardant les RC présentées en annexe E où l'on ne distingue aucun pic. En se basant sur les mesures de la marche suivante, de 6,4 mm d'épaisseur, on découvre que le cristal fait près de 1 arcmin de mosaicité avec des cristallites de l'ordre de 130 μ m. Avec ces paramètres, l'épaisseur optimale théorique est de 8,9 mm. En supposant que le cristal est relativement homogène, ce qui est extrêmement optimiste aux vues des mesures faites sur les autres marches, et en prenant en compte que les mesures sont assez bruitées (un plus long temps de pose aurait été nécessaire), cela peut expliquer que les 2 marches les plus fines ne produisent pas de pic de diffraction détectable selon les plans (111).

En regardant le tableau 5.3 on remarque immédiatement l'hétérogénéité des résultats en fonction de l'épaisseur du cristal. Par exemple la mosaïcité déterminée à 489 keV sur les plans (111) passe de 57 ± 13 arcsec à 167 ± 19 arcsec lorsque l'on passe de 6,4 mm à 7,4 mm d'épaisseur. Il devient difficile d'étudier la réflectivité en fonction de l'épaisseur dans ces conditions, l'épaisseur optimale étant fortement dépendante de la mosaïcité. La figure 5.16 montre la réflectivité au pic (valeur obtenue par l'ajustement) en fonction de l'épaisseur du cristal pour les trois séries de mesures. La courbe théorique est tracée en trait continu pour comparaison. Pour effectuer ces calculs, des valeurs moyennes des résultats sur les différentes marches ont été pris en compte, ces valeurs sont rapportées dans le tableau 5.4. Comme prévu, on constate que l'accord est loin d'être parfait, le maximum théorique (marqué par un losange sur la courbe théorique) étant rarement en accord avec les valeurs mesurées.

Les trois dernières marches donnent tout de même des résultats relativement cohérents dont les moyennes de mosaïcité et de longueur de cristallites sont reprises dans le tableau 5.4. Il est flagrant de voir à quelle point l'anti-corrélation de la mosaïcité avec la taille

Epaisseur		489 keV	$698 \ \mathrm{keV}$	815 keV
(mm)		111	111	220
	Ω (arcsec)	57 ± 13	-	-
	$t_0 \ (\mu m)$	129 ± 6	-	-
$6,\!4$	Eff. diffraction	$0{,}22\pm0{,}04$	-	-
	Réflectivité	$0{,}14\pm0{,}02$	-	-
	$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$1{,}68\pm0{,}08$	-	-
	Ω (arcsec)	167 ± 19	183 ± 18	43 ± 12
	$t_0 \ (\mu m)$	87 ± 7	101 ± 18	134 ± 44
$7,\!4$	Eff. diffraction	$0{,}17\pm0{,}01$	$0{,}10\pm0{,}04$	$0{,}11\pm0{,}03$
	Réflectivité	$0{,}10\pm0{,}01$	$0{,}06\pm0{,}002$	$0{,}07\pm0{,}02$
	$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$1{,}13\pm0{,}09$	$0,\!92\pm0,\!16$	$0{,}76\pm0{,}25$
	Ω (arcsec)	92 ± 12	97 ± 23	34 ± 10
	$t_0 \ (\mu \mathrm{m})$	91 ± 6	128 ± 14	194 ± 23
9,4	Eff. diffraction	$0{,}29\pm0{,}03$	$0{,}21\pm0{,}03$	$0{,}14\pm0{,}04$
	Réflectivité	$0,\!15\pm0,\!01$	$0{,}12\pm0{,}02$	$0{,}08\pm0{,}02$
	$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$1,\!18\pm0,\!08$	$1{,}17\pm0{,}13$	$1{,}10\pm0{,}13$
	Ω (arcsec)	79 ± 26	45 ± 11	40 ± 16
	$t_0 \ (\mu m)$	94 ± 16	125 ± 38	167 ± 79
11,4	Eff. diffraction	$0{,}36\pm0{,}04$	$0{,}33\pm0{,}05$	$0{,}15\pm0{,}02$
	Réflectivité	$0,\!15\pm0,\!02$	$0,\!16\pm0,\!03$	$0{,}08\pm0{,}01$
	$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$1{,}22\pm0{,}21$	$1,\!14 \pm 0,\!35$	$0,\!95\pm0,\!45$
14,5	Ω (arcsec)	71 ± 19	71 ± 7	89 ± 27
	$t_0 \ (\mu m)$	78 ± 10	116 ± 13	91 ± 32
	Eff. diffraction	$0{,}43\pm0{,}03$	$0,\!31 \pm 0,\!04$	$0{,}12\pm0{,}04$
	Réflectivité	$0{,}15\pm0{,}01$	$0{,}12\pm0{,}02$	$0{,}05\pm0{,}02$
	$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$1,\!01\pm0,\!13$	$1,06 \pm 0,12$	$0{,}52\pm0{,}18$

TAB. 5.3: Synthèse des résultats expérimentaux obtenus avec les échantillons Cu834.21 et Cu 834.22.

des cristallites est visible lorsque l'énergie augmente, même si les mesures à 815 keV sont réalisées avec la réflexion 220. Même en ne regardant que les mesures de la réflexion 111, on retrouve clairement le même phénomène qu'avec le cristal précédent.

La taille des cristallites déduite des mesures à 815 keV sur l'échantillon précédent selon la réflexion 220 se confirme par cette nouvelle série de mesure. On trouvait une moyenne de $192 \pm 42 \ \mu m$ sur l'échantillon Cu 834.31, et on trouve maintenant une moyenne de $147 \pm 44 \ \mu m$ en prenant en compte toutes les marches. La taille des cristallites a une influence primordiale sur l'efficacité de diffraction, de telles valeurs donnent au cristal une réflectivité très inférieure à son potentiel, comme nous avons pu le voir dans le chapitre précédent.

5.2.3.4 Conclusion

De ces mesures, on peut tirer les conclusions :

- L'échantillon a une mosaicité de l'ordre de 75 arcsec selon les plans (111) et de



FIG. 5.16: Echantillons Cu 834.21 et 834.22. Réflectivité en fonction de l'épaisseur pour les séries de mesures à 489, 698 et 815 keV. La courbe théorique correspondant à chaque cas est tracée en trait plein, les paramètres d'entrée (mosaicité et longueur des cristallites) ayant été déterminés en prenant les moyennes des meilleurs résultats de mesure.

Energie (keV)	489	698	815
Réflexion	111	111	220
Ω (arcsec)	81 ± 11	71 ± 26	52 ± 25
$t_0 \; (\mu { m m})$	88 ± 9	123 ± 6	147 ± 44
$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$1,\!05\pm0,\!14$	$1{,}12\pm0{,}05$	$0{,}84\pm0{,}25$

TAB. 5.4: Moyennes des mosaïcités et longueurs des cristallites déduites des mesures sur les 3 marches les plus épaisses du cristal Cu834.21.

l'ordre de 50 arcsec selon les plans (110). Cela tendrait à confirmer que l'anisotropie de mosaïcité (et de longueur de cristallite) est une généralité dans les cristaux mosaïques, cependant les mesures selon les deux plans n'ont pas été faite à la même énergie, ce qui laisse un doute.

- L'homogénéité de l'échantillon s'est révélée être très mauvaise, ce qui ne nous a pas permis de vérifier notre calcul d'épaisseur optimale.
- L'anti-corrélation entre la mosaïcité et la taille des cristallites lorsque l'énergie de mesure augmente se confirme avec cet échantillon. Il devient clair que le modèle de Darwin atteint ses limites.
- A 815 keV, la longueur moyenne des cristallites est de l'ordre de 150 μm. Bien que cela donne un facteur A légèrement inférieur à 1, c'est encore trop pour bénéficier pleinement de l'efficacité de diffraction potentielle du modèle de cristal idéalement imparfait.

5.3 Résultats expérimentaux sur le germanium mosaïque

Un seul échantillon de germanium mosaïque a pu être mesuré au cours de cette thèse, il s'agit d'un cristal de l'anneau 0 de la lentille CLAIRE. Ce cristal, orienté selon les plans (111) et épais de 3 mm avait été optimisé pour diffracter à 170 keV. Nous l'avons mesuré à l'ESRF lors de notre première expérience, en novembre 2005 avec un faisceau de 292 keV. Les conditions de mesures sont identiques à celles utilisées pour les cristaux Cu 805.11.1 et Cu.805.11.3, soit un faisceau de 0,02 mm x 0,1 mm de section (respectivement dans le plan de diffraction et perpendiculairement) et de 0,16 arcsec de divergence.

Le but de ces mesures est d'évaluer la qualité des cristaux de germanium (en fait $Ge_{1-x}Si_x$, avec x constant et égal à quelques pourcents) qui ont été produits pour la lentille CLAIRE. On cherche à connaître la mosaïcité, mais aussi la taille des cristallites et la forme de la rocking curve. Pour cela on a choisi un des meilleurs cristaux de la lentille CLAIRE.

5.3.1 Résultats expérimentaux - Analyse

Réflexion (hkl)	111	111
Energie (keV)	292	122
Epaisseur (mm)	3,0	3,0
Nbre de points	2(4)	1
$\Omega (arcsec)$	42 ± 11	77 ± 4
$t_0 \; (\mu \mathrm{m})$	96 ± 7	84 ± 2
Eff. de diffraction (fit)	$0,\!25\pm0,\!05$	0,26
Eff. de diffraction (max)	$0,\!35\pm0,\!01$	-
Réflectivité (fit)	$0{,}21\pm0{,}04$	0,163
Réflectivité (max)	$0{,}29\pm0{,}01$	-
$A = \pi t_0 / \Lambda_0$	$0,\!97\pm0,\!07$	$2{,}04\pm0{,}05$

TAB. 5.5: Mesures et résultats sur le cristal Ge 127_6b issu de l'anneau 0 de la lentille CLAIRE. La colonne de droite indique les mesures qui ont été faites au CESR en 2003 lors du réglage de la lentille CLAIRE.

Le tableau 5.5 présente les résultats obtenus à l'ESRF mais aussi, pour comparaison, les résultats obtenus au CESR lors du réglage des cristaux sur la lentille CLAIRE en vue du vol stratosphérique de juin 2003. La mosaïcité mesurée à 292 keV est presque deux fois inférieure à celle mesurée à 122 keV, ce qui s'explique très bien comme on l'a vu avec le cristal Cu 834.31. Les longueurs de cristallites obtenues lors des deux expériences sont relativement cohérentes, avec toujours une tendance à varier inversement à la mosaicité (et augmenter avec l'énergie).

L'éfficacité de diffraction du cristal atteint seulement 35 %, ce qui est dû à la fois à la longueur des cristallites relativement importante ($A \approx 1$) et au fait que le cristal soit

beacoup trop fin pour cette énergie : l'épaisseur optimisant la réflectivité de ce cristal ($\Omega = 42$ ", $t_0 = 96 \ \mu m$) à 292 keV serait 7,0 mm.

Finalement, les RC présentées sur la figure 5.17 montrent que la distribution des cristallites n'est pas uniforme. Une fois de plus, cela explique le désaccord avec le modèle théorique que l'on constate notamment en comparant l'efficacité au pic du modèle ajusté et celle qui est mesurée.



FIG. 5.17: Rocking curves du cristal Ge 127_6b issu de l'anneau 0 de la lentille CLAIRE, mesuré dans un faisceau de 292 keV. En rouge, la courbe représente le meilleur ajustement du modèle de Darwin.

Ces mesures ne sont pas suffisantes pour tirer des conclusions fermes, mais elles donnent une idée sur la qualité des cristaux de la lentille CLAIRE, en gardant à l'esprit que cet échantillon est l'un des meilleurs de l'anneau 0. Ainsi on voit que la mosaïcité est dans la gamme souhaitée pour une lentille de Laue spatiale, avec par contre des cristallites un peu trop grandes qui limitent l'efficacité de diffraction. Des mesures sur un cristal dont l'épaisseur serait plus adaptée à l'énergie apporteraient plus de certitude. On peut donc seulement conclure que le germanium est potentiellement un matériaux utilisable pour une lentille de Laue spatiale, ce qui est déjà un point positif.

5.4 Résultats expérimentaux sur le silicium-germanium à gradient de concentration

Comme expliqué brièvement dans le chapitre précédent, deux types de cristaux à gradient de concentration ont été mesurés :

- Des cristaux à gradient variable
- Des cristaux à gradient constant

La mosaïcité d'un cristal d'épaisseur donnée étant proportionnelle à la valeur du gradient de concentration, pour avoir un cristal dont les propriétés de diffraction sont homogènes, il faut que son gradient de concentration soit constant en tout point. C'est ce type de cristal qui nous intéresse pour la réalisation d'une lentille de Laue. Cependant, les cristaux à gradient de concentration sont encore mal connus avec seulement une poignée d'études réalisées à des énergies inférieures à 200 keV [Keitel *et al.*, 1999]. C'est pour cette raison que nous avons d'abord souhaité les étudier de façon à pouvoir déterminer par la suite les paramètres optimum pour faire croître des cristaux à gradient constant. Divers échantillons à gradient variables ont donc été mesurés, ce qui nous a permis d'explorer différentes valeurs du gradient de contrainte β à différentes énergies, ce qui revient à explorer le paramètre α (introduit à la page 85).

5.4.1 Si $_{1-x}$ Ge $_x$ à gradient de concentration variable : échantillon SiGe 10.3

5.4.1.1 Présentation de l'échantillon et objectifs

Le cristal SiGe 10.3 a été produit à l'IKZ sous forme d'une petite boule de 35,4 mm de diamètre, puis découpé et poli sur deux faces opposées. Sa concentration moyenne en germanium est $\approx 2,5$ at.% avec un gradient $\sim 0,1$ at.% cm⁻¹. Deux faces sont restées brutes dans un premier temps puis on été découpées pour finir de former un parallélépipède de 16 mm x 20 mm x 28 mm. Le but des mesures sur ce cristal était de comprendre le comportement du cristal en diffraction à différentes énergies et en différents points de son axe de croissance, de manière à étudier différentes valeurs de gradient de concentration, et donc différentes courbures des plans diffractants.



FIG. 5.18: Cristal à gradient de concentration variable SiGe 10.3. La direction [111] est parallèle à l'axe de croissance et donc à l'axe du gradient de concentration. Les plans (111) sont courbés sphériquement et se présentent du coté convexe sur cette photo, la concentration de germanium augmentant dans la direction indiquée par la flèche rouge.

5.4.1.2 Configuration expérimentale

Le cristal a été mesuré à trois reprises, toujours selon les plans (111) :

– à l'ESRF en septembre 2006, le faisceau traversant 20 mm d'épaisseur. Le faisceau mesurait 0,5 mm x 2 mm (respectivement dans le plan de diffraction et perpendiculairement), ce qui offrait une divergence de 1,8 arcsec. Les énergies de 297 keV et 489 keV ont été sélectionnées à l'aide du double monochromateur en Ge (711).

- à l'ESRF en février 2007, au travers de 28 mm d'épaisseur (cristal recoupé pour l'occasion). Le faisceau mesurait 0,2 mm x 0,4 mm, et avait une divergence de 0,72arcsec. Les énergies de 400 keV, 495 keV et 698 keV ont été sélectionnées par le monochromateur simple en Si (111).
- à l'ILL en Mai 2007 sur l'instrument GAMS 4. Le cristal a de nouveau été mesuré au travers de ses 28 mm, le faisceau mesurait 2 mm x 12 mm de section et présentait une divergence de 2 arcsec. Des raies à 184,285 keV, 517,06 keV et 815,986 keV ont été sélectionnées par le monochromateur en quartz (100).

5.4.1.3**Résultats expérimentaux - Analyse**

Première partie : 20 mm d'épaisseur. La figure 5.20 montre l'efficacité de diffraction du cristal SiGe 10.3 en fonction du paramètre α . Trois séries de données obtenues à différentes énergies sont représentées. Dans chaque série, la valeur de α ne dépend que de la mosaïcité Ω qui est proportionnelle au gradient de concentration atomique en germanium. La valeur du gradient évoluant le long de l'axe de croissance, on observe une variation de la mosaïcité le long de l'axe de croissance. La figure 5.19 montre cette évolution sur les 16 mm de largeur (les rocking curves sont montrées à la page 5.22). On voit que le gradient est relativement constant sur le premier tiers du cristal avant d'augmenter quasi linéairement faisant évoluer la mosaïcité depuis environ 2 arcsec jusqu'à 12 arcsec.



FIG. 5.19: Mosaïcité en fonction de la position le long de l'axe de croissance (axe Y) du cristal SiGe 10.3 (les barres d'erreurs sont inférieures à la taille des croix). Valeurs relevées sur les mesures à 297 keV des plans (111).

Sur la figure 5.20, les points rouges représentent une série de 15 rocking curves en transmission enregistrées sur l'axe du cristal à 297 keV. Les rocking curves de cette série sont montrées à la page 141. La première chose que l'on remarque est cette extraordinaire valeur de l'efficacité de diffraction de 97% atteinte en quelques points. Ce résultat est prédit par la théorie PPK comme le montre la courbe noire de la figure 5.20, mais on c'est toujours agréable de mesurer une telle valeur. Le modèle représenté par la courbe noire n'est valide que pour $\alpha > \pi/2$, ce qui explique que les données ne collent à la théorie que pour des valeurs de α supérieures à environ 2.

Cependant on remarque un arrondi dans la forme de la courbe décrite par les points rouge. On retrouve un arrondi du même type, beaucoup plus prononcé dans les données prises sur l'axe du cristal à 495 keV, représentées en bleu. Cette fois-ci, on a l'impression que les données ne vont venir coller à la courbe théorique qu'au delà de $\alpha \approx 6$. Tout se passe comme si la validité de la théorie dépendait de l'énergie, ce qui n'est normalement pas le cas, mais il faut remarquer que c'est la première fois que de des cristaux à gradient de concentration sont mesurés en géométrie de Laue à des énergies supérieures à 200 keV.

Les points verts de la figure 5.20 proviennent de mesures à 489 keV réparties sur deux lignes situées à Z = 5 mm et Z = -5 mm de part et d'autre de l'axe du cristal. On observe plus du tout le comportement régulier que l'on peut avoir avec les deux premières séries de mesures, ce qui est difficile à expliquer. Il semble que le fait que la courbure ne soit plus symétrique limite l'efficacité de diffraction.

Deuxième partie : 28 mm d'épaisseur Pour cette deuxième partie des mesures, on tourne le cristal de 90° autour de la direction [111], de façon à continuer à étudier la réflexion 111, mais en traversant une épaisseur de cristal différente. Cela permet d'explorer l'efficacité de diffraction sur une gamme encore un peu plus étendue du paramètre α , et aussi de caractériser la sphéricité des plans diffractants.

La figure 5.21 représente trois séries de mesures obtenues pour 400 keV, 495 keV et 698 keV, respectivement en rouge, vert et bleu. Les séries à 400 keV et 495 keV montrent à nouveau des efficacités de diffraction supérieures à 80%, mais comportent aussi quelques points moins réguliers. Par contre la série à 698 keV est propre et présente, à l'instar de la première série, une courbure douce qui ne vient coller à la courbe théorique que vers $\alpha \approx 10$. Ainsi, il devient clair que le seuil de validité de la théorie en terme de α augmente avec l'énergie.

Il n'est fait allusion nulle part à ce phénomène, il semble que nous soyons les premiers à le remarquer. Pourtant on retrouve ce phénomène dans Smither *et al.* [2005b,a] où les auteurs ont étudié la diffraction dans un cristal de silicium pur soumis à un gradient thermique qui engendre une courbure des plans diffractants, mais aucune mention à l'accord avec la théorie n'y est faite. Le graphique publié dans cet article est reproduit en figure 5.23. On y voit l'efficacité de diffraction tracée en fonction de α pour différentes séries de mesures, la première à 92,6 keV et la seconde à 153 keV. Dans cet article, Smither *et al.* [2005b,a] étudient l'influence de la face de réflexion, concave ou convexe, mais ce n'est pas ce qui nous intéresse ici. Deux points sont à remarquer sur ce graphique : premièrement, on retrouve le comportement que l'on a décrit plus haut, à savoir que les valeurs de α pour lesquelles les données rejoignent la courbe théorique augmentent avec l'énergie, et ce en décrivant une courbe tout à fait comparable à celle que nous avons observée. Le deuxième point est que les données obtenues par Keitel [1999] sur un cristal de Si_{1-x}Ge_x à gradient de concentration (fourni par l'IKZ) sont en accord avec les données obtenues sur le silicium pur soumis au gradient thermique.

Cela signifie que ce comportement est dû à la courbure des plans et non à la présence de germanium ou d'impureté dans le cristal. De même on pourrait penser que cet écart avec la théorie PPK est dû à des irrégularités dans la courbure des plans, à des défauts visibles sur de 'grandes' épaisseurs (la longueur d'extinction dépasse le millimètre à 400 keV), mais la courbure obtenue par l'application d'un gradient thermique est la plus pure que l'on puisse créer, et pourtant l'écart avec la théorie est visible. Il est certain que le phénomène observé a une réalité physique qu'il conviendrait d'expliquer et de décrire mathématiquement.

Pour en revenir à l'échantillon SiGe 10.3, le fait que la série à 698 keV semble homogène alors que les deux autres comportent des points qui sont moins bons peut s'expliquer par le fait que la section du faisceau utilisé est très petite et ces séries n'ont pas été faites d'affilée; il est donc probable que la zone mesurée ne soit pas exactement la même pour les différentes énergies (changer d'énergie à l'ESRF est une opération qui prend environ une demi journée, donc on mesure tous les échantillons à une énergie avant d'en régler une autre, ce qui fait que le cristal a été démonté entre chaque mesure).

Concernant l'homogénéité de la courbure, le tableau 5.6 montre les valeurs de mosaïcité relevées dans les deux directions de mesure, à 1 mm de l'extrémité contenant la plus grande concentration de germanium. En supposant que la courbure est uniforme, on peut calculer son rayon très simplement en divisant l'épaisseur traversée par la mosaïcité. En faisant cela, on trouve des valeurs de rayon de courbure très différentes : on passe de 335 m à 589 m. On peut donc en déduire que la courbure des plans (111) est elliptique et non sphérique dans ce cristal.

	$T_0 = 20 \text{ mm}$	$T_0 = 28 \text{ mm}$
Mosaïcité (arcsec)	$12{,}3\pm0{,}1$	$9{,}8\pm0{,}2$
Rayon de courbure (m)	335 ± 2	589 ± 4

TAB. 5.6: Calcul du rayon de courbure des plans (111) à 1 mm de l'extrémité du cristal la plus riche en germanium.

5.4.1.4 Conclusion

Ce premier échantillon de $Si_{1-x}Ge_x$ a montré de remarquables performances et a soulevé d'importantes questions. Nous retiendrons de ces mesures les points suivants :

- Une efficacité de diffraction de 97% à 297 keV a été mesurée, ce qui fait une réflectivité de près de 60% dans une bande passante de environ 11 arcsec. Bien que ce cristal ne soit pas exploitable pour une lentille de Laue du fait de son gradient de concentration qui varie, ce résultat est très encourageant et prouve qu'il est possible d'atteindre les valeurs théoriques calculées au chapitre précédent.
- Comme prévu par le modèle PPK, aucune variation de mosaïcité significative n'a été observée en fonction de l'énergie de mesure (visible sur les RC présentées en annexe).
- Il semble que l'on obtienne des performances moindres lorsque les photons diffractés ne passent pas par l'axe de croissance du cristal. Ce point peut avoir des conséquences rédhibitoires, car cela voudrait dire qu'on ne peut utiliser que la partie centrale de la boule, ce qui limiterait terriblement le rendement de production, mais cela reste à confirmer.
- Nous avons noté un écart systématique avec le modèle PPK lorsque l'énergie augmente. Cette constatation est corroborée par les résultats publiés par [Smither et al.,



FIG. 5.20: Efficacité de diffraction en fonction du paramètre α pour le cristal SiGe 10.3, réflexion 111, épaisseur de 20 mm. Les couleurs rouge, bleue et verte représentent respectivement les mesures faites à 297 keV, 489 keV et 495 keV. Toutes les mesures ont été faites sur l'axe du cristal à l'exception des mesures à 489 keV qui ont été faites à sur deux lignes à 5 mm de part et d'autre de l'axe.



FIG. 5.21: Efficacité de diffraction en fonction du paramètre α pour le cristal SiGe 10.3, réflexion 111, épaisseur de 28 mm. Les couleurs rouge, bleue et verte codent respectivement les mesures faites à 400 keV, 495 kev et 698 keV. Toutes les mesures ont été faites sur l'axe du cristal.



SiGe_10-3 (111), convex side, E = 297 keV, thickness = 20.0 mm, transmission = 0.61 Beam size: v = 2.00 mm, h = 0.50 mm; divergence: 1.79 arc sec.

FIG. 5.22: Série de 15 RC en transmission enregistrées à 297 keV sur le cristal SiGe10.3 selon les plans (111) suivant l'axe de croissance du cristal. Le fait que le faisceau ait une divergence d'environ 1,8 arcsec élargit et arrondi légèrement les courbes qui sans cela seraient plus 'carrées'.



FIG. 5.23: Graphique reproduit de [Smither *et al.*, 2005a]. Efficacité de diffraction en fonction du paramètre α pour un cristal de silicium soumis à un gradient thermique. Les cercles représentent les mesures à 92,6 keV alors que les carrés représentes les mesures à 153 keV. Deux géométries de diffraction sont étudiées : lorsque les points sont remplis, la diffraction a lieu sur le coté concave des plans réticulaires, alors que lorsque les points sont vides, c'est le coté convexe qui est utilisé. Les autres symboles présents sur ce graphique se réfèrent aux résultats que Keitel [1999] a obtenu sur un cristal Si_{1-x}Ge_x à gradient de concentration fourni par l'IKZ.

2005a], bien que dans cette étude, il ne soit pas fait allusion à ce désaccord.

– Tout comme le cristal de $Ge_{1-x}Si_x$ de CLAIRE, les cristaux de $Si_{1-x}Ge_x$ sont facilement manipulables et ne sont pas fragiles : ce cristal a été découpé à l'aide d'une scie à fil et a ensuite été poli sur deux faces sans que cela n'affecte ses performances.

5.4.2 $Si_{1-x}Ge_x$ à gradient de concentration variable : échantillons SiGe 61

5.4.2.1 Présentation des échantillons et objectifs

L'échantillon SiGe 61 est en fait constitué de deux cristaux ayant été découpés côteà-côtes dans la même boule, l'un étant centré sur l'axe de la boule. On les distingue par "SiGe 61 symétrique" pour celui qui est centré et "SiGe 61 asymétrique" pour l'autre. La photo de la figure 5.24 nous montre ces deux échantillons et le schéma représente une coupe de la boule dont les deux échantillons ont été extraits. L'orientation des plans (111) dans ces cristaux est représentée par les lignes en tirets; on voit que le cristal qui n'est pas centré sur l'axe de la boule a effectivement une découpe asymétrique, avec en plus, l'orientation de ses plans diffractants évoluant le long du cristal. D'une extrémité à l'autre, la concentration en germanium évolue de 1,9 % à 3,1 % (pourcentage atomique).

L'objectif de ces mesures est de comprendre le comportement en diffraction des cristaux à plans courbes, avec en particulier une étude de l'influence de la position d'origine du cristal dans la boule. Il faut bien noter que le faisceau est diffracté par des plans parfaitement symétriques seulement lorsqu'il passe par l'axe Z = 0 du cristal SiGe 61 symétrique (l'axe Y étant défini comme l'axe de croissance).



FIG. 5.24: Echantillons SiGe 61 symétrique et asymétrique : l'axe de croissance de la boule passe par le milieu du cristal dit symétrique, comme indiqué sur le schéma de droite. Les plans diffractants sont symbolisés par les traits en pointillés, qui mettent en évidence la découpe asymétrique du deuxième cristal et le fait que l'angle d'asymétrie évolue lorsqu'on se déplace suivant l'axe de croissance du cristal.

5.4.2.2 Configuration expérimentale

Ces deux cristaux ont été mesurés à l'ESRF en septembre 2006 à 297 keV et 489 keV dans les mêmes conditions que celles utilisées pour le cristal SiGe 10.3.

5.4.2.3 Résultats expérimentaux - Analyse

Les graphiques de la figure 5.25 montrent la mosaïcité en fonction de la position sur les cristaux SiGe 61 symétrique et asymétrique. Les mesures les plus denses ont été faites à 297 keV sur l'axe Z = 0 de chaque cristal (points rouges). On voit que ces points oscillent mais décrivent une tendance générale d'augmentation linéaire à mesure que l'on progresse le long de l'axe de croissance. Une fois de plus, on voit que la mosaïcité mesurée ne dépend pas de l'énergie utilisée puisque les données à 297 keV sont cohérentes avec celles à 489 keV (graphique de gauche notamment). Sur le cristal asymétrique, les mosaïcités relevées sur les lignes Z = 0, Z = 10 mm et Z = -17 mm sont en accord, ce qui semble indiquer que la courbure des plans (111) est uniforme à Y constant. On note aussi que l'intervalle de mosaïcité relevé sur les deux cristaux est quasiment identique, évoluant entre 5 arcsec et 25 arcsec, à part sur le dernier cm où les mosaïcités divergent.

Le rayon de courbure des plans diffractants de ces cristaux varie de 500 m à 100 m sur les 50 mm de l'axe Y.

L'efficacité de diffraction en fonction de α (dont la valeur est calculée pour chaque point à partir de la mosaïcité mesurée, de l'épaisseur du cristal et de l'énergie du faisceau) est reportée sur les graphiques de la figure 5.26. On voit clairement une différence entre les mesures prises sur l'axe du cristal et les autres. Sur le graphique du cristal symétrique,



FIG. 5.25: Mosaïcité en fonction de la position le long de l'axe de croissance sur les cristaux SiGe 61 symétrique (graphique de gauche) et asymétrique (graphique de droite). Dans les deux cas, les points rouges et magentas représentent respectivement les mesures à 297 keV et 489 keV faites sur l'axe du cristal, les points verts et bleus représentent des mesures à 489 keV faites sur des lignes parallèles à l'axe du cristal : 9 ou 10 mm pour les points verts et 17 ou 22 mm pour les points bleus.



FIG. 5.26: Efficacité de diffraction des cristaux SiGe 61 symétrique (graphique de gauche) et asymétrique (graphique de droite) en fonction de α . Le code couleur est identique à celui de la figure 5.25.

les points en rouge et magenta représentent les mesures sur l'axe. Ces points tendent à reproduire la forme des courbes observées sur le cristal SiGe 10.3, alors que les points verts et bleus (mesures à 489 keV sur des lignes Z = 9 mm et Z = -22 mm) ne semblent pas suivre le même schéma.

Cette constatation est encore plus claire sur le cristal asymétrique : tous les points se répartissent suivant une courbe qui n'est pas du tout en accord avec le modèle de la théorie PPK. Pour une raison indéterminée, l'efficacité de diffraction ne dépasse pas les 50 %, et diminue doucement lorsque α augmente. On observe aussi que l'efficacité de diffraction mesurée dépasse les valeurs théoriques à partir de $\alpha \approx 30$, ce qui n'a pas d'explication, mais qui contribue à laisser penser que le modèle de la théorie PPK n'est pas correct.

Une autre hypothèse est que dans le cristal asymétrique, la géométrie particulière de diffraction nécessite de considérer un modèle plus élaboré que le modèle très simple de la géométrie de Laue avec un gradient de contrainte constant dans la zone de cristal scannée par le faisceau lors d'une rocking curve. Cependant, cela n'explique pas pourquoi on obtient des résultats similaires avec le cristal symétrique lorsque l'on scanne une zone éloignée de l'axe de croissance.

5.4.2.4Conclusion

Ces deux cristaux semblent être de bonne qualité avec une mosaïcité qui évolue régulièrement le long de leur axe de croissance, des performances remarquables à 297 keV, et une bonne homogénéité à Y constant. Ils sont issus d'une boule de 47 mm de diamètre, ce qui prouve qu'il est possible de croître des boules de volume important. Deux points majeurs ressortent de ces mesures :

- L'efficacité de diffraction en géométrie de Laue est sensible au fait que le faisceau passe par l'axe du cristal, bien que la mosaïcité soit constante lorsqu'on se place à Y constant.
- Le modèle issu de la théorie PPK ne paraît pas correct pour les hautes énergies et les forts gradients de contrainte. Le fait que l'on observe une différence importante entre les mesures où le faisceau passe par l'axe de croissance et les autres n'est pas non plus décrit par la théorie PPK, à moins qu'il ne faille alors considérer un autre modèle plus complexe, ce qui n'a pas été fait dans cette étude.

5.4.3 $Si_{1-x}Ge_x$ à gradient de concentration constant : échantillon SiGe 322

5.4.3.1Présentation de l'échantillon et objectifs

Jusqu'à présent, trois cristaux à gradient constant ont pu être étudiés, chacun provenant d'une boule expérimentale si petite que seul un cristal pouvait en être extrait. L'échantillon SiGe 322 représente la deuxième itération dans le développement de cristaux en SiGe utilisables pour une lentille de Laue. Il mesure 15 mm x 15 mm de section et 30 mm d'épaisseur et a été optimisé pour diffracter à 500 keV selon ses plans (111) dans une bande passante de 15 arcsec.

L'objectif de ces mesures est d'évaluer la qualité et l'homogénéité de ce prototype de seconde génération en déterminant ses performances en différents points.

Configuration expérimentale 5.4.3.2

Les mesures ont été effectuées à l'ILL sur GAMS 4 en Mai 2007. Un faisceau de 2 mm x 7,6 mm avec une divergence de 2 arcsec et une énergie de 517,0696 keV a été utilisé. Il a ainsi été possible de réaliser 6 points sur le cristal, comme schématisé sur la figure 5.27.

5.4.3.3**Résultats expérimentaux - Analyse**

Le tableau 5.7 résume les performances du cristal, la figure 5.28 les compare au modèle PPK et la figure 5.29 montre les différentes rocking curves enregistrées. La mosaïcité relevée sur les différents points du cristal varie entre 8,5 arcsec et 14,0 arcsec, sa valeur moyenne est 11 arcsec et son écart type vaut 2 arcsec. Cette valeur moyenne plus faible



FIG. 5.27: Schéma du cristal à gradient de concentration constant SiGe 322. Les rectangles rouges marquent l'emplacement des points de mesures, et la flèche rouge indique le sens du gradient de concentration en germanium.

que la valeur attendue (15 arcsec était l'objectif), avec une amplitude de variation autour de la moyenne valant 50% de la valeur moyenne. Du point de vue de la mosaïcité et de l'homogénéité, malgré le fait que le cristal n'ait pas pu être caractérisé très finement (seulement 6 points), les résultats ne sont pas encore pleinement satisfaisants.

Mosaicité	11 ± 2
Efficacité de diffraction	$0{,}47\pm0{,}04$
Réflectivité	$0{,}26\pm0{,}02$

TAB. 5.7: Performances du cristal à gradient de concentration constant SiGe 322, mesuré à 517 keV.

L'efficacité de diffraction atteint en moyenne 47%, ce qui est assez éloigné de la valeur prédite par le modèle PPK, cependant en regardant la réflectivité , on voit que le cristal atteint 26%, ce qui est déjà intéressant à 517 keV.

Enfin, on voit que les différentes rocking curves présentées sur la figure 5.29 présentent bien une forme 'carrée' pour la plupart, mais ne sont pas parfaitement homogènes.

5.4.3.4 Conclusion

Ce deuxième essai de cristal à gradient de concentration constant est un demi succès, avec une homogénéité qui n'est pas encore satisfaisante et une mosaïcité plus faible que celle qui était attendue, mais une réflectivité de l'ordre de 26% à 517 keV, ce qui est très encourageant. Une nouvelle itération est déjà en cours d'étude. Elle sera optimisée pour 300 keV avec une bande passante de 30 arcsec. Cependant, le fait que le modèle PPK se révèle être trop optimiste à haute énergie fausse les calculs du gradient de concentration optimal. Ce problème fondamental devra être résolu pour pouvoir avancer sérieusement dans le développement des cristaux en silicium germanium pour une lentille de Laue. De nouvelles mesures sur des cristaux à gradient variable sont d'ores et déjà prévues dans le but de mieux comprendre ce qui se passe à haute énergie.



FIG. 5.28: Efficacité de diffraction en fonction de α pour les différents points du cristal SiGe 322 mesuré à 517 keV.

5.5 Résultats expérimentaux sur les empilements de wafers

Dans la mesure où il a été démontré au chapitre précédent que les empilements de wafers ne pouvent pas satisfaire les contraintes posées aux cristaux pour une lentille de Laue, nous n'allons pas nous étendre sur ce sujet. Des résultats encourageants ont toute-fois été obtenus sur le banc de diffraction du groupe monochromateur de l'ILL (qui utilise un générateur de rayons X à tube atteignant 420 keV). Ces résultats sont présentés sur la figure 5.30 où l'intensité intégrée en fonction de l'énergie diffractée par différents empilements de wafers en germanium et, pour comparaison, du cristal mosaïque en germanium - silicium issu de la lentille CLAIRE dont les mesures sont présentées au § 5.3 (cristal CLAIRE 127_6b).

Le problème quand on compare les intensités intégrées diffractées par différents cristaux, c'est que le cristal le plus mosaïque l'emporte souvent, ce qui n'est pourtant pas un critère de qualité pour la réalisation d'une lentille de laue. C'est pourquoi la mosaïcité de chaque empilement est indiquée dans la légende de la figure 5.30, et reportée ici :

- $-25 \ge 300 \ \mu m, \ \Omega = 93 \pm 17 \ arcsec$
- $-15 \ge 300 \ \mu m$, $\Omega = 71 \pm 17 \ arcsec$
- 10 x 300 $\mu m, \Omega = 105 \pm 31 \text{ arcsec}$
- $-6 \ge 500 \ \mu m$, $\Omega = 59 \pm 18 \ arcsec$
- CLAIRE 127_6b, 3 mm, $\Omega = 59 \pm 18$ arcsec

Comme on peut le constater sur ce graphique, seul le dernier empilement (6 x 500 μ m, courbe vert clair) est réellement comparable au cristal de CLAIRE puisqu'il a une épaisseur et une mosaïcité identique. Or on voit que son intensité intégrée diffractée est bien inférieure à celle du cristal mosaïque de CLAIRE, ce qui n'est en fait pas bon signe.

Malgré tout, nous avons voulu savoir à quoi ressemble la rocking curve d'un tel cristal 'assemblé' : est-elle continue ou non ? Un de ces empilements à donc été mesuré à l'ESRF



SiGe322 (111), E = 517.1 keV, thickness = 30.0 mm, trans = 0.55 Beam size: v = 7.60 mm, h = 2.00 mm; divergence: 2.00"

FIG. 5.29: Rocking curves enregistrées sur le cristal à gradient constant SiGe 322 selon les plans (111) à 517 keV.



FIG. 5.30: Intensité intégrée diffractée par différents empilements de wafers en germanium comparé à un cristal en $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ issu de la lentille CLAIRE (cristal 127_6b dont les résultats sont présentés dans ce chapitre). Les comptages sont en coups par seconde ramené à une surface éclairée du cristal de 1 mm².

lors de la première campagne de mesure en novembre 2005.

Les rocking curves présentées en figure 5.31 ont été obtenues avec un empilement de 15 wafers de germanium de 500 μ m d'épaisseur, maintenus ensemble par le support en aluminium amovible présenté au chapitre précédent (c.f. figure 4.11 page 103). Cet empilement a été mesuré avec un faisceau de 292 keV, de 0,02 mm x 0,1 mm de section et de 0,1 arcsec de divergence. Un pas angulaire de 0,45 arcsec a été choisi de manière à résoudre les pics de diffraction individuels de chacun des wafers dans l'hypothèse où ils ne seraient pas collés les uns aux autres... ce qui s'est effectivement produit, comme on le constate sur la figure 5.31.

Cet empilement a été réalisé dans un environnement non contrôlé, avec comme seule précaution le fait de porter des gants sans talc et de dépoussiérer les wafers à l'aide d'une bombe d'air sec et d'un pinceau avant de les disposer dans le support. Les wafers sont bruts de découpe sur leur plus grande partie et possèdent une zone qui a été passée à l'acide dans le but d'éliminer la couche superficielle qui aurait pu être affectée par la découpe. Les rocking curves présentées sur la figure 5.31 ont été enregistrées dans la partie non traitée à l'acide. Dans la plupart des cas, l'écart angulaire entre wafers est bien supérieur à la largeur à mi-hauteur de chaque pic. On remarque d'ailleurs que cette largeur à mi-hauteur est de l'ordre de 1,8 arcsec pour les pics simples, alors que la valeur attendue est $2\delta_w = 0,42$ arcsec. Cette différence est d'autant plus surprenante que les rocking curves dans la partie traitée à l'acide montrent des pics de même largeur, ce qui exclut l'hypothèse des défauts de découpe.

Par la suite, après que les wafers de silicium aient été découpés en carrés de 1 cm de coté, de nouveaux empilements ont été réalisés, mais cette fois ci, de manière définitive en les prenant dans la colle ou la résine par exemple. Au total, 16 empilements de 4 plaquettes de 1 cm de coté ont été réalisés utilisant une méthode différente pour chaque couple (les empilements sont réalisés par série de deux), ces empilements étant réalisés dans une salle blanche de classe 100 (= ISO 5) au CESR. La plupart de ces tentatives se sont révélées infructueuses, à l'exception d'un empilement (le n° 15), qui a été mesuré sur GAMS 4 à



FIG. 5.31: Rocking curves réalisée à 292 keV d'un empilement de 15 wafers de germanium de 500 μ m d'épaisseur pris dans un support démontable en aluminium.

184 keV (voir figure 5.32). Une efficacité de diffraction inférieure à 10% a été trouvée dans une bande continue de environ 16 arcsec.

Il est assez surprenant de constater que l'on peut réaliser une bande passante de 16 arcsec avec seulement 4 wafers. Ceci est dû à la colle qui a engendré des contraintes dans les wafers lors de son séchage, ce qui les a courbés, augmentant ainsi énormément leur bande passante, mais diminuant aussi fortement leur efficacité de difraction. De plus, la faible résolution angulaire que nous avons choisie sur GAMS 4 (2 arcsec FWHM de divergence) ne nous permet pas de distinguer des structures fines dans la rocking curve. On ne peut donc pas considérer cet essai comme un succès, même si le principe de la courbure élastique par collage pourrait être une idée à exploiter...



FIG. 5.32: Rocking curves à 184 keV d'un empilement de 4 wafers en silicium de 500 μ m d'épaisseur pris dans la colle. Mesure réalisée sur l'instrument GAMS 4.

Cette technique, telle que nous l'avons abordée ne semble pas pouvoir apporter de solution dans la recherche de nouveau matériaux pour une lentille γ . Non seulement il a été prouvé au chapitre précédent que les empilements idéaux de wafers de silicium ou de

germanium ne peuvent satisfaire les contraintes, mais en plus, on voit avec les exemples des figures 5.31 et 5.32 qu'il est très difficile de réaliser un empilement idéal, i.e. un empilement où la séparation angulaire entre deux wafers est inférieure à deux fois la largeur de Darwin.

Par contre, si la solution de l'empilement sans déformation montre ses limites, celle de l'empilement avec déformation élastique (par collage notamment) pourrait être une voie à explorer, d'autant plus que les wafers de silicium ne coûtent pas excessivement cher, ce qui permet de tester différentes techniques sans prendre trop de risques.

5.6 Conclusion

Cristaux de cuivre Les cristaux de cuivre que nous avons pu mesurer provenaient de deux boules produites à deux ans d'écart. Ces deux boules nous sont apparues au travers des échantillons mesurés comme équivalentes en qualité et en homogénéité. Malheureusement cela signifie que dans les deux cas, l'homogénéité n'est pas satisfaisante avec de gros écarts de performances au sein d'un même cristal et entre cristaux.

Le plus surprenant et instructif aura été de constater à quel point les valeurs mesurées dépendent de l'énergie du faisceau diffracté. Lorsque l'énergie utilisée est plus haute, la mosaïcité extraite de l'ajustement du modèle de Darwin sur les données diminue systématiquement et la longueur des cristallites obtenue elle aussi par l'ajustement du modèle de Darwin augmente systématiquement. On pourrait penser au premier regard que les cristaux de la boule n° 805 ont des cristallites plus petites que ceux de la boule n° 834, mais c'est parce qu'ils n'ont pas été mesurés à aussi haute énergie : le cristal 834.21 a lui aussi des cristallites de longueur inférieure à 100 μ m lorsqu'il est mesuré à 500 keV...

Ces constatations remettent en cause le modèle de Darwin. En effet nous avons montré qu'il n'est pas possible de prévoir les performances d'une réflexion donnée (matériau, épaisseur) pour diverses énergies à partir de seulement deux informations : la mosaïcité et la taille des cristallites. Le problème principal du modèle de Darwin semble être l'hypothèse que toutes les cristallites sont de tailles identiques. Nous interprétons les variations observées d'épaisseurs de cristallites en fonction de l'énergie de mesure comme une conséquence de l'extinction primaire dans un ensemble de cristallites ayant une distribution d'épaisseur : à faible énergie, la longueur d'extinction est plus courte. Les petites cristallites ($t_0 \ll \Lambda_0 : A \ll 1$) sont dans un régime où leur contribution est proportionnelle à leur épaisseur. Les grandes cristallites atteigne une saturation, et subissent même les fluctuations dues au pendellösung (dans le cas où le faisceau est très monochromatique seulement, sinon, l'effet est moyenné). Ainsi, à partir d'une certaine épaisseur, les cristallites ne diffractent pas plus mais subissent l'absorption linéaire, ce qui fait que les plus épaisses contribuent le moins. Ce sont donc les cristallites ayant une épaisseur proche de la valeur t_0 qui donne A = 1, qui sont les plus visibles, pour peu qu'elles existent.

A mesure que l'on augmente l'énergie, l'épaisseur des cristallites les plus visibles augmente. Cependant, la distribution en épaisseur des cristallites dans un échantillon n'est certainement pas uniforme et infinie. On peur supposer qu'elle est suit une loi normale, avec une valeur moyenne et une déviation standard. Cela peut expliquer qu'on ne retrouve pas toujours la valeur A = 1 lorsqu'on détermine la valeur des cristallites par ajustement du modèle de Darwin. Le modèle qui est donc proposé ici nécessiterait un troisième paramètre pour caractériser une réflexion d'un cristal mosaïque d'épaisseur donnée :

- la mosaïcité
- la taille moyenne des cristallites
- la FWHM de la distribution en taille des cristallites

Ce modèle, qui reste assez simple, n'a pas encore été traduit mathématiquement. Ce travail reste à faire, et à confronter aux mesures.

Concernant l'état de l'art des cristaux de cuivre, on a mesuré un cristal dont la mosaïcité moyenne vaut 25 arcsec à 500 keV, ce qui prouve qu'il est possible de réaliser des cristaux de cuivre répondant aux spécifications pour une lentille de Laue. Par contre la longueur des cristallites de la plupart des cristaux mesurés à haute énergie (≥ 700 keV) dépasse les 100 μ m, ce qui indique une d'efficacité de diffraction inférieure à celle donnée par le modèle du cristal idéalement imparfait, comme cela a été montré au chapitre précédent.

Cristaux de germanium Le seul cristal de germanium qui a pu être mesuré présente des résultats encourageants. Des tests à plus haute énergie avec des cristaux plus épais sont à réaliser.

Cristaux de Si_{1-x}**Ge**_x à gradient de concentration Des résultats extrêmement positifs ont été obtenus sur les cristaux à gradients variables (réflectivité de 60% à 300 keV dans une bande passante de 11 arcsec), qui nous ont appris qu'il est possible d'atteindre le maximum théorique prédit par la théorie PPK. Cependant on a aussi remarqué que l'accord avec cette théorie se dégrade lorsque l'énergie augmente. Cela est évidemment un point de la plus haute importance qu'il conviendrait de traiter rapidement. En effet, il est nécessaire de pouvoir modéliser correctement le comportement de ces cristaux pour pouvoir d'une part calculer leurs paramètres optimaux (à transmettre à l'IKZ) et d'autre part les intégrer dans la simulation d'une lentille de Laue.

Il a été démontré au chapitre précédent que les cristaux de silicium-germanium ne peuvent être intéressants pour une lentille de Laue qu'en dessous de 340 keV, domaine où la théorie PPK n'est pas trop éloignée des observations, ce qui justifie le fait que nous continuons à l'utiliser dans la suite.

D'autre part, deux itérations de croissance de cristaux à gradient constant ont été réalisées. Le prototype issu de la deuxième itération a montré des résultats très encourageants (27% de réflectivité à 517 keV dans une bande passante de 11 arcsec), bien que son homogénéité ne soit pas encore pleinement satisfaisante. Une nouvelle génération de cristaux à gradient constant optimisé pour diffracter à 300 keV avec une mosaïcité de 30 arcsec est actuellement en cours de production, pour être caractérisé au printemps 2008. Le but de ce nouvel essai va être de produire des boules suffisamment grosses pour en extraire plusieurs échantillons dont les performances devraient se rapprocher des spécifications pour une lentille γ , grâce à l'expérience acquise lors des deux premiers essais.

Empilement de wafers de silicium ou de germanium Cette idée, telle que nous l'avons abordée, a montré ses limites aussi bien théoriquement que dans la pratique. Cependant, l'idée de partir de cristaux parfaits dont la croissance est bien maîtrisée pour

en faire des cristaux mosaïques, ou mieux encore, à plans courbes reste une voie à exploiter. Nous avons notamment constaté que le collage des wafers entre eux induisait une déformation qui élargit fortement la rocking curve. Lors de cet essai, l'épaisseur de l'ensemble n'était pas suffisante, ce qui a provoqué une faible efficacité de diffraction, mais cette expérience mériterait d'être approfondie. Une autre piste à explorer pourrait être l'empilement de wafers (ou plaquettes) par pressage à chaud sur un mandrin courbe, le pressage à chaud permettant la soudure des wafers entre eux.

Toutes ces pistes extrêmement prospectives méritent d'être évaluées avec attention tant les performances potentielles sont attractives.

Chapitre 6

Conception et étude de lentilles de Laue

La première partie de ce chapitre est consacrée aux outils de simulation qui ont été créés pour l'étude des lentilles de Laue. Ces outils sont ensuite utilisés pour évaluer l'influence des différents paramètres du design sur la sensibilité, par le biais du facteur de mérite. Cela permet de comprendre le comportement des lentilles de Laue, ce qui est un prérequis pour se lancer dans la conception d'un projet. Au travers de la mission Gammaray Imager, toutes les étapes de la conception d'une lentille sont ensuite décrites. Les performances de la mission GRI sont présentées et prises comme exemple pour décortiquer le fonctionnement d'une lentille gamma, au niveau de sa PSF, de sa surface efficace, de son champ de vue et de sa sensibilité. Finalement la mission MAX est aussi présentée.

6.1 Les outils pour la conception : Le code SimuLentille

6.1.1 Présentation

Un code écrit en C par Halloin [2003] lors de la calibration et des vols ballons de la lentille CLAIRE permettait déjà de simuler une lentille de Laue. Cependant ce code fonctionne sur le principe Monte-Carlo, ce qui fait qu'il est relativement lent. Il était impossible dans ces conditions de l'exploiter pour développer un nouvel instrument pour lequel tous les paramètres sont à optimiser. C'est pourquoi un nouveau code, nommé SimuLentille, a été développé au cours de cette thèse.

Le code SimuLentille est un ensemble de routines écrites en IDL dont le but est de simuler la transmission par une lentille de Laue de façon suffisamment rapide pour pouvoir être intégré dans un programme de maximisation de la sensibilité. Ce code est analytique ou plutôt semi-analytique puisque la PSF est calculée comme la somme des contributions de chacun des cristaux. Pour gagner du temps de calcul, les symétries sont utilisées, ce qui permet de visualiser les performances d'un design en une poignée de secondes.

SimuLentille utilise la théorie dynamique de la diffraction et le modèle de Darwin pour simuler les cristaux mosaïques et la théorie PPK pour simuler les cristaux à plans courbes. Il calcule la diffraction jusqu'au troisième ordre et renvoie la surface efficace de la lentille, la répartition des photons sur le plan focal (la PSF), et une évaluation de la sensibilité du télescope si des informations sur le plan de détection lui sont fournies. De plus, des aides à la conception telles qu'un fichier contenant le détail de chaque anneau de cristaux et une représentation graphique du remplissage de la surface de la lentille sont créés dans le même temps.

Le repère retenu pour écrire ce code dérive directement de celui établi lors de la calibration de CLAIRE, avec une petite différence dans le repérage de la source qui devient un repère sphérique, et des axes de rotation du cristal renommés (c.f. figure 6.1). La lentille s'inscrit dans un repère orthonormé où l'axe Oz représente l'axe de propagation de la lumière, et le plan xOy définit le plan de la lentille. La source est repérée par rapport à son écart à l'axe de visée (angle zénithal θ_S) et par rapport à l'axe Oy du plan de la lentille (angle azimutal φ_S). Les rotations associées au cristal sont notées sur la figure, avec la rotation d'axe tangentiel qui joue sur l'angle de Bragg et la rotation d'axe perpendiculaire (au plan de la lentille) qui est aussi appelée 'tilt'.

6.1.2 Fonctionnement

6.1.2.1 Les paramètres d'entrée

Le fichier lentille. C'est dans ce fichier qu'est définie la disposition des anneaux de cristaux qui constituent la lentille. Il contient en entête la focale de la lentille et le nombre de plages de cristaux. Une plage de cristaux regroupe plusieurs anneaux, et est définie par les paramètres suivants :

- Rayon moyen de l'anneau le plus interne
- Rayon moyen de l'anneau le plus externe



FIG. 6.1: Repérage des axes de la lentille et des cristaux.

- Taille tangentielle des cristaux
- Taille radiale des cristaux
- Epaisseur des cristaux (pas utile si l'épaisseur est optimisée)
- Espacement minimum inter-cristaux (concerne aussi l'espacement inter-anneaux)
- Matériau cristallin
- Réflexion hkl
- Méthode d'optimisation de l'épaisseur : cristaux mosaïques ou cristaux à plans courbes, ou rien si l'épaisseur est entrée à la main
- Mosaïcité
- Taille moyenne des cristallites (utile seulement pour des cristaux mosaïques)
- Taux de remplissage maximum des anneaux de la bande (les cristaux sont répartis uniformément sur chaque anneau)
- Température des cristaux

Il n'y a pas de limitation sur le nombre de plages, et plusieurs plages peuvent se partager le même intervalle de rayons, dans la mesure ou la somme de leur taux de remplissage n'excède pas 1. Cette description de la lentille fixe les plages de rayon mais ne définit pas complètement leur remplissage. En assignant un taux de remplissage négatif à une plage de cristaux, chaque anneau va se remplir au maximum jusqu'à la valeur absolue du taux spécifié, mais ceci en tenant compte du remplissage préalable des anneaux (utile lorsqu'on définit une plage de cristaux se trouvant sur des intervalles de rayons déjà partiellement remplis). Cela permet de compléter la lentille en fonction de la place disponible.

Dans le but d'obtenir une surface efficace constante, il est possible de spécifier pour chaque plage de cristaux la surface efficace totale que la lentille ne doit pas dépasser. Cette limitation se base sur un algorithme qui adapte le taux de remplissage anneau par anneau en le diminuant éventuellement par rapport à la valeur spécifiée dans le fichier lentille (cet algorithme est décrit dans la section 6.1.2.2).
Définition du télescope et de la source. Une fois la lentille définie, il faut spécifier l'intervalle d'énergie de la source (qui a un flux de 1 ph/s/cm²/keV dans un spectre uniformément plat), sa position par rapport à l'axe de visée de la lentille et entrer les informations relatives au plan focal; si l'on ne s'intéresse qu'à la PSF, alors on peut n'entrer que les dimensions du plan focal (considéré carré) et des pixels (tous identiques et carrés). Cependant si une estimation de la sensibilité de l'instrument est désirée, alors il faut être beaucoup plus complet; les informations suivantes sont nécessaires :

- Un fichier de bruit de fond par bin en énergie [cps/s/cm³/keV]
- Le temps de pose
- Le niveau de détection
- L'épaisseur du détecteur
- Efficacité de détection (full peak efficiency)
- Résolution en énergie du détecteur δE

Le calcul de sensibilité est détaillé en annexe D et les valeurs numériques utilisées ainsi que les résultats obtenus sont présentés au § 6.3.9.2.

Options. Dans le programme principal, on peut spécifier quelques options, comme par exemple

- L'épaisseur minimum autorisée pour les cristaux
- L'épaisseur équivalente d'aluminium absorbant les rayonnements (pour simuler la structure de la lentille)
- Le mode d'optimisation de l'épaisseur des cristaux; il y a deux possibilités, l'épaisseur optimale ou l'épaisseur qui donne 99% de la réflectivité maximum (permet de réduire le poids des cristaux jusqu'à 15%).
- La surface efficace maximum (au pic) produite par les anneaux de chaque plage : ce paramètre va diminuer le taux de remplissage des anneaux d'une plage par rapport à la limite spécifiée dans le fichier lentille. En affinant ainsi le taux de remplissage anneau par anneau, chacun d'eux produit la même surface efficace au pic, ce qui permet d'une part d'obtenir des bandes passantes plates, et d'autre part d'économiser de la masse. La conséquence de l'utilisation de ce paramètre est que les plages d'anneaux ne sont pas entièrement remplies, l'anneau limitant étant le plus interne de la plage (le seul à être rempli).
- Le mode de calcul de la PSF; Rapide : la PSF d'une plage est calculée à partir de l'anneau comportant le plus de cristaux de la bande et est ensuite mis à l'échelle pour simuler l'influence de tous les cristaux de la plage. Lent : La PSF de chaque anneau est évaluée séparément, toutes les PSF des anneaux d'une plage étant ensuite additionnées pour sortir la PSF de la plage.

6.1.2.2 Principe du calcul

Le programme principal SimuLentille s'appuie sur les bibliothèques SimuDifflib, Utillib, SpotFoclib ainsi que sur les routines EffectiveArea, SimuSpotFoc et Sensitiv pour effectuer tous les calculs et sortir les résultats.

Le fichier lentille est tout d'abord chargé, puis les plages de cristaux sont traités une par une, dans l'ordre du fichier. Prenons l'exemple de la plage i pour décrire l'algorithme

qui est utilisé :

- 1. La plage est divisée en un nombre entier d'anneaux qui vont être traités un par un, en partant du plus interne.
- 2. Suivant la nature des cristaux qui composent l'anneau et son rayon, l'énergie moyenne diffractée est calculée.
- 3. L'épaisseur optimale de chaque anneau est calculée.
- 4. En fonction du taux de remplissage défini pour la plage, le nombre de cristaux de chaque anneau est déterminé. Ce nombre est provisoire, il constitue une limite supérieure. Tous les paramètres des anneaux de la plage *i* ont maintenant une valeur.
- 5. La surface efficace produite par la plage i est calculée par le biais du module Effective Area.
- 6. Cette surface efficace est additionnée aux surfaces efficaces des plages préalablement traitées.
- 7. Si une surface efficace maximum a été attribuée à la plage i et que la somme de toutes les surfaces efficaces est inférieure à cette valeur dans la bande d'énergie couverte par la plage i, alors on passe à la plage suivante (retour à l'étape 1 pour la plage i + 1). Par contre si cela n'est pas le cas, on entre dans un processus itératif jusqu'à ce que cela le devienne :
 - (a) Recherche des anneaux de la plage i engendrant le dépassement de la valeur de surface efficace définie
 - (b) Décrément du taux de remplissage de ces anneaux
 - (c) Retour à l'étape 5
- 8. Lorsque toutes les plages sont traitées, le design de la lentille est figé, les sorties du programmes sont calculées.

En fonction du mode de calcul spécifié dans les options, soit la PSF de l'anneau est calculée pour tous les anneaux, soit elle est calculée uniquement pour l'anneau le plus externe de la plage (mode rapide). Ce calcul est effectué par le module SimuSpotFoc. Une fois que tous les anneaux d'une plage ont été ainsi traités, on passe à la plage suivante, et ainsi de suite jusqu'à ce que toute la lentille ait été simulée.

Vient ensuite la mise en forme des résultats :

- Un fichier texte détaillant tous les paramètres de chaque anneau, plage par plage (incluant le taux de remplissage, le poids, etc...).
- Un fichier PostScript contenant l'histogramme du taux de remplissage des anneaux en fonction de leur rayon.
- Un fichier PostScript contenant la surface efficace de la lentille sur l'intervalle d'énergies spécifié.
- Un fichier PostScript par plage contenant la PSF produite par la plage de cristaux en question.
- Un fichier PostScript contenant la somme des PSF.
- Un fichier PostScript contenant la sensibilité de l'instrument sur l'intervalle d'énergies spécifié.

- Un fichier FITS regroupant toutes les PSF de chaque anneau et la PSF totale, ainsi que la surface efficace et la sensibilité.
- en option : un fichier texte de la surface efficace en fonction de l'énergie.
- en option : un fichier texte de la sensibilité en onction de l'énergie.
- en option : un fichier texte du profil du spot focal.

Calcul de la PSF. Dans le cas où la source est sur l'axe de visée de la lentille, dans la mesure où l'on considère que les cristaux sont orientés idéalement, tous les cristaux d'un même anneau produisent la même réponse; seul l'azimut de leur empreinte va changer sur le plan focal en fonction de leur position sur l'anneau, mais toutes seront centrées sur le centre du plan focal. On ne considère donc qu'un seul cristal pour lequel on calcule suivant son axe radial la distribution spatiale des photons sur le plan focal. Ce calcul est le résultat de la convolution entre l'extension radiale du cristal et la courbe de diffraction du cristal produite par un faisceau parallèle tombant en un point (c.f. § 4.2.3). Cette courbe est ensuite projetée sur un axe ayant un pas identique au détecteur, et élargie suivant la taille tangentielle du cristal. Après l'avoir normalisée, on obtient ainsi l'empreinte d'un cristal en trois dimensions posées sur une grille dont le pas est égal aux pixels du détecteur.

On additionne ensuite autant d'empreintes qu'il y a de cristaux sur l'anneau, en leur appliquant une rotation correspondant à l'emplacement du cristal sur l'anneau (le code répartit les cristaux uniformément sur chaque anneau).

Dans le cas où la source n'est pas sur l'axe, le calcul doit être fait pour chacun des cristaux du fait qu'ils ne voient pas tous la source sous le même angle (ce qui change l'énergie diffractée et donc la forme de la courbe de diffraction) et que l'empreinte de chaque cristal ne sera pas positionnée sur le même point du plan focal. Du fait de la symétrie, on peut ne traiter que la moitié des cristaux d'un même anneau pour gagner du temps.

6.1.2.3 Limitations

Bien que ce code représente un outil très efficace pour le développement d'une lentille γ , il possède des limitations qui sont principalement dues au fait que ces fonctionnalités n'ont pas représenté un besoin sur la durée de cette thèse. Il est donc toujours possible de les implémenter. Voici les principales limitations :

- Le spectre en énergie de la source est plat.
- La source ne peut être qu'à l'infini (ne peut simuler des mesures de calibration).
- Le spectre transmis par la lentille est récupéré sur l'ensemble du plan focal. On ne sort pas le spectre reçu par chaque pixel.
- La lentille est idéale : Les cristaux d'un même anneau sont tous rigoureusement identiques, les cristaux sont parfaitement orientés.
- Les cristaux sont répartis uniformément sur les anneaux, même lorsqu'ils ne sont pas pleins.
- Lors de l'évaluation de la sensibilité, on considère implicitement que chaque photon est arrêté dans le pixel sur lequel il est tombé, l'épaisseur de ce pixel pouvant atteindre plusieurs centimètres. Cette partie du code est la plus grossière, le code n'étant pas prévu initialement pour calculer la sensibilité en absolu d'un télescope

mais plutôt pour la calculer en relatif, de façon à chercher l'optimum pour une lentille.

 Il n'y a pas d'interface graphique, on entre les informations dans le fichier lentille et dans le programme principal.

6.1.3 Validation : comparaison avec le code Monte Carlo Simu-Lens

Pour établir la validité du code, les résultats ont été comparés à ceux du code Monte-Carlo SimuLens écrit par Halloin [2003], qui avait lui même été vérifié sur les données de calibration de la lentille CLAIRE (du moins spectralement). Un anneau test a été simulé dans le cas d'une source ponctuelle sur l'axe et aussi lorsque la source se trouve à 72 arsec de l'axe de visée. L'anneau a un rayon de 632 mm, il est constitué de cristaux de Ge 111 de 30 arcsec de mosaïcité et diffracte sur un plan focal situé à 86 m.

Les figures 6.2 et 6.3 permettent de comparer les résultats produits par les deux codes dans le cas où l'anneau test reçoit des rayonnements d'une source placée sur l'axe de visée. La première figure montre les spots focaux produits par les deux codes. Le graphique de gauche de la deuxième figure présente une comparaison du profil de ces spots focaux pris sur la ligne bleue, et le graphique de droite montre les surfaces efficaces calculées par les deux codes. Comme on peut le constater, les résultats sont parfaitement en accord.

Les résultats de la comparaison pour la source hors de l'axe sont montrés sur les figures 6.4 et 6.5. Comme dans le premier cas, les résultats des deux codes sont parfaitement en accord, ce qui valide le code semi-analytique SimuLentille.



FIG. 6.2: Comparaison du spot focal simulé par le code semi-analytique Simulentille (image de droite) et de celui produit par le code Monte-Carlo SimuLens (image de gauche) dans le cas où la source est sur l'axe de visée.



FIG. 6.3: Gauche : Comparaison des profils des spots focaux simulés par les deux codes (pris suivant la ligne bleue). Droite : Comparaison de la surface efficace produit par l'anneau de test simulé par le code Monte-Carlo (courbe noire) et par le code Semi-analytique (courbe rouge).



FIG. 6.4: Même chose que la figure 6.2 dans le cas où la source est dépointée de 72 arcsec par rapport à l'axe de visée



FIG. 6.5: Comparaison des profils des spots focaux et des surfaces efficaces calculées par les deux codes dans le cas où la source se trouve à 72 arcsec hors de l'axe de visée.

6.2 Conception d'une lentille de Laue

Avant de voir avec l'exemple de la lentille du Gamma Ray Imager (GRI) la méthode pour concevoir une lentille de Laue, nous allons nous intéresser dans cette section au comportement des facteurs de mérites FM et FM^m (définis au début du chapitre 4) en fonction de trois paramètres d'importance majeure :

- La distance focale
- La section des cristaux (carrés)
- La mosaïcité des cristaux

La comparaison entre les différents matériaux cristallins sera faite par la suite, dans cette section, on ne considère que des cristaux de cuivre diffractant selon les plans (111). Il sont modélisés avec une longueur de cristallite de 50 μ m, et sont orientés idéalement en étant répartis sur des anneaux concentriques dont l'axe de symétrie définit l'axe optique de la lentille. Ces anneaux diffractent dans la bande d'énergie comprise entre 800 keV et 900 keV . L'épaisseur de chaque anneau est optimisée en fonction de l'énergie principale qu'il diffracte, et le nombre d'anneaux est calculé en fonction du domaine de rayons correspondant à la bande d'énergie à couvrir et à la taille des cristaux.

6.2.1 La distance focale

A distance focale donnée, une bande d'énergie est diffractée par des anneaux occupant une plage de rayons. Le rayon r_i de l'anneau diffractant une énergie E_i est donné par l'expression 2.8 qui est rappelée ici :

$$r_i \approx \frac{12,3984\,f}{E_i\,d_{hkl}}\tag{6.1}$$

Lorsque la focale augmente, les rayons extrêmes diffractant dans la bande d'énergie vont augmenter linéairement et leur écart va lui aussi augmenter linéairement. Cela signifie que pour une bande d'énergie donnée, plus la focale est grande et plus la surface de cristaux diffractant dans la bande d'énergie est grande.

Il y a deux contreparties à ce fait ; premièrement lorsque la focale augmente, la masse de cristaux diffractant dans une bande d'énergie donnée augmente de façon quadratique. Deuxièmement, le diamètre de la PSF augmente linéairement avec la focale du fait de la mosaïcité des cristaux. Cela contribue à l'étalement du signal sur le plan de détection et donc tend à réduire la sensibilité. Cela ne s'applique pas à une raie fine puisqu'un un seul angle de diffraction lui est associé.

La figure 6.6 montre les facteurs de mérite FM et FM^m en fonction de la distance focale. Les cristaux simulés sont du Cu 111 de 30 arcsec de mosaïcité. Sur le graphique de gauche, la section des cristaux est fixée à 10 mm x 10 mm, alors que sur le graphique de droite elle varie proportionnellement à la focale, avec comme référence une section de 15 mm x 15 mm pour f = 100 m. Dans ce dernier cas, le nombre d'anneaux reste constant et égal à 7 quelle que soit la focale, la section des cristaux variant de $4,5^2$ mm² à 45^2 mm². Dans le cas 'section constante', les oscillations observées sur les courbes sont dues au fait que le nombre d'anneaux augmente de façon discrète avec la focale.



FIG. 6.6: Facteur de mérite incluant la masse (en tirets) ou non (en trait plein) en fonction de la distance focale de la lentille pour diffracter dans une bande d'énergie comprise entre 800 et 900 keV. Les cristaux simulés sont du Cu 111 de 30 arcsec de mosaïcité. Sur le graphique de gauche, la section des cristaux est fixée à 10 mm x 10 mm, alors que sur le graphique de droite, leur section varie proportionnellement à la focale, avec comme référence 15 x 15 mm² pour f = 100 m.

Dans les deux cas, on voit qu'augmenter la focale conduit à une augmentation du facteur de mérite FM, mais cela n'est pas rentable en terme de masse investie : le facteur de mérite FM^m décroît avec la focale. Cela signifie que l'on gagne à prendre la focale la plus longue possible, dans la limite de la masse autorisée.

Dans le cas 'section proportionnelle', la fraction des coups pris en compte reste constante (voire même augmente légèrement) avec la focale, alors que dans le cas 'section constante' c'est le rayon optimal qui reste constant, impliquant une fraction ϵ_{sf} toujours plus faible lorsque la focale augmente (figure 6.7). Bien que le nombre total de coups diffractés soit légèrement supérieur dans le cas 'section proportionnelle' (dû au fait qu'il y a moins de perte de surface collectrice dans les espace inter-cristaux), le facteur de mérite FM est supérieur dans le cas 'section constante'.

On voit donc sur ces graphiques qu'une longue focale permet de gagner en sensibilité, quelle que soit la taille des cristaux. D'autre part, bien que cela n'ait pas été abordé ici, plus la focale est longue et plus l'alignement des cristaux doit être précis pour que le centre de leur empreinte de diffraction intercepte l'axe optique de la lentille sur le détecteur, cet argument plaidant bien-sûr en faveur de cristaux plus gros et d'une focale plus courte.



FIG. 6.7: Nombre total de photons diffractés vers le plan de détection et fraction de signal pris en compte pour optimiser la significativité de détection en fonction de la focale, pour les mêmes conditions que la figure précédente.

6.2.2 Section des cristaux et mosaïcité

Lorsque la mosaïcité augmente, la surface efficace de la lentille augmente du fait de l'augmentation de la réflectivité intégrée des cristaux se traduisant par un élargissement linéaire de la bande passante avec la mosaïcité (et d'une légère baisse de l'efficacité au pic, mais cette effet n'est pas prépondérant). Cependant, un élargissement de la bande passante spectrale implique automatiquement un élargissement de l'empreinte du cristal sur le plan focal. Ainsi la quantité de signal diffracté augmente avec la mosaïcité, mais sa dispersion sur le plan focal augmente aussi. D'autre part, l'épaisseur optimale des cristaux augmente avec la mosaïcité, ce qui implique une augmentation de la masse de cristaux.

La figure 6.8 montre la variation des facteurs de mérite FM et FM^m en fonction de la mosaïcité des cristaux et de leur section dans le cas d'une lentille de 100 m de focale (constituée de cristaux de Cu 111 diffractant dans la bande de 800 keV à 900 keV). La figure 6.9 montre la fraction ϵ_{sf} du nombre de coups diffractés vers le détecteur à prendre en compte pour maximiser le niveau de détection (graphique de gauche) et le nombre total de photons diffractés (pour un flux incident de 1 ph/s/cm²/keV).

Les deux derniers graphiques montrent bien que lorsque la mosaïcité augmente, la quantité de signal diffracté augmente, mais cela s'accompagne d'un étalement sur le plan focal. En conséquence la fraction de ce signal qui maximise le niveau de détection diminue, au point que le facteur de mérite diminue lui aussi comme on le voit sur la figure 6.8. Pour une focale de 100 m, si la masse n'entre pas en jeu (pas vraiment réaliste...), on peut se permettre d'utiliser des cristaux de environ 20 arcsec et jusqu'à 15^2 mm^2 de section. Cependant si la masse est un paramètre critique, alors la plus petite mosaïcité est la meilleure.

La section des cristaux, quant à elle, intervient plus sur la forme de la PSF que sur la quantité de signal diffracté, à l'exception du cas où les cristaux sont trop petits par rapport à la focale utilisée et que l'on perd du facteur de remplissage dû à la multiplication des espaces inter-cristaux. Si les cristaux sont de grande dimension, c'est leur projection







FIG. 6.9: Nombre de photons diffractés (à droite) et fraction à prendre en compte pour maximiser le niveau de détection (à gauche) en fonction de la mosaïcité et de la section des cristaux, pour une focale de 100 m.

droite qui va dominer la PSF, la rendant plutôt cylindrique. Alors que si les cristaux sont petits, c'est la divergence du faisceau diffracté dû à la mosaïcité (mosaic defocusing) qui prend le dessus, créant de grandes ailes à une PSF relativement fine. La figure 6.8 montre que des petits cristaux sont préférables pour maximiser le facteur de mérite FM, mais on voit sur la figure 6.9 que la fraction de signal à prendre en compte pour optimiser la significativité de détection augmente avec la taille des cristaux : En résumé, on utilise plus de signal, mais la sensibilité est moindre.

Ces considérations ne prennent pas en compte la faisabilité de la lentille : plus les cristaux ont une faible mosaïcité et plus ils doivent être homogènes entre eux et alignés avec précision. Cela se résume de la manière suivante : plus les cristaux utilisés ont une forte mosaïcité, et plus on a de chance d'atteindre les performances idéales. D'autre part, de plus gros cristaux diminuent le nombre total de pièces à préparer (découper, orienter, aligner, monter) et sont plus facile à monter avec précision. Tout cela conduit à faire des compromis lors du design d'une lentille.

6.3 La mission Gamma-Ray Imager

Le but de cette section est à la fois de présenter la mission Gamma Ray Imager (GRI) et de décrire les étapes qui mènent à un design de lentille de Laue.



FIG. 6.10: Vue d'artiste du télescope spatial Gamma Ray Imager.

6.3.1 Présentation de la mission GRI

Le concept de la mission GRI est né pour répondre aux questions fondamentales de l'astrophysique concernant les conditions extrêmes qui règnent dans notre Univers : Energies extrêmes mises en jeu lors de l'explosion d'étoiles massives qui accélèrent des particules jusqu'à des énergies macroscopiques, densités extrêmes au sein d'étoiles compactes et de trous noirs qui modifient profondément les lois de la physique dans leur environnement, et champs extrêmes qui interagissent avec la matière d'une façon que l'on ne pourra jamais reproduire sur Terre [Knödlseder, 2006]. Par le biais de l'étude des événements les plus violents de notre Univers, la mission GRI cherche à étendre notre connaissance des lois de la physique, un sujet dont l'importance est mise en avant dans le plan Cosmic Vision de l'ESA.

Pour atteindre cet objectif, la mission GRI propose de réaliser des observations à haute sensibilité sur la bande X-durs / γ de faible énergie grâce à une lentille de Laue combinée à des miroirs à incidence rasante, l'ensemble focalisant sur la bande 10 keV - 1,3 MeV. L'idée est de concentrer les rayonnements de basse énergie grâce aux miroirs (simple réflexion) et de prendre le relais avec la lentille pour atteindre l'énergie la plus haute possible. Au point focal, une caméra unique en CZT pixelisé assure la détection des photons diffractés.

GRI a été proposé (sans succès) à l'Agence Spatiale Européenne (ESA) en réponse à son appel à mission paru au début de l'année 2007 dans le cadre du plan Cosmic Vision 2015-2025. La mission a été présentée comme une classe M (dont le coût hors charge utile entre dans une enveloppe de 300 10^6 euros), lancée par une fusée Soyuz Fregate-2B depuis

Kourou. Elle se compose de deux satellites volant en formation pour réaliser une focale de 100 m entre le satellite portant les optiques (OSC) et celui portant le détecteur (DSC). Lors du lancement, les deux satellites sont empilés sous la coiffe du lanceur, le DSC étant sur le dessus de l'OSC. Dans cette configuration attachée, les deux satellites sont d'abord placés sur une orbite circulaire de 300 km d'altitude, ce qui offre une capacité d'emport de 2340 kg. Puis utilisant le propulseur de l'OSC, les deux satellites sont injectés sur une orbite de transfert leur permettant d'atteindre leur orbite finale, une orbite HEO (*highly excentric orbit*) de 20000 km de périgée et 183000 km d'apogée. Une fois cette orbite atteinte, les deux satellites se séparent et se positionnent en formation pour réaliser le télescope. La durée de la mission est initialement prévue pour 3 ans, avec une extension possible d'une année [Knödlseder, 2006].

Nous allons tout d'abord voir comment la lentille de Laue a été conçue avant d'entrer dans le détail de la mission. Comme nous allons le constater avec cet exemple concret, la conception d'une lentille de Laue est un processus itératif au cours duquel de nombreux compromis sont à faire. Le design est principalement guidé par les objectifs scientifiques de la mission, mais des contraintes fortes qui découlent directement du budget de la mission, comme l'encombrement et le poids, viennent compliquer l'exercice.

6.3.2 Contraintes et valeurs requises

Les objectifs scientifiques de la mission ont été définis à la suite de nombreux meetings au sein du consortium. Les thèmes principaux ont été présentés dans la dernière partie du chapitre 1, cela se traduit par des spécifications exprimées en terme de sensibilité dans des bandes d'énergies définies, et dans une moindre mesure pour une lentille γ , en terme de champ de vue et de résolution angulaire. Le tableau 6.1 donne les spécifications qui concernent la lentille du GRI.

Paramètres	Valeurs requises	Objectifs
Bandes d'énergie (keV)	150 - 600 & 800 - 900	10 - 1300
Sensibilité en continuum - $\Delta E = E/2, 3\sigma$,	10-7	$2 10^{-8}$
$100 \text{ ks} (\text{ph cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ keV}^{-1})$	10	3 10
Sensibilité en raie, $\Delta E = 3\%$, 3σ , 100 ks	$2 10^{-6}$	10^{-6}
$(\rm ph \ cm^{-2} \ s^{-1})$	0 10	10
Champs de vue - diamètre (arcmin)	5	10
Résolution angulaire - PSF (arcsec)	60	30

TAB. 6.1: Spécifications des performances reliées à la lentille de Laue du GRI.

Viennent s'ajouter à cela les contraintes sur l'OSC qui dérivent des choix stratégiques de la mission; Pour pouvoir lancer deux satellites empilés sous la coiffe d'une fusée Soyuz, la lentille n'a d'autre choix que d'être disposée 'à plat'. L'enveloppe budgétaire d'une mission de classe M de l'ESA ne permet pas d'envisager un mécanisme de déploiement, ce qui fait que le diamètre externe de la lentille est limité par le diamètre interne de la coiffe, soit 3,80 m. Le diamètre interne de la lentille est plus flou, il est limité par le diamètre externe des miroirs multicouches, mais celui-ci dépend de l'énergie minimale



FIG. 6.11: Schéma de l'agencement du satellite optique du GRI : le disque noir au centre représente les miroirs à incidence rasante, la surface allouée aux cristaux de la lentille de Laue est représentée en orange, et les différents organes vitaux du satellites sont répartis dans les zones en bleu.

qu'ils diffractent (la réflexion sur ces miroirs est en fait de la diffraction, comme nous allons le voir par la suite) et de la focale, de même que pour une lentille de Laue. Ainsi on se fixe un diamètre minimal de ~ 110 cm pour la lentille.

La configuration proposée est schématisée sur la figure 6.3.2 : les miroirs se trouvent au centre, entourés par une structure rigidifiante, puis le reste du disque est occupé par les cristaux à l'exception de 4 bras qui font à la fois office de structure et contiennent les modules vitaux du satellite. Cela a l'inconvénient de limiter la surface de la lentille, mais c'est la seule possibilité pour réaliser un satellite comportant deux optiques ayant le même point focal (ce qui permet de n'avoir qu'un seul détecteur) sans mécanisme de déploiement. Ainsi les cristaux ne peuvent occuper que 80% de la circonférence de chaque anneau, les 20% restant étant répartis sur les quatre bras du satellite.

Contraintes
< 180
> 55
< 250
< 0.8

TAB. 6.2: Contraintes sur le design de la la lentille du GRI.

6.3.3 Design de la lentille : Première itération

6.3.3.1 Choix de la focale

Connaissant la liste des cristaux potentiellement utilisables pour une lentille de Laue, le cuivre, le germanium-silicium et le silicium-germanium dans notre cas, il faut déterminer la focale qui représente le meilleur compromis pour couvrir l'ensemble des énergies avec suffisamment de sensibilité. Nous avons vu au § 6.2.1 que la sensibilité de l'instrument augmente avec la focale. Cela signifie que l'on va chercher la plus longue focale satisfaisant toutes les contraintes.

C'est le seuil bas en énergie qui représente la plus grosse contrainte sur la focale : La focale la plus longue est celle qui permet au cristal ayant la plus grande distance interréticulaire placé sur le rayon le plus externe autorisé de diffracter l'énergie la plus faible de la bande passante requise. Les distances inter-réticulaires des cristaux dont nous disposons sont présentées dans le tableau 3.1 à la page 49. C'est le germanium qui a la plus grande distance inter-réticulaire avec 3,26627 Å pour les plans (111).

En utilisant les contraintes d'encombrement citées dans le tableau 6.2, on détermine la focale maximum à partir de l'expression 2.8 :

$$f \approx \frac{E_i \, d_{hkl} \, r_i}{12,3984} = \frac{150 \times 3,26627 \times 1,8}{12,3984} \approx 71 \mathrm{m} \tag{6.2}$$

Cette valeur, 71 m, sera donc le point de départ du design de la lentille.

6.3.3.2 Choix des cristaux et allocation des plages de rayons



FIG. 6.12: Facteurs de mérite des différents cristaux sur une bande d'énergie de 100 keV à 1 MeV, limités sur une plage de rayons comprise entre 55 cm et 180 cm. La focale est de 71 m, la mosaïcité de 30,5 arcsec (ce qui correspond à deux fois la mosaïcité minimum pour avoir une couverture continue avec des cristaux à plans courbes) et la section des cristaux de 10 mm x 10 mm. Le cuivre et le Germanium sont des cristaux mosaïques dont la taille des cristallites vaut 50 μ m, alors que les cristaux notés 'Si' sont des cristaux à plans courbes.

En se basant sur la focale déterminée précédemment, on calcule le facteur de mérite FM des différents cristaux dont on dispose (incluant les différentes réflexions) pour choisir les plus intéressants à utiliser dans cette configuration. Précisons que cette étude est faite en prenant une longueur de cristallite de 50 μ m pour les cristaux de cuivre et de germanium.

Le facteur de mérite d'un matériau utilisant une réflexion donnée est calculé de la façon suivante :

Création d'une lentille. On considère une lentille dont la plage de rayons utilisable est définie par les contraintes de la mission. Cette plage de rayons est divisée en anneaux concentriques. Parmi ces anneaux, ceux qui focalisent dans la bande d'énergie définie par les objectifs scientifiques sont remplis, l'épaisseur des cristaux de chaque anneau étant optimisée en fonction de l'énergie diffractée. On obtient ainsi une lentille, dont on va calculer les performances : La surface efficace et la PSF sont déterminée pour une source sur l'axe.

Analyse des performances. De même que pour comparer différents designs, la comparasion entre les différents cristaux se fait par rapport aux facteurs de mérite FMet FM^m . FM est le produit de la surface efficace multiplié par le coefficient ϵ_{sf} et divisé par le rayon r_{opt} , et FM^m est égal à FM divisé par la masse de cristaux. Cela donne une courbe en [cm] ou [cm/kg] en fonction de l'énergie, qui est représentative de la significativité de détection que l'on peut atteindre, et de la 'rentabilité' de la masse de cristaux utilisée. La figure 6.12 montre les facteurs de mérites des différents cristaux dont nous disposons pour réaliser une lentille de Laue, dans le cas où la focale est de 71 m.

La forme des courbes est représentative de la surface efficace produite par une plage de rayons recouverte d'un matériau utilisant une unique réflexion : la surface efficace est toujours plus élevée à basse énergie du fait que la circonférence des rayons externes est plus importante que celle des rayons internes. Ajouté à cela que l'efficacité de diffraction est meilleure à basse énergie, et surtout que la largeur de la bande passante d'un anneau est proportionnelle à l'énergie diffractée, cela explique par exemple que le facteur de mérite du SiGe 111 chute d'un facteur 10 entre 150 keV et 520 keV.

Ceci est l'un des problèmes majeurs inhérents aux lentilles de Laue : La surface efficace et donc la sensibilité de l'instrument a tendance à chuter lorsque l'énergie augmente, alors que le flux des sources lui aussi chute avec l'énergie. Il faudrait donc pouvoir être plus sensible à haute énergie qu'à basse énergie. La solution est d'utiliser plusieurs plages de cristaux pour diffracter dans la même bande d'énergie.

Les différents types de cristaux doivent être répartis sur des plages de rayons de façon à couvrir au mieux les objectifs scientifiques. Pour cela on utilise un graphique du rayon en fonction de l'énergie pour chaque matériau et réflexion potentiellement utilisable comme le montre la figure 6.13. Pour le choix des matériaux, on se reporte au graphique du facteur de mérite FM (on considère d'abord FM, et si l'on dépasse la masse autorisée, on se rabat sur FM^m) où l'on voit que le SiGe à plans courbes est de loin le meilleur entre 150 keV et environ 220 keV, et au delà les réflexions 111, 200 et 220 du Cu prennent le relais. On va donc utiliser préférentiellement ces matériaux.

La première chose que l'on remarque sur la figure 6.13 est qu'à basse énergie, il faut une plage importante de rayons pour couvrir un petit intervalle (toujours du fait que la largeur de la bande passante d'un anneau soit proportionnelle à l'énergie diffractée), alors qu'à haute énergie, les bandes passantes des anneaux s'étalent, ce qui fait que l'on peut couvrir 100 keV avec une plage de rayons inférieure à 10 cm, ce qui limite fortement la surface de collection diffractant dans cette bande d'énergie.

6.3.3.3 Evaluation du résultat

Un agencement de la lentille est proposé à l'aide des couleurs et repris dans le tableau 6.3. Cette première itération de lentille est basée sur une focale légèrement affinée à 73 m (pour que l'anneau le plus interne en Cu 200 ait un rayon de 55 cm et diffracte à 910 keV), et sur des cristaux de $10 \times 10 \text{ mm}^2$ de section, répartis en 119 anneaux concentriques divisés en 6 plages. Les deux dernières plages de cristaux se partagent les mêmes rayons, ce qui est la seule possibilité pour couvrir les basses énergies de façon continue tout en assurant la couverture des hautes énergie.



FIG. 6.13: Rayon de l'anneau en fonction de l'énergie diffractée pour une focale de 70 m. Les différents matériaux et réflexions utilisables sont représentés. Ce type de graphique est utilisé pour réaliser un agencement grossier des différentes plages de cristaux. Les couleurs en transparence montrent les différentes plages de rayons et la bande en énergie qu'elles couvrent, dans le cas d'une première itération.



FIG. 6.14: Surface efficace de la première itération du plan de la lentille du Gamma Ray Imager.

n°	Plage de	Bande d'énergie	Matériau et	Nombre	Taux de	Poids
	rayons (cm)	(keV)	réflexion	d'anneaux	$\operatorname{remplissage}$	(kg)
0	55,00 - 63,40	789,8 - 910,4	Cu 200	9	$0,\!8$	18,7
1	64,45 - 77,05	562,8 - 672,8	Cu 111	13	$0,\!8$	20,1
2	78,10 - 89,65	789,9 - 906,7	Cu 220	12	$0,\!8$	45,7
3	90,70 - 103,30	484,7 - 552,1	Cu 200	13	$0,\!8$	$25,\!9$
4	104,34 - 178,90	280,0 - 479,9	Cu 200	72	$0,\!4$	69,5
5	104,34 - 178,90	161,4 - 276,6	SiGe 111	72	$0,\!4$	$92,\!6$

TAB. 6.3: Première itération de l'agencement de la lentille du Gamma-ray Imager. Les cristaux mesurent $10 \ge 10 \text{ mm}^2$ de coté, ils sont répartis sur 119 anneaux concentriques divisés en six plages.

La figure 6.14 montre la surface efficace de cette lentille calculée par le programme SimuLentille. Cette surface efficace est le résultat brut de l'agencement présenté dans le tableau 6.3. Aucun effort n'a été fait pour l'aplanir. Le problème que l'on voit apparaitre dans ce design est que si l'on cherchait à aplanir cette surface efficace, on atteindrait à peine les 300 cm² entre 150 keV et 600 keV, ce qui est relativement faible. Il est sûr qu'avec une si faible surface efficace, on atteint pas les spécifications de sensibilité.

D'autre part, ce design nécessite plus de 270 kg de cristaux, ce qui dépasse la limite de 250 kg. En regardant la répartition des masses de cristaux dans le tableau 6.3 on voit que la couverture de la bande 161 keV - 276 keV nécessite 92,6 kg de cristaux, ce qui représente un tiers de la masse totale de cristaux de la lentille. En conséquence, il parait plus raisonnable de relever le seuil bas en énergie de la lentille pour obtenir une meilleure surface efficace sur les énergies couvertes. Cela n'affectera pas les objectif scientifiques de la mission, puisque en relevant le seuil en énergie de la lentille, cela permet d'augmenter la focale et donc d'augmenter la limite haute des miroirs. On ne fait donc que relever l'énergie de transition miroir - lentille. La technologie des miroirs, comme nous allons le voir brièvement dans le §6.3.5 permet aujourd'hui d'atteindre environ 300 keV.

6.3.4 Design de la lentille : Version finale

En portant le seuil bas en énergie de la lentille à 220 keV, et en considérant que le matériau le plus approprié est non pas le germanium, mais le silicium-germanium à plans courbes $(d_{111} = 3,13542 \text{ Å})$, le calcul 6.2 donne à présent une focale de 100 m. On reprend donc les différentes étapes de la première itération avec cette valeur. La figure 6.16 montre les types de cristaux utilisés et leur agencement sur la lentille. Avec une focale de 100 m, il devient possible d'utiliser plus largement le Cu 111 qui est le plus performant en termes de FM^m comme on le voit sur la figure 6.15.

Comme on l'a senti lors de la première itération, atteindre les spécifications sur la bande centrée sur la raie à 847 keV est l'un des points difficile. Pour y remédier, on va utiliser des cristaux de 10 mm de coté sur la bande de 800 à 900 keV alors que l'on utilise des cristaux de 15 mm de coté pour le reste de la lentille. De plus on a vu que diminuer la mosaïcité conduit à une meilleure sensibilité, c'est pourquoi une mosaïcité plus faible que pour le reste de la lentille y est utilisée. Ces deux choix impliquent que la réalisation serait



FIG. 6.15: Facteurs de mérite des différents cristaux sur une bande d'énergie de 100 keV à 1 MeV, limités sur une plage de rayons comprise entre 60 cm et 180 cm. La focale est de 100 m, la mosaïcité de 32 arcsec et la section des cristaux de 15 mm x 15 mm. Le cuivre et le Germanium sont des cristaux mosaïques dont la taille des cristallites vaut 50 μ m, alors que les cristaux notés 'Si' sont des cristaux à plans courbes.

plus exigeante techniquement, mais cela est le seul moyen d'atteindre les spécifications en sensibilité.

Dans le but d'obtenir une bande passante plate, un nouvel algorithme, développé lors de cette thèse, est utilisé. Il permet de répartir plus finement les différents matériaux et réflexions de façon à combler les 'trous' de la surface efficace. Ainsi, les plages de cristaux représentées sur la figure 6.16 ne sont que les principales, d'autres réflexion du cuivre et du germanium sont ensuite utilisées pour compléter la lentille. La figure 6.17 montre cette surface efficace, et la distribution des plages d'anneaux est présentée sur la figure 6.18. Le tableau 6.4 regroupe les informations sur les différentes plages de cristaux (le détail du remplissage de chaque anneau est donné est donné en annexe F).

Le résultat est une lentille à trois composante : la première de 220 à 330 keV atteint 320 cm^2 , la seconde qui s'étend de 330 keV jusqu'au delà de 610 keV s'approche des 400 cm² avec un pic à 420 cm² autour de 511 keV, et la dernière couvre largement la bande entre 800 et 900 keV avec une surface efficace de 630 cm². Ces surfaces efficaces sont calculées en prenant en compte l'absorption par une épaisseur de 1,5 mm d'aluminium qui simule l'effet de la structure supportant les cristaux.

La figure 6.19 montre l'évolution de cette surface efficace lorsque l'angle zénithal de la source n'est plus nul, i.e. lorsque la source se déplace dans le champs de vue. Comme on peut le constater, la bande à basse énergie 'résiste' plutôt bien, alors que la bande à haute énergie s'effondre complètement. On peut donc déjà imaginer que le champs de vue dans la raie élargie à 847 keV va être assez restreint.



FIG. 6.16: Rayon de l'anneau en fonction de l'énergie diffractée pour une focale de 100 m. Agencement de la lentille du GRI.



FIG. 6.17: Surface efficace de la lentille GRI telle qu'elle a été proposée à l'ESA.



FIG. 6.18: Taux de remplissage des anneaux en fonction du rayon pour la version finale de la lentille GRI.



FIG. 6.19: Evolution de la surface efficace de la lentille GRI en fonction de l'angle zénithal de la source. Les angles représentés sont (en acrsec) 0, 30, 60, 90, 120, 150 et 180.

n°	Plage de	Bande d'énergie	Matériau et	Taux de	Poids	Nbre de	Mosaïcité
	rayons (cm)	(keV)	réflexion	$\operatorname{remplissage}$	(kg)	$\operatorname{cristaux}$	(arcsec)
0	65,50 - 74,95	792,6 - 907,0	Cu 111	$0,\!8$	$19,\!41$	3330	27
1	76,00 - 85,45	802,8 - 902,6	Cu 200	$0,\!8$	$25,\!27$	3833	27
2	120,90 - 179,80	220,0 - 327,1	SiGe 111	$0,\!47$	$91,\!09$	7757	32
3	120,90 - 179,80	330,4 - $491,4$	Cu 111	$0,\!33$	$48,\!24$	6998	40
4	$97,\!65 - 119,\!35$	497,7 - 608,4	Cu 111	0,585	$33,\!09$	3395	40
5	$105,\!40 - 119,\!35$	812,8 - 920,4	Cu 220	-0,8	$21,\!21$	1067	27
6	127,10 - 155,00	399,9 - 487,7	Ge 220	-0,8	$4,\!22$	414	40
$\overline{7}$	$117,\!80 - 119,\!35$	519,4 - 526,2	Ge 220	-0,8	1,78	146	40
8	145,70 - 165,85	438,31 - 498,9	Ge 311	-0,8	$7,\!61$	633	40
9	168,95 - 179,80	487,6 - 518,9	Ge 400	-0,8	4,77	499	40

TAB. 6.4: Design final de la lentille GRI. Les cristaux des deux premiers anneaux ont une section de 10 x10 mm² alors que le reste de la lentille est occupé par des cristaux de 15 x 15 mm². Les taux de remplissage négatifs indiquent que les anneaux sont complétés au maximum jusqu'à la valeur absolue du taux indiqué, en tenant compte de leur remplissage préalable par les plages précédentes.

6.3.5 Les miroirs multicouches

Les miroirs multicouches consistent en une superposition de films d'épaisseurs grandissante à mesure que l'on s'éloigne du substrat. Contrairement aux miroirs de type Wolter I qui associent une première réflexion sur une surface parabolique et une deuxième sur une surface hyperbolique, les miroirs de GRI sont coniques et ne font qu'une réflexion, ce qui permet de gagner en efficacité et de couvrir la bande d'énergie 10 - 300 keV. Il s'agit donc de concentrateurs qui ne font pas d'image directe; sur le plan focal, la PSF est similaire à celle d'une lentille γ , la différence étant que la PSF des miroirs est plus fine, une résolution angulaire de ~ 10 arcsec étant visée.

Matériau	Epaisseur de la couche	Rugosité
	la plus mince (mm)	(mm)
W/Si	1,8	$0,\!4$
W/SiC	$1,\!4$	$0,\!35$
Pt/SiC	$3,\!0$	$0,\!45$
$\rm NiV/SiC$	$_{3,0}$	$0,\!55$

Tab.	6.5:	Caractéristiques	des	différents	groupes	de	couches	$\operatorname{constituant}$	les	miroirs	du
GRI.											

Le substrat de ces miroirs reprend le concept des optiques en Si-pore développés pour la mission XEUS par l'ESA, ce qui permet d'obtenir des miroirs extrêmement fins et légers [Collon *et al.*, 2007]. Le principe de la réflexion est montré sur la figure 6.20, il s'agit en fait d'une diffraction de Bragg par les différentes couches de revêtement, qui ne mesurent que quelques nanomètres d'épaisseur comme indiqué dans le tableau 6.5 [Jensen *et al.*, 2007]. L'ensemble des miroirs, représenté sur la figure 6.20 est constitué de 86 éléments ou 'pétales', qui doivent être alignés indépendamment sur la structure.



FIG. 6.20: Schéma des miroirs à incidence rasante du GRI (à gauche), et principe utilisés par les miroirs (à droite).

6.3.6 Le plan focal

Le plan de détection de la version de base du GRI a été conçu par l'IASF de Rome en collaboration avec Thales Alenia Space (TAS) de Milan. Il s'agit d'un spectromètre à résolution spatiale fine constitué de 4 couches octogonales de CZT pixelisées. (figure 6.21). La première couche, mesurant 5 mm d'épaisseur et 17 cm de diamètre (entre deux plats) est constituée de 129 cristaux de CZT montés en 'planar', i.e. présentant de fines électrodes polarisant verticalement les cristaux, divisant ce premier plan en 33024 pixels de 0,8 x 0.8 mm^2 de section. Ce plan est optimisé pour absorber par interaction photoélectrique les photons de la bande 10 - 250 keV. Les trois couches suivantes font 20 mm d'épaisseur, chacune étant légèrement plus large que celle qui la surplombe. Chacune est constituée de 688 cristaux de CZT divisés en pixels de 1,6 x 1,6 mm² de section, les cristaux mesurant respectivement 1,6 x 12,8, 1,6 x 19,2 et 1,6 x 25,6 mm² de section. Les cristaux sont polarisés transversalement de sorte que la distance maximale parcouru par les charges n'excède pas 1.6 mm, ce qui permet de limiter la perte de résolution spectrale. Ces 4 couches sont entourées de plans en CZT pixelisés dont le but est de collecter les photons diffusés pour augmenter l'efficacité de détection. Ces plans sont constitués de 1344 cristaux de 10 mm d'épaisseur divisés en 4032 pixels de 6,4 x 6,4 mm² par des électrodes produisant un champ transverse.

L'ensemble du détecteur est entouré par un blindage actif en BGO de 10 mm d'épaisseur, segmenté en 44 modules associés à des photomultiplicateurs de nouvelle génération. Au dessus, un collimateur passif de 1 m de long composé d'un sandwich de différents matériaux ayant des numéros atomiques décroissant vers l'intérieur a pour but d'atténuer le bruit de fond cosmique jusqu'à environ 100 keV.

Au total, le détecteur est constitué de 62208 pixels indépendants. Cette pixelisation fine permet d'appliquer efficacement la cinématique de reconstruction Compton dans le but de discriminer les photons ne provenant pas du satellite optique, tout en reconstruisant la trace du spot focal pour déterminer la position de la source et ainsi recréer une image du ciel observé. Cette configuration offre aussi la possibilité de mesurer la polarisation du rayonnement incident. Les performances attendues de ce design sont résumées dans le tableau 6.6.

Le premier plan de détection mesurant 17 cm de diamètre, cela offre un champ de vue théorique légèrement supérieur à 5 arcmin en diamètre. L'étude réalisée par TAS propose l'utilisation d'une plate-forme PROTEUS pour emporter les 100 kg du plan focal. Cette solution limite le risque et le coût puisque cette plate-forme polyvalente a déjà été utilisées par plusieurs missions [Knödlseder *et al.*, 2007].



FIG. 6.21: Représentation schématique du plan focal du GRI.

Paramètre	Valeur attendue
Gamme d'énergie	10 - 1300 keV
Efficacité de détection @ 50 / 200 / 850 keV	100% / > 90% / > 75%
Résolution spectrale @ 50 / 200 / 850 keV	2% / $1%$ / $1~%$
Polarisation minimum détectable	5% (100 ks, 0.1 Crab)
Résolution temporelle	$100 \ \mu s$
Temps mort	< 2 ~%
Température de fonctionnement (°C)	-5 \pm 15 $^\circ\mathrm{C}$

TAB. 6.6: Paramètres principaux du plan de détection du GRI.

Un détecteur en germanium constitué de planars finement pixélisé [Wunderer *et al.*, 2005, 2006] de type *Nuclear Compton Telescope* représente une option alternative pour le plan focal du GRI. Cette option offre une meilleure résolution spectrale, ce qui permet une reconstruction Compton des événements plus fine, et donc un meilleur filtrage du bruit

de fond. Mais la complexité de ce type de détecteur est plus importante du fait qu'il faut les refroidir à température cryogénique, et les réchauffer périodiquement pour annuler la dégradation de la résolution due aux impacts des rayons cosmiques.



FIG. 6.22: Vue éclatée du satellite détecteur du GRI, basé sur la plate-forme PROTEUS développée par TAS.

6.3.7 Satellite optique et structure de la lentille

Le satellite optique proposé par TAS est une conception dédiée s'inspirant des études menées pour la mission XEUS pour ce qui est de la forme de roue et de l'aspect modulaire. Bien que le satellite en lui même soit dessiné pour cette mission, les sous-équipements sont standards, ce qui limite le coût du développement. L'architecture du satellite est basée sur un cône central faisant l'interface avec le lanceur par le dessous et avec le satellite détecteur par le dessus, ce qui permet de lancer les deux satellites simultanément, étant empilés l'un sur l'autre. Les miroirs multicouches ainsi qu'un réservoir d'ergols hélicoïdal sont disposés à l'intérieur du cône. Le cône est relié à un cylindre externe par deux types de rayons : quatre 'rayons d'équipement' qui abritent l'ensemble des sous-systèmes du satellite, et quatre rayons de rigidification dont le but est d'assurer la stabilité mécanique de l'ensemble (figure 6.23). Ces deux types de rayons laissent 80% de la surface pour les cristaux de la lentille de Laue.

Le cylindre extérieur est couvert de cellules photovoltaïques assurant l'apport d'énergie au satellite. Un angle de ± 20 ° par rapport à la normale à la direction du soleil a été considéré lors du dimensionnement. Des excursion à ± 80 ° du soleil avec une autonomie de 2-3 heures seront tout de même possible en puisant dans les batteries. Cela permettra d'assurer un pointage régulier sur les supernovae.

Les cristaux sont montés sur des modules qui viennent ensuite se fixer en trois points sur les secteurs (figure 6.3.7). Cette architecture modulaire est pensée pour pouvoir paralléliser l'assemblage de la lentille, tout en assurant une stabilité mécanique et thermique maximum. Le mode de fixation des cristaux sur les modules est actuellement en cours d'étude dans une collaboration TAS - CESR financée par le CNES. La solution retenue pour cette étude consiste à déterminer précisément l'angle d'asymétrie des cristaux par rapport à leur face inférieure (celle qui sera en contact avec le module), puis prenant en compte cette asymétrie et l'angle de Bragg, l'orientation à donner à la face inférieure est



FIG. 6.23: Configuration du satellite optique du GRI, basé sur un design en roue, avec au centre les miroirs et sur l'extérieur la lentille. Sur la figure en haut à droite, on voit le réservoir hélicoïdal. La figure en bas à gauche montre les sous systèmes du satellite répartis dans les quatre 'rayons d'équipement', et la figure en bas à droite montre le détail d'un de ces rayon d'équipement, ainsi qu'un des rayons structuraux. [Knödlseder *et al.*, 2007]

transmise. Sur le module, chaque site devant accueillir un cristal est équipé de trois plots d'appuis. Connaissant l'angle à laquelle la face inférieure du cristal (face de référence) doit être orientée par rapport aux repères du module, ces trois plots sont usinés pour réaliser cet angle. Ensuite le cristal est collé sur le module en étant en appuis sur les trois plots, ce qui doit assurer un collage de précision. L'évaluation de cette option, qui dépend pour beaucoup de la faisabilité d'une surface de référence sur les cristaux, est actuellement en cours d'étude.

Une option alternative pour le montage des cristaux serait de réaliser un module dont les plots d'appuis des cristaux sont de hauteur variable, et directement réglés dans le faisceau. Lorsque l'orientation serait trouvée, de la colle serait injectée par derrière, aspirant le cristal contre ses appuis lors du séchage. Cette technique de réglage dérive de la méthode utilisée pour le réglage de la lentille CLAIRE.



FIG. 6.24: Secteur de lentille supportant les modules sur lesquels sont fixés les cristaux. La lentille est composée de 8 secteurs identiques réalisés en CeSiC. Design réalisé par Thales Alenia Space.

6.3.8 Le vol en formation

Comme nous l'avons déjà mentionné, GRI est un télescope dont les optiques se trouvent sur un satellite et le plan focal sur un autre. Une étude menée par TAS dérivée de l'étude de la mission MAX au CNES en phase 0 (c.f. § 6.4) a permis d'élaborer la stratégie du vol en formation.

Durant l'observation d'une cible, l'OSC maintient un pointage inertiel à \pm 10 arcsec, et les star trackers assurent un retour sur le pointage à 3 arcsec. Le DSC a pour rôle de maintenir la formation en se plaçant à la distance focale sur l'axe optique de l'OSC. L'OSC contrôle son attitude au moyen de roues à réactions qui peuvent être déchargées par la propulsion chimique. Le DSC maintient la formation au moyen de propulseurs à gaz froid. Lors d'un changement de cible, l'OSC pivote sur lui même alors que le DSC suit en se maintenant dans l'axe optique. Il a été estimé qu'une réorientation de la formation de 20° prendrait environ 2 heures.

Le positionnement relatif des deux satellites est réalisé au moyens de deux systèmes; le moins précis, le lien radio fréquence (RF) assure le positionnement longitudinal ainsi que la détermination de l'azimut et de l'élévation d'un satellite par rapport à l'autre. Au total six antennes sont disposées sur l'OSC, 3 sur chaque face formant un 'L'. Le DSC est lui aussi équipé de six antennes réparties de la même façon. Avec ce système, lorsque la formation est active, les trois antennes du DSC font face aux trois antennes de l'OSC, la disposition en 'L' supprimant le degré de liberté autour de l'axe optique du télescope.

D'autre part le système HDOM (Hexa-Dimensional Optical Metrology) développé par TAS assure le positionnement fin des satellites, bien que la mission GRI ne soit pas trop exigeante en ce qui concerne les spécifications du vol en formation (voir tableau 6.7).

Paramètre	Valeur requise	Performance attendue
Déplacement longitudinal (m)	100	15 - 250
Déplacement transversal (m)	0	< 1
Positionnement relatif longitudinal (mm)	± 100	< 4
Positionnement relatif transversal (mm)	± 10	< 0,4
Attitude relative (azimut) (°)	0	< 0,1
Attitude relative (elevation) (arcsec)	0	< 1

TAB. 6.7: Spécifications pour le vol en formation de la mission GRI.

6.3.9 Performances

6.3.9.1 PSF et imagerie

Avec le design proposé, la lentille de GRI produit en fait 3 spots focaux différents suivant la mosaïcité, la nature et la section des cristaux qui diffractent les radiations incidentes. La bande de 220 keV à 330 keV est couverte par les cristaux de Si-Ge à plans courbes de 32 arcsec de mosaïcité. C'est la bande sur laquelle le spot focal est le plus compact, ce qui se traduit par un gain en sensibilité (voir section suivante). La figure 6.25 montre les PSF des plages de cristaux n° 0, 2 et 3, qui représentent la diversité des cristaux utilisé dans ce design. Le graphique 6.26 montre le flux radial intégré (et normalisé) pour les trois différentes PSF, et le tableau 6.8 reprend leurs caractéristiques. On retrouve bien sûr l'argument majeur des cristaux à plans courbes qui limitent fortement la dispersion du signal sur le plan focal par rapport aux cristaux mosaïques. Tout se passe donc comme si l'on avait plusieurs optiques indépendantes qui constituent la lentille.

Plage	Type	Mosaïcité	Section	r_{opt}	ϵ_{sf}
n°		(arcsec)	(mm^2)	(mm)	-
0	Mosaïque	27	$10 \ge 10$	8,8	$0,\!46$
2	plans courbes	32	$15\ge 15$	11,9	$0,\!65$
3	Mosaïque	40	$15\ \mathrm{x}15$	$13,\!8$	$47,\! 6$

TAB. 6.8: Comparaison des PSF produites par les différentes plages de cristaux employées sur la lentille GRI.

Le Gamma Ray Imager, comme son nom l'indique entend faire des images des objets observés. Une lentille de Laue en en fait un concentrateur dont les plans diffractants des cristaux approchent une section de cône, il n'y a donc pas production d'une image directe de la source. Cependant sa PSF permet de remonter à la position de la source sans indétermination comme le montre la figure 6.27 où l'on voit l'évolution de la PSF (de la lentille entière) pour une source ponctuelle émettant un spectre plat et continu se déplaçant dans le champ de vue. Son angle azimutal est $\varphi_S = 90^\circ$ et son angle zénithal θ_S varie de 0 à 120 arcsec. Comme on le voit, le pic central se transforme progressivement en un anneau dont le profil azimutal varie d'une fonction créneau à une Gaussienne étalée. Le rayon de l'anneau nous renseigne sur l'angle zénithal de la source alors que la position angulaire du maximum d'intensité sur l'anneau nous donne son angle azimutal. Avec les notations introduites sur la figure 6.3.9.1, on a :

$$\varphi_S = \pi + \alpha$$
$$\theta_S \approx \frac{r}{f}$$

où α est la position angulaire du maximum d'intensité sur l'anneau, repéré par rapport à la projection de l'axe Oy de la lentille sur le plan de détection, f est la focale et r, le rayon de l'anneau formé par la PSF. La largeur de l'anneau au niveau du maximum d'intensité est donné par la taille tangentielle des cristaux.

On remarque que la position du maximum d'intensité est aligné avec la source et le centre de la lentille, comme dans le cas d'une image directe. Les capacités d'imagerie ont été démontrées dans [Knödlseder *et al.*, 2007].

La résolution angulaire (ou pouvoir de séparation) est donnée par la largeur à mihauteur de la PSF qui est de ~ 12 mm en moyenne. Avec la focale de 100 m, cela donne une résolution angulaire de l'ordre de 25 arcsec.

Finalement, il faut noter que le fait que les cristaux sont répartis sur quatre cadrans séparés par les bras du satellite n'a pas été étudié. Dans cette thèse, on a toujours considéré que les cristaux sont répartis uniformément sur la lentille, avec un taux de remplissage de chaque anneau limité à 80%.



FIG. 6.25: PSF des plages de cristaux n° 0, 2, et 3 de la lentille GRI



FIG. 6.26: Profil radial intégré et normalisé des trois PSF des plages de cristaux 0 (rouge), 2 (bleu), et 3 (vert) de la lentille GRI



FIG. 6.27: Evolution de la PSF avec le dépointage dans le cas d'une source ponctuelle.



FIG. 6.28: Principe de l'imagerie par une lentille γ .

6.3.9.2 Sensibilité et champ de vue

La sensibilité du GRI au travers de la lentille de Laue est calculée dans l'hypothèse d'un détecteur en germanium strippé permettant d'appliquer la discrimination du bruit de fond par la cinématique Compton. Le principe de ce calcul (simpliste) considère un détecteur pixellisé qui compterait les événements dans un volume de surface optimisé en fonction de la forme de la PSF et dont l'épaisseur varie linéairement avec l'énergie. Le bruit de fond utilisé provient de INTEGRAL / SPI (ACS on), et est mis à l'échelle par rapport au volume considéré. Un facteur correctif est ensuite appliqué pour tenir compte de la réduction du bruit de fond lié à la reconstruction de la direction d'origine des photons par la cinématique Compton (évalué d'après [Weidenspointner *et al.*, 2005]).

Les détails des valeurs numériques utilisées sont présentés dans les tableau 6.9. La figure 6.29 montre les sensibilités pour une raie fine et pour un continuum ($\Delta E = E/2$), pour 100 ks de temps de pose. Sur le graphique indiquant la sensibilité en raie fine, la croix indique la sensibilité pour une raie élargie à 3%. Sur ce même graphique, on remarque le gain apporté par les cristaux à plans courbes en SiGe entre 220 et 330 keV, qui malgré une surface efficace moindre produisent une meilleure sensibilité.

Paramètre	Valeur
Significativité de détection	3σ
Temps d'observation (s)	10^{5}
Efficacité de détection	$0{,}75 \rightarrow 0{,}25$
Epaisseur (cm)	$1,5 \rightarrow 6$
Résolution en énergie (keV)	2
Elargissement de la raie à 847 keV (%)	3
Facteur de conversion Segmenté - Compton	
raie fine	2,0
continuum	2,0
raie élargie	2,8

TAB. 6.9: Paramètres utilisés pour calculer la sensibilité du GRI, dans le cas d'un plan focal en germanium strippé. Les flèches indiquent qu'une interpolation linéaire a été faite sur la bande d'énergie.

Le graphique 6.30 montre l'évolution de la sensibilité avec l'angle zénital (dépointage) de la source, pour un continuum et pour la raie fine à 511 keV et la raie élargie (3%) à 847 keV). Ces calculs sont effectués pour les mêmes conditions que précédemment, i.e., on considère un détecteur en germanium, un niveau de détection de 3σ et un temps de pose de 100 ks. La seule différence est que le volume de détecteur considéré évolue depuis un cylindre plein vers un cylindre creux (surface optimisée sur le plan focal par le code).

La taille du plan focal limite le champ de vue de l'instrument, 2,6 arcmin dans le cas de l'option CZT, mais on voit aussi que du fait de l'étalement de la PSF en un anneau, et de la modification de la courbe de surface efficace notamment au niveau de la raie à 847 keV (c.f. figure 6.19), la sensibilité chute assez rapidement lorsque la source s'éloigne de l'axe optique. On perd approximativement un facteur 2 lorsque l'angle zénithal de la source atteint 30 arcsec. A la limite du champs de vue, à 2,5 arcmin, la sensibilité chute



FIG. 6.29: Sensibilité du GRI pour 100 ks de temps de pose pour une raie fine (à gauche) et pour un continuum (à droite). La croix sur le panneau de gauche indique la sensibilité pour la raie à 847 keV élargie à 3%. Le détecteur est en germanium strippé, utilisant la discrimination des événements par cinématique Compton.



FIG. 6.30: Evolution de la sensibilité avec le dépointage de la source. Le graphique de droite montre la sensibilité pour une raie fine à 511 keV (rouge) et pour une raie élargie à 3% à 847 keV (bleu). Le graphique de gauche représente la sensibilité pour un continuum depuis une source sur l'axe jusqu'à un angle zénithal de 180 arcsec, par pas de 30 arcsec.

d'un facteur 8 dans la raie fine à 511 keV et d'un facteur 16 dans la raie élargie à 847 keV. Il faut toutefois noter qu'un instrument ayant ces caractéristiques aurait une sensibilité environ 30 fois meilleure que SPI à bord du satellite INTEGRAL pour une source sur l'axe, et donc toujours 2 fois meilleure à la limite du champs de vue.

6.4 La mission MAX

La mission MAX a été proposée au CNES en mars 2004 en réponse à un appel à mission concernant la charge utile d'un vol en formation. Sélectionné parmi quatre missions (dont Simbol-X qui a été sélectionné pour une phase A, puis B actuellement [Ferrando *et al.*, 2006]) pour une phase 0 d'étude pendant un an, plusieurs aspect de la mission ont été étudiés en profondeur, tel que le vol en formation, la thermique de la lentille, la stratégie de lancement, etc... Autant de sujets qui ont été repris pour l'élaboration du concept de mission Gamma ray Imager.

L'article présenté par la suite résume une partie du projet MAX, tel qu'il était en 2005.

Exp Astron (2005) 20:269–278 DOI 10.1007/s10686-006-9058-x

ORIGINAL ARTICLE

MAX, a Laue diffraction lens for nuclear astrophysics

N. Barrière · P. von Ballmoos · H. Halloin · N. Abrosimov · J. M. Alvarez · K. Andersen · P. Bastie · S. Boggs · P. Courtois · T. Courvoisier · M. Harris · M. Hernanz · J. Isern · P. Jean · J. Knödlseder · G. Skinner · B. Smither · P. Ubertini · G. Vedrenne · G. Weidenspointner · C. Wunderer

Received: 1 June 2006 / Accepted: 27 June 2006 © Springer Science + Business Media B.V. 2006

Abstract The next generation of instrumentation for nuclear astrophysics will have to achieve a factor of 10–100 improvement in sensitivity over present technologies. With the focusing gamma-ray telescope MAX we take up this challenge: combining unprecedented sensitivity with high spectral and angular resolution, and the capability of measuring the polarization of the incident photons. The feasibility of such a crystal diffraction gamma-ray lens has recently been demonstrated with the prototype lens CLAIRE. MAX is a proposed

N. Barrière () · P. von Ballmoos · M. Harris · P. Jean · J. Knödlseder · G. Skinner ·

G. Vedrenne · G. Weidenspointner

Centre d'Etude Spatiale des Rayonnements, 9, avenue du Colonel Roche, BP 4143 - 31028 Toulouse Cedex 4, France

K. Andersen · P. Bastie · P. Courtois Institut Laue Langevin, 6, rue Jules Horowitz BP 156 – 38042 Grenoble Cedex 9, France

N. Abrosimov Institut für Kristallzüchtung, Max-Born-Strasse 2, D-12489 Berlin, Germany

H. Halloin APC, collège de France, 11, place Marcelin Berthelot, 75231 Paris, France

S. Boggs · C. Wunderer Space Sciences Laboratory #7450, University of California, Berkeley, CA 94720-7450, USA

T. Courvoisier ISDC, Chemin d'Ecogia 16, 1290 Versoix, Switzerland

J. M. Alvarez · M. Hernanz · J. Isern IEEC-CSIC, Campus UAB, 08193 Bellaterra (Barcelona), Spain

B. Smither Argonne National Laboratory, 9700 S. Cass Avenue, Argonne, IL 60439, USA

P. Ubertini Istituto di Astrofisica Spaziale e Fisica Cosmica, Via del Fosso del Cavaliere 100, 00133 Roma, Italy

² ≦ Springer

e-mail: barriere@cesr.fr

Exp Astron (2005) 20:269-278

mission which will make use of satellite formation flight to achieve 86 m focal length, with the Laue lens being carried by one satellite and the detector by the other. In the current design, the Laue diffraction lens of MAX will consist of 13740 copper and germanium (Ge_{1-x}Si_x, $x \sim 0.02$) crystal tiles arranged on 36 concentric rings. It simultaneously focuses in two energy bands, each centred on one of the main scientific objectives of the mission: the 800–900 keV band is dedicated to the study of nuclear gamma-ray lines from type Ia supernovae (e.g. ⁵⁶Co decay line at 847 keV) while the 450–530 keV band focuses on electron-positron annihilation (511 keV emission) from the Galactic centre region with the aim of resolving potential point sources. MAX promises a breakthrough in the study of point sources at gamma-ray energies by combining high narrow-line sensitivity (better than 10^{-6} cm⁻² s⁻¹) and high energy resolution (E/dE ~ 500). The mission has successfully undergone a pre-phase A study with the French Space Agency CNES, and continues to evolve: new diffracting materials such as bent or composite crystals seem very promising.

Keywords Instrumentation: Gamma-ray Laue lens · Gamma-ray astrophysics · Mosaic crystals

PACS: 95.55.Ka, 29.30.Kv, 61.10.-i

1. Introduction

Observing gamma-ray lines is first and foremost a matter of extracting a weak signal swamped in an intense and complex instrumental background. This is partly due to the fact that all existing instruments are based on concepts where the collecting area is equal to the sensitive area. Since the instrumental background in a detector operating in space is roughly proportional to its volume, decoupling the instrument effective area from the detector volume would lead to a dramatic improvement of sensitivity. That is why focusing gamma rays appears today as the only way to study point sources with a sufficient sensitivity to further our understanding of explosive nucleosynthesis and compact objects.

MAX is a mission concept for a space-borne gamma-ray telescope using a Laue lens to focus nuclear gamma-ray lines from a large area onto a small detector. The lensing effect is based on Bragg diffraction in the volume of crystalline materials. CLAIRE, a prototype of such a Laue lens has already been realized in a CESR – CNES (the French space Agency) collaboration, and has demonstrated the feasibility of this concept [11, 23].

In this paper we first provide an overview of the MAX mission: its principal scientific objectives, the characteristics of the current instrument design, sensitivity estimates for various crystal types and detector options. We then describe ongoing R&D on new diffracting materials, such as composite crystals or bent crystals.

2. Scientific motivations

Gamma-ray astronomy presents an extraordinary scientific potential for the study of the most powerful sources and the most violent events in the Universe. While at lower wavebands the observed emission is generally dominated by thermal processes, the gamma-ray sky provides us with a view of the non-thermal Universe, where particles are accelerated by still poorly understood mechanisms to extremely relativistic energies and nuclear reactions and decays are creating the basic elements that constitute our world (see the first section of this volume).

270

Exp Astron (2005) 20:269-278

MAX aims to observe radioisotopes produced in Type Ia supernovae (SN) (see e.g. [19]) and around compact objects through their emitted nuclear lines. Type Ia supernovae (SN), with classical novae [12] and core collapse SN (Type Ib, Ic, II, . . .), are the main contributors to the production of heavy elements, playing a major role in the life cycle of matter in the Universe. The exceptional luminosity of SN Ia has made them a valuable tool for the measurement of extragalactic distances and for determining the metric of the Universe. The optical light produced in Type Ia SN is mostly powered by the decay chain ${}^{56}\text{Ni} \rightarrow {}^{56}\text{Co} \rightarrow {}^{56}\text{Fe}$, which is directly observable mainly in two gamma-ray lines at 812 keV and 847 keV.

Despite their great interest in many areas of astronomy, fundamental questions remain about all types of SN. Establishing the actual ⁵⁶Ni and ⁵⁶Co decay line intensities and shapes is a primary goal that will lead to a breakthrough for our understanding of the detailed physics at work in these explosions. A sensitivity of $\sim 10^{-6}$ cm⁻²s⁻¹ to broadened gamma-ray lines would allow at least one Type Ia SN per year closer than 20 Mpc to be observed with a detection significance of 25 σ , which would allow discrimination between various models [16]. Up to 5 y⁻¹ could be detectable with a significance of 3 σ , in a radius of 50 Mpc.

The search for potential sources of the positrons whose presence is implied by the 511 keV radiation observed with SPI/INTEGRAL constitutes the other main scientific theme of the MAX mission. Compact objects (microquasars, neutron stars and pulsars, X-ray binaries, ...), active galactic nuclei, solar flares and the high energy afterglow from gamma-ray bursts may release significant numbers of positrons leading to 511 keV annihilation line emission. The shift and the shape of this line carry a lot of information about the region and conditions where positrons have annihilated [14]. Fine spectroscopy of the annihilation line combined with a good spatial resolution could elucidate the nature of these objects.

3. The MAX mission

MAX was proposed in response to an announcement of opportunity issued by the CNES concerning a formation flight demonstrator mission. It consists of a lens spacecraft and a detector spacecraft flying in formation to form a gamma-ray telescope of 86 m focal length. The pre-phase A study led by the CNES/PASO group that ended in November 2005 confirmed the feasibility of the mission, and indicated a mass margin of 400 kg. As a consequence we have updated the MAX design (which becomes MAX 3.0) with an increase of 72% in the focusing area (crystal tiles), resulting in dramatic increases in the effective areas of both bandpasses.

MAX is still under development and so is continuously evolving. The version 3.0 presented here is based on crystals representing the current state of the art and which are relatively conservative compared to new diffracting materials that are highlighted by the current R&D program (see below).

3.1. Lens features

In the current MAX design, the lens is made of 13740 crystal tiles of $1.5 \text{ cm} \times 1.5 \text{ cm}$ including 90% copper crystals [8] and 10% germanium crystals [1]. The thicknesses, T_0 , of crystal tiles are optimized for each ring according to the following formula which comes from the maximisation of a mosaic crystal peak diffraction efficiency for a given mosaicity:

$$T_0 = rac{1}{2\sigma} \ln \left(1 + rac{2\sigma \cos heta_B}{\mu}
ight).$$

[™] Springer

271
Table 1 MAX crystals masses Focal length f86 m and geometrical areas. LE: low 30 arcsec. Crystal mosaicity energy band; HE: high energy Geometrical area $30915 \, cm^2$ Mass of crystals 235 kg Number of HE rings 20 Mass of HE crystals 172 kg Geometrical area of HE rings 15966 cm² Number of LE rings 16 Mass of LE crystals 62 kg Geometrical area of LE rings $14949\,\mathrm{cm}^2$

 σ is the diffraction coefficient for the crystalline material, μ is the absorption coefficient (without coherent scattering which is precisely the origin of the Bragg diffraction), and θ_{B} is the angle of incidence of rays on the diffracting planes (called Bragg angle when diffraction occurs). The value of σ is calculated according to the dynamical theory of diffraction (see Halloin, Bastie [5, 6] for complete treatment). The crystal tiles are arranged on 36 concentric rings with radii ranging from 56.25 to 76.35 cm and from 93.05 to 129.05 cm.

The resulting lens focuses simultaneously in two broad energy bands corresponding to the previously described scientific objectives (Figure 1): the lower energy band is centred on 500 keV. Its width permits the observation of red-shifted $e^- - e^+$ annihilation lines from compact objects (e.g. the supermassive black hole in the centre of our Galaxy), as well as the study of the 478 keV decay line from ⁷Be. The bandpasses of the 14 Cu rings and 2 Ge rings combine to cover an energy band from 450 to 530 keV, with a total effective area of 1200 cm² at 511 keV. The second energy bandpass is obtained with 18 Cu rings and 2 Ge rings whose responses superimpose to cover an energy band from 800 to 900 keV, with a total effective area of 660 cm² at 847 keV. In addition, the second order diffraction of the crystals covering the lower energy bandpass extends this band up to 1050 keV. Details of masses and geometrical areas of both bandpasses are given in Table 1.

3.2. Detector features

The baseline detector for MAX is a Compton camera consisting of a stack of planar germanium strip detectors (GeD). The stack is made of 5 GeD modules similar to the ones used in the balloon borne Nuclear Compton Telescope, which was successfully tested in 2005 (NCT, [4]). Each GeD is approximately $8 \text{ cm} \times 8 \text{ cm}$ and 1.5 cm thick, and the strips are 2 mm pitch, which ensure a 1 mm^3 3D-positionning. The design used to estimate sensitivities [24, 25] assumes a gap of 0.7 cm between two GeD. To reduce the background count rate, the detector is separated from the spacecraft by being placed on a 1 m "tower". In addition, the Compton camera is encapsulated in a plastic veto shield, and a 5 cm thick active BGO crystal screens it from the emissions produced in the structure of the spacecraft. It has been established during the MAX pre-phase A study that cooling of the Compton camera can be achieved with a 1 m diameter radiator. Alternative solutions to the above baseline are being considered, including a high sensitivity Si/CdTe narrow field of view Compton camera [17, 22], or Compton CdTe pixel detector [7].

The advantages of using a detector providing localization of the interactions are multiple: besides following any excursions of the focal spot across the detector plane, such a system allows the simultaneous measurement of signal and background. Most importantly, in a system with three-dimensional event localization, a significant background reduction can be achieved by reconstructing the arrival direction of the photons using Compton Springer

194

272

band



Fig. 1 Effective area of the lens for a perfect pointing on a point source. Each Gaussian curve is the contribution of a single ring. The second order diffraction of low energy (LE) rings extends the high energy (HE) bandpass up to 1050 keV. Various sets of Bragg planes in copper and germanium at different radii contribute to the two main energy bands: Cu(111), Cu(200) and Ge(111) are used for the LE band, whereas Cu(111), Cu(200), Cu(222) and Ge(311) diffract in the HE band. In this sense, this lens is a hybrid between a broad-band lens and a narrow-band lens

kinematics. This allows the rejection of photons not coming from the lens direction. In addition, a Compton camera is inherently sensitive to gamma-ray polarization. Lastly a fine pixellated focal plane allows the limited imaging capabilities of the lens to be used. One drawback of a Compton camera is at present their low detection efficiency (ranging between 6–7% for a Ge- strip Compton stack). First steps in the optimisation for the particular case of a Laue lens have been performed [25] and this works will continue in the future.

3.3. Sensitivity estimates

The modelled narrow line sensitivity of MAX in both energy bandpasses is shown in Figure 2. Lens efficiency estimates are derived from the diffraction efficiency given by the Darwin model, which are in agreement with the diffraction efficiencies measured for the lens prototype CLAIRE [11] and recent measurements made at the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF, Grenoble, France) [5, 6]. The upper curve (a) in Figure 2 shows the sensitivity with current technology, based on the lens MAX 3.0 and the baseline Compton camera described in Section 3.2. The lower curve in Figure 2b shows a sensitivity requiring advanced technology: a lens using bent crystals (see below) focusing onto an optimized Compton camera (the "LARGE" geometry in [25]). At this early stage, these estimates are rough but conservative. Numerous optimizations could still be done, as for example, improving the treatment of the Compton-rejected photons (93% of the signal), or the optimization of the detector geometry or the lens efficiency.

3.4. Lens PSF - imaging capabilities

Although a crystal lens telescope is not a direct imaging system, the spatial response does depend on the source position in the field of view. For an on-axis point source, the response is a

195



Fig. 2 The modelled narrow line sensitivity of MAX in both energy bands. Curve (a) is the sensitivity with current technology, using the baseline Compton camera (see above) and the current lens MAX 3.0. Curve (b) is the sensitivity reachable with a lens using bent crystals and an optimized Compton camera. The circle and the triangle are the sensitivities for a broad line (3%) at 847 keV



Fig. 3 MAX baseline detection plane $(8 \text{ cm} \times 8 \text{ cm}, 1 \text{ mm}^2 \text{ pixels})$ response for a point source. Flux is coded both by a grey square root scale and by square root contours. Left: image of an on-axis point source. Right: image of an off-axis point source when the lens is pointing 60 arcsec away from the source. The Monte-Carlo code used for these simulations was developed by Halloin [11]

Springer

Gaussian-like spot centred on the optical axis of the lens (Figure 3, right). For an off-axis point source, the focal spot becomes a donut shape (centred on the lens optical axis) presenting an azimuthal intensity modulation [18]. The average radius r_a of the focal ring and the angular position of the maximum intensity φ_m give the zenithal (off-axis) (θ_s) and the azimuthal (φ_s) angles of the source through the very simple relations:

$$egin{aligned} & heta_{\mathcal{S}} = a anig({r_a} /_f ig), \ &arphi_{\mathcal{S}} = arphi_m + \pi \end{aligned}$$

where f is the focal distance of the lens for a source at infinity.

The minimum thickness of the focal ring (where the intensity is maximal) approaches the radial size of the crystals with increasing zenith angle of the source (individual square crystals are arranged on rings such that one side is tangential). Thus, mosaicity and crystal sizes dictate the angular resolution of the instrument.

The field of view of MAX is limited by two parameters: firstly, the size of the detection plane (8 cm \times 8 cm) limits the radius of the recorded focal ring to 4 cm. Taking into account crystals radial size, the maximum radius of observable focal ring is 3.25 cm. The field of view of MAX is therefore \pm 78 arcsec. The second limiting parameter is the decrease of the lens effective area when the zenithal angle of the source increases (Figure 4). For an angle of 60 arcsec, the effective area goes down by 45% and 40% at 511 keV and 847 keV respectively.



Fig. 4 Effective area as a function of position in the field of view at 511 keV and 847 keV

Springer

4. The R&D towards a spaceborne Laue lens

4.1. Lens structure

A first design of the structure of the lens has been made in order to study its thermo-elastic deformations. The design is based on the ALCATEL structural concept [10, 13]: a main circular carrier structure supports 32 independent modules onto which the individual crystals are attached. The central carrier structure homogenizes the temperature and transmits mechanical forces to the satellite structure through four titanium links. Due to the penetrating nature of gamma rays it is possible to put the lens in a multilayers insulator (MLI) cocoon to ensure sufficient thermal stability. Even with such a passive system the temperature would already be within ± 3 K of the nominal temperature, whatever the orientation of the sun.

For a 86 m focal distance, the diffracting planes of a crystal have to be oriented within ~ 10 arcsec with respect to the lens line of sight to keep the position of the crystal footprint within ± 1 cm of its nominal position. This value dictates the specification for the lens out of plane deformation: modules have to keep their nominal orientation within ± 10 arcsec. It has been shown in the MAX pre-phase A study that a ± 2 K active thermal control around the nominal temperature (ambient) is sufficient to satisfy this deformation specification, a requirement that seems easily attainable [13].

4.2. Diffracting materials

4.2.1. Lessons from the CLAIRE lens

The CLAIRE lens was made of 556 crystals mounted on eight rings (see [11, 23] for an in-depth description of the CLAIRE project). These crystals, that are actually a solid solution of silicon in germanium (Ge_{1-x}Si_x, x < 0.1), were grown using a modified Czochralski technique at the Institute of Kristalzüchtung (IKZ, Berlin, Germany) by [1]. CLAIRE was a narrow bandpass Laue lens, it focused radiation centered on 170 keV (for rays coming from infinity) using a different family of crystalline planes for each ring. The overall diffraction efficiency of the lens was found to be about 10%, though some of the best crystals had a peak reflectivity of 25%.

There are two reasons to explain the relatively low efficiency of the entire lens compared to that of the best crystals. Firstly, the theoretical diffraction efficiency decreases with increasing Miller index. For example, the eighth ring used the [440] reflection that has a theoretical integrated reflectivity 7.5 times lower than that of the (111) planes. Secondly, even on a given ring where all crystals are supposed to be identical, differences do exist. These differences that translate into differences in absolute reflectivity and energy bandpass, are due to mosaicity and crystallites length variation. Basically, the larger the crystallites, the worse is the reflectivity. A larger mosaicity offers a larger energy bandpass, but it, too, decreases the reflectivity.

The CLAIRE project has emphasized the need to use preferentially sets of crystalline planes of lower Miller index, and to ensure that the quality of the crystals grown can be maintained consistently during the production of a large number of boules.

4.2.2. Existing crystals

MAX lens would be mainly made with copper crystals, with 10% germanium-silicon crystals to provide enhanced collecting area in the energy bands of interest. Copper crystals combine high theoretical diffraction efficiency (higher than germanium) with inherent mosaic \bigotimes Springer

structure. The challenge was to grow crystals with a mosaicity of about 30 arcsec, a value which is very small for this material. In 2005, this goal was achieved for the very first time by [8] at ILL. Such a low mosaicity copper crystal have shown a peak reflectivity reaching 30%.

Concerning germanium crystals, since the time when CLAIRE's crystals were grown the quality of crystals obtained by the modified Czochralski technique has been improved. Using only the most efficient reflections (low Miller index), we can count on peak diffraction efficiencies exceeding 25%.

Nevertheless, the only way to completely avoid variation of the crystalline parameters, such as those noted in the CLAIRE lens, would be to characterize every crystal and to select only the best.

4.2.3. New generation of crystals

Alternative crystalline materials are also being considered. One possibility is germanium 'composite crystals', made of perfect single-crystal germanium wafers that are stacked with a slight mis-oriention from one to the next (like the crystallites in a mosaic crystal). This kind of crystal presents potentially advantages with respect to mosaic crystals: single crystal wafers are easily reproducible and it is possible to optimize the wafer thickness according to the energy that the stack will have to diffract. Since wafers are perfect single crystals, the formulae given in subsection 3.1 do not apply any more, the optimal thickness of a wafer equals half of the Pendellösung period (the period of the oscillations of the diffracted intensity as a function of the thickness of the crystal; [3]). Of course the key point is to manage to build the stack properly. Indeed, a recent measurement run at the ESRF [5, 6] on a prototype composite crystal showed that the angular separation between wafers was greater than their angular bandpass¹, leading to an undesirable comb-like response. This still-evolving technique, especially the surface treatment of the wafers, has yet to be optimised.

Bent crystals are another alternative that seem very promising. Smither [21] have already measured Si crystals with efficiency close to 100% (disregarding absorption²) in an angular bandpass of 30 arcsec. Bent diffracting planes can be obtained in 3 ways: by applying a thermal gradient to a crystal, by elastically bending a crystal, or by growing a composition-gradient crystal (Ge_{1-x}Si_x) [2]. In the latter case, a spherical curvature of atomic planes perpendicular to the gradient direction appears, due to the fact that Ge atoms are larger than Si atoms [21].

Bent crystals present two main advantages with respect to mosaic crystals: their peak diffraction efficiencies are not limited to 50% as is the case for mosaic crystals (see for instance Halloin, Bastie [5, 6]), and their rocking curves (curves representing the range of angles through which an incident beam can be diffracted) can have a square shape. As a comparison, mosaic crystals exhibit a Gaussian-like rocking curve, which is good for the lens field of view, but degrades the focusing on the detector (since each crystal diffracts a diverging beam whose spatial distribution is Gaussian). Preliminary estimates of the sensitivity achievable with a lens made of bent crystals show a gain of a factor 2 with respect to the current version of MAX.

¹ Even a perfect single crystal has an angular bandpass that is called the Darwin width. In addition, the cutting process induces deformations that increase the angular bandpass.

 $^{^{2}}$ If we do not consider the absorption, when a beam goes through a crystal, it is shared in two complementary parts: the diffracted beam and the transmitted beam. In the case of a mosaic crystal, these two parts tend to be equal if the crystal is thick enough: the maximum diffraction efficiency without absorption is 50%.

5. Summary

With its Laue lens consisting of Cu and Ge crystals rings MAX promises a breakthrough for the study of point sources at gamma-ray energies by combining narrow line sensitivities better than 10^{-6} cm⁻² s⁻¹ and high energy resolution (E/dE ~ 500). MAX features a Laue lens consisting of rings of Cu and Ge crystals, covering simultaneously two broad energy ranges: 800–900 keV and 450–540 keV. A small detector, maintained at a distance of 86 m by a second spacecraft flying in formation, collects the focused radiation. A pre-phase A study of the French Space Agency CNES has established the feasibility of the mission with present technologies [10].

The performance of a future Laue lens depends mainly on the diffraction properties of its individual crystals. Despite the fact that mosaic crystals produce a focal spot not ideally concentrated on the detection plane, the copper crystals grown at ILL show peak reflectivities up to 30%. The growth of copper crystals can be fairly well controlled at present, with mosaicities ranging from a few minutes down to 30 arcsec. It is hence already possible to build an efficient gamma-ray Laue lens using a combination of copper and germanium mosaic crystals.

We have shown that Laue lenses can benefit either from crystals having a composition gradient (causing curvature of the crystalline planes) or from "composite crystals" (having an "artificial mosaic structure" produced by assembling wafers with slightly different alignments). In either case, the efficiency-limitation, which prevents Laue mosaic crystals of having a reflectivity higher than 50%, can be exceeded. We also show the importance of improving the crystals point spread function to obtain a compact focal spot and thus a enhanced signal/noise ratio.

Acknowledgements The authors acknowledge continuing support from the French Space Agency CNES.

References

- 1. Abrosimov, N. et al.: J. Crystal Growth 275, e495-e500 (2005)
- 2. Abrosimov, N.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9036-3 (2006)
- 3. Authier, A.: Dynamical theory of X-ray diffraction. Oxford Science Publications (2001)
- 4. Boggs, S.E. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9051-4 (2006)
- 5. Bastie, P. et al.: ESRF User report, http://ftp.esrf.fir/pub/UserReports/32513_A.pdf (2006)
- 6. Halloin, H., Bastie, P. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9064-z (2006)
- 7. Caroli, E. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9048-z (2006)
- 8. Courtois, P. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-005-9018-x (2006)
- 9. Cosmic Vision, ESA, BR-247
- 10. Duchon, P. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9070-1 (2006)
- Halloin, H.: Phd Thesis, University Toulouse III, (2003) http://www.cest.fr/~pvb/MAX/publis/Diss_Halloin_03.pdf
- 12. Hernanz, M. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9036-3 (2006)
- 13. Hinglais, E. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-005-9020-3 (2006)
- 14. Jean, P. et al.: A&A 445, 579-589 (2006)
- 15. Knödlseder, J. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9031-8 (2006)
- 16. Leising, M.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9052-3 (2006)
- 17. Limousin, O. et al.: NIM A 504, 24-37 (2003)
- 18. Lund, N.: Exp Astron 2, 259 (1992)
- 19. Prantzos, N.: In Proc 5th INTEGRAL Science Workshop (ESA SP-552), 15 (2005)
- 20. Smither, R. et al.: RSI 76, 123107 (2005)
- 21. Smither, R. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-005-9019-9 (2006)
- 22. Takahashi, T.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9059-9 (2006)
- 23. von Ballmoos, P. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9071-0 (2006)
- 24. Weidenspointner, G. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9035-4 (2006)
- 25. Wunderer, C. et al.: Exp. Astron. 20, DOI 10.1007/s10686-006-9034-5 (2006)

当Springer

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons vu principalement au travers de la mission Gamma-Ray Imager l'impact des différents paramètres de la lentille sur le facteur de mérite et donc sur la sensibilité. Les outils numériques qui ont été développés au cours de cette thèse ont été d'un usage permanent pour pouvoir mener ces études. La bibliothèque SimuLentille, par sa rapidité de calcul se révèle être un outil didactique extrêmement efficace en permettant de jouer sur tous les paramètres et d'obtenir en un clin d'oeil la surface efficace, la PSF accompagnée de la surface à prendre en compte sur le plan focal pour maximiser la significativité de détection, la visualisation de la répartition des plages de cristaux et la sensibilité, et ce pour une source ponctuelle sur l'axe ou hors de l'axe.

Malgré cela, la conception d'une lentille de Laue reste un exercice subtil, avec de nombreux compromis à faire, notamment sur le choix des objectifs scientifiques qui seront couverts; Du fait que la lentille γ utilise la diffraction de Bragg, seule une relativement faible gamme d'énergie peut être focalisée, les plus hautes énergies étant pénalisées par le fait qu'elles sont diffractées par les anneaux internes qui offrent moins de surface de collection.

On retiendra que plus la focale est longue et meilleure est la sensibilité, au prix d'une masse augmentant quadratiquement avec la focale, et que la mosaïcité la plus faible semble théoriquement la meilleure. C'est à ce niveau qu'interviennent les choix technologiques, pour lesquels tous les aspects ne sont pas encore maîtrisés. On sait qu'une longue focale, et des cristaux de petite section et de faible mosaïcité vont diminuer les tolérances sur l'orientation et la dispersion en mosaïcité des cristaux, et la tenue mécanique de la lentille. Ainsi, aller dans ce sens augmente les performances théoriques mais diminue les chances de les atteindre, ce qui conduit à faire des compromis pour rester réaliste et donc crédible. Des études sont actuellement en cours pour essaver de quantifier l'impact de ces facteurs.

Prédire la sensibilité d'un instrument dans le domaine γ est un challenge; l'évaluation du niveau de bruit de fond est toujours difficile, même si l'arrivée de simulation Monte Carlo *ab initio* permettent maintenant de modéliser le détecteur entier ainsi que la matière passive qui l'entoure comme les boîtiers électroniques et le satellite lui même. Coupler les simulations de lentille γ à de tels outils serait un pas en avant vers la prédiction des performances. Mais cela impliquera d'inventer de nouvelle stratégie de traitement du signal dans le plan focal, compte tenu de l'évolution de la PSF et de la surface efficace en fonction de l'angle zénithal de la source.

Conclusions et perspectives

Au cours de cette thèse, deux aspects du développement d'une lentille de Laue ont été étudiés : le premier concerne l'étude théorique, la caractérisation expérimentale et le développement de différents types de cristaux. Le second a consisté en la conception, la simulation des performances et l'optimisation du design de lentilles. Comme nous l'avons vu, ces deux sujets sont étroitement liés car les spécifications sur les cristaux découlent des optimisations du design des lentilles. Le chemin parcouru depuis la fin du projet CLAIRE est important, mais il reste encore du travail à accomplir. Voici les conclusions sur les divers points traités dans ce rapport et les perspectives qu'elles ouvrent.

Caractérisation expérimentale des cristaux mosaïques. Les trois campagnes de mesure à l'ESRF et celle à l'ILL ont permis de caractériser de façon quantitative les échantillons dont nous avons disposé. Concernant les cristaux mosaïques, nous nous sommes en particulier rendu compte qu'il est primordial de faire les mesures avec l'énergie à laquelle ils seront utilisés dans leur application, et selon la réflexion qui sera utilisée. Nous avons en effet constaté les limites du modèles de Darwin; aucune extrapolation n'est réellement raisonnable, du fait de l'anisotropie de la mosaïcité d'une part et de la dispersion de la taille des cristallites d'autre part. Du point de vue du modèle de Darwin, toutes les cristallites ont la même épaisseur, contrairement à ce que l'on peut déduire de nos mesures (ce qui semble d'ailleurs intuitif). En ajustant le modèle de Darwin sur des données obtenues à des énergies différentes, la mosaïcité et la taille des cristallites que l'on retire des ajustements seront différents pour les différentes énergies. Lorsque l'énergie augmente, la taille des cristallites augmente et la mosaïcité diminue. Cela s'explique par le fait que les 'petites' cristallites perdent de l'influence à haute énergie, et que la contribution des grandes cristallites est éteinte à basse énergie du fait de l'extinction primaire, ce qui n'est pas décrit par le modèle de Darwin.

Ces constatations ont été effectuées sur la base de mesures sur des cristaux de cuivre uniquement. Des mesures sur d'autres cristaux mosaïques (germanium, arsenure de gallium, or, ...) doivent être faites pour confirmer et affiner ces résultats. Si cela se confirme, on pourra en déduire que soit les paramètres taille des cristallites et mosaïcité ne sont pas adaptés pour décrire complètement un cristal, soit qu'il faut ajouter un paramètre (largeur à mi-hauteur de la distribution en longueur des cristallites?). Un modèle qui va dans ce sens a été proposé (voir conclusion du chapitre 5) mais n'a pas pu être évalué au cours de cette thèse.

Cela n'empêche pas d'utiliser le modèle de Darwin pour simuler la diffraction des cristaux au sein d'une lentille puisqu'il s'ajuste sur les données, le point important étant

d'y entrer les bons paramètres (et particulièrement une taille de cristallites réaliste). Il reste néanmoins primordial de trouver un modèle analytique qui reproduit les effets observés dans le but de pouvoir prédire les performances et optimiser l'épaisseur des cristaux.

Etat de l'art des différents cristaux étudiés. Au delà de ces 'pièges', les cristaux de cuivre mosaïques mesurés ont avant tout montré que les spécifications pour une lentille γ d'un projet comme le GRI ou MAX sont réalisables aujourd'hui. Des rocking curves de très faible mosaïcité, jusqu'à 20 arcsec, atteignant l'efficacité théorique maximale (cas du cristal *idéalement imparfait*) ont été observées. Par contre les échantillons mesurés ont aussi révélé une dispersion en mosaïcité importante, aussi bien dans un échantillon donné qu'entre échantillons, même lorsqu'ils provenaient de la même boule. L'activité de développement de ces cristaux n'en est qu'à ses débuts, ce qui laisse espérer que l'homogénéité va s'améliorer dans un avenir proche. Cependant, ces résultats sont difficiles à relativiser car les conséquences d'une dispersion en mosaïcité autour de la valeur idéale n'ont pas encore été quantifiées. Cette étude pourra être faite en utilisant le facteur de mérite qui a été introduit au début du chapitre 4, et conduira à la détermination de la dispersion acceptable, critère indispensable pour juger de la qualité des cristaux produits.

On a montré dans le dernier chapitre que les cristaux de germanium peuvent être très intéressants pour la réalisation de la bande basse énergie d'une lentille de type GRI. Un seul échantillon a pu être étudié avec précision, qui a montré des résultats en accord avec les exigences du GRI. Des données sur la qualité des cristaux de la lentille CLAIRE [Halloin, 2003] montrent qu'eux aussi présentaient de fortes disparités en mosaïcité et efficacité. De nouvelles mesures seraient à faire sur un échantillon statistique de cristaux.

Les empilements de wafers tels qu'ils ont été abordés dans cette étude ne permettent pas d'apporter un gain pour une lentille γ . Les premières mesures ont révélé que la qualité des empilements semble très difficile à contrôler, mais même dans le cas idéal, il a été démontré théoriquement qu'ils ne peuvent apporter un progrès par rapport aux cristaux mosaïques. Pourtant, l'idée de partir de cristaux parfaits, dont la croissance est bien maîtrisée, pour en faire des cristaux présentant une dispersion angulaire organisée est toujours aussi attractive. Notamment la voie de l'empilement de wafers avec déformation élastique pourrait être intéressante; comme nous avons pu le constater, le collage des wafers engendre des contraintes qui élargissent fortement la mosaïcité de l'empilement. Il doit être possible de contrôler cet élargissement et d'obtenir une bonne efficacité en prenant une épaisseur totale suffisante... une nouvelle piste à explorer!

Le gain que peuvent apporter les cristaux à plans courbes a été clairement établi au chapitre 4. Porté par les résultats extraordinaires des premières mesures sur des échantillons de silicium-germanium à gradient variable, un processus de développement de cristaux à gradient constant (réellement utilisables sur une lentille de Laue) a été lancé avec l'IKZ, le laboratoire qui les produit. La deuxième génération montre des performances encourageantes, et une troisième génération est actuellement en cours de production, optimisée pour 300 keV. Cependant, dans le cadre d'un projet spatial, ou la masse plus que l'encombrement est un facteur déterminant, cet alliage atteint ses limites. Plus performant que des cristaux mosaïques, notamment le germanium, lorsqu'ils occupent la même plage de rayons, ces cristaux sont aussi beaucoup plus lourds, ce qui conduit à faire un choix : la masse investie dans cette bande d'énergie pour gagner en sensibilité pourrait être redistribuée ailleurs.

Forts de leur potentiel, ces cristaux vont continuer à être développés pour pouvoir évaluer leur performances réelles. Des mesures ont montré que les prévisions théoriques peuvent être atteintes à basse énergie, mais au delà un écart entre le modèle (théorie PPK) et les données a clairement été mis en évidence. Cela n'est pas trop gênant dans le cas de l'alliage silicium-germanium car il n'est théoriquement intéressant que jusqu'à environ 340 keV. Mais ce problème devra être résolu car l'intérêt des cristaux à plans courbes dépasse le silicium-germanium : des cristaux de germanium-étain à gradient de concentration sont actuellement à l'étude, et devraient être mesurés au cours du printemps 2008 à l'ESRF et à l'ILL. Ces cristaux présentent un potentiel jusqu'à plus de 600 keV selon la théorie PPK, d'où l'intérêt de l'affiner...

L'ensemble de ces mesures a permis de dresser l'état de l'art des cristaux actuellement disponibles. On voit que les objectifs sont réalisables, mais quel que soit le matériau envisagé, des travaux restent à faire. Les financements actuels de l'ESA et du CNES permettent d'avancer en donnant les moyens aux cristallographes (l'ILL et l'IKZ) de faire croître de nouveaux cristaux pour cette étude. Jusqu'à présent l'accès aux grands instruments (ILL, ESRF) était soumis à l'accéptation des propositions d'expériences. Grâce à ces financements, une ligne dédiée à la caractérisation de cristaux pour une lentille de Laue est en train d'être mise en place à l'ILL. Avec cette ligne, nommée DIGRA, le travail initié lors de cette thèse va se poursuivre et s'intensifier.

De nombreuses options restent encore à explorer concernant les matériaux diffractants. Les cristaux mosaïques présentent l'avantage de croître directement avec leur structure mosaïque et sont relativement courants, comme par exemple le GaAs (qui est produit à l'IKZ avec une mosaïcité proche de 30 arcsec, ce qui reste à vérifier expérimentalement). Mais ils sont aussi difficiles à contrôler finement, et leur réflectivité reste dans tous les cas inférieure à 50 %. Les cristaux à plans courbes peuvent potentiellement atteindre une réflectivité bien supérieure, et permettent d'obtenir une PSF plus compacte, mais les options sont encore peu nombreuses. Dans ce sens la voie de la courbure mécanique permanente d'un cristal parfait est à explorer.

Design d'une lentille de laue. La bibliothèque de routines SimuLentille écrite au cours de cette thèse est un outil puissant pour l'étude des performances de lentilles de Laue. Du fait que ce code est basé sur des routines analytiques, il calcule suffisamment rapidement la surface efficace et la PSF de la lentille pour pouvoir étudier l'influence de tous les paramètres. Ainsi un facteur de mérite, directement proportionnel au niveau de détection a pu être établi comme moyen de comparaison, ce qui aurait demandé une durée rédhibitoire auparavant. Ce facteur de mérite a été utilisé pour déterminer les paramètres optimaux de la lentille GRI : Si l'on est simplement limité par l'encombrement des cristaux, il ressort que la plus grande focale, utilisant des mosaicités inférieures ou égale à 30 arcsec produit la meilleure sensibilité. Par contre lorsqu'on fait intervenir la masse de cristaux mise en jeu, alors c'est la plus faible mosaïcité qui l'emporte.

La lentille de Laue du projet de télescope spatial GRI a bénéficié des résultats de cette étude. Avec 250 kg de cristaux, et une focale de 100 m, une sensibilité à un continuum de

 10^{-7} ph.cm².s⁻¹.keV⁻¹ serait possible ainsi qu'une sensibilité de $3x10^{-6}$ ph.cm².s⁻¹.keV⁻¹ dans la raie élargie de décroissance du ⁵⁶Co à 847 keV. Le conditionnel s'impose toutefois car seul le cas idéal a été simulé jusqu'à présent : aucune dispersion en mosaïcité n'a été simulée, les cristaux sont considérés parfaitement orientés et les cristallites des cristaux mosaïques mesurent 50 μ m. Il s'agit donc de performances maximales théoriques.

Assemblage des cristaux. Financée par le CNES et conduite en collaboration par Thales Alenia Space et le CESR, une activité sur le montage des cristaux est en cours depuis début 2007. Elle a pour but de tester une méthode d'orientation et de fixation des cristaux et doit déboucher sur la réalisation d'un prototype de secteur de lentille (un 'module') comportant une dizaine de cristaux. La solution retenue pour cette étude, une détermination fine de l'orientation du cristal par rapport à une de ses surface, puis la transmission de l'information pour la fixation, ne semble pas permettre d'orienter les cristaux à mieux que 10 arcsec par rapport à l'axe optique du télecsope. La conséquence directe est l'élargissement de la PSF et donc la diminution de la sensibilité. L'évaluation quantitative de ces conséquences est actuellement en cours d'étude. Quelle que soit la méthode d'assemblage sélectionnée, les limites technologiques de la réalisation de la lentille devront être prise en compte dans l'optimisation du design; par exemple, si l'on ne peut garantir l'orientation des cristaux qu'à plus ou moins 10 arcsec, alors il est évident que le facteur de mérite privilégiera des cristaux de plus grande mosaïcité que ce qui semble optimal actuellement.

Après MAX et GRI, la prochaine proposition de mission bénéficiera des avancées de la modélisation, de la connaissance et de la qualité des cristaux ainsi que de l'étude des méthodes de montage. Cette nouvelle génération n'en sera que plus crédible, confortée par les prototypes à venir aussi bien du coté CESR / CNES que du coté italien où une équipe de l'Université de Ferrara travaille sur les mêmes problématiques. La technologie des lentilles de Laue mûrit et malgré des problèmes commun à tout développement instrumental, elle parait en bonne voie pour offrir le gain en sensibilité tant attendu dans la bande des rayons γ de faible énergie.

Bibliographie

- N. V. ABROSIMOV, S. N. ROSSOLENKO, V. ALEX, A. GERHARDT ET W. SCHRÖDER. Single crystal growth of $Si_{l_x} Ge_x$ by the Czochralski technique. Journal of Crystal Growth, vol. 166 p. 657–662, 1996.
- N. V. ABROSIMOV, S. N. ROSSOLENKO, W. THIEME, A. GERHARDT ET W. SCHRÖDER. Czochralski growth of Si- and Ge-rich SiGe single crystals. Journal of Crystal Growth, vol. 174 p. 182–186, 1997.
- F. ALBERNHE, J. F. LEBORGNE, G. VEDRENNE, D. BOCLET, P. DUROUCHOUX ET J. M. DA COSTA. Detection of the positron annihilation gamma ray line from the Galactic Center region. Astronomy and Astrophysics, vol. 94 p. 214, 1981.
- C. ANDERSON. Physical Review, vol. 41 p. 405, 1932.
- J. R. ARNOLD, A. E. METZGER, E. C. ANDERSON ET M. A. VAN DILLA. Gamma Rays in Space, Ranger 3. Journal of Geophysical Research, vol. 67 p. 4878-+, November 1962.
- D. ATTIÉ, M. CHERNYAKOVA, P. KRETSCHMAR, I. KREYKENBHOM, S. SCHANNE, P. SIZUN,
 R. STAUBERT ET A. VON KIENLIN. Cyclotron lines in INTEGRAL/SPI spectra of Vela X-1. In COSPAR, Plenary Meeting, page 2862, 2005.
- A. AUTHIER. Dynamical theory of X-ray diffraction. Oxford University Press, 2001.

A. AUTHIER ET F. BALIBAR.
 Création de nouveaux champs d'ondes généralisés dus à la présence d'un objet diffractant à l'intérieur d'un cristal parfait. II. Cas d'un défaut isolé.
 Acta Crystallographica Section A p. 647 – 654, 1970.

- F. BALIBAR, F. N. CHUKHOVSKII ET C. MALGRANGE. Dynamical X-ray propagation : a theoretical approach to the creation of new wave fields. Acta Crystallographica Section A p. 387–399, 1983.
- N. BARRIÈRE, P. V. BALLMOOS, H. HALLOIN, N. ABROSIMOV, J. M. ALVAREZ, K. ANDER-SEN, P. BASTIE, S. BOGGS, P. COURTOIS, T. COURVOISIER, M. HARRIS, M. HERNANZ,

- J. ISERN, P. JEAN, J. KNÖDLSEDER, G. SKINNER, B. SMITHER, P. UBERTINI, G. VE-DRENNE, G. WEIDENSPOINTNER ET C. WUNDERER. *MAX, a Laue diffraction lens for nuclear astrophysics.* Experimental Astronomy, vol. 20 p. 269–278, *December*2005.
- N. BARRIÈRE, P. VON BALLMOOS, P. BASTIE, P. COURTOIS, N. V. ABROSIMOV, K. ANDERSEN, H. HALLOIN, G. SKINNER ET R. K. SMITHER. Second generation crystals for Laue lens applications.
 In Space Telescopes and Instrumentation II : Ultraviolet to Gamma Ray. Edited by Turner, Martin J. L.; Hasinger, Günther, volume 6266 of Presented at the SPIE Conference, page 62662D, July2006.
- S. E. BOGGS. The Advanced Compton Telescope mission. New Astronomy Review, vol. 50 p. 604–607, October2006.
- L. BOUCHET, P. MANDROU, J. P. ROQUES, G. VEDRENNE, B. CORDIER, A. GOLDWURM, F. LEBRUN, J. PAUL, R. SUNYAEV, E. CHURAZOV, M. GILFANOV, M. PAVLINSKY, S. GRE-BENEV, G. BABALYAN, I. DEKHANOV ET N. KHAVENSON. Sigma discovery of variable e(+)-e(-) annihilation radiation from the near Galactic center variable compact source 1E 1740.7 - 2942. Astrophysical Journal, vol. 383 p. 45, 1991.
- E. L. CHUPP, D. J. FORREST, P. R. HIGBIE, A. N. SURI, C. TSAI ET P. P. DUNPHY. Solar Gamma Ray Lines observed during the Solar Activity of August 2 to August 11, 1972. Nature, vol. 241 p. 333-+, 1973.
- E. L. CHUPP, D. J. FORREST, P. R. HIGBIE, A. N. SURI, C. TSAI ET P. P. DUNPHY. Solar Gamma Ray Lines observed during the Solar Activity of August 2 to August 11, 1972. Nature, vol. 241 p. 333, 1973.
- G. W. CLARK, G. P. GARMIRE ET W. L. KRAUSHAAR. Observation of High-Energy Cosmic Gamma Rays. The Astrophysical Journal, vol. 153 p. L203+, September1968.
- W. COLLMAR, K. BENNETT, H. BLOEMEN, J. J. BLOM, W. HERMSEN, G. G. LICHTI, J. RYAN, V. SCHÖNFELDER, G. J. STACY, H. STEINLE, R. O. WILLIAMS ET C. WINKLER. COMPTEL Observations of AGN at Mev-Energies. Astrophysical Letters Communications, vol. 39 p. 57–+, 1999.
- M. J. COLLON, R. GÜNTHER, S. KRAFT, M. W. BEIJERSBERGEN, M. BAVDAZ, K. WALLAE, M. KRUMREY ET M. FREYBERG. Silicon pore optics for astrophysical X-ray missions. In Proceedings of the SPIE, volume 6688 of Presented at the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference, September 2007.
- A. COMASTRI.
 AGN Models for the X and γ-RAY Backgrounds.
 Astrophysical Letters Communications, vol. 39 p. 181-+, 1999.

E. COSTA, F. FRONTERA, J. HEISE, M. FEROCI, J. IN'T ZAND, F. FIORE, M. N. CINTI, D. DAL FIUME, L. NICASTRO, M. ORLANDINI, E. PALAZZI, M. RAPISARDA, G. ZAVATTINI, R. JAGER, A. PARMAR, A. OWENS, S. MOLENDI, G. CUSUMANO, M. C. MACCARONE, S. GIARRUSSO, A. COLETTA, L. A. ANTONELLI, P. GIOMMI, J. M. MULLER, L. PIRO ET R. C. BUTLER.
Discovery of an X-ray afterglow associated with the γ-ray burst of 28 February 1997. Nature, vol. 387 p. 783–785, June 1997.

M. R. DARDORD.

Sur la réflexion des rayons x par de cristaux. Journal de Physique : Le Radium, vol. 3 p. 218, 1922.

- C. G. DARWIN. Phil. Mag., vol. 27 p. 315–657, 1914.
- C. G. DARWIN. Phil. Mag., vol. 43 p. 800, 1922.
- P. P. EWALD.Ann. Phys. (Leipzig), vol. 54 p. 519–597, 1917.
- E. E. FENIMORE ET T. M. CANNON. Uniformly redundant arrays - Digital reconstruction methods. Applied Optics, vol. 20 p. 1858, 1981.
- E. FERMI.
 Formazione di immagini coi raggi röntgen.
 Nuovo Cimento, vol. 25 p. 63–68, 1923.
- P. FERRANDO, M. ARNAUD, U. BRIEL, O. CITTERIO, R. CLÉDASSOU, P. DUCHON, F. FIORE, P. GIOMMI, A. GOLDWURM, G. HASINGER, E. KENDZIORRA, P. LAURENT, F. LEBRUN, O. LIMOUSIN, G. MALAGUTI, S. MEREGHETTI, G. MICELA, G. PARESCHI, Y. RIO, J. P. ROQUES, L. STRÜDER ET G. TAGLIAFERRI. Simbol-X : mission overview.
 In Proceedings of the SPIE, volume 6266 of Presented at the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference, July2006.
- G. J. FISHMAN ET D. D. CLAYTON.
 Nuclear Gamma Rays from 7Li in the Galactic Cosmic Radiation.
 The Astrophysical Journal, vol. 178 p. 337–340, 1972.
- M. GILFANOV, E. CHURAZOV, R. SUNYAEV, N. KHAVENSON, B. NOVIKOV, A. DYACHKOV,
 I. TSERENIN, K. SUKHANOV, L. BOUCHET, M. DENIS, M. C. SCHMITZ-FRAYSSE, P. MAN-DROU, J. PAUL, B. CORDIER, A. GOLDWURM ET F. LEBRUN.
 Observation of transient high-energy emission features in the spectra of black hole candidates and the Crab Nebula by Granat/SIGMA.
 The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 92 p. 411–418, June1994.

- A. GOLDWURM, J. BALLET, B. CORDIER, J. PAUL, L. BOUCHET, J. P. ROQUES, D. BARRET, P. MANDROU, R. SUNYAEV, E. CHURAZOV, M. GILFANOV, A. DYACHKOV, N. KHAVENSON, V. KOVTUNENKO, R. KREMNEV ET K. SUKHANOV.
 Sigma/GRANAT soft gamma-ray observations of the X-ray nova in Musca - Discovery of positron annihilation emission line. The Astrophysical Journal, vol. 389 p. L79, 1992.
- J. GÓMEZ-GOMAR, J. ISERN ET P. JEAN. Prospects for Type IA supernova explosion mechanism identification with gamma rays. Royal Astronomical Society, monthly Notices, vol. 295 p. 1–+, March1998.

M. Gouy.

Sur la catoptrique des rayons x et son application à un spectrographe à foyers réels. Annales de Physique et de Chimie, vol. 5 p. 241, 1916.

H. HALLOIN ET P. BASTIE.

Laue diffraction lenses for astrophysics : Theoretical concepts. Experimental Astronomy, vol. 20 p. 151–170, December2005.

H. HALLOIN, P. VON BALLMOOS, J. EVRARD, G. K. SKINNER, J. M. ALVAREZ, M. HERNANZ, N. ABROSIMOV, P. BASTIE, B. HAMELIN, P. JEAN, J. KNÖDLSEDER, R. K. SMITHER ET G. VEDRENNE.

Gamma-Ray Astronomy Starts to see CLAIRE : First Light for a Crystal Diffraction Telescope.

In V. Schoenfelder, G. Lichti ET C. Winkler, editors, 5th INTEGRAL Workshop on the IN-TEGRAL Universe, volume 552 of ESA Special Publication, pages 739–+, October2004.

H. HALLOIN.

CLAIRE : Premières lumières d'une lentille gamma. Thèse de Doctorat, Université Toulouse III - Paul Sabatier, 2003.

- M. HAMUY, M. M. PHILLIPS, N. B. SUNTZEFF, R. A. SCHOMMER, J. MAZA, R. C. SMITH, P. LIRA ET R. AVILES. *The Morphology of Type IA Supernovae Light Curves.* Astronomical Journal, vol. 112 p. 2438–+, December1996.
- B. A. HARMON, M. H. FINGER, B. RUBIN, R. MALLOZZI, W. S. PACIESAS, R. B. WILSON,
 G. J. FISHMAN, M. BROCK ET C. A. MEEGAN.
 Occultation analysis of BATSE data operationnal aspects.
 In The Compton Observatory Science Workshop, pages 69–75, 1992.
- G. HASINGER.
 - The X-ray background and AGNs. Nuclear Physics B Proceedings Supplements, vol. 132 p. 86–96, June2004.
- R. C. HAYMES, D. V. ELLIS, G. J. FISHMAN, J. D. KURFESS ET W. H. TUCKER. Observation of Gamma Radiation from the Crab Nebula. The Astrophysical Journal, vol. 151 p. L9+, January1968.

K. HIROTANI.

Gamma-ray Emission Mechanism From Pulsar Magnetospheres : A Unification Of Inner And Outer Gap Models. In Bulletin of the American Astronomical Society, volume 38 of Bulletin of the American Astronomical Society, pages 333-+, September2006.

- A. F. IYUDIN, R. DIEHL, H. BLOEMEN, W. HERMSEN, G. G. LICHTI, D. MORRIS, J. RYAN, V. SCHOENFELDER, H. STEINLE, M. VARENDORFF, C. DE VRIES ET C. WINKLER. COMPTEL observations of Ti-44 gamma-ray line emission from CAS A. Astronomy and Astrophysics, vol. 284 p. L1, 1994.
- A. F. IYUDIN, V. SCHONFELDER, K. BENNETT, H. BLOEMEN, R. DIEHL, W. HERMSEN, G. G. LICHTI, R. D. VAN DER MEULEN, J. RYAN ET C. WINKLER. *Emission from 44Ti associated with a previously unknown Galactic supernova*. Nature, vol. 396 p. 142, 1998.
- A. S. JACOBSON, J. C. LING, W. A. MAHONEY ET J. B. WILLETT. Observational evidence for extraterrestrial gamma-ray line sources. In Gamma Ray Spectroscopy in Astrophysics, page 228, 1978.
- J. V. JELLEY.
 The atmospheric Cherenkov technique in gamma-ray astronomy The early days.
 Royal Society of London Philosophical Transactions Series A, vol. 301 p. 611–614, June1981.
- C. P. JENSEN, F. E. CHRISTENSEN, S. E. ROMAINE, R. J. BRUNI ET Z. ZHONG. Stacked depth-graded multilayer for hard x-rays measured up to 140 keV. In Proceedings of the SPIE, Volume 6688, (2007)., volume 6688, 2007.
- W. N. JOHNSON, J. E. GROVE, R. L. KINZER, R. A. KROEGER, J. D. KURFESS, M. S. STRICKMAN, K. MCNARON-BROWN, D. A. GRABELSKY, W. R. PURCELL, M. P. ULMER, G. V. JUNG ET R. A. CAMERON.
 OSSE Observations of Seyfert AGN.
 In Bulletin of the American Astronomical Society, volume 25, pages 1390-+, December1993.
- W. N. JOHNSON, F. R. HARNDEN ET R. C. HAYMES. *The Spectrum of Low-Energy Gamma Radiation from the Galactic-Center Region*. The Astrophysical Journal, vol. 172 p. L1, 1972.
- W. N. JOHNSON, III ET R. C. HAYMES.
 Detection of a Gamma-Ray Spectral Line from the Galactic-Center Region. The Astrophysical Journal, vol. 184 p. 103–126, August1973.
- G. KANBACH, R. ANDRITSCHKE, P. F. BLOSER, F. SCHOPPER, V. SCHOENFELDER ET A. ZO-GLAUER. Concept study for the next generation medium-energy gamma-ray astronomy mission : MEGA. In Proceedings of the SPIE, volume 4851, pages 1209–1220, March2003.
- G. KANBACH, R. ANDRITSCHKE, A. ZOGLAUER, M. AJELLO, M. L. MCCONNELL, J. MACRI, J. M. RYAN, P. BLOSER, S. HUNTER, D. DICOCCO, J. KURFESS ET V. REGLERO. *Development and calibration of the tracking Compton/Pair telescope MEGA*. Nuclear Instrument and Methods in Physics Research, section A, vol. 541 p. 310–322, *April*2005.

B. KANDEL.

Etude du plan de détection du spectromètre SPI sur INTEGRAL : Analyse expérimentale et modélisation des détecteurs HPGe.

Thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier Toulouse III, 1998.

N. Kato.

Pendellösung Fringes in Distorted Crystals I. Fermat's Principle for Bloch Waves. Journal of the Physical Society of Japan, vol. 18 p. 1785–1791, December1963.

N. Kato.

Pendellösung Fringes in Distorted Crystals II. Application to Two-Beam Cases. Journal of the Physical Society of Japan, vol. 19 p. 67–77, January1964a.

N. Kato.

Pendellösung Fringes in Distorted Crystals III. Application to homogeneously bent crystals. Journal of the Physical Society of Japan, vol. 19 p. 971–985, 1964b.

- S. KEITEL, C. MALGRANGE, T. NIEMÓLLER ET J. R. SCHNEIDER. Diffraction of 100 to 200 keV X-rays from an Si_{1-x}Ge_x gradient crystal : comparison with results from dynamical theory. Acta Crystallographica Section A p. 855–863, 1999.
- S. Keitel.

Untersuchung von Si1-xGex-Gradientenkristallen und in-situ getemperten Silizium-Einkristallen als Monochromatoren für hochenergetische Synchrotronstrahlung. Thèse de Doctorat, Universität Hamburg, 1999.

C. KITTEL.

Introduction à la physique de l'état solide. Dunod, Paris, 3eme édition edition, 1972.

- R. W. KLEBESADEL, I. B. STRONG ET R. A. OLSON. Observations of Gamma-Ray Bursts of Cosmic Origin. The Astrophysical Journal, vol. 182 p. L85+, June1973.
- J. KNÖDLSEDER, K. BENNETT, H. BLOEMEN, R. DIEHL, W. HERMSEN, U. OBERLACK, J. RYAN, V. SCHÖNFELDER ET P. VON BALLMOOS. A multiwavelength comparison of COMPTEL 1.8 MeV²⁶ Al line data. Astronomy and Astrophysics, vol. 344 p. 68, 1999.

J. KNÖDLSEDER. GRI : the gamma-ray imager mission. In Proceedings of the SPIE, volume 6266, 2006.

J. KNÖDLSEDER, P. JEAN, V. LONJOU, G. WEIDENSPOINTNER, N. GUESSOUM, W. GILLARD, G. SKINNER, P. VON BALLMOOS, G. VEDRENNE, J.-P. ROQUES, S. SCHANNE, B. TEE-GARDEN, V. SCHÖNFELDER ET C. WINKLER. *The all-sky distribution of 511 keV electron-positron annihilation emission.* Astronomy and Astrophysics, vol. 441 p. 513–532, 2005. J. KNÖDLSEDER, P. VON BALLMOOS, F. FRONTERA, A. BAZZANO, F. CHRISTENSEN, M. HER-NANZ ET C. WUNDERER.

GRI : focusing on the evolving violent universe.

In Proceedings of the SPIE, volume 6688 of Presented at the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference, 2007.

F. G. KNOLL. Radiation Detection and Measurement. John Wiley & Sons, Inc, 1989.

- A. KOHNLE, R. SMITHER, T. GRABER, P. VON BALLMOOS, P. LAPORTE ET J.-F. OLIVE. Realization of a tunable crystal lens as an instrument to focus gamma rays. Nuclear Instruments and Methods, section A, vol. 408 p. 553–561, 1998.
- J. D. KURFESS, W. N. JOHNSON, R. L. KINZER, R. A. KROEGER, M. S. STRICKMAN, J. E. GROVE, M. D. LEISING, D. D. CLAYTON, D. A. GRABELSKY, W. R. PURCELL, M. P. ULMER, R. A. CAMERON ET G. V. JUNG. Oriented Scintillation Spectrometer Experiment observations of Co-57 in SN 1987A. The Astrophysical Journal, vol. 399 p. L137, 1992.
- P. LAPORTE.

Etude la diffraction en géométrie de Laue : Application à l'astrophysique nucléaire. Thèse de Doctorat, Université Toulouse III - Paul Sabatier, 2000.

F. LEI, A. J. DEAN ET G. L. HILLS.

Compton Polarimetry in Gamma-Ray Astronomy. Space Science Reviews, vol. 82 p. 309–388, November 1997.

M. D. Leising.

Focusing supernova gamma rays. Experimental Astronomy, vol. 20 p. 49–55, December2005.

M. LEVENTHAL.

Positronium-Formation Redshift of the 511-ke V Annihilation Line. The Astrophysical Journal, vol. 183 p. L147+, 1973.

M. LEVENTHAL.

Recent balloon observation of the Galactic center 511 keV annihilation line. Advances in Space Research, vol. 11 p. 157, 1991.

M. LEVENTHAL, C. J. MACCALLUM ET P. D. STANG.

Detection of 511 keV positron annihilation radiation from the galactic center direction. The Astrophysical Journal, vol. 225 p. L11, 1978.

O. LIMOUSIN.

Mise en oeuvre et étude des propriétés spectrales de la gamma-caméra ISGRI. Thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier Toulouse III, 2001.

R. P. LIN, G. J. HURFORD, N. W. MADDEN, B. R. DENNIS, C. J. CRANNELL, G. D. HOL-MAN, R. RAMATY, T. T. VON ROSENVINGE, A. ZEHNDER, H. F. VAN BEEK, P. L. BORN-MANN, R. C. CANFIELD, A. G. EMSLIE, H. S. HUDSON, A. BENZ, J. C. BROWN, S. ENOME, T. KOSUGI, N. VILMER, D. M. SMITH, J. MCTIERNAN, I. HAWKINS, S. SLASSI-SENNOU, A. CSILLAGHY, G. FISHER, C. JOHNS-KRULL, R. SCHWARTZ, L. E. ORWIG, D. ZARRO, E. SCHMAHL, M. ASCHWANDEN, P. HARVEY, D. CURTIS, D. PANKOW, D. CLARK, R. F. BOYLE, R. HENNECK, A. MICHEDLISHVILI, K. THOMSEN, J. PREBLE ET F. SNOW. *High-Energy Solar Spectroscopic Imager (HESSI) Small Explorer mission for the next (2000)* solar maximum. In Proceedings of the SPIE, volume 3442, page 2, 1998.

T. R. LINDQUIST ET W. R. WEBBER.

A focusing X-ray telescope for use in the study of extraterrestrial X-ray sources in the energy range 20-140 keV.

Canadian Journal of Physics. Proceedings of the 10th International Conference on Cosmic Rays, Calgary, Alberto, June 19-30, 1967, Vol. 46., p.1103, vol. 46 p. 1103–+, *May*1968.

T. R. LINDQUIST.

Observations of extraterrestrial X-rays by a balloon-borne focusing X-ary telescope. Thèse de Doctorat, University of Minnesota, 1971.

- J. C. LING, W. A. MAHONEY, J. B. WILLETT ET A. S. JACOBSON. A possible line feature at 73 keV from the Crab Nebula. Astrophysical Journal, vol. 231 p. 896, 1979.
- R. E. LINGENFELTER ET R. RAMATY. Gamma-ray lines from interstellar grains.
 - The Astrophysical Journal, vol. 211 p. L19–L22, January1977.
- R. E. LINGENFELTER, R. RAMATY ET D. LEITER. Origin of 0.511 MeV emission from the Galactic center. In International Cosmic Ray Conference, volume 1 of International Cosmic Ray Conference, pages 112–115, 1981.
- N. LUND. A study of focusing telescopes for soft gamma rays. Experimental Astronomy, vol. 2 p. 259–273, 1992.
- W. A. MAHONEY, J. C. LING ET W. A. WHEATON. High-resolution spectrum of the Galactic center. Astronomy and Astrophysics Supplement Series, vol. 97 p. 159, 1993.
- W. A. MAHONEY, J. C. LING, W. A. WHEATON ET A. S. JACOBSON. HEAO 3 discovery of Al-26 in the interstellar medium. Astrophysical Journal, vol. 286 p. 578–585, November1984a.
- W. A. MAHONEY, J. C. LING, W. A. WHEATON ET A. S. JACOBSON. HEAO 3 discovery of Al-26 in the interstellar medium. Astrophysical Journal, vol. 286 p. 578, 1984b.
- C. MALGRANGE.

X-ray propagation in distorted crystals : From dynamical to kinematical theory. Crystals Research and Technology, vol. 37 p. 654–662, 2002.

- A. MALIZIA, L. BASSANI, J. B. STEPHEN, A. BAZZANO, P. UBERTINI, A. J. BIRD, A. J. DEAN, V. SGUERA, M. RENAUD, R. WALTER ET F. GIANOTTI. *The INTEGRAL/IBIS Source AX J1838.0-0655 : A Soft X-Ray-to-TeV γ-Ray Broadband Emitter.* The Astrophysical Journal, vol. 630 p. L157–L160, September2005.
- S. M. MATZ, G. H. SHARE, M. D. LEISING, E. L. CHUPP ET W. T. VESTRAND. Gamma-ray line emission from SN1987A. Nature, vol. 331 p. 416, 1988a.
- S. M. MATZ, G. H. SHARE, M. D. LEISING, E. L. CHUPP ET W. T. VESTRAND. Gamma-ray line emission from SN1987A. Nature, vol. 331 p. 416–418, 1988b.
- H. A. MAYER-HASSELWANDER, G. KANBACH, K. BENNETT, G. G. LICHTI, G. F. BIGNAMI, P. A. CARAVEO, R. BUCCHERI, F. LEBRUN, J. L. MASNOU ET W. HERMSEN. Large-scale distribution of galactic gamma radiation observed by COS-B. Astronomy and Astrophysics, vol. 105 p. 164–175, January1982.
- E. P. MAZETS, S. V. GOLENETSKII, R. L. APTEKAR, I. A. GURIAN ET V. N. ILINSKII. Cyclotron and annihilation lines in gamma-ray burst. Nature, vol. 290 p. 378, 1981.
- M. MCCONNELL, S. FLETCHER, K. BENNETT, H. BLOEMEN, R. DIEHL, W. HERMSEN, J. RYAN, V. SCH[^]NFELDER, A. STRONG ET R. VAN DIJK. COMPTEL All-Sky Imaging at 2.2 MeV.
 In C. D. Dermer, M. S. Strickman ET J. D. Kurfess, editors, AIP Conf. Proc. 410 : Proceedings of the Fourth Compton Symposium, page 1099, 1997.
- T. MIHARA, K. MAKISHIMA ET F. NAGASE. Cyclotron Lines and Continuum Spectra of X-ray Binary Pulsars with GINGA. Bulletin of the American Astronomical Society, vol. 27 p. 1434, 1995.
- R. S. MILLER. The Lunar Occultation Observer (LOCO) mission concept. In Proceedings of the SPIE, volume 6686, 2007.
- D. J. MORRIS, K. BENNETT, H. BLOEMEN, W. HERMSEN, G. G. LICHTI, M. L. MCCONNELL, J. M. RYAN ET V. SCHÖNFELDER. Evidence for ⁵⁶Co Line Emission from the Type Ia Supernova 1991 T Using COMPTEL. In Seventeeth Texas Symposium on Relativistic Astrophysics and Cosmology, page 397, 1995a.
- D. J. MORRIS, K. BENNETT, H. BLOEMEN, W. HERMSEN, G. G. LICHTI, M. L. MCCONNELL, J. M. RYAN ET V. SCHÖNFELDER. Evidence for ⁵⁶Co Line Emission from the Type Ia Supernova 1991 T Using COMPTEL. In Seventeeth Texas Symposium on Relativistic Astrophysics and Cosmology, page 397, 1995b.
- R. J. MURPHY, G. H. SHARE, J. R. LETAW ET D. J. FORREST. Nuclear line spectroscopy of the 1981 April 27 solar flare. Astrophysical Journal, vol. 358 p. 298, 1990.

J.-F. OLIVE.

Observation de l'Emission Gamma Emise par Trois Pulsars : le Crabe, Vela et A0535+26. Thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, 1992.

- J. PAUL, J. BALLET, M. CANTIN, B. CORDIER, A. GOLDWURM, A. LAMBERT, P. MANDROU,
 J. P. CHABAUD, M. EHANNO ET J. LANDE.
 Sigma The hard X-ray and soft gamma-ray telescope on board the GRANAT space observatory.
 Advances in Space Research, vol. 11 p. 289, 1991.
- J. PAUL ET P. LAURENT. Astronomie Gamma Spatiale. Gordon and Breach Science Publishers, 1997.
- P. PENNING ET D. POLDER. Philips Research Report, vol. 16 p. 419–440, 1961.
- G. J. PERLOW ET C. W. KISSINGER. A search for primary cosmic gamma-radiation. i. Phys. Rev. p. 552–554, Feb1951a.
- G. J. PERLOW ET C. W. KISSINGER.
 A search for primary cosmic gamma-radiation. ii. low energy radiation above and within the atmosphere.
 Phys. Rev. p. 572–580, Nov1951b.
- L. PETERSON ET J. R. WINCKLER. Short γ-ray burst from a solar flare. Phys. Rev. Lett. p. 205–206, Sep1958.
- A. PISA, F. FRONTERA, P. DE CHIARA, G. LOFFREDO, D. PELLICCIOTTA, G. LANDINI, T. FRANCESCHINI, S. SILVESTRI, K. ANDERSEN, P. COURTOIS ET B. HAMELIN. *Feasibility study of a Laue lens for hard x rays for space astronomy*. In *Proceedings of the SPIE*, volume 5536, pages 39–48, *October*2004.
- S. PLÜSCHKE, R. DIEHL, V. SCHÖNFELDER, H. BLOEMEN, W. HERMSEN, K. BENNETT, C. WINKLER, M. MCCONNELL, J. RYAN, U. OBERLACK ET J. KNÖDLSEDER. *The COMPTEL 1.809 MeV survey*. In A. Gimenez, V. Reglero ET C. Winkler, editors, *Exploring the Gamma-Ray Universe*, volume 459 of *ESA Special Publication*, pages 55–58, *September*2001.
- S. PLÜSCHKE, R. H. DIEHL, V. SCHÖNFELDER, G. WEIDENSPOINTNER, H. BLOEMEN, W. HERMSEN, M. MCCONNEL, J. RYAN, K. BENNETT, U. OBERLACK ET J. KNÖDLSEDER. COMPTEL 1.8 MeV All Sky Survey : The Cygnus Region.
 In M. L. McConnel ET J. M. Ryan, editors, AIP Conf. Proc. 510 : Proceedings of the Fifth Compton Symposium, page 35, 2000.
- N. PRANTZOS ET R. DIEHL.
 Radioactive 26Al in the galaxy : observations versus theory.
 Physics Reports, vol. 267 p. 1, 1996.

- E. Prince, editor. International Tables for Crystallography. Kluwer Academic Publishers, 2004.
- W. R. PURCELL, L.-X. CHENG, D. D. DIXON, R. L. KINZER, J. D. KURFESS, M. LEVEN-THAL, M. A. SAUNDERS, J. G. SKIBO, D. M. SMITH ET J. TUELLER. OSSE Mapping of Galactic 511 keV Positron Annihilation Line Emission. Astrophysical Journal, vol. 491 p. 725, 1997.
- W. R. PURCELL, M. P. ULMER, G. H. SHARE, R. KINZER ET E. O. HULBURT. SMM observations of interstellar ²⁶Al : a status report. In N. Johnson, editor, The Gamma Ray Observatory Science Workshop, pages N4–327, 1989.
- J. P. ROQUES, S. SCHANNE, A. VON KIENLIN, J. KN[^]DLSEDER, R. BRIET, L. BOUCHET, P. PAUL, S. BOGGS, P. CARAVEO, M. CASSÈ, B. CORDIER, R. DIEHL, P. DUROU-CHOUX, P. JEAN, P. LELEUX, G. LICHTI, P. MANDROU, J. MATTESON, F. SANCHEZ, V. SCH[^]NFELDER, G. SKINNER, A. STRONG, B. TEEGARDEN, G. VEDRENNE, P. VON BALLMOOS ET C. WUNDERER. SPI/INTEGRAL in-flight performance. Astronomy and Astrophysics, vol. 411 p. L91, 2003.
- A. SANTANGELO, A. SEGRETO, S. GIARRUSSO, D. DAL FIUME, M. ORLANDINI, A. N. PAR-MAR, T. OOSTERBROEK, T. BULIK, T. MIHARA, S. CAMPANA, G. L. ISRAEL ET L. STELLA. A BEPPOSAX Study of the Pulsating Transient X0115+63 : The First X-Ray Spectrum with Four Cyclotron Harmonic Features. The Astrophysical Journal and 522 p. 185, 1999

The Astrophysical Journal, vol. 523 p. L85, 1999.

B. P. SCHMIDT.

Measuring global curvature and cosmic acceleration with supernovae. Bulletin of the Astronomical Society of India, vol. 32 p. 269–281, December2004.

- V. SCHÖNFELDER, H. AARTS, K. BENNETT, H. DE BOER, J. CLEAR, W. COLLMAR, A. CONNORS, A. DEERENBERG, R. DIEHL, A. VON DORDRECHT, J. W. DEN HERDER, W. HERMSEN, M. KIPPEN, L. KUIPER, G. LICHTI, J. LOCKWOOD, J. MACRI, M. MCCON-NELL, D. MORRIS, R. MUCH, J. RYAN, G. SIMPSON, M. SNELLING, G. STACY, H. STEINLE, A. STRONG, B. N. SWANENBURG, B. TAYLOR, C. DE VRIES ET C. WINKLER. Instrument description and performance of the Imaging Gamma-Ray Telescope COMPTEL aboard the Compton Gamma-Ray Observatory. Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 86 p. 657, 1993.
- V. Schönfelder, editor. *The Universe in Gamma Rays.* Springer, 2001.
- G. H. SHARE, R. L. KINZER, J. D. KURFESS, D. J. FORREST, E. L. CHUPP ET E. RIEGER. Detection of galactic Al-26 gamma radiation by the SMM spectrometer. The Astrophysical Journal, vol. 292 p. L61, 1985.
- G. H. SHARE, M. D. LEISING, D. C. MESSINA ET W. R. PURCELL. Limits on a variable source of 511 keV annihilation radiation near the Galactic center. The Astrophysical Journal, vol. 358 p. L45, 1990.

- G. K. SKINNER, T. J. PONMAN, A. P. HAMMERSLEY ET C. J. EYLES. *Techniques for the analysis of data from coded-mask X-ray telescopes.* Astrophys. Space. Sci., vol. 136 p. 337, 1987.
- R. SMITHER, K. A. SALEEM, M. BENO, C. KURTZ, A. KHOUNSARY ET N. ABROSIMOV. Diffraction efficiency and diffraction bandwidth of thermal-gradient and composition-gradient crystals.
 Review of Scientific Instruments, vol. 76 p. 3107-+, December2005a.

R. K. SMITHER.

New method for focusing X rays and gamma rays. Review of Scientific Instruments, vol. 53 p. 131–141, 1982.

- R. K. SMITHER, K. A. SALEEM, D. E. ROA, M. A. BENO, P. V. BALLMOOS ET G. K. SKINNER. High diffraction efficiency, broadband, diffraction crystals for use in crystal diffraction lenses. Experimental Astronomy, vol. 20 p. 201–210, December 2005b.
- J. TRÜMPER, W. PIETSCH, C. REPPIN, W. VOGES, R. STAUBERT ET E. KENDZIORRA. Evidence for strong cyclotron line emission in the hard X-ray spectrum of Hercules X-1. The Astrophysical Journal, vol. 219 p. L105, 1978.
- J. TRÜMPER, B. SACCO, W. PIETSCH, C. REPPIN, E. KENDZIORRA ET R. STAUBERT. Evidence for strong cyclotron emission in the hard X-ray spectrum of HER X-1. Mitteilungen der Astronomischen Gesellschaft Hamburg, vol. 42 p. 120, 1977.
- P. UBERTINI, L. BASSANI, A. MALIZIA, A. BAZZANO, A. J. BIRD, A. J. DEAN, A. DE ROSA, F. LEBRUN, L. MORAN, M. RENAUD, J. B. STEPHEN, R. TERRIER ET R. WALTER. *INTEGRAL IGR J18135-1751 = HESS J1813-178 : A New Cosmic High-Energy Accelerator* from keV to TeV Energies. The Astrophysical Journal, vol. 629 p. L109–L112, August2005.
- P. UBERTINI, F. LEBRUN, G. DI COCCO, A. BAZZANO, A. J. BIRD, K. BROENSTAD, A. GOLDWURM, G. LA ROSA, C. LABANTI, P. LAURENT, I. F. MIRABEL, E. M. QUA-DRINI, B. RAMSEY, V. REGLERO, L. SABAU, B. SACCO, R. STAUBERT, L. VIGROUX, M. C. WEISSKOPF ET A. A. ZDZIARSKI. *IBIS : The Imager on-board INTEGRAL*. Astronomy and Astrophysics, vol. 411 p. L131, 2003.
- P. VILLARD.

Sur la réflexion et la réfraction des rayons cathodiques et des rayons déviables du radium. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, vol. 130 p. 1010–1012, 1900.

- P. VON BALLMOOS, R. DIEHL ET V. SCHOENFELDER. Map of the Galactic center region in the 1.8 MeV Al-26 gamma-ray line. Astrophysical Journal, vol. 318 p. 654, 1987.
- P. VON BALLMOOS, H. HALLOIN, J. EVRAD, G. SKINNER, N. ABROSIMOV, J. ALVAREZ, P. BASTIE, B. HAMELIN, M. HERNANZ, P. JEAN, J. KNÖDLSEDER ET R. K. SMITHER. *CLAIRE : First light for a gamma-ray lens.* Experimental Astronomy, vol. 20 p. 253–267, *December*2005a.

- P. VON BALLMOOS, H. HALLOIN, J. EVRARD, G. SKINNER, N. ABROSIMOV, J. ALVAREZ,
 P. BASTIE, B. HAMELIN, M. HERNANZ, P. JEAN, J. KNÖDLSEDER, V. LONJOU, B. SMITHER ET G. VEDRENNE.
 CLAIRE's first light.
 New Astronomy Review, vol. 48 p. 243–249, February2004.
- P. VON BALLMOOS, S. KAHN ET R. SUNYAEV. 30th Saas Fee Advanced Course on High-Energy Spectroscopic Astrophysics, chapter Instruments for Nuclear Astrophysics. Springer, 2005b.
- P. VON BALLMOOS ET R. K. SMITHER.
 A positron annihilation radiation telescope using Laue diffraction in a crystal lens. The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 92 p. 663–669, June1994.
- G. WEIDENSPOINTNER, C. R. SHRADER, J. KNÖDLSEDER, P. JEAN, V. LONJOU, N. GUES-SOUM, R. DIEHL, W. GILLARD, M. J. HARRIS, G. K. SKINNER, P. VON BALLMOOS, G. VE-DRENNE, J.-P. ROQUES, S. SCHANNE, P. SIZUN, B. J. TEEGARDEN, V. SCHÖNFELDER ET C. WINKLER. The sky distribution of positronium annihilation continuum emission measured with SPI/INTEGRAL.

Astronomy and Astrophysics, vol. 450 p. 1013–1021, May2006.

- G. WEIDENSPOINTNER, G. SKINNER, P. JEAN, J. KNÖDLSEDER, P. VON BALLMOOS, G. BI-GNAMI, R. DIEHL, A. W. STRONG, B. CORDIER, S. SCHANNE ET C. WINKLER. An asymmetric distribution of positrons in the Galactic disk revealed by γ-rays. Nature, vol. 451 p. 159–162, January2008.
- G. WEIDENSPOINTNER, C. B. WUNDERER, N. BARRIÈRE, A. ZOGLAUER ET P. V. BALL-MOOS. Monte Carlo study of detector concepts for the MAX Laue lens gamma-ray telescope. Experimental Astronomy, vol. 20 p. 375–386, 2005.
- C. B. WUNDERER, P. V. BALLMOOS, S. E. BOGGS, W. COBURN, H. HALLOIN ET G. K. SKINNER.
 Adding a Gamma-Ray Lens to ACT Looking Deeper into the Fires of Creation.
 In Bulletin of the American Astronomical Society, volume 36 of Bulletin of the American Astronomical Society, pages 1206-+, August2004.
- C. B. WUNDERER, P. VON BALLMOOS, N. BARRIÈRE, S. E. BOGGS, G. WEIDENSPOINTNER ET A. ZOGLAUER. Simulated performance of dedicated Ge-strip Compton telescopes as γ-lens focal plane instrumentation. Experimental Astronomy, vol. 20 p. 365–373, December2005.
- C. B. WUNDERER, G. WEIDENSPOINTNER, A. ZOGLAUER, P. V. BALLMOOS, N. BARRIÈRE, S. E. BOGGS, H. HALLOIN, J. KNÖDLSEDER ET N. LUND. Germanium (Compton) focal plane detectors for gamma-ray lenses. In Proceedings of the SPIE, volume 6266, 2006.

W. H. ZACHARIASEN.

Theory of X-Ray Diffraction in Crystals. Dover Publication, Inc., New York, 1945.

A. Zoglauer et G. Kanbach.

Doppler broadening as a lower limit to the angular resolution of next-generation Compton telescopes.

In Proceedings of the SPIE, volume 4851, pages 1302–1309, March2003.

ANNEXES

Annexe A

Acronymes

L'utilisation d'acronymes facilite la communication. Encore faut-il savoir qu'est ce qui veut dire quoi...

acronyme	définition
FWHM	Full Width at Half Maximum : Largeur à mi-hauteur
\mathbf{PSF}	Point spread function : Fonction d'étalement du point
GRB	Gamma-Ray Burst : sursaut gamma
SNIa	Supernova de type Ia
AGN	Active Galactic Nuclei : Noyaux actifs de galaxies
NSB	Neutron Star Binary : Système binaire dont l'objet compact est une étoile à
	neutron
BHB	Black Hole Binary : Système binaire dont l'objet compact est un trou noir
QED	Quantum Electrodynamics : électrodynamique quantique
PWN	Pulsar Wind Nebula : Nébuleuse créée autour d'un pulsar par l'émission de
	particules relativistes s'apparentant à un vent.
HPGe	High Purity Germanium detector : Détecteur en Germanium de haute pureté.
\mathbf{RC}	Rocking Curve
RCdiffr	Rocking curve en diffraction : le détecteur est placé dans le faisceau réfléchi.
RCtrans	Rocking curve en transmission : le détecteur est placé dans le faisceau transmis.
GRI	Gamma Ray Imager
MAX	Ceci n'est pas un acronyme, c'est un nom propre.
ESA	Agence Spatiale Européenne
CNES	Centre National d'Etudes Spatiales
TAS	Thales Alenia Space
HEO	Highly Excentric Orbit : Orbite fortement excentrique
OSC	<i>Optics spacecraft</i> : Satellite portant les optiques
DSC	Detector spacecraft : Satellite portant les détecteurs

Annexe B

Liste des expériences et des participants

Voici la liste des expériences (soumises à proposition) auxquelles j'ai participé pendant ma thèse. La plupart des résultats expérimentaux énoncés dans ce manuscrit proviennent des mesures réalisées durants ces expériences. Des comptes rendus succins (2 pages) de ces expériences sont disponibles en ligne, aux adresses indiquées pour chaque expérience.

ESRF, ligne ID 15A, Novembre 2005

Numéro :	ME-1203
Durée :	4 jours
Local contact :	Thierry D'almeida
Participants :	Pierre Bastie
	Nikolai Abrosimov
	Peter von Ballmoos
	Nicolas Barrière
	Thierry Camus
	Eric Deleage
Compte rendu :	http://ftp.esrf.fr/pub/UserReports/32513_A.pdf

ESRF, ligne ID 15A, Septembre 2006

Numéro :	MA-173
Durée :	6 jours
Local contact :	Thomas Buslaps
Participants :	Pierre Bastie
	Pierre Courtois
	Nicolas Barrière
	Gilles Roudil
	Denis Serre
Compte rendu :	http://ftp.esrf.fr/pub/UserReports/35271_A.pdf

ESRF, ligne ID 15A, Février 2007

Numéro :	MA-173 (2eme partie)
Durée :	4 jours
Local contact :	Thomas Buslaps
Participants :	Pierre Bastie
	Nikolai Abrosimov
	Nicolas Barrière
	Julien Rousselle
Compte rendu :	http://ftp.esrf.fr/pub/UserReports/35271_A.pdf

ILL, instrument PN3, GAMS 4, Mai 2007

Numéro :	3-03-689
Durée :	14 jours
Local contact :	Michael Jentschel
	Bernhard Lauss
Participants :	Nicolas Barrière
	Julien Rousselle
	Nicolai Frisch Brejnholt
Compte rendu :	
1	http://club.ill.fr/cv/servlet/
	ReportFind?issuer=ReportFind2&viewPDF=
	view&selectedProposalId=35198

Annexe C

Liste des mesures effectuées

Les tableaux ci-dessous regroupent toutes les mesures qui ont été faites sur chacun des cristaux étudiés. La colonne 'Nbre de points' indique le nombre de points mesurés sur la surface du cristal. Lorsque pour chaque point une mesure en transmission ainsi qu'une mesure en diffraction ont été réalisée, le nombre total de scans est indiqué entre parenthèses.

Cu 834.31							
Produit pa	ar	ILL - Gro	upe monoch	nromateur			
Energie	(hbl)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commentaire		
(keV)		(mm)	points	date	Commentane		
815	(220)	10.8	10(20)	ILL	Cristal brut de déseupe		
010	(220)	10.0	10(20)	Mai 07	Cristal blut de decoupe		
18/	(220)	10.8	1(2)	ILL	Cristal brut de découpe		
104	(220)	10.0	1(2)	Mai 07	Clistal blut de decoupe		
815	(220)	10.3	10(20)	ILL	Cristal passé à l'acide		
010	(220)	10.5	10(20)	Mai 07	Cristal passe a l'acide		
184	(220)	10.3	1(2)	ILL	Cristal passé à l'acide		
104	(220)	10.5	1(2)	Mai 07	Cristal passe a l'acide		
815	(111)	10.3	1(2)	ILL	Cristal passé à l'acide		
010	(111)	10.5	1 (2)	Mai 07	Cristar passe à l'actue		

C.1 Cristaux de cuivre

Cu 834.21								
Produit p	ar	ILL - Gro	upe monocl	nromateur				
Energie	(bbl)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commontaira			
(keV)	(IIKI)	(mm)	points	date	Commentane			
495	(111)	$7.4; 9.4; \\11.4; \\14.5$	32	ESRF Fev 07	Cristal découpé en escalier			
698	(111)	$7.4; 9.4; \\11.4; \\14.5$	16	ESRF Fev 07				
815	(220)	$7.4; 9.4; \\11.4; \\14.5$	12 (24)	ILL Mai 07	Cristal repassé à l'acide			

Cu 834.22								
Produit p	ar	ILL - Gro	upe monocl	nromateur				
Energie (keV)	(hkl)	Epaisseur (mm)	Nbre de points	Lieu et date	Commentaire			
495	(111)	2.3; 4.4; 6.4	21	ESRF Fev 07	Cristal découpé en escalier			

Cu 805.11.1							
Produit p	ar	ILL - Gro	upe monocl	nromateur			
Energie	(hkl)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commontaira		
(keV)		(mm)	points	date	Commentaire		
202	(200)	2 75	1(9)	ESRF			
292	(200)	5.75	1(2)	Nov 05			

Cu 805.11.3								
Produit p	ar	ILL - Gro	upe monocl	nromateur				
Energie (keV)	(hkl)	Epaisseur (mm)	Nbre de points	Lieu et date	Commentaire			
292	(200)	5.65	1(2)	ESRF Nov 05				

Cu 805.3								
Produit p	ar	ILL - Gro	upe monoch	nromateur				
Energie	(bbl)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commontaira			
(keV)		(mm)	points	date	Commentane			
207	(220)	10	91	ESRF				
291	(220)	10	21	Sept 06				

Cu 805.23					
Produit p	ar	ILL - Gro	upe monocl	nromateur	
Energie (keV)	(hkl)	Epaisseur (mm)	Nbre de points	Lieu et date	Commentaire
489	(200)	9.5	2(4)	ESRF Sept 06	Cristal fortement attaqué à l'acide. Scan sur le goniomètre 'mc'
489	(200)	9.5	22	ESRF Sept 06	Scan sur le goniomètre 'sty'
489	(220)	9.5	6	ESRF Sept 06	
489	(200)	11 pas de 4.1 à 9 mm	11	ESRF Sept 06	Cristal découpé en escalier sur sa longueur et à nouveau passé à l'acide
489	(220)	11 pas de 4.1 à 9 mm	22	ESRF Sept 06	
C.2 Cristaux de germanium

CLAIRE	CLAIRE 127_6b							
Produit p	ar	IKZ						
Energie (keV)	(hkl)	Epaisseur (mm)	Nbre de points	Lieu et date	Commentaire			
292	(111)	3	2(4)	ESRF Nov 05	L'un des meilleurs cristaux de l'anneau 0 de la lentille CLAIRE.			

C.3 Cristaux de silicium germanium à gradient de concentration variable

SiGe 19						
Produit p	ar	IKZ				
Energie	(hkl)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commontaira	
(keV)		(mm)	points	date	Commentaire	
202	(111)	10	6(12)	ESRF		
292	(111)	10	0(12)	Nov 05		
					4 mesures sont faites en	
480	(111)	10	5(20)	ESRF	chaque point : diffraction sur	
409	(111)	10	5(20)	Sept 06	la face convexe et la face	
					concave, idem en transmission	

C.3. Cristaux de silicium germanium à gradient de concentration variable

SiGe 61 sy	ym (découp	e symétriqu	.e)			
Produit pa	ar	IKZ				
Energie	(bbl)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commontaira	
(keV)		(mm)	points	date	Commentane	
207	(111)	19.1	22	ESRF	face convexe des plans	
291	(111)	12.1 25		Sept 06	cristallins	
480	(111)	19.1	15 (20)	ESRF	sur la face convexe des plans	
409	(111)	12.1	10(50)	Sept 06	cristallins	
480	(111)	10.1	5(10)	ESRF	sur la face concave des plans	
409	(111)	12.1	5(10)	Sept 06	cristallins	
480	(220)	47.9	7(14)	ESRF		
409	(220)	41.2	(14)	Sept 06		
480	(220)	54	1 (8)	ESRF		
409	(220)	54	4 (0)	Sept 06		

SiGe 61 as	SiGe 61 asym (découpe asymétrique)						
Produit par IKZ							
Energie	(bbl)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commontaira		
(keV)		(mm)	points	date	Commentane		
207	(111)	19.1	93	ESRF	face convexe des plans		
291	(111)	12.1	23	Sept 06	cristallins		
480	(111)	19.1	20 (60)	ESRF	sur la face convexe des plans		
409	(111)	12.1	30 (00)	Sept 06	$\operatorname{cristallins}$		
480	(111)	19.1	10(90)	ESRF	sur la face concave des plans		
409	(111)	12.1	10(20)	Sept 06	cristallins		

SiGe 13.6					
Produit p	ar	IKZ			
Energie (keV)	(hkl)	Epaisseur (mm)	Nbre de points	Lieu et date	Commentaire
297	(111)	20	25	ESRF Sept 06	face convexe des plans cristallins
489	(111)	20	18 (34)	ESRF Sept 06	sur la face convexe des plans cristallins
489	(111)	20	6 (12)	ESRF Sept 06	sur la face concave des plans cristallins
489	(111)	34.3	10 (40)	ESRF Sept 06	Le cristal est brut dans cette direction, les faces sont quasi-cylindriques et font des vagues

SiGe 10.3							
Produit p	ar	IKZ					
Energie (keV)	(hkl)	Epaisseur (mm)	Nbre de points	Lieu et date	Commentaire		
489	(111)	19.75	10 (40)	ESRF Sept 06			
489	(111)	32	4 (16)	ESRF Sept 06	Cristal brut dans cette direction. les faces sont quasi cylindriques.		
297	(111)	19.75	15	ESRF Sept 06	face convexe des plans cristallins.		
495	(111)	28	5	ESRF Fev 07	Le cristal a été recoupé, il n'y a plus de faces brutes. Mesures sur la face convexe.		
495	(111)	19.75	5	ESRF Fev 07	Mesures sur la face convexe.		
698	(111)	28	5	ESRF Fev 07	Mesures sur la face convexe.		
400	(111)	28	8	ESRF Fev 07	Mesures sur la face convexe.		
184	(111)	28	9 (35)	ILL Mai 07	Mesure du du paramètre de maille de long du gradient (face convexe).		
517	(111)	28	9 (18)	ILL Mai 07	face convexe.		
815	(111)	28	9 (18)	ILL Mai 07	face convexe.		

C.4 Cristaux de silicium germanium à gradient de concentration constant

SiGe 312					
Produit p	ar	IKZ			
Energie	(bkl)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commontaira
(keV)		(mm)	points	date	Commentaire
405	(111)	30	33	ESRF	
490	(111)	30	00	Fev 07	
480	(111)	15	15	ESRF	
409	(111)	10	10	Fev 07	

SiGe 316					
Produit p	ar	IKZ			
Energie	(bl-l)	Epaisseur	Nbre de	Lieu et	Commentaire
(keV)	(IIKI)	(mm)	points	date	Commentaire
405	(111)	30	33	ESRF	
490	(111)	50	00	Fev 07	
480	(111)	15	15	ESRF	
409	(111)	10	10	Fev 07	

SiGe 322					
Produit p	ar	IKZ			
Energie (keV)	(hkl)	Epaisseur (mm)	Nbre de points	Lieu et date	Commentaire
517	(111)	30	6 (12)	ILL Mai 07	

Annexe D

Calcul de sensibilité

Nous allons voir dans cette annexe la méthode qui a été utilisée pour estimer la sensibilité des télescopes à lentille de Laue MAX et GRI. Le niveau de confiance d'une détection (le nombre de sigma) est le rapport de la meilleure estimation du signal sur son incertitude :

$$n = \frac{S}{\sigma(S)} \tag{D.1}$$

Le signal peut être estimé par

$$S = C_{on} - \alpha C_{off} \tag{D.2}$$

où C_{on} est le comptage dans la zone du détecteur éclairée par la lentille, la zone sous le spot focal, et C_{off} est le comptage dans la zone du détecteur autour du spot focal. α est le rapport de la surface du détecteur éclairée par la lentille sur la surface non éclairée par la lentille :

$$\alpha = \frac{A_{on}}{A_{off}} \tag{D.3}$$

L'erreur statistique sur S peut s'écrire $\sigma(S) = \sqrt{\sigma^2(C_{on}) + \alpha^2 \sigma^2(C_{off})}$. La statistique de comptage dans les détecteurs suit une loi poissoniènne, on peut donc réécrire $\sigma(S)$:

$$\sigma(S) = \sqrt{C_{on} + \alpha^2 C_{off}} \tag{D.4}$$

Le niveau de confiance d'une détection est donné par :

$$n = \frac{C_{on} - \alpha C_{off}}{\sqrt{C_{on} + \alpha^2 C_{off}}} \tag{D.5}$$

D.1 Observation d'une raie fine

On va maintenant expliciter C_{on} et C_{off} pour l'observation d'une raie fine centrée sur l'énergie E_0 . C_{on} contient à la fois le signal et le bruit de fond induit dans le détecteur. On fait l'hypothèse que le bruit de fond astrophysique est négligeable devant le bruit fond instrumental. Le terme de signal met en jeu la surface efficace de la lentille à E_0 , noté $A_l(E_0)$, alors que le terme de bruit de fond est proportionnel à la surface sous le spot focal A_{on} . La PSF de la lentille n'étant pas un cylindre, mais plutôt une sorte de gaussiènne, on gagne à ne pas prendre tout le signal, d'où le facteur ϵ_{sf} . Une partie du signal se retrouve donc dans la zone du détecteur de surface A_{off} , ce qui explique le terme de signal dans le comptage de bruit de fond.

On obtient pour C_{on} et C_{off} :

$$C_{on} = f_n A_l(E_0) \epsilon_{sf} \epsilon_{det} \epsilon_s t_{obs} + b \Delta E A_{on} h t_{obs}$$
(D.6)

$$C_{off} = b \Delta E A_{off} h t_{obs} + (1 - \epsilon_{sf}) f_n A_l(E_0) \epsilon_{det} \epsilon_s t_{obs}$$
(D.7)

avec

- $-f_n$: le flux de la source en [ph/s/cm²],
- $-A_l$: la surface efficace de la lentille [cm²] (incluant l'absorption de la structure de la lentille),
- $-\epsilon_{det}$: l'efficacité de détection dans le pic,
- $-\epsilon_{sf}$: la fraction des coups de la PSF pris en compte (spatialement),
- $-\epsilon_s$: la fraction du pic pris en compte (spectralement),
- $-A_{on}$: la surface du détecteur prise en compte pour chercher le signal [cm²],
- $-A_{off}$: la surface du détecteur prise en compte pour estimer le bruit de fond [cm²],
- -h: l'épaisseur du détecteur [cm],
- -b: le taux de comptage de bruit de fond dans le détecteur [cps/cm³/s/keV],
- $-\Delta E$: l'intervalle d'énergie sur lequel on cherche le signal [keV],
- $-t_{obs}$: le temps d'observation [s].

Dans le cas d'une raie fine, l'intervalle d'énergie qu'il faut prendre en compte dépend de la résolution du détecteur (que l'on notera δE). Dans l'hypothèse d'une réponse gaussiènne, on prend généralement $\Delta E = 1.5 \, \delta E$, ce qui entraîne $\epsilon_s = 0.92$.

On introduit dans D.2 les équations D.7 et D.6, et on obtient l'estimation du signal :

$$S = \left(1 + \alpha - \frac{\alpha}{\epsilon_{sf}}\right) f_n A_l \epsilon_{det} \epsilon_{sf} \epsilon_s t_{obs}$$
(D.8)

$$= c_1 f_n X \tag{D.9}$$

avec

$$X = A_l \epsilon_{det} \epsilon_{sf} \epsilon_s t_{obs} \tag{D.10}$$

$$c_1 = \left(1 + \alpha - \frac{\alpha}{\epsilon_{sf}}\right) \tag{D.11}$$

où X est l'exposition effective en $[cm^2.s]$

_

A partir de l'équation D.4, l'incertitude sur le signal s'écrit :

$$\sigma(S) = \sqrt{b \Delta E A_{on} h t_{obs}(1+\alpha) + \left(\frac{\alpha^2}{\epsilon_{sf}} - \alpha^2 + 1\right) f_n A_l \epsilon_{det} \epsilon_{sf} \epsilon_s t_{obs}} \quad (D.12)$$

$$\sqrt{N} + c_2 f_n X \tag{D.13}$$

avec

$$N = b \Delta E A_{on} h t_{obs} (1 + \alpha)$$
 (D.14)

$$c_2 = \left(\frac{\alpha^2}{\epsilon_{sf}} - \alpha^2 + 1\right) \tag{D.15}$$

où N est le comptage de bruit de fond.

En utilisant l'équation D.1, on obtient une équation dont f_n est l'inconnue :

$$f_n = \frac{n\sqrt{N + c_2 f_n X}}{c_1 X}$$
(D.16)

La solution de cette équation nous donne le flux minimum de la source pour réaliser une détection à $n\sigma$:

$$f_n = \frac{n}{2c_1^2 X} \left(nc_2 + \sqrt{n^2 c_2^2 + 4c_1^2 N} \right)$$
(D.17)

La valeur du niveau de confiance est bien inférieure au nombre de coup de bruit de fond, donc on peut faire l'approximation

$$f_n \approx \frac{n}{2c_1^2 X} \left(\sqrt{n^2 c_2^2 + 4c_1^2 N} \right),$$
 (D.18)

ce qui nous permet d'effectuer le développement limité de f_n :

$$f_n \approx \frac{n\sqrt{N}}{c_1 X} \left(1 + \omega + \frac{1}{2} \omega^2 + O(\omega^4) \right) \quad \text{avec} \quad \omega = \frac{nc_2}{2c_1 \sqrt{N}} \tag{D.19}$$

Dans le cas où le rapport signal sur bruit est très faible (cas général en astronomie γ), on a $c_2 f_n X \ll N$ et $\omega \ll 1$. Les expressions D.16 et D.19 donnent alors le même résultat :

$$f_n = \frac{n\sqrt{N}}{c_1 X} \tag{D.20}$$

$$= \frac{n\sqrt{b}\Delta E h (1+\alpha)}{\left(1+\alpha - \frac{\alpha}{\epsilon_{sf}}\right) \epsilon_{det} \epsilon_s \sqrt{t_{obs}}} \frac{\sqrt{A_{on}}}{A_l \epsilon_{sf}}$$
(D.21)

On obtient la sensibilité en fonction du niveau de confiance, du bruit de fond et de l'exposition. On voit que pour augmenter la sensibilité (diminuer f_n), il faut minimiser le terme $\frac{\sqrt{A_{on}}}{A_l \epsilon_{sf}}$. Cela implique d'augmenter la surface efficace de la lentille, mais aussi d'augmenter la compacité de la PSF : il faut concentrer la plus grande fraction du flux diffracté sur la plus petite surface possible. La valeur de ϵ_{sf} est relié à A_{on} , le couple est déterminé numériquement pour optimiser la sensibilité (voir figure D.1).

 α dépend principalement de la taille du détecteur. Plus celui ci est grand et pus α tend vers 0. le tableau D.1 donne les valeurs de α et de c_1 calculées à partir des simulations montrées dans les figures D.1 et D.2. Ces deux simulations représente la PSF d'une lentille composée de cristaux de Cu(111) de 10x10 mm² et de 30 arcsec de mosaïcité, la focale

Dimensions du plan	Dépointage de	α	c_1
de détection (mm^2)	la source (arcsec)		
200 x 200	0	$6,69 \ 10^{-3}$	0,991
200 x 200	60	$0,\!120$	$0,\!973$
80 x 80	0	$4,33 \ 10^{-2}$	0,945
80 x 80	60	$2,\!03$	$0,\!538$

TAB. D.1: Exemples de calculs de α et c_1 pour deux plans focaux différents pour les cas d'une source sur l'axe et d'une source à 60 arcsec hors de l'axe.

étant de 100 m. Dans le premier cas, la source est sur l'axe de visée alors que dans le deuxième elle se trouve 60 arcsec hors de l'axe. Lorsque la source est sur l'axe, le couple $(A_{on}, \epsilon_s f)$ vaut (265.9 mm², 0.444). Pour la source hors de l'axe, ces valeurs deviennent : (4290 mm², 0.815).

On peut constater que α et de c_1 ne sont pas toujours négligeables, bien au contraire, ils participent à diminuer la sensibilité (augmenter f_n) lorsque la source est hors de l'axe et que le plan de détection est de petite taille.

D.2 Observation d'une raie élargie

Le principe du calcul de sensibilité pour une raie élargie reste le même que dans le cas d'une raie fine à deux différences près : La première est que la lentille transmet une plage d'énergie au lieu d'une valeur unique. La forme spectrale de la raie qui arrive sur le détecteur est donc la convolution de la forme initiale de la raie astrophysique par la réponse de la lentille. Si la raie n'est pas trop élargie en regard de la bande passante d'un anneau, on peut considérer la réponse de la lentille comme constante. Cependant, dans le cas de la raie à 847 keV du ⁵⁶Co, qui est supposée être élargie à 3 %, cette approximation n'est pas valable du fait de la forme de la bande passante de la lentille autour de cette énergie. Si la forme de la raie est donnée par la fonction g(E), alors le flux dans la raie est l'intégrale de cette fonction sur l'énergie :

$$f_n = \int_E g(E) dE$$

et le produit $f_n A_l$ devient :

$$f_n A_l = \int_E g(E) A_l(E) dE \tag{D.22}$$

La deuxième différence est que la largeur en énergie sur laquelle on intègre, ΔE n'est plus donnée par la résolution du détecteur mais par la largeur supposée de la raie. En conséquence, il faut estimer ϵ_s , la fraction du nombre de coups que l'on prend en compte, en fonction de la largeur et de la forme de la raie.



FIG. D.1: PSF idéale pour une source ponctuelle sur l'axe d'une lentille dont les paramètres sont : Cu(111), m=30 arcsec, taille des cristaux : 10x10 mm², f = 100 m. Le cercle noir indique le rayon optimisant la significativité de détection, son rayon est $r_{opt} = 9.2$ mm, il inclut 44.4% des coups diffractés par la lentille.

D.3 Observation d'un continuum

Le principe du calcul est similaire à celui des raies élargies sauf que le flux minimum détectable s'exprime en [ph / s / keV / cm²]. On regroupe en fait dans un même bin tous les photons compris dans un intervalle d'énergie ΔE centré sur E_0 . L'expression du signal donnée en D.12 devient (avec $\epsilon_s = 1$) :

$$\left(1 + \alpha - \frac{\alpha}{\epsilon_{sf}}\right) f_n \Delta E A_l^m \epsilon_{det} \epsilon_{sf} t_{obs}$$
(D.23)

Cependant, comme dans le cas précédent, il faut tenir compte que la transmission de la lentille n'est pas uniforme, on prend donc la moyenne de la surface efficace sur la bande ΔE :

$$A_l^m = \frac{1}{\Delta E} \int_{\Delta E} A_l(E) dE \tag{D.24}$$

En suivant le même raisonnement que précédemment, on trouve l'expression exacte de la sensibilité pour un continuum

$$f_n = \frac{n}{2\Delta E \, X \, c_1^2} \left(nc_2 + \sqrt{n^2 c_2^2 + 4c_1^2 N} \right), \tag{D.25}$$



FIG. D.2: PSF idéale pour une source ponctuelle à 60 arcsec hors de l'axe. La lentille est identique à celle utilisée pour produire la figure D.1. La surface optimisant la significativité de détection est délimitée par les traits noirs, elle est égale à 42.9 cm^2 et englobe 81.5 % des photons diffractés par la lentille.

qui comme précédemment peut se simplifier dans le cas où $c_2 f_n \Delta E X \ll N$ ou encore $\omega = \frac{nc_2}{2c_1\sqrt{N}} \ll 1$:

$$f_n = \frac{n\sqrt{N}}{\Delta E X c_1} \tag{D.26}$$

$$= \frac{n\sqrt{b}h(1+\alpha)}{\left(1+\alpha-\frac{\alpha}{\epsilon_{sf}}\right)\epsilon_{det}\sqrt{\Delta E t_{obs}}}\frac{\sqrt{A_{on}}}{A_l^m \epsilon_{sf}}$$
(D.27)

On voit tout de suite la différence majeure entre la sensibilité à un continuum et celle à une raie : dans le cas présent, le flux minimum détectable diminue en $1/\sqrt{\Delta E}$. En général, on défini $\Delta E = E/2$.

Annexe E

Rocking curves

E.1 Cu 834.31

Rocking curve obtenues à l'ILL sur l'instrument GAMS 4 en Mai 2007. La FWHM indiquée correspond à la moyenne des deux mosaïcités déduites des ajustements.





Cu834-xx non-etched (220), E = 816.0 keV, thickness = 10.8 mm, trans = 0.54 Beam size: v = 11.00 mm, h = 2.00 mm; divergence: 2.00"















Cu834-xx non-etched (220), E = 184.3 keV, thickness = 10.8 mm, trans = 0.23 Beam size: v = 11.00 mm, h = 2.00 mm; divergence: 2.00"



Cu834-xx etched (220), E = 184.3 keV, thickness = 10.3 mm, trans = 0.25 Beam size: v = 11.00 mm, h = 2.00 mm; divergence: 2.00"



E.2 Cu 834.22 et Cu 834.21



Cu_834-22 (111) , E = 489. keV, thickness = 2.3 mm, transmission = 0.84

Cu_834-22 (111), E = 489. keV, thickness = 4.4 mm, transmission = 0.72 Beam size: v = 0.60 mm, h = 0.20 mm; divergence: 0.72 arc sec.





Cu_834-22 (111) , E = 489. keV, thickness = 6.4 mm, transmission = 0.62 Beam size: v = 0.60 mm, h = 0.20 mm; divergence: 0.72 arc sec.



Cu_834-21 (111) , E = 489. keV, thickness = 7.4 mm, transmission = 0.58 Beam size: v = 0.60 mm, h = 0.20 mm; divergence: 0.72 arc sec.



Cu_834-21 (111), E = 489. keV, thickness = 9.4 mm, transmission = 0.50



Cu_834-21 (111), E = 489. keV, thickness = 11.4 mm, transmission = 0.43



Cu_834-21 (111), E = 489. keV, thickness = 14.5 mm, transmission = 0.34





Cu_834-21 (111), E = 698. keV, thickness = 9.4 mm, transmission = 0.56



Cu_834-21 (111), E = 698. keV, thickness = 11.4 mm, transmission = 0.49



Cu_834-21 (111), E = 698. keV, thickness = 14.5 mm, transmission = 0.41



Cu834-21 (220), E = 816.0 keV, thickness = 7.40 mm, transmission = 0.65 Beam size: v = 4.00 mm, h = 3.50 mm; divergence: 2.00"



Cu834-21 (220), E = 816.0 keV, thickness = 9.40 mm, transmission = 0.58



Cu834-21 (220), E = 816.0 keV, thickness = 11.40 mm, transmission = 0.52 Beam size: v = 4.00 mm, h = 3.50 mm; divergence: 2.00"

Cu834-21 (220), E = 816.0 keV, thickness = 14.50 mm, transmission = 0.43 Beam size: v = 4.00 mm, h = 3.50 mm; divergence: 2.00"



E.3 SiGe 10.3



SiGe10-3 (111), E = 517.1 keV, thickness = 28.0 mm, trans = 0.57 Beam size: v = 12.00 mm, h = 2.00 mm; divergence: 2.00"



SiGe10-3 (111), E = 184.3 keV, thickness = 28.0 mm, trans = 0.44 Beam size: v = 12.00 mm, h = 2.00 mm; divergence: 2.00"



SiGe10-3 (111), E = 816.0 keV, thickness = 28.0 mm, trans = 0.63 Beam size: v = 12.00 mm, h = 2.00 mm; divergence: 2.00''


SiGe_10-3 (111), convex side, E = 400. keV, thickness = 28.0 mm, transmission = 0.54 Beam size: v = 0.40 mm, h = 0.20 mm; divergence: 0.72 arc sec.



267



SiGe_10-3 (111), convex side, E = 700. keV, thickness = 28.0 mm, transmission = 0.61 Beam size: v = 1.00 mm, h = 0.20 mm; divergence: 0.72 arc sec.

E.4 SiGe 61 symétrique

SiGe_61sym (111), convex side, E = 297. keV, thickness = 12.1 mm, transmission = 0.74 Beam size: v = 2.00 mm, h = 0.50 mm; divergence: 1.79 arc sec.





SiGe_61sym (111), convex side, E = 489. keV, thickness = 12.1 mm, transmission = 0.78 Beam size: v = 2.00 mm, h = 0.50 mm; divergence: 1.79 arc sec. (Nov 2005)

E.5 SiGe 61 asymétrique

SiGe_61asym (111), convex side, E = 297. keV, thickness = 12.0 mm, transmission = 0.74 Beam size: v = 2.00 mm, h = 0.50 mm; divergence: 1.79 arc sec.





SiGe_61asym (111)_Z=-17, convex side, E = 489. keV, thickness = 12.0 mm, transmission = 0.78



SiGe_61asym (111)_Z=1, convex side, E = 489. keV, thickness = 12.0 mm, transmission = 0.78



SiGe_61asym (111)_Z=10, convex side, E = 489. keV, thickness = 12.0 mm, transmission = 0.78

Annexe F

Description complète de la lentille GRI

Détail anneau par anneau de la version finale de la lentille GRI telle que présentée dans le chapitre 6. La colonne marquée % indique le pourcentage de l'anneau occupé par les cristaux. Plusieurs plages d'anneaux peuvent occuper les mêmes intervalles de rayons, mais la somme de ces pourcentages n'excède jamais 80 %, le pourcentage maximum de la circonférence d'un anneau alloué aux cristaux. Le reste étant réservé pour les bras du satellites renfermant les différents modules de contrôle.

lage	n٥	matériau	h	k	ı	%	rayon (cm)	Energie (keV)	Theta_B (°)	Nb cristaux	T _{tan} (mm)	T _{rad} (mm)	T ₀ (mm)	poids (kg)	t₀ (µm)	mosaïcité (arcsec)
0	0	Cu	1	1	1	80,0	65,50	907,0	0,214712	310	10	10	7,1	1,95	50	27
0	1	Cu	1	1	1	80,0	66,55	892,7	0,214712	316	10	10	6,9	1,96	50	27
0	2	Cu	1	1	1	80,0	67,60	878,8	0,214712	320	10	10	6,8	1,95	50	27
0	3	Cu	1	1	1	80,0	68,65	865,4	0,214712	325	10	10	6,7	1,94	50	27
)	4	Cu	1	1	1	80,0	69,70	852,3	0,214712	331	10	10	6,6	1,95	50	27
0	5	Cu	1	1	1	80,0	70,75	839,7	0,214712	336	10	10	6.5	1,94	50	27
2	6	Cu	1	1	1	80.0	71.80	827.4	0.214712	340	10	10	6.4	1.93	50	27
2	7	Cu	1	1	1	80.0	72.85	815 5	0 214712	345	10	10	6.3	1 03	50	27
	~	Cu	1	1	+	00,0	72,00	013,5	0,214712	345	10	10	0,5	1,95	50	27
	0	Cu	- 1	1	1	00,0	73,90	603,9	0,214/12	351	10	10	0,2	1,95	50	21
)	9	Cu	1	1	1	80,0	74,95	792,6	0,214712	356	10	10	6,1	1,93	50	27
										3330				19,41		
1	0	Cu	2	0	0	80,0	76,00	902,6	0,24479	360	10	10	7,9	2,53	50	27
1	1	Cu	2	0	0	80,0	77,05	890,3	0,24479	366	10	10	7,8	2,54	50	27
1	2	Cu	2	0	0	80.0	78.10	878.3	0.24479	371	10	10	7.7	2.53	50	27
1	3	Cu	2	0	0	80.0	79.15	866.7	0 24479	376	10	10	7.5	2 53	50	27
1	4	Cu	2	0	0	00,0	80,20	055,7	0 24479	280	10	10	7.4	2,55	50	27
1	4	Cu	4	0	0	00,0	60,20	000,0	0,244/9	360	10	10	7,4	2,52	50	2/
	5	Cu	2	0	0	80,0	81,25	844,3	0,24479	386	10	10	7,3	2,53	50	27
1	6	Cu	2	0	0	80,0	82,30	833,5	0,24479	391	10	10	7,2	2,53	50	27
1	7	Cu	2	0	0	80,0	83,35	823,0	0,24479	396	10	10	7,1	2,52	50	27
	8	Cu	2	0	0	80,0	84,40	812,8	0,24479	401	10	10	7	2,52	50	27
1	9	Cu	2	0	0	80.0	85.45	802.8	0,24479	406	10	10	7	2.52	50	27
	1		-	~	4	0070	00,10	SOLIO	512 111 3	3933	-9		50) (1)	25 27		0.000
2	•	C 1	a c		a n	47.0	120.00	337 1	0.515024	229	150	3100	27	3.31	10	22
	0	31	1	1	1	47,0	120,90	327,1	0,515034	226	15	15	21	3,21	10	32
-	1	SI	1	1	1	47,0	122,45	323,0	0,515034	231	15	15	26,7	3,22	10	32
2	2	Si	1	1	1	47,0	124,00	318,9	0,515034	234	15	15	26,4	3,22	10	32
2	3	Si	1	1	1	46,5	125,55	315,0	0,515034	234	15	15	26,1	3,19	10	32
	4	Si	1	1	1	45,5	127,10	311,1	0,515034	232	15	15	25,8	3,12	10	32
2	5	Si	1	1	1	44.0	128.65	307.4	0.515034	227	15	15	25.5	3.02	10	32
2	6	SI	1	- î	1	43.5	130.20	303 7	0.515034	227	15	15	25.2	2 00	10	32
5	-	51	1	1	-	42.0	131,75	300,7	0,515034	2227	15	15	240	2,33	10	32
	2	51	1	5	1	42,0	131,75	300,2	0,515034	223	15	15	24,9	2,9	10	32
2	8	SI	1	1	1	41,0	133,30	296,7	0,515034	220	15	15	24,7	2,83	10	32
2	9	Si	1	1	1	40,5	134,85	293,3	0,515034	219	15	15	24,4	2,79	10	32
2	10	Si	1	1	1	39,5	136,40	289,9	0,515034	216	15	15	24,2	2,72	10	32
2	11	Si	1	1	1	38,5	137,95	286,7	0,515034	214	15	15	23,9	2,67	10	32
2	12	Si	1	1	1	37.5	139.50	283.5	0.515034	210	15	15	23.7	2.59	10	32
	13	Si	1	1	1	37.0	141.05	280.4	0.515034	210	15	15	23.4	2 57	10	32
	1.4	51	1	4	1	36.0	142,60	200,4	0,515034	207	15	15	220	2,57	10	32
2	14	51	- 53	1	-	30,0	142,00	277,5	0,515034	207	15	15	23,2	2,5	10	32
2	15	51	1	1	1	35,0	144,15	274,3	0,515034	203	15	15	22,9	2,43	10	32
2	16	Si	1	1	1	34,5	145,70	271,4	0,515034	202	15	15	22,7	2,39	10	32
2	17	Si	1	1	1	34,0	147,25	268,6	0,515034	201	15	15	22,5	2,36	10	32
2	18	Si	1	1	1	33,0	148,80	265,8	0,515034	198	15	15	22,2	2,3	10	32
>	19	Si	1	1	1	32.5	150.35	263.0	0.515034	196	15	15	22	2.25	10	32
2	20	Si	1	1	1	32.0	151 90	260.4	0.515034	195	15	15	21.8	2 22	10	32
5	21	Ci Ci	1	1	1	21.0	152.45	250,4	0 515034	101	15	15	21.6	2.15	10	22
	21	5	1	1	+	31,0	155,45	257,7	0,515034	191	15	15	21,0	2,10	10	52
4	11	51	1	T	1	30,5	155,00	255,1	0,515034	190	15	15	21,4	2,12	10	32
2	23	SI	1	1	1	30,0	156,55	252,6	0,515034	189	15	15	21,2	2,09	10	32
2	24	Si	1	1	1	29,5	158,10	250,1	0,515034	187	15	15	21	2,05	10	32
2	25	Si	1	1	1	29,0	159,65	247,7	0,515034	186	15	15	20,8	2,02	10	32
	26	Si	1	1	1	28.5	161.20	245.3	0.515034	185	15	15	20.6	1.98	10	32
>	27	Si	1	1	1	28.0	162 75	243.0	0.515034	183	15	15	20.4	1 94	10	32
8	20	6	1	4	1	27 5	164 30	240 7	0.515034	182	15	15	20.2	1 01	10	32
	20	31	1	1	-	27,5	104,30	240,7	0,515034	102	15	15	20,2	1,91	10	32
	29	SI	1	1	1	27,0	105,85	238,5	0,515034	180	15	15	20	1,88	10	32
2	30	Si	1	1	1	26,5	167,40	236,2	0,515034	178	15	15	19,8	1,84	10	32
	31	Si	1	1	1	26,0	168,95	234,1	0,515034	177	15	15	19,6	1,81	10	32
2	32	Si	1	1	1	25,5	170,50	232,0	0,515034	175	15	15	19,4	1,77	10	32
	33	Si	1	1	1	25.0	172.05	229.9	0.515034	173	15	15	19.2	1.73	10	32
2	34	SI	1	4	1	24 5	173 60	227.8	0.515034	171	15	15	19	17	10	32
2	34	5	1	1	4	24,5	175,00	227,0	0,515034	172	15	15	10.0	1.00	10	22
-	35	51	1	1	1	24,5	1/5,15	225,8	0,515034	172	15	15	10,9	1,09	10	32
8	36	Si	1	1	1	24,0	176,70	223,8	0,515034	171	15	15	18,7	1,67	10	32
2	37	Si	1	1	1	0,0	178,25	221,9	0,515034	0	15	15	18,5	0	10	32
	38	Si	1	1	1	47,0	179,80	220.0	0,515034	340	15	15	18,3	3,25	10	32
						10203/82804	CONTRACTOR (000000)	000000000000000000000000000000000000000	~~~	7757	00852			91.09		
8	0	Cu	12	1	312	33.0	120.90	491.4	0.515034	160	15	15	43	1.38	50	40
		C.,	1	+	-	22.0	120,90	405.0	0,515034	160	15	15	4,5	1 37	50	40
1	1	Cu	1	1	1	0,00	122,45	405,2	0,515034	102	10	10	4,2	1,3/	50	40
3	2	Cu	1	1	1	33,0	124,00	4/9,1	0,515034	164	15	15	4,2	1,37	50	40
3	3	Cu	1	1	1	33,0	125,55	473,2	0,515034	166	15	15	4,1	1,37	50	40
3	4	Cu	1	1	1	33,0	127,10	467,4	0,515034	168	15	15	4,1	1,37	50	40
3	5	Cu	1	1	1	33.0	128.65	461.8	0,515034	170	15	15	4	1,37	50	40
	6	Cu	1	1	1	33.0	130.20	456 3	0.515034	172	15	15	4	1 36	50	40
	7	Cu	1	1	-	33,0	131 75	450,5	0.515034	175	15	15	30	1 37	50	40
3	1	Cu	1	1	1	0,00	131,/5	450,9	0,515034	1/5	15	15	3,9	1,3/	50	40
5	8	Cu	1	1	1	33,0	133,30	445,7	0,515034	177	15	15	3,9	1,37	50	40
\$	9	Cu	1	1	1	33,0	134,85	440,6	0,515034	179	15	15	3,8	1,37	50	40
	10	Cu	1	1	1	33,0	136,40	435,6	0,515034	181	15	15	3,8	1,37	50	40
3	+ 4					1		1000 Contract (1000)	- Y A 1000 100 100 100 100 100 100 100 100					m12552221		

3	12	Cu	1 1 1	33,0	139,50	425,9	0,515034	185	15	15	3,7	1,36	50	40
3	13	Cu	1 1 1	33,0	141,05	421,2	0,515034	187	15	15	3,6	1,36	50	40
3	14	Cu	1 1 1	33,0	142,60	416,6	0,515034	189	15	15	3,6	1,36	50	40
3	15	Cu	1 1 1	33,0	144,15	412,1	0,515034	191	15	15	3,5	1,36	50	40
3	16	Cu	1 1 1	32,5	145,70	407,8	0,515034	190	15	15	3,5	1,33	50	40
3	17	Cu	1 1 1	32.0	147.25	403.5	0.515034	189	15	15	3.5	1.31	50	40
3	18	Cu	1 1 1	31.5	148,80	399.3	0.515034	189	15	15	3.4	1.3	50	40
3	19	Cu	1 1 1	31.0	150 35	395.2	0.515034	187	15	15	34	1 27	50	40
2	20	Cu		20 5	151,00	201 1	0,515034	196	15	15	2,7	1 25	50	40
2	20	Cu	1 1 1	20,5	151,90	291,1	0,515034	100	15	15	2,2	1,25	50	40
3	21	Cu	1 1 1	30,0	153,45	387,2	0,515034	185	15	15	3,3	1,23	50	40
3	22	Çu	1 1 1	29,5	155,00	383,3	0,515034	184	15	15	3,3	1,21	50	40
3	23	Cu	1 1 1	29,5	156,55	379,5	0,515034	186	15	15	3,2	1,21	50	40
3	24	Cu	1 1 1	28,5	158,10	375,8	0,515034	181	15	15	3,2	1,17	50	40
3	25	Cu	1 1 1	28,5	159,65	372,1	0,515034	183	15	15	3,2	1,17	50	40
3	26	Cu	1 1 1	28,0	161,20	368,6	0,515034	182	15	15	3,1	1,15	50	40
3	27	Cu	1 1 1	27,5	162,75	365,0	0,515034	180	15	15	3,1	1,13	50	40
3	28	Cu	1 1 1	27,5	164,30	361,6	0,515034	182	15	15	3,1	1,13	50	40
3	29	Cu	1 1 1	27,0	165,85	358,2	0,515034	180	15	15	3,1	1,11	50	40
3	30	Cu	1 1 1	26.5	167.40	354.9	0.515034	178	15	15	3	1.08	50	40
3	31	Cu	1 1 1	26.0	168.95	351.7	0.515034	177	15	15	3	1.07	50	40
3	32	Cu	1 1 1	26.0	170 50	348 5	0 515034	178	15	15	3	1.05	50	40
3	32	Cu	1 1 1	20,0	172.05	345.3	0,515034	176	15	15	20	1.04	50	40
2	33	Cu	1 1 1	25,5	172,05	343,3	0,515034	170	15	15	2,9	1,04	50	40
2	34	Cu		20,0	175,60	342,2	0,515034	176	15	15	2,9	1,04	50	40
3	35	Cu	1 1 1	24,5	1/5,15	339,2	0,515034	172	15	15	2,9	1	50	40
3	36	Cu	1 1 1	24,0	1/6,/0	336,2	0,515034	1/1	15	15	2,9	0,98	50	40
3	37	Cu	1 1 1	28,0	178,25	333,3	0,515034	201	15	15	2,8	1,15	50	40
3	38	Cu	1 1 1	24,0	179,80	330,4	0,515034	174	15	15	2,8	0,98	50	40
								6998				48,24		
4	0	Cu	1 1 1	58,5	97,65	608,4	0,341896	229	15	15	5,4	2,49	50	40
4	1	Cu	1 1 1	58,5	99,20	598,9	0,341896	233	15	15	5,3	2,49	50	40
4	2	Cu	1 1 1	58.5	100.75	589.7	0.341896	236	15	15	5.2	2,48	50	40
4	3	Cu	1 1 1	57.0	102.30	580.7	0.341896	234	15	15	5.2	2.42	50	40
4	4	Cu	1 1 1	55.5	103.85	572 1	0 341896	231	15	15	5.1	2 35	50	40
4	5	Cu	1 1 1	54.0	105,05	563.6	0 341896	228	15	15	5	2 28	50	40
-	6	Cu		57,0	105,40	505,0	0,341090	220	15	15	4.0	2,20	50	40
7	2	Cu		55,0	100,95	555,5	0,341896	221	15	15	4,9	2,24	50	40
4	~	Cu	1 1 1	51,5	106,50	547,5	0,341896	224	15	15	4,6	2,17	50	40
4	8	Cu	1 1 1	50,5	110,05	539,8	0,341896	223	15	15	4,8	2,13	50	40
4	9	Cu	1 1 1	49,0	111,60	532,3	0,341896	220	15	15	4,7	2,07	50	40
4	10	Cu	1 1 1	48,5	113,15	525,0	0,341896	220	15	15	4,6	2,04	50	40
4	11	Cu	$1 \ 1 \ 1$	47,0	114,70	517,9	0,341896	216	15	15	4,5	1,97	50	40
4	12	Cu	1 1 1	45,5	116,25	511,0	0,341896	212	15	15	4,5	1,9	50	40
4	13	Cu	1 1 1	44,5	117,80	504,3	0,341896	210	15	15	4,4	1,86	50	40
4	14	Cu	1 1 1	52,5	119,35	497,8	0,341896	252	15	15	4,3	2,2	50	40
				8 936430300	V10230000000	05053539		3395			2042500	33,09		
5	0	Cu	2 2 0	26.0	105.40	920.4	0.341896	110	15	15	10.4	2.3	50	27
5	1	Cu	2 2 0	27.0	106.95	907.1	0.341896	116	15	15	10.3	2.39	50	27
5	2	Cu	2 2 0	28.5	108 50	894 1	0 341896	124	15	15	10.1	2 53	50	27
5	2	Cu	2 2 0	20,5	110.05	001 5	0.341906	120	15	15	10,1	2,55	50	27
F	4	Cu	2 2 0	23,5	111,60	860.2	0,341806	120	15	15	0.0	2,02	50	27
5	7	Cu	2 2 0	51,0	112,00	057.4	0,341090	139	15	15	9,9	2,70	50	2/
2	5	Cu	2 2 0	2/,5	113,15	857,4	0,341896	125	15	15	9,8	2,45	50	21
Б	6	Cu	2 2 0	21,0	114,70	845,8	0,341896	96	15	15	9,7	1,86	50	21
5	7	Cu	220	16,0	116,25	834,5	0,341896	74	15	15	9,6	1,42	50	27
5	8	Cu	220	7,0	117,80	823,5	0,341896	33	15	15	9,4	0,63	50	27
5	9	Cu	220	25,0	119,35	812,9	0,341896	120	15	15	9,3	2,25	50	27
								1067				21,21		
6	0	Ge	2 2 0	1,5	127,10	487,7	0,444007	7	15	15	9,4	0,08	50	40
6	1	Ge	2 2 0	3,0	128,65	481,9	0,444007	15	15	15	9,3	0,17	50	40
6	2	Ge	2 2 0	3,5	130,20	476,1	0,444007	18	15	15	9,2	0,2	50	40
6	3	Ge	2 2 0	5,0	131,75	470,5	0,444007	26	15	15	9	0,28	50	40
6	4	Ge	2 2 0	6.0	133.30	465.1	0.444007	32	15	15	8.9	0.34	50	40
6	5	Ge	2 2 0	6.5	134.85	459.7	0.444007	35	15	15	8.8	0.37	50	40
6	6	Ge	2 2 0	7.5	136.40	454.5	0 444007	41	15	15	8.7	0.43	50	40
6	7	Co	2 2 0	7.5	137.05	449 4	0,444007	41	15	15	8.6	0,43	50	40
6	6	Co	2 2 0	6.0	120 50	444.4	0,444007	33	15	15	0,0	0,72	50	40
E	0	Co	2 2 0	5,0	141 05	430 E	0,444007	20	15	15	8.4	0.24	50	40
0	9	Ge	2 2 0	5,0	141,05	439,5	0,444007	28	15	15	0,4	0,28	50	40
0	10	Ge	2 2 0	4,5	142,60	434,/	0,444007	25	15	15	8,3	0,25	50	40
6	11	Ge	220	4,0	144,15	430,1	0,444007	23	15	15	8,2	0,23	50	40
6	12	Ge	220	3,0	145,70	425,5	0,444007	17	15	15	8,1	0,16	50	40
6	13	Ge	220	2,0	147,25	421,0	0,444007	11	15	15	8	0,11	50	40
6	14	Ge	220	2,0	148,80	416,6	0,444007	11	15	15	7,9	0,1	50	40
6	15	Ge	2 2 0	1,5	150,35	412,3	0,444007	9	15	15	7,8	0,08	50	40
6	16	Ge	2 2 0	1,5	151,90	408,1	0,444007	9	15	15	7.7	0,08	50	40
6	17	Ge	2 2 0	1,5	153,45	404.0	0,444007	9	15	15	7,6	0,08	50	40
6	18	Ge	2 2 0	4.0	155.00	400.0	0,444007	24	15	15	7.5	0,22	50	40
NSE03	1000	1000		1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1	000000 100000		001010000000000000000000000000000000000	414	0.605	20000	10000	4.22	10000	
7	0	Ge	2 2 0	28.5	117.80	526.2	0.341896	135	15	15	10.2	1.65	50	40
7	1	Co	2 2 0	2 5	110 35	510 4	0 341906	11	15	15	10.1	0.13	50	40
10	+	00	2 2 0	210	119,00	519,4	0,541090	11	10	10	10,1	0,10	50	40

										146				1,78		
8	0	Ge	3	1	1	5,0	145,70	498,9	0,475082	29	15	15	10	0,35	50	40
8	1	Ge	3	1	1	12,0	147,25	493,7	0,475082	71	15	15	10	0,85	50	40
8	2	Ge	3	1	1	13,5	148,80	488,5	0,475082	81	15	15	10	0,97	50	40
8	3	Ge	3	1	1	15,0	150,35	483,5	0,475082	90	15	15	10	1,08	50	40
8	4	Ge	3	1	1	16,0	151,90	478,6	0,475082	97	15	15	10	1,16	50	40
8	5	Ge	3	1	1	13,0	153,45	473,7	0,475082	80	15	15	10	0,96	50	40
8	6	Ge	3	1	1	7,0	155,00	469,0	0,475082	43	15	15	10	0,52	50	40
8	7	Ge	3	1	1	7,0	156,55	464,3	0,475082	44	15	15	10	0,53	50	40
8	8	Ge	3	1	1	4,5	158,10	459,8	0,475082	28	15	15	10	0,34	50	40
8	9	Ge	3	1	1	2,5	159,65	455,3	0,475082	16	15	15	10	0,19	50	40
8	10	Ge	3	1	1	1,5	161,20	451,0	0,475082	9	15	15	10	0,11	50	40
8	11	Ge	3	1	1	1,5	162,75	446,7	0,475082	9	15	15	10	0,11	50	40
8	12	Ge	3	1	1	2,0	164,30	442,4	0,475082	13	15	15	10	0,16	50	40
8	13	Ge	3	1	1	3,5	165,85	438,3	0,475082	23	15	15	10	0,28	50	40
										633				7,61		
9	0	Ge	4	0	0	5,5	168,95	518,9	0,515034	37	15	15	8	0,35	50	40
9	1	Ge	4	0	0	9,5	170,50	514,2	0,515034	65	15	15	8	0,62	50	40
9	2	Ge	4	0	0	11,0	172,05	509,6	0,515034	76	15	15	8	0,73	50	40
9	3	Ge	4	0	0	9,5	173,60	505,0	0,515034	66	15	15	8	0,63	50	40
9	4	Ge	4	0	0	6,5	175,15	500,6	0,515034	45	15	15	8	0,43	50	40
9	5	Ge	4	0	0	2,5	176,70	496,2	0,515034	17	15	15	8	0,16	50	40
9	6	Ge	4	0	0	25,0	178,25	491,9	0,515034	179	15	15	8	1,72	50	40
9	7	Ge	4	0	0	2,0	179,80	487,6	0,515034	14	15	15	8	0,13	50	40
										499				4,77		