



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI FERRARA

---

Tesi di laurea in Fisica

**Lenti di Laue per applicazioni astrofisiche.  
Ottimizzazione del campo di vista e  
studio della risoluzione angolare per  
sorgenti fuori asse.**

Relatore:

Prof. Piero Rosati

II Relatore:

Dott. Enrico Virgilli

Laureando:

Giovanni Volta

---

Anno Accademico 2015/2016





UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI FERRARA

---

Tesi di laurea in Fisica

**Lenti di Laue per applicazioni astrofisiche.  
Ottimizzazione del campo di vista e  
studio della risoluzione angolare per  
sorgenti fuori asse.**

Relatore:

Prof. Piero Rosati

II Relatore:

Dott. Enrico Virgilli

Laureando:

Giovanni Volta

---

Anno Accademico 2015/2016



# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>1 Principi base delle lenti di Laue</b>	<b>3</b>
1.1 Cenni sulla struttura cristallina . . . . .	3
1.1.1 Disposizione periodica degli atomi . . . . .	3
1.1.2 Posizione e orientamento dei piani cristallini . . . . .	4
1.2 Diffrazione e diffusione dei cristalli . . . . .	5
1.2.1 Diffrazione dei cristalli . . . . .	5
1.2.2 Diffrazione in trasmissione dei cristalli . . . . .	6
1.3 Cristalli a mosaico . . . . .	11
<b>2 Lenti di Laue</b>	<b>17</b>
2.1 Concetto di Lente di Laue . . . . .	17
2.2 Geometria delle lenti di Laue e principali proprietà . . . . .	17
2.2.1 Sistema di riferimento cilindrico . . . . .	18
2.2.2 Diffrazione da parte di cristalli a mosaico . . . . .	19
2.3 Posizionamento dei cristalli sulla lente . . . . .	21
2.3.1 Profili delle lenti . . . . .	21
2.3.2 Disposizione dei cristalli . . . . .	22
2.3.3 Disposizione geometrica a spirale . . . . .	23
<b>3 Software di simulazioni delle lenti di Laue</b>	<b>27</b>
3.1 Laue Lens Libraries . . . . .	27
3.1.1 LLL: FISICA, COSTANTI . . . . .	28
3.1.2 LLL: SORGENTE . . . . .	28
3.1.3 LLL: CRISTALLO . . . . .	28
3.1.4 LLL: LENTI . . . . .	29
3.1.5 LLL: RIVELATORE . . . . .	29
3.2 Esempi delle potenzialità del software . . . . .	29
<b>4 Studio della risoluzione angolare e del campo di vista di una lente di Laue</b>	<b>37</b>
4.1 Introduzione . . . . .	37
4.1.1 Parametri mantenuti costanti in tutte le simulazioni . . . . .	38
4.2 Parametri che influenzano la distribuzione dei fotoni sul piano del rivelatore . . . . .	39
4.2.1 Dipendenza dall'energia . . . . .	39
4.2.2 Dipendenza dalle dimensioni dei cristalli . . . . .	41

---

4.3	Analisi della PSF per sorgenti fuori asse . . . . .	48
4.3.1	Ottimizzazione del campo di vista e della risoluzione an- golare . . . . .	50
4.4	Stima dell'indice di asimmetria delle distribuzioni di fotoni . . .	53
	<b>Conclusioni</b>	<b>57</b>

# Elenco delle figure

1.1	Struttura cristallina . . . . .	4
1.2	Piani di Miller . . . . .	5
1.3	Legge di Bragg . . . . .	6
1.4	Metodo di Laue . . . . .	7
1.5	Sfera di Ewald . . . . .	10
1.6	Cristallo a mosaico . . . . .	11
1.7	Geometria in trasmissione . . . . .	12
1.8	Cristallo curvo . . . . .	14
2.1	Lente di Laue . . . . .	18
2.2	Sistema di riferimento . . . . .	19
2.3	Disposizione dei cristalli . . . . .	22
2.4	Spirale di Archimede . . . . .	24
3.1	Diagramma del software LLL . . . . .	27
3.2	Confronto fra le figure di diffrazione prodotte da un cristallo piatto e da uno curvo . . . . .	30
3.3	Figura di diffrazione da un cristallo curvo . . . . .	31
3.4	Dimensione della sorgente . . . . .	32
3.5	Geometria ad anello . . . . .	33
3.6	Confronto fra le PSF ottenute con cristalli piatti o cristalli curvi .	34
3.7	Dipendenza della PSF dalla posizione del rivelatore . . . . .	34
3.8	Configurazioni per lente di Laue: anelli e petalo . . . . .	35
4.1	Schema illustrativo di lente di Laue . . . . .	40
4.2	Confronto fra immagini di diffrazione per sorgenti in asse e fuori asse per cristalli perfetti . . . . .	40
4.3	Confronto fra immagini di diffrazione per sorgenti in asse e fuori asse per cristalli a mosaico . . . . .	40
4.4	Schema illustrativo di una sezione di anello . . . . .	41
4.5	Influenza della dimensione radiale sulla PSF . . . . .	42
4.6	Influenza della dimensione tangenziale sui diffratti . . . . .	43
4.7	Influenza della dimensione tangenziale sui profili delle PSF . . . .	44
4.8	Influenza della dimensione tangenziale sul'HPR . . . . .	44
4.9	Schema esemplificativo per la diffrazione dei cristalli a mosaico .	45
4.10	PSF in funzione della mosaicità dei campioni . . . . .	46
4.11	Profilo $x$ della PSF per cristalli a mosaico: dipendenza dalla mosaicita . . . . .	47

---

4.12	Dipendenza dell'HPR dalla mosaicitá . . . . .	47
4.13	Confronto fra PSF con sorgente in asse e fuori asse . . . . .	48
4.14	Confronto fra i profili delle PSF prodotti da cristalli perfetti per sorgenti in asse e fuori asse . . . . .	48
4.15	Schema esemplificativo per il confronto fra sorgenti in asse e fuori asse per cristalli perfetti . . . . .	49
4.16	Schema illustrativo per il confronto fra sorgenti in asse e fuori asse per cristalli a mosaico . . . . .	50
4.17	Influenza del fuori asse sull'HPR . . . . .	51
4.18	influenza del fuori asse sull'immagini di diffrazione . . . . .	52
4.19	Asimmetria dei profili delle PSF . . . . .	54
4.20	Sensibilitá dei telescopi . . . . .	57
4.21	Immagine di piú sorgenti . . . . .	59



# Elenco delle tabelle

2.1	Profilo sferico di una lente di Laue . . . . .	21
4.1	HPR in funzione della dimensione dei cristalli . . . . .	53
4.2	Risoluzione angolare e FOV in funzione delle dimensione dei cristalli	55



# Introduzione

Nel 1962 venne scoperta la prima sorgente X extrasolare (Sco X-1) e da allora l'Astronomia X ha fatto grandi progressi con l'avvento di strumentazione sempre piú sensibile e con risoluzione angolare sempre migliore. Le sorgenti di raggi X sono di varia natura nell'Universo e per questo motivo questa frazione dello spettro elettromagnetico é importante per studiare fenomeni diversi fra loro e altamente energetici quali i resti di supernova, i lampi di raggi gamma, il fondo cosmico X diffusi, o l'emissione continua provocata dall'accrescimento di materia su sistemi binari ospitanti oggetti compatti come stelle di neutroni o buchi neri. Dagli anni sessanta e per tutti i 20 anni successivi le osservazioni venivano fatte con voli da pallone aerostatico. Successivamente, la comunitá scientifica ha iniziato a utilizzare veri e propri telescopi spaziali dotati di rivelatori di radiazione con conseguente miglioramento delle prestazioni.

Gli elementi essenziali per una missione di successo sono la presenza di rivelatori di radiazione in un ampio range spettrale e la presenza di ottiche in grado di permettere la capacita di produrre immagini del cielo nella banda X e gamma. Una delle proprietá piú importanti, derivate dalle due caratteristiche precedenti, é quella di avere una buona risoluzione angolare. Il parametro che esprime la bonatá della risoluzione angolare in ottica é la larghezza del segnale a metá potenza (detto half energy width, HEW o half power radius, HPR) cioé il diametro o il raggio della regione nella quale vengono raccolti il 50% dei fotoni focalizzati.

Un telescopio per raggi X deve avere una area di raccolta piu alta possibile, per massimizzare il numero di fotoni raccolti e focalizzati. Il parametro detto area efficace rende conto di tale proprietá ed é data dal prodotto dell'area geometrica di raccolta per l'efficienza della focalizzazione e l'efficienza di rivelazione dei detector usati.

Telescopi focalizzanti per basse e medie energie (da qualche keV fino a circa 70-80 keV) sono nati fino dagli albori dell'astronomia X. In un famoso articolo del 1960 Riccardo Giacconi (poi premio Nobel per la Fisica nel 2002 per il ruolo pionieristico che ebbe nella nascita della astronomia X) e Bruno Rossi [1] proposero l'uso di paraboloidi per concentrare i raggi X. Per queste energie si possono impiegare le ottiche ad incidenza radente (mirror o super-mirrors) che sfruttano specchi fatti di materiale ad alto valore di Z (per i quali l'angolo di incidenza é meno radente e quindi offre un area di raccolta maggiore anche se un alto Z provoca un piu alto assorbimento della radiazione).

L'astronomia dei raggi X duri e raggi Gamma é invece penalizzata dall'alta energia di questi fotoni che non possono essere focalizzati con le tecniche sopra descritte. Ad energie sopra i 100 keV oggi non sono presenti telescopi focalizzanti ma strumentazione a vista diretta con collimatori meccanici, che offrono un

ampio campo di vista ma una risoluzione angolare modesta (per esempio IBIS a bordo di INTEGRAL ha un FOV =  $9^\circ \times 9^\circ$  e una risoluzione angolare di  $\sim 15'$ ).

Questa Tesi é volta ad uno studio preliminare del campo di vista e delle possibili prestazioni di una lente di Laue quando le sorgenti osservate sono in asse e fuori asse. Lo studio quindi é di fondamentale importanza per definire il campo di vista di un possibile strumento che adotti ottiche focalizzanti in configurazione Laue. Nel primo capitolo vengono dati i fondamenti di cristallografia su cui poggia la teoria della diffrazione alla base del concetto di lente Laue. Nel secondo capitolo vengono descritte le applicazioni dei concetti base allo sviluppo tecnologico. Verranno descritte le geometrie applicabili per sviluppare una lente di Laue. Nel capitolo 3 sará descritto il software di simulazione sviluppato per descrivere le proprietá di una lente di Laue. Tale software ha avuto ed ha ancora una grande importanza perché in primo luogo permette di confrontare i risultati sperimentali con le simulazioni e inoltre permette di visualizzare i risultati che si otterrebbero scegliendo opportunamente tutti i parametri che governano un'ottica. Nel quarto capitolo ci soffermeremo sulle simulazioni fatte sia per sorgenti in asse che per sorgenti fuori asse. Infine trarremo le conclusioni che saranno anche uno spunto per descrivere nuove possibili geometrie per migliorare sia il campo di vista, sia la risoluzione angolare di una possibile missione basata sulle lenti di Laue.

# Capitolo 1

## Principi base delle lenti di Laue

*In questo capitolo troviamo le basi teoriche con cui sono costruite le lenti di Laue. Di seguito é riportata una panoramica approfondita su tutti i principi necessari per comprendere appieno la fisica che regola il processo di diffrazione. Partendo dalla descrizione di un cristallo, passando per la diffrazione in regime di riflessione e trasmissione arriveremo a definire le proprietá dei cristalli a mosaico, concentrandoci anche sui cristalli curvi.*

### 1.1 Cenni sulla struttura cristallina

#### 1.1.1 Disposizione periodica degli atomi

Agli inizi del secolo scorso lo studio dei cristalli riguardava solamente la loro forma esterna e le loro caratteristiche geometriche. Dopo il 1910 i fisici si interessarono a fondo ai modelli atomici dei cristalli, ciò avvenne in seguito alla scoperta della diffrazione dei raggi X da parte di quest'ultimi e alla pubblicazione di una serie di calcoli e previsioni delle proprietá cristalline [2].

La cristallinitá di un materiale é una caratteristica a livello microscopico per cui gli atomi sono disposti in una matrice periodica nello spazio, chiamata *Reticolo di Bravais*. Il Reticolo di Bravais é una matrice infinita di punti con ugual disposizione, indipendente dal punto di osservazione. Ogni punto del reticolo puó essere individuato mediante tre vettori primitivi **a**, **b**, **c**:

$$\vec{R} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad (1.1)$$

dove  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  sono numeri reali.

Spesso si usano i vettori primitivi per definire gli *assi cristallografici* **a**, **b**, **c**.. Si possono usare assi non primitivi se essi risultano piú convenienti o piú semplici. Gli assi cristallografici **a**, **b**, **c**, formano i tre spigoli adiacenti di un parallelepipedo. Se vi sono punti reticolari soltanto sui vertici del parallelepipedo, esso é un parallelepipedo primitivo.

Un reticolo é una astrazione matematica in cui la struttura cristallina si forma soltanto quando a ciascun punto reticolare corrisponde identicamente una base di atomi. La relazione logica é:

$$\text{reticolo} + \text{base} = \text{struttura cristallina}$$



Figura 1.1: Rappresentazione di una struttura cristallina in cui sono evidenziati reticolo e base.

Attribuiamo a ciascun punto reticolare una base di atomi (Fig. 1.1). Tutte le basi sono identiche per composizione, disposizione e orientamento.

Il parallelepipedo definito dagli assi primitivi  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  é detto *cella primitiva*, questa appartiene al gruppo delle celle unitarie: la particolaritá di questo sottogruppo la troviamo nel loro volume, in quanto é il piú piccolo fra tutti i tipi di celle. Le celle unitarie sono definite in modo che possano riempire tutto lo spazio sotto l'azione di opportune operazioni di traslazione del cristallo.

### 1.1.2 Posizione e orientamento dei piani cristallini

La posizione e l'orientamento di un piano atomico di un cristallo sono determinati da tre punti qualsiasi non allineati del piano. Se ciascuno dei punti giace su un asse cristallografico, il piano puó essere individuato mediante le posizioni dei punti lungo gli assi per mezzo delle costanti reticolari. É utile per l'analisi della struttura specificare l'orientamento di un piano mediante gli *indici di Miller*. Gli indici di Miller sono determinati come segue:

1. Trovare le intercetta sugli assi  $a$ ,  $b$ ,  $c$  usando le costanti reticolari. Gli assi possono essere primitivi o non primitivi.
2. Si prendono i reciproci di questi numeri e quindi si riducono a tre interi nello stesso rapporto, di solito gli interi piú piccoli. Il risultato é racchiuso tra parentesi:  $(hkl)$ .

Gli indici  $(hkl)$  possono denotare sia un singolo piano sia un gruppo di piani paralleli (Fig. 1.2). Se un piano taglia una asse dalla parte negativa rispetto all'origine, l'indice corrispondente é negativo ed é indicato ponendo un segno meno sopra l'indice stesso:  $(\bar{h}kl)$ . Le facce del cubo in un cristallo cubico sono  $(100)$ ,  $(010)$ ,  $(001)$ ,  $(\bar{1}00)$ ,  $(0\bar{1}0)$  e  $(00\bar{1})$ . Piani ad esse equivalenti per simmetria si possono denotare con parentesi graffe che racchiudono gli indici di Miller; il gruppo delle facce del cubo é  $100$ .

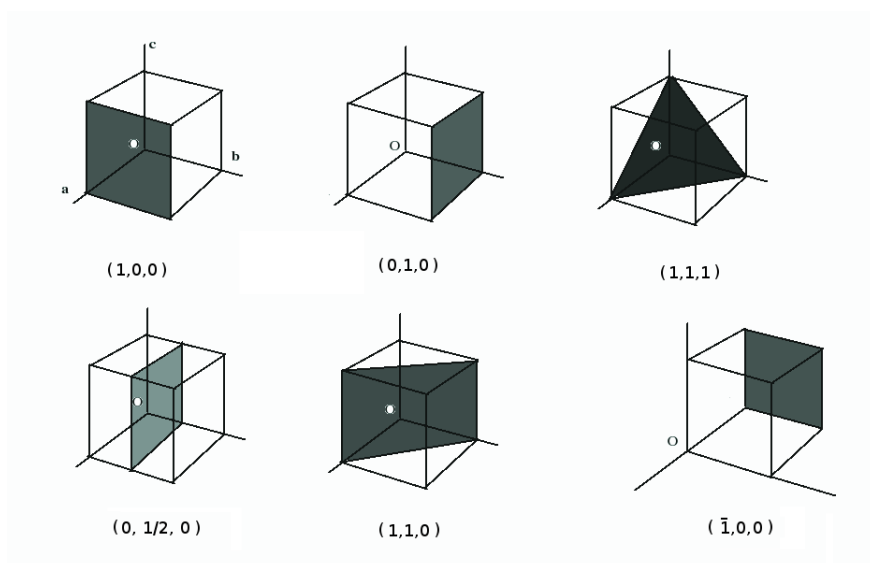


Figura 1.2: Piani con differenti indici di Miller in cristalli cubici.

Per convenzione, mentre con le parentesi tonde ci si riferisce ad un piano, utilizzando le parentesi quadre  $[hkl]$  ci si riferisce al vettore perpendicolare ad un piano o ad una famiglia di piani di diffrazione. Nei cristalli cubici la direzione  $[hkl]$  è sempre perpendicolare al piano  $[hkl]$  che ha gli stessi indici, però questo non è in generale vero per altri sistemi cristallografici.

## 1.2 Diffrazione e diffusione dei cristalli

Per esplorare la struttura dei cristalli si usa la diffrazione di onde che interagiscano con gli atomi e che hanno una lunghezza d'onda confrontabile con la separazione interatomica ( $10^{-8}$  cm) dei cristalli. La sonda più conveniente da usare sono i raggi X, in quanto hanno l'energia necessaria per attraversare il cristallo interagendo con i suoi atomi.

### 1.2.1 Diffrazione dei cristalli

In cristallografia si studia la struttura cristallina mediante la diffrazione di fotoni e onde elettromagnetiche. L'angolo sotto il quale un'onda è diffratta da un cristallo dipende soprattutto dalla struttura del cristallo e dalla lunghezza d'onda della radiazione. L'energia di un fotone è legata alla sua lunghezza d'onda:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.2)$$

Rispettivamente si indica con  $h$  la costante di Planck pari a  $6.626 \times 10^{-34}$   $J \cdot s$ ,  $c$  è la velocità della luce ( $3 \times 10^8$   $m/s$ ),  $\nu$  è la frequenza dell'onda elettromagnetica associata, come  $\lambda$  è la sua lunghezza d'onda.

Quando un'onda elettromagnetica incide su di un cristallo, se questa ha una lunghezza d'onda confrontabile con il passo reticolare o più piccola, si possono

generare uno o piú fasci diffratti, in direzioni molto diverse dalla direzione incidente. Tale fenomeno é stato formalizzato da W.H. Bragg e W.L. Bragg nel 1913.

### Legge di Bragg

Consideriamo una serie di piani reticolari paralleli separati dalla stessa distanza  $d_{hkl}$ , assumiamo inoltre che siano semi riflettenti. Prendiamo una radiazione incidente sul piano del foglio (Fig. 1.3). La differenza di cammino ottico  $2l$  per raggi riflessi da piani adiacenti é  $2d_{hkl} \sin \theta_B$  dove  $\theta_B$  é misurato dal piano. Si ha interferenza *costruttiva* della radiazione riflessa dai piani successivi ogni volta che la differenza di cammino ottico é un numero  $n$  intero di lunghezze d'onda  $\lambda$  [3]:

$$2d_{hkl} \sin \theta_B = n\lambda \quad (1.3)$$

Questa legge prende il nome di *legge di Bragg*.

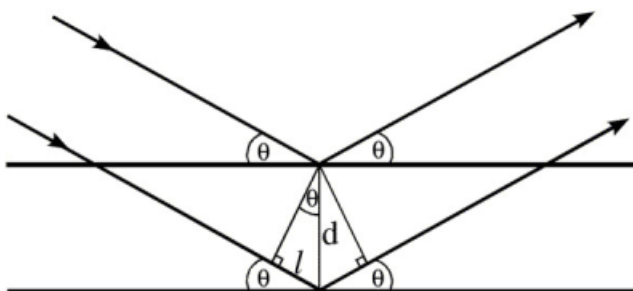


Figura 1.3: Figura esplicativa de processo di diffrazione in cui le riflessioni da parte di piani reticolari successivi per un'onda incidente produrranno interferenza costruttiva solo se é verificata la legge di Bragg.

### 1.2.2 Diffrazione in trasmissione dei cristalli

La Eq. 1.3 richiede che  $\theta$  e  $\lambda$  siano legati tra loro: *raggi X di lunghezza d'onda  $\lambda$  che incidono su di un cristallo tridimensionale sotto un angolo d'incidenza arbitrario non saranno in generale riflessi*. Questo viene eseguito sperimentalmente facendo variare la lunghezza d'onda e l'angolo d'incidenza, anche se si preferisce variare soltanto  $\theta$ .

Un metodo utilizzato per studiare le strutture cristalline, che prende il nome dal suo ideatore, é il *metodo di Laue* in cui un pennello di radiazione di radiazione X policromatica incide su un monocristallo (Fig. 1.4). Il cristallo seleziona e *diffrange* i valore discreti di  $\lambda$  per cui esistono piani con separazione  $d$  e angoli di incidenza  $\theta$  che soddisfano la legge di Bragg.

### Ampiezza dell'onda diffusa

La diffusione da parte di cristalli di onde elettromagnetiche prevede l'interazione di quest'ultime con la distribuzione spaziale di elettroni propri delle celle unitarie.



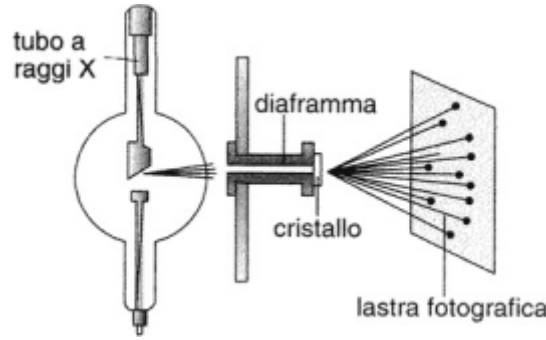


Figura 1.4: La tecnica Laue consiste nell'inviare su un cristallo un fascio di raggi X policromatico e nel registrare radiazione di ritorno.

Consideriamo un'onda elettromagnetica con vettore d'onda  $\mathbf{k}$ , lunghezza d'onda  $\lambda=2\pi/k$ , di pulsazione  $\omega$  e di ampiezza:

$$F(x) = F_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} \quad (1.4)$$

incidente su un cristallo piccolo avente assi primitivi del reticolo spaziale  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  e  $M^3$  celle primitive.

Poniamo il cristallo nel fascio, con l'origine  $O$  scelta in un punto qualunque entro il cristallo. Al tempo  $t=0$ , l'ampiezza dell'onda incidente in un punto  $\rho$  nel cristallo é

$$F(\rho) = F_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\rho)} \quad (1.5)$$

L'atomo con raggio posizione  $\rho$  diffonderá una parte della radiazione al di fuori del fascio incidente. In un punto  $\mathbf{R} = \rho + \mathbf{r}$  fuori dal cristallo, l'ampiezza dell'onda avrá fase:

$$e^{i(\mathbf{k}\cdot\rho)} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} = e^{i(\mathbf{k}\cdot\rho+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \quad (1.6)$$

Se  $\mathbf{R}$  é molto piú grande delle dimensioni del cristallo:

$$e^{i(\mathbf{k}\cdot\rho+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R})} \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\rho} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (1.7)$$

Gli elettroni sono la causa della diffusione; é ragionevole pensare che l'ampiezza dell'onda diffusa da un elemento di volume del cristallo sia proporzionale alla densità di elettroni  $n(\rho)$  nell'elemento di volume. Cosí l'ampiezza della radiazione diffusa dal cristallo e ricevuta in un punto esterno  $\mathbf{R}$  sarà proporzionale all'integrale:

$$\int dV n(\rho) e^{i\mathbf{k}\cdot\rho+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R} - i\mathbf{k}\cdot\rho \cos(\rho,\mathbf{R})} \quad (1.8)$$

Il termine  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$  é trascurabile in quanto é costante su tutto il volume [2]. Possiamo scrivere l'argomento dell'esponenziale anche come:

$$i\mathbf{k}\cdot\rho - i\mathbf{k}\cdot\rho \cos(\rho,\mathbf{R}) \equiv i\rho \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \equiv -i\rho \cdot \Delta\mathbf{k} \quad (1.9)$$

dove  $\mathbf{k}'$  é il vettore d'onda nella direzione di diffusione  $\mathbf{R}$ , e

$$\Delta \mathbf{k} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad (1.10)$$

é la differenza fra il vettore d'onda diffuso  $\mathbf{k}'$  e il vettore d'onda iniziale  $\mathbf{k}$ .

In un cristallo finito avremmo dei centri di diffusione puntiformi identici in ogni punto reticolare

$$\boldsymbol{\rho} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c} \quad (1.11)$$

dove  $m, n, p$  sono interi che vanno da  $[0;M-1]$  così da avere un cristallo con  $M^3$  celle primitive. Allora l'Eq. 1.8 si riduce a una somma discreta sui punti reticolari. L'ampiezza totale della radiazione diffusa vista in  $\mathbf{R}$  sarà proporzionale a [2]:

$$\mathbf{A} \equiv \sum_{\boldsymbol{\rho}} e^{(-i\boldsymbol{\rho} \cdot \Delta \mathbf{k})} = \left( \sum_m e^{-im(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})} \right) \left( \sum_n e^{-imn\mathbf{b} \cdot \Delta \mathbf{k}} \right) \left( \sum_p e^{-ip(\mathbf{c} \cdot \Delta \mathbf{k})} \right) \quad (1.12)$$

Viene naturale ora definire l'intensità dell'onda diffusa in quanto é uguale al quadrato delle ampiezza d'onda:

$$|\mathbf{A}|^2 = \left| \sum_m e^{-im(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})} \right|^2 \dots \left| \sum_n e^{-imn\mathbf{b} \cdot \Delta \mathbf{k}} \right|^2 \dots \left| \sum_p e^{-ip(\mathbf{c} \cdot \Delta \mathbf{k})} \right|^2 \quad (1.13)$$

Usando la serie:

$$\sum_{m=0}^{M-1} x^m = \sum_{m=0}^{\infty} x^m - \sum_{m=M}^{\infty} x^m = \frac{1}{1-x} - \frac{x^M}{1-x} \quad (1.14)$$

vediamo che l'intensità diffusa implica il prodotto di tre fattori, ciascuno della forma

$$\left| \sum_m e^{-im(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})} \right|^2 = \frac{\sin^2(\frac{1}{2}M(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k}))}{\sin^2(\frac{1}{2}(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k}))} \quad (1.15)$$

Il massimo assoluto lo si trova quando

$$\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi q \quad (1.16)$$

dove  $q$  é un intero.

Per avere un fascio intensamente diffratto devono essere soddisfatte simultaneamente le *equazioni di Laue* per valori interi di  $q, r, s$ :

$$\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi q \quad \mathbf{b} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi r \quad \mathbf{c} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi s \quad (1.17)$$

Queste equazioni possono essere risolte per il vettore  $\Delta \mathbf{k}$  definito dall'Eq. 1.10; come la legge di Bragg, le equazioni di Laue sono condizioni necessarie per un fascio diffratto. La soluzione dell'Eq. 1.17 é particolarmente semplice se gli assi del cristallo  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  sono tra di loro ortogonali, per cui:

$$\Delta \mathbf{k} = 2\pi \left( \frac{q}{a} \hat{\mathbf{a}} + \frac{r}{b} \hat{\mathbf{b}} + \frac{s}{c} \hat{\mathbf{c}} \right) \quad (1.18)$$

Se gli assi del cristallo non sono ortogonali, per determinare la soluzione abbiamo bisogno del *reticolo reciproco* [2].

### Reticolo reciproco

Consideriamo l'espressione:

$$\Delta \mathbf{k} = q\mathbf{A} + r\mathbf{B} + s\mathbf{C} \quad (1.19)$$

dove  $q, r, s$  sono degli interi e  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$  sono dei vettori da determinare, questa sarà soluzione dell'Eq. 1.17 scegliendo:

$$\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}; \quad \mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}; \quad \mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}; \quad (1.20)$$

Questi sono i *vettori fondamentali del reticolo reciproco*. Essi sono ortogonali solo se lo sono  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ .

Ogni struttura cristallina ha due importanti reticoli associati ad essa, il reticolo cristallino e il reticolo reciproco, questi sono legati dall'Eq. 1.17: quando ruotiamo un cristallo, ruotiamo entrambi i reticoli. Il reticolo cristallino è un reticolo nello spazio reale in cui i vettori hanno dimensioni di una lunghezza, invece il reticolo reciproco appartiene allo spazio di Fourier in cui i vettori hanno dimensione dell'inverso di una lunghezza [2].

Se i punti  $\boldsymbol{\rho}$  del reticolo cristallino sono dati dall'Eq. 1.11, similmente definiamo come *punti del reticolo reciproco* o *vettori del reticolo reciproco*  $\mathbf{G}$  nello spazio di Fourier

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C} \quad (h, k, l = \text{interi}) \quad (1.21)$$

Notiamo che:

$$\begin{aligned} \mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\rho} &= (h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}) \cdot (\boldsymbol{\rho} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}) = \\ &= 2\pi(hm + kn + lp) = 2\pi(\text{intero}) \end{aligned} \quad (1.22)$$

ne segue che

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\rho}} = 1 \quad (1.23)$$

questo motiva il termine *spazio di Fourier*.

Vediamo dall'Eq. 1.17 che se  $\Delta \mathbf{k}$  è uguale a uno qualsiasi dei vettori  $\mathbf{G}$  del reticolo cristallino, allora le equazioni di Laue sono soddisfatte.

La condizione di diffrazione perciò è:

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G} \quad (1.24)$$

Di seguito sono riportate due relazioni molto importanti:

1. Ogni vettore del reticolo reciproco  $\mathbf{G}(hkl)$  è normale al piano del reticolo cristallino con indici di Miller  $(hkl)$ ;
2. La separazione  $d(hkl)$  dei piani  $(hkl)$  del reticolo cristallino è tale che

$$d(hkl) = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}(hkl)|} \quad (1.25)$$

Per mezzo dell'Eq. 1.10 e dell'Eq. 1.24, abbiamo:

$$\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}' \quad (1.26)$$

dove  $\mathbf{k}'$  é il vettore d'onda dopo la riflessione e  $\mathbf{G}$  connette due punti qualsiasi del reticolo cristallino. Questa altri non é che una regola di selezione, rappresentabile graficamente dalla sfera di Ewald (Fig. 1.5) [4].

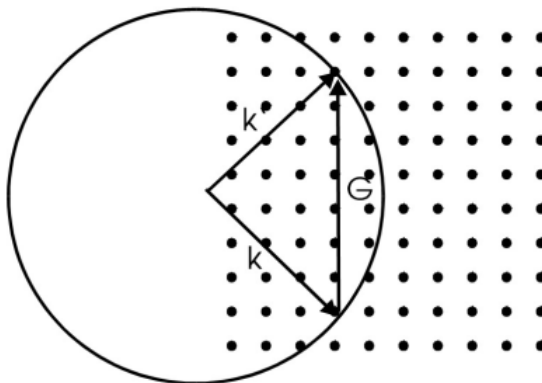


Figura 1.5: Costruzione della sfera di Ewald.

### Fattore di struttura

I cristalli reali sono composti da celle contenenti uno o piú atomi che non possono essere considerati puntiformi ma hanno un'estensione spaziale significativa rispetto alle lunghezze d'onda dei raggi X. Gli elettroni, responsabili della diffusione dei fotoni, sono distribuiti in un volume attorno all'atomo, dunque il cammino ottico varia in modo non trascurabile in funzione della distanza dall'evento di diffusione e dal punto dove i fotoni sono ricolati.

A questo proposito, si introduce il *fattore di struttura* per migliorare il modello teorico. Fisicamente rappresenta il numero di elettroni forniti dalla cella che contribuisce costruttivamente al processo di diffrazione:

$$F_{hkl} = \sum_i f_i e^{2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_i} \quad (1.27)$$

dove  $f_i$  é il *fattore di forma atomico* dell' $i$ -esimo atomo della cella,  $\mathbf{k}_0$  é il vettore d'onda incidente e  $\mathbf{r}_i$  é la posizione dell' $i$ -esimo atomo rispetto all'origine della cella.

### Assorbimento normale e estinzione

Alcuni processi fisici non sono stati presi in considerazione fino ad ora come l'*assorbimento* dovuto all'effetto fotoelettrico e alla diffusione Compton. Questi due fenomeni, in particolare, deviano i fotoni dalla direzione del fascio, come la diffrazione, ma in modo incoerente e in funzione solo del materiale e della materia attraversata. Per distinguere questo tipo di diffusione dalla diffrazione di Laue chiamiamo il primo *assorbimento normale* mentre il secondo verrà chiamato *estinzione*.

### 1.3 Cristalli a mosaico

Mentre la teoria della diffrazione dei raggi X é in accordo con i dati sperimentali, nel profilo d'intensitá del diffratto si trovano alcune differenze con il modello teorico. Alcune delle differenze sono spiegabili tramite processi non trattati fino ad ora come *difetti del reticolo* o *agitazione termica*, perciò per tenere conto anche di questi effetti si utilizza il modello dei *cristalli a mosaico* [5,6].

Il modello prevede che un cristallo é composto da piccoli cristalli (Fig. 1.6), di dimensioni che variano da 1 a 100  $\mu\text{m}$ , considerati perfetti, con orientazione distribuita in modo gaussiano attorno alla direzione principale.



Figura 1.6: Immagine al microscopio di un cristallo a mosaico.

Per descrivere la distribuzione dei micro cristalli attorno alla direzione principale si utilizza una Gaussiana:

$$W(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\eta} e^{-\frac{\Delta^2}{2\eta^2}} \quad (1.28)$$

dove  $W(\Delta)d\Delta$  rappresenta la probabilitá di trovare un micro cristallo con disallineamento angolare compreso tra  $\Delta$  e  $\Delta+d\Delta$  dalla direzione principale e  $\eta$  é la deviazione standard che determina quanto i piani sono disallineati rispetto il piano fondamentale [4].

Come parametro per quantificare il disallineamento angolare dei micro blocchi si prende la larghezza a metá altezza (FWHM) della Gaussiana. Questa quantitá prende il nome di *mosaicitá* e viene indicata con il simbolo  $\beta$ . Essa é uguale a:  $\beta = 2\sqrt{2\ln 2} \sigma \approx 2.35\sigma$ .

#### Riflettivitá per cristalli perfetti e a mosaico

Nella nostra trattazione consideriamo il caso in cui sia micro cristalli perfetti che l'intero cristallo sia composto da piano piatti e paralleli. Chiamiamo  $T_0$  lo spessore del cristallo e con  $t_0$  lo spessore dei micro blocchi.

Consideriamo una *geometria di trasmissione* o di *Laue* in cui  $\theta_0$  e  $\theta_{hkl}$  sono gli angoli tra la normale alla superficie di uscita ( $\hat{n}_e$ ) e il vettore d'onda del fascio  $\mathbf{k}_0$  e  $\mathbf{k}_{hkl}$  (Fig. 1.7).

I due fasci trasmessi e diffratti formano un sistema dissipativo. La frazione d'intensitá che passa da un fascio all'altro quando il fascio incidente attraversa uno strato infinitesimo di spessore  $dT$ , é espressa dal coefficiente  $\sigma$  di *estinzione secondaria*, mentre la restante frazione persa dipende dal coefficiente di assorbimento normale per unitá di lunghezza  $\mu$ .

Nel modello a mosaico sono previste due estinzioni:

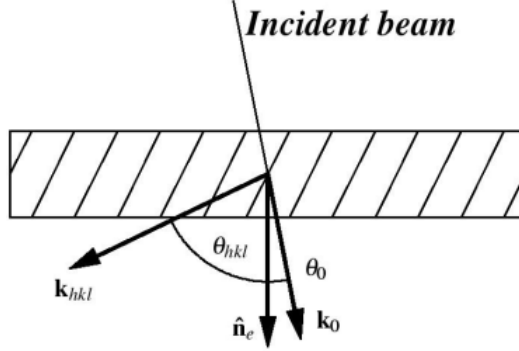


Figura 1.7: Rappresentazione dell'interazione fra fasci di fotoni e cristallo.

1. L'estinzione primaria, descritta in precedenza, si riferisce ai fotoni che passano dal fascio incidente al fascio diffratto;
2. L'estinzione secondaria restituisce la probabilità per unità di lunghezza che i fotoni vengano diffratti. Dipende sia dalla natura dei micro cristalli che dalla loro funzione di distribuzione  $W(\Delta)$ .

Si può dimostare la quantità di potenza persa dai fasci diretti ( $dP_0$ ) e diffratti ( $dP_{hkl}$ ) dopo aver attraversato uno spessore  $dT$  percorrendo un cammino, rispettivamente,  $dT/\cos \theta_0$  e  $dT/\cos \theta_{hkl}$  [7].

$$\begin{cases} dP_0 &= -\mu P_0 \frac{dT}{\cos \theta_0} - \sigma(P_0 - P_{hkl})dT \\ dP_{hkl} &= -\mu P_{hkl} \frac{dT}{\cos \theta_{hkl}} - \sigma(P_{hkl} - P_0)dT \end{cases} \quad (1.29)$$

Il sistema ha due vincoli derivanti dalla geometria di Laue. Per  $T = 0$  il fascio incidente è al suo massimo e il fascio diffratto non esiste ancora, dunque  $P_{hkl}(0)=0$ .

La soluzione di tale sistema, nella maggior parte dei casi, la si trova numericamente, mentre nel caso in cui si considerano piani cristallini piatti e paralleli e una simmetria tale che  $\theta_0=\theta_{hkl}$ , la soluzione è facile da ottenere.

### Soluzione nel caso simmetrico

Se sono valide le condizioni poste in precedenza sui piani e sugli angoli, la potenza del fascio diffratto come funzione di  $T$  dall'equazione:

$$\frac{P_{hkl}(T)}{P_0(0)} = \frac{1}{2} (1 - e^{-2\sigma T}) e^{-\mu \frac{T}{\cos \theta_0}} \quad (1.30)$$

A  $T$  fissato, il valore di  $P_{hkl}$  cresce linearmente con  $\sigma$  e decresce linearmente con  $\mu$ . Si può determinare lo spessore che massimizza  $P_{hkl}$  eguagliando a zero la derivata prima dell'Eq. 1.30 rispetto a  $T$ . Risulta che:

$$T_{best} = \frac{1}{2\sigma} \ln \left( 1 + \frac{2\sigma \cos \theta_0}{\mu} \right) \quad (1.31)$$

Il valore massimo per  $P_{hkl}$  è  $1/2$ , che è il valore limite ottenibile nel caso ideale con zero assorbimento e infinita estinzione secondaria [4].

### Coefficiente di estinzione secondaria

Il coefficiente di estinzione secondaria é calcolabile analiticamente. La riflettività dei micro cristalli é di un cristallo perfetto é data da  $P_{hkl}(\theta' - \theta_B)/P_0$ , che é molto intensa attorno all'angolo di Bragg  $\theta_B$ . Il valore  $\theta'$  é uguale alla differenza tra l'angolo radente al piano piú probabile del cristallo e l'angolo radente al piano del micro cristallo considerato ( $\theta' = \langle \theta \rangle - \Delta$ ). La riflettività media del cristallo a mosaico puó essere calcolata usando la funzione di distribuzione  $W(\Delta)$  e si ottiene:

$$p = \left\langle \frac{P_{hkl}}{P_0} \right\rangle = \int W(\Delta) \frac{P_{hkl}(\langle \theta \rangle - \theta_B + \Delta)}{P_{hkl}} d\Delta \quad (1.32)$$

Essendo la riflettività di un singolo blocco piú intensa attorno al valor medio, é possibile assumere  $W(\Delta)$  costante nel range in cui la riflettività é significativamente diversa da zero, giustificando la seguente approssimazione:

$$p \approx W(\theta_B - \langle \theta \rangle) \int \frac{P_{hkl}(\langle \theta \rangle - \theta_B + \Delta)}{P_0} d\Delta = W(\theta_B - \langle \theta \rangle) R_{hkl}^\theta \quad (1.33)$$

dove la quantità  $R_{hkl}^\theta$  é chiamata potere riflettivo integrato di un singolo blocco e é possibile mostrare che é:

$$R_{hkl}^\theta = \left| \frac{r_e F_{hkl}}{V} \right|^2 \lambda^3 \frac{1 + \cos^2(2\theta_B)}{2 \sin(2\theta_B)} \frac{t_0}{\cos \theta} \quad (1.34)$$

in cui  $r_e$  é il raggio classico dell'elettrone,  $F_{hkl}$  é il fattore di struttura,  $V$  é il volume delle celle unitarie del cristallo,  $\lambda$  é la lunghezza d'onda e  $\theta_B$  é l'angolo di Bragg per questa particolare energia. La formula ([7]) é valida se le estinzioni, primaria e secondaria, sono trascurabili.

Quando un fascio viaggia attraverso uno strato di spessore  $dT$ , esso incontra un numero di cristalli uguale a  $dT/t_0$ , di conseguenza la frazione di potenza trasferita dal fascio diffratto al fasci diretto a causa della diffrazione é:

$$dP = W(\theta_B - \langle \theta \rangle) R_{hkl}^\theta \frac{dT}{t_0} \quad (1.35)$$

Possiamo considerare la variazione  $dP$  come se fosse lineare in  $\sigma$ , coefficiente di diffusione, che restituisce la probabilità di diffusione del fascio incidente per unità di lunghezza del cristallo:

$$dP = \sigma dT \quad \text{con} \quad \sigma = W(\theta_B - \langle \theta \rangle) R_{hkl}^\theta t_0^{-1} \quad (1.36)$$

Questo é esattamente il coefficiente di estinzione secondaria utile per calcolare la potenza trasferita tra i fasci nel processo di diffrazione.

### Cristalli curvi

Grazie a particolari tecniche, é possibile incurvare i piani di diffrazione. La curvatura dei piani atomici permette la focalizzazione della radiazione incidente in un'area molto piú piccola delle dimensioni del cristallo stesso, perciò é detta curvatura focalizzante.

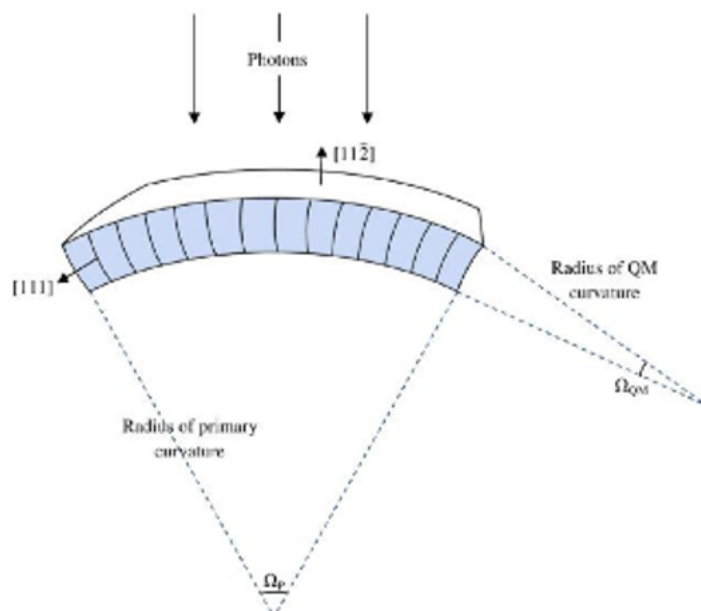


Figura 1.8: Schema esplicativo di un cristallo curvo in cui sono evidenziate la curvatura della superficie esterna del cristallo, detta primaria, e quella interna dei piani cristallini, chiamata secondaria.

Nei cristalli perfetti, la curvatura della superficie esterna induce una curvatura secondaria per alcune direzioni cristallografiche. Tale curvatura secondaria è responsabile dell'allargamento della banda energetica puntuale caratteristica dei piani atomici incurvati e si comporta come una sorta di mosaicità indotta. In Fig. 1.8 è raffigurato un cristallo perfetto in cui sono presenti entrambe le curvature.

La distorsione dei piani cristallini è descritta da un gradiente di tensione  $\beta_s$ , il quale, in caso di curvatura uniforme, è dato da:

$$\beta_s = \frac{\Omega}{T_0 (\delta/2)} \quad (1.37)$$

dove  $\Omega$  è l'angolo di curvatura totale e corrisponde alla mosaicità nei cristalli a mosaico,  $T_0$  è lo spessore dei cristalli e  $\delta$  è lo spessore di Darwin che è la larghezza a metà altezza (FWHM) del profilo di riflettività di un cristallo monocromatore [8, 9]. Se  $|\beta_s|$  diventa uguale al valore critico  $\beta_c = \pi/2(\Lambda_0)$ , si può dimostrare che, per curvatura uniformi, il picco di riflettività  $R^{max}$  per cristalli curvi è pari a:

$$R^{peak}(c_p, E) = \left(1 - e^{-\frac{\pi^2}{c_p} \frac{d_{hkl}}{\Lambda_0^2}}\right) e^{-\frac{\mu}{c_p} \frac{\Omega}{\cos \theta_B}} \quad (1.38)$$

dove  $c_p = \Omega/T_0$  è la curvatura dei piani cristallini assunta uniforme lungo tutto lo spessore del cristallo,  $\mu$  è un fattore di assorbimento in funzione dell'energia della radiazione incidente e  $\Lambda_0$  è la lunghezza di estinzione che caratterizza l'assorbimento da parte di una singola cella unitaria del cristallo, anch'essa è funzione dell'energia della radiazione incidente.



Dall'Eq. 1.38, si può ricavare la curvatura dei piani cristalli che massimizza la riflettività:

$$c_p^{best} = \frac{\pi^2 d_{hkl} / \Lambda_0^2}{\ln \left( 1 + \frac{\pi^2 d_{hkl}}{\Lambda_0^2} \frac{\cos \theta_B}{\mu \Omega} \right)} \quad (1.39)$$



## Capitolo 2

# Lenti di Laue

*Questo capitolo é dedicato alle caratteristiche e alle possibili configurazioni di una lente di Laue. Per descrivere la lente e i cristalli di cui é composta, sará introdotta il sistema di riferimento cilindrico. Verranno prese in considerazione alcuni possibili geometrie della lente e diversi modi in cui si possono disporre i cristalli cosí da valutarne gli aspetti positivi e negativi.*

### 2.1 Concetto di Lente di Laue

I metodi di osservazioni astrofisiche per radiazioni nell'intervallo energetico dei raggi X duri o dei Gamma morbidi si dividono in due categorie. I *telescopi a vista diretta* sono i piú utilizzati e sono caratterizzati da collimatori e/o maschere opportune, la loro sensibilitá é fortemente legata all'area del detector. I *telescopi a focalizzazione* utilizzano ottiche che concentrano la radiazione su di un piano focale, dove é posto il detector, in questo caso abbiamo che la sensibilitá aumenta al diminuire diminuendo l'area del detector [10]. Orientando e posizionando in maniera opportuna cristalli curvi o a mosaico, é possibili deviare i fotoni incidenti verso un punto focale. Questa é l'idea che sta dietro alle lenti di Laue (Fig. 2.1).

Ovviamente non tutti i fotoni incidenti sulle tessere cristalline vengono deviati nel fuoco della lente di Laue. Una parte di essi viene assorbita e una parte viene trasmessa senza che la direzione di incidenza venga alterata. Una frazione dell'energia incidente viene invece diffratta e la direzione di focalizzazione dipende dall'orientazione del cristallo. Risulta quindi cruciale un ottimo allineamento delle tessere cristalline onde ottenere il massimo dal processo di focalizzazione.

### 2.2 Geometria delle lenti di Laue e principali proprietá

Prima di discutere le proprietá principali della geometria e le sue conseguenze, é essenziale introdurre il sistema di riferimento adottato per la descrizione analitica.

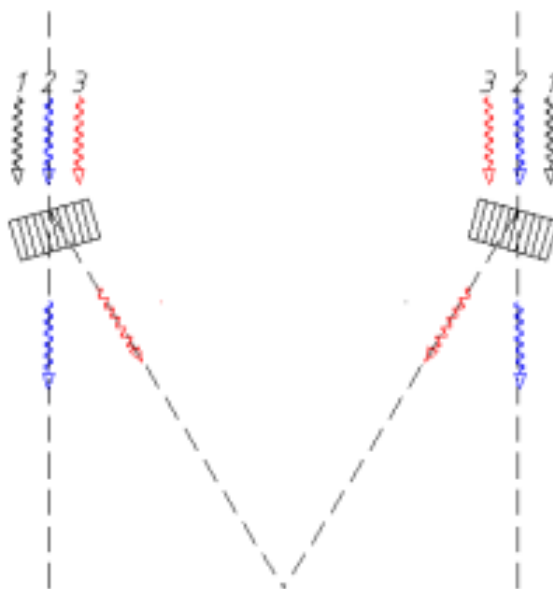


Figura 2.1: Schema rappresentativo del funzionamento di una lente di Laue.

### 2.2.1 Sistema di riferimento cilindrico

Si è scelto di utilizzare un sistema di riferimento cilindrico data l'ovvia simmetria della lente di Laue (almeno nella trattazione semplice di sorgenti di radiazione posta in asse) rispetto ad un asse verticale. Nello specifico, si è preso l'asse  $z$  coincidente con l'asse focale e l'origine  $O$  coincidente con il fuoco. L'asse positivo della  $z$  è diretto verso il cristallo. La coordinata radiale è individuata dalla lettera  $r$  mentre la coordinata angolare dalla lettera  $\phi$  (Fig. 2.2).

I cristalli, in quanto sistema rigido, sono individuati da sei parametri: tre coordinate cilindriche  $(r_c, \phi_c, z_c)$  riferite al centro  $C$  della faccia superiore del cristallo, e tre angoli che sono riferiti alle tre rotazioni attorno agli assi  $x, y, z$ , perciò vengono indicati con  $\theta_x, \theta_y, \theta_z$ . Distinguiamo fra le tre rotazioni quella intorno all'asse  $z$  che non provoca variazioni nell'energia diffratta poiché essa non modifica l'angolo fra la radiazione incidente e il piano di diffrazione. Fra i tre angoli di cui può essere orientata una tessera cristallina, quella che governa la variazione dell'angolo di Bragg rispetto alla radiazione incidente è la più importante.

I cristalli sono considerati di forma parallelepipedica, con il piano principale, scelto in base al primo ordine di diffrazione, perpendicolare alla superficie dove incide il raggio X. Il vettore normale ai piani e il vettore del reticolo reciproco  $\mathbf{g}$  associato ad un punto puntano verso l'asse  $z$  e giacciono sul piano individuato a  $(z, r)$ .

#### Orientamento dei cristalli

L'orientamento dei cristalli è determinato da tre angoli  $\theta_x, \theta_y, \theta_z$ . Questi angoli definiscono la direzione del vettore reticolo reciproco  $\mathbf{g}$ . I fotoni, presi con un

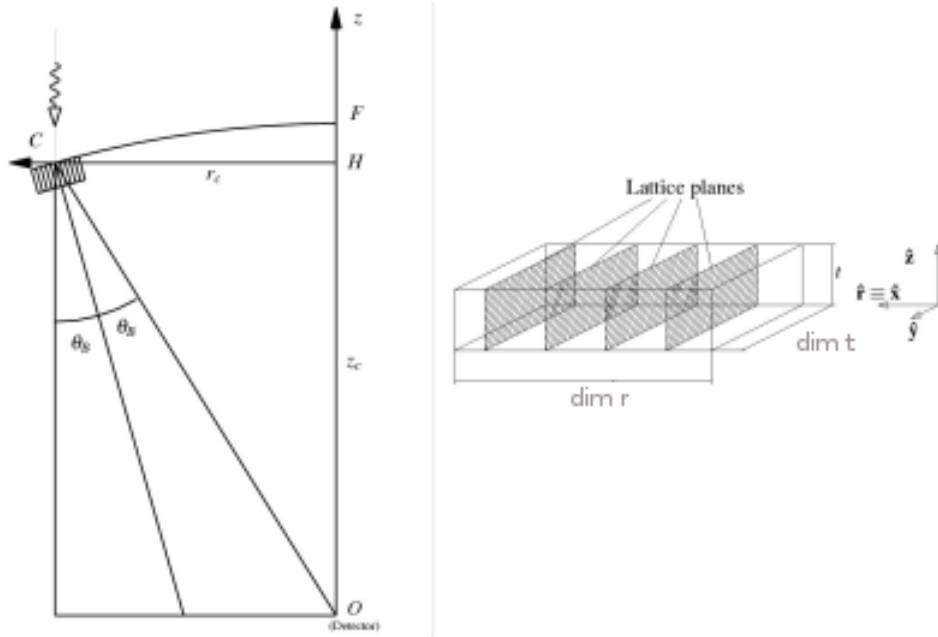


Figura 2.2: Nella figura di sinistra é rappresentato il sistema di riferimento cilindrico scelto per descrivere la geometria che regola il processo di diffrazione in una lente di Laue, nella figura di destra é rappresentato uno schema semplificato di un cristallo con i piani cristallini in evidenza [4].

vettore d'onda diretto come  $-z$ , che urta un cristallo nel suo centro  $C$ , per finire nel centro del detector  $O$ , devia il suo cammino di un angolo  $2\theta_B$ , a patto che:

$$\begin{cases} \theta_x = 0 \\ \theta_y = \theta = \frac{1}{2} \arctan \frac{r_c}{z_c} \\ \theta_z = 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

Naturalmente, se il cristallo fosse perfetto, solo i fotoni con una determinata energia verrebbero diffratti in accordo alla legge di Bragg:

$$E(\theta) = n \frac{hc}{2d_{hkl} \sin \theta} \quad (2.2)$$

Una lente di Laue invece é dedicata alla focalizzazione di una banda energetica quindi cristalli con uno spread angolare non nullo (come i cristalli a mosaico per esempio) sono lo strumento ideale per raggiungere lo scopo. Come vedremo nel prossimo paragrafo la banda passante di un cristallo dipende essenzialmente dal centroide dell'energia diffratta e dalla natura del cristallo stesso ( $d_{hkl}$ ).

### 2.2.2 Diffrazione da parte di cristalli a mosaico

I cristalli a mosaico faranno diffrazione all'energia corrispondente ad un intervallo piu o meno largo, centrato sul valore espresso dal'Eq. 2.2.

Nei cristalli a mosaico l'intensità del fascio diffratto é proporzionale alla funzione di distribuzione dei piani ( $W(\theta_B - \langle \theta \rangle)$ ) e dalla riflettività  $R_{hkl}^\theta(E)$  di tali piani. Queste due quantità dipendono dall'orientamento dei piani. Se la distribuzione dei piani attorno ad una direzione preferenziale é Gaussiana, la

FWHM della distribuzione é uguale a  $\beta \approx 2.35\eta$ . In questo caso, le variazioni di riflettività in funzione dell'energia possono essere trascurate nel range in cui  $W$  é significativamente diversa da zero, cioè quando  $\beta$  é piccolo in confronto all'angolo di Bragg. Vediamo ora qual'è la banda passante di un cristallo a mosaico avente una mosaicità  $\beta$ . I piani medi, corrispondenti al centro della distribuzione angolare Gaussiana hanno un angolo  $\theta_0$  che corrisponderá ad una energia  $E_0$ . Per i piani disallineati di  $+\beta/2$ , i fotoni che vengono diffratti hanno energia minore di  $E_0$ , dato che l'angolo di incidenza della radiazione sui piani é diverso da  $\theta_0$ . L'energia diffratta sará quindi in questo caso:

$$E_- = \frac{hc}{2d_{hkl} \sin(\theta + \frac{\beta}{2})} \approx E_0 \left(1 - \frac{\beta}{2\theta}\right) \quad (2.3)$$

l'approssimazione vale nel caso in cui  $\beta/\theta \ll 1$ . Tutto ciò implica che i fotoni non vengono piú focalizzati in  $O$ : se essi interagiscono con il cristallo nel punto  $C = (r_c, 0, z_c)$ , saranno focalizzati in  $(\Delta_-, 0, 0)$ , dove  $\Delta_- = r_c - z_c \tan(2\theta + \beta) \approx -z_c\beta$ . Allo stesso modo, per un disallineamento di  $-\beta/2$ , l'energia dei fotoni che vengono diffratti dovrá essere maggiore:

$$E_+ = \frac{hc}{2d_{hkl} \sin(\theta - \frac{\beta}{2})} \approx E_0 \left(1 + \frac{\beta}{2\theta}\right) \quad (2.4)$$

mentre il punto d'impatto corrispondente avrá coordinate  $(\Delta_+, 0, 0)$  con  $\Delta_+ = r_c - z_c \tan(2\theta - \beta) \approx +z_c\beta$ . Questi due valori definiscono la banda d'energia centrata in  $E_0$  del cristallo a mosaico, la cui larghezza,  $\Delta E$  é approssimativamente data da:

$$\Delta E = E_+ - E_- \approx \frac{E_0\beta}{\theta} \quad (2.5)$$

É anche possibile calcolare l'allargamento spaziale totale  $\Delta_{||}$  della figura di diffrazione nella direzione radiale causata dalla mosaicità:

$$\Delta_{||} \approx \Delta_+ - \Delta_- = 2\beta z_c \sim 2\beta F \quad (2.6)$$

in cui l'ultima approssimazione risulta valida nel caso in cui la focale sia molto maggiore del raggio al quale i cristalli vengono posizionati. Quest'ultima equazione verrá discussa anche nel Cap. 3 e determinata per via geometrica. L'allargamento nella direzione perpendicolare,  $\Delta_{\perp}$ , puó essere calcolato usando il disallineamento di  $\pm \beta/2$  data dalla rotazione attorno all'asse  $z$ . I fotoni diffratti da questi piani non saranno focalizzati in  $O$ : un fotone che incide su di un cristallo nel punto  $C (r, 0, z_c)$ , finirá sul detector nel punto di coordinate  $(r_c(1 - \cos \frac{\beta}{2}), r_c \sin \frac{\beta}{2})$ . Con questa informazione é possibile stimare l'allargamento:

$$\Delta_{\perp} \approx 2r_c \sin(\frac{\beta}{2}) \approx r_c\beta \quad (2.7)$$

Come giá detto, per applicazioni astrofisiche in cui la focale raggiunge valore id decine di metri  $z_c \sim F \gg r_c$ , perció, confrontando gli allargamenti, ne deriva  $\Delta_{||} \gg \Delta_{\perp}$ . Dunque, la figura formata da un cristallo ha approssimativamente la stessa dimensione del cristallo piú allargamento nella direzione radiale data dall'Eq. 2.6.

## 2.3 Posizionamento dei cristalli sulla lente

Esistono diversi profili superficiali sui quale possono essere posizionate le tessere cristalline. Il caso ideale é quello in cui il profilo segue la forma di una calotta sferica. Esiste comunque la possibilitá di utilizzare un profilo piatto (nel quale la focalizzazione é data dall'inclinazione dei cristalli rispetto al piano che accoglie i cristalli) o un profilo parabolico. Indipendentemente dal profilo utilizzato, l'arrangiamento delle tessere sulla superficie deve seguire un'orientazione ed una logica ben precisa. Come già anticipato una possibilitá é quella di arrangiare i cristalli in anelli concentrici tali per cui tutti i cristalli appartenenti allo stesso anello faranno diffrazione alla stessa banda di energia. In questa Tesi, oltre a descrivere nel dettaglio questa configurazione accenneremo anche ad un altro tipo di disposizione cristallina che é quella a geometria a *spirale* [11]. Nei prossimi paragrafi descriveremo sia il tipo di profilo della lente, sia le possibili geometrie di posizionamento dei cristalli.

### 2.3.1 Profili delle lenti

#### Profilo sferico

Le lenti sferiche hanno l'interessante proprietá di produrre la focalizzazione a metá del raggio della sfera, lungo l'asse della lente. Con tale configurazione i cristalli (i cui piani riflettenti sono idealmente perpendicolari alla superficie che accoglie la tessera cristallina) devono essere tangenti alla superficie sferica. La geometria sferica prevede altre relazioni interessanti per le coordinate  $z_c$ ,  $r_c$  e  $\theta_y$ , che sono raccolte nella tab 2.1. Dalle relazioni  $\theta(r)$  possiamo per esempio desumere che l'angolo di diffrazione aumenta all'aumentare del raggio della lente per cui da queste relazioni si evince direttamente che a raggi di posizionamento maggiori corrispondono energie diffratte minori e viceversa.

Tabella 2.1: Relazioni utili fra coordinate spaziali per una lente di Laue descritto da una geometria sferica.

	$r_c$	$z_c$	$\theta_y$
$r_c$		$\sqrt{F^2 - r_c^2}$	$2F \sin \theta_y$
$z_c$	$\sqrt{F^2 - r_c^2}$		$F(2 \cos \theta_y - 1)$
$\theta_c$	$\arcsin \frac{r_c}{sF}$	$\arccos \frac{z_c + F}{2F}$	

#### Profilo piatto e parabolico

Dato che gli angoli di Bragg sono molto piccoli (dell'ordine di pochi gradi, dipendentemente dalla natura del materiale utilizzato) le differenze fra i profili parabolico e sferico sono piccole. Tuttavia il profilo parabolico ha l'interessante

proprietá di focalizzare nel fuoco del paraboloide tutti i raggi che provengono dall'infinito, anche se in direzione fuori asse. Nel caso parabolico, il centro del cristallo é posto su di una supeficie generata dalla rotazione di una curva parabolica definita dalla seguente equazione:

$$z(r) = F - \frac{1}{4F}r^2 \quad (2.8)$$

### 2.3.2 Disposizione dei cristalli

Per non creare ambiguitá nella notazione, attribuiamo il numero intero  $j$  per identificare i cristalli: parte da zero e arriva al numero totale di cristalli sulla lente meno uno ( $N - 1$ ). Con questa convenzione abbiamo, inoltre, che:

1. a piú piccolo valore di  $r_c$  corrisponde il piú piccolo valore di  $j$ ;
2. a piú piccolo valore di  $\phi_c$  corrisponde il piú piccolo valore di  $j$ .

#### Anelli concentrici

Una semplice distribuzione dei cristalli é data dalla disposizione su anelli concentrici su raggi variabili ( $r_j$ ). Analogamente alla notazione usata per ciascun cristallo indicato con  $j$ , attribuiamo ad ogni anello in numero intero  $k$ . Il valore piú piccolo di  $k$ , cioé zero, é attribuito all'anello piú interno cioé a raggio minore che corrisponde al limite superiore dell'energia diffratta ( $E_{max}$ ). I cristalli localizzati sul primo anello saranno posizionati in modo adiacente fra loro. Naturalmente, fra ogni cristallo ci sará una porzione di spazio vuota, che verrá indicata con  $\delta$ .

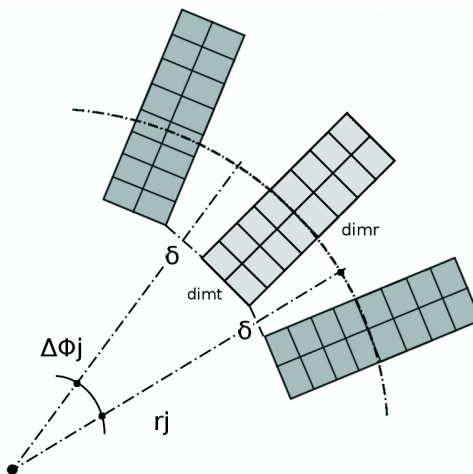


Figura 2.3: Sistema di posizionamento dei cristalli seguendo la geometria a spirale di Archimede. In questo modo l'orientazione e il raggio al quale le tessere sono posizionate cambiano lentamente e con continuitá. Il risultato é un'area efficace piú regolare e senza buchi dovuti al cambio netto di angolo di Bragg fra un anello e l'altro, nel caso di anelli concentrici.

Con riferimento alla Fig. 2.3 non é difficile mostrare attraverso alcune considerazioni geometriche che la coordinata angolare del cristallo  $j$ -esimo é uguale a:



$$\Delta\phi_j = 2 \arctan \left( \frac{\delta + \dim t/2}{r_j - \delta - \dim r/2} \right) \quad (2.9)$$

D'altra parte vale anche  $\Delta\phi_j = 2 \pi/N_k$  per cui dalle due equazioni si può determinare il numero di cristalli posizionabili per l'anello k-esimo, e l'angolo di posizionamento per ciascun cristallo.

Una volta posizionati i primi  $N_k$  cristalli, il procedimento prosegue posizionando il primo cristallo del successivo anello, con raggio  $r_{k+1}$ . Il valore del raggio sarà:

$$r_{k+1} = \dim r/2 + \delta + \sqrt{(r_k + \dim r/2 + \delta)^2 + (\dim t/2 + \delta)^2} \quad (2.10)$$

Dunque, tramite un procedura iterativa é possibile posizionare tutti i cristalli sulla lente.

### Differenza energetica tra anelli contigui

Ogni anello ha i cristalli orientati secondo il proprio angolo di Bragg. I cristalli concentrano un intervallo energetico, con valore centrale ricavabile invertendo la legge di Bragg. Ricaviamo ora il gap energetico che si ha fra i due centroidi corrispondenti a due anelli attigui. L'energia  $E_k$ , diffratta dal cristallo sul k-esimo anello é uguale a:

$$E_k = \frac{hc}{2d_{hkl} \sin \theta_k} = \frac{hcF}{d_{hkl} r_k} \quad (2.11)$$

La differenza d'energia  $\Delta E_k$  tra l'energia media del k-esimo e del k+1-esimo anello é:

$$\Delta E_k = \frac{hc}{2d_{hkl}} \left( \frac{\sin \theta_{k+1} - \sin \theta_k}{\sin \theta_{k+1} \sin \theta_k} \right) \propto \Delta \theta E^2 \quad (2.12)$$

Dalla precedente Equazione si deduce che ad anelli piú esterni dedicati ad energie minori il gap energetico é minore rispetto alle piú alte energie in cui la differenza energetica aumenta con il quadrato dell'energia diffratta. Una richiesta ragionevole per la strumentazione é avere una risposta continua dell'area efficace lungo tutta la banda energetica di lavoro. Comparando l'Eq. 2.5 con l'Eq. 2.12 é possibile stimare se la banda di lavoro degli strumenti é sufficientemente continua. Infatti se il gap provocato dalla differenza fra anelli contigui é colmato dallo spread della mosaicitá il comportamento della lente in tutta la banda sará continuo. In caso contrario, se la mosaicitá non copre gli spazi lasciati vuoti dal gap radiale, l'area efficace ne risentirá ed avrá una forma "seghettata".

### 2.3.3 Disposizione geometrica a spirale

Un altro modo per posizionare i cristalli é cambiando in modo continuo il raggio e l'angolo di Bragg per ciascun cristallo. Tale sistema venne suggerito per la prima volta da Niels Lund [11] e viene schematizzato in Fig. 2.4.

La curva che rappresenta la disposizione radiale delle tessere in configurazione spirale é:

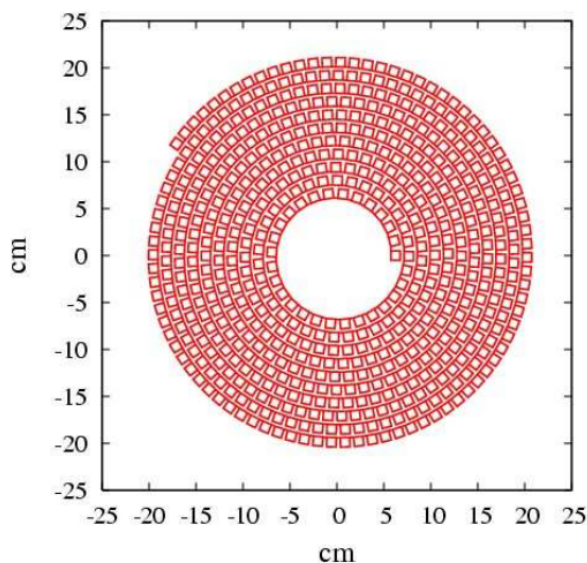


Figura 2.4: Sistema di posizionamento dei cristalli seguendo la geometria a spirale di Archimede. In questo modo l'orientazione e il raggio al quale le tessere sono posizionate cambiano lentamente e con continuità. Il risultato é un'area efficace piú regolare e senza buchi dovuti al cambio netto di angolo di Bragg fra un anello e l'altro, nel caso di anelli concentrici.

$$r(\phi) = r_0 + c \frac{\phi}{2\pi} \quad (2.13)$$

In cui il valore di  $c$  fornisce in un certo senso il “passo” della spirale ed é stimato in modo tale da lasciare abbastanza spazio tra i cristalli.

### Disposizione dei cristalli

Il primo cristallo posizionato corrisponde, anche in questo caso, all'estremo superiore della banda d'energia di lavoro desiderata. Questo cristallo ha le stesse coordinate del corrispondente nel profilo sferico:  $r_0$  e  $z_0$  sono fissati dall'angolo di Bragg mentre  $\phi_0$  é uguale a zero. Il secondo cristallo é posizionato considerando un incremento angolare per  $\phi$  uguale a quello dato dell'Eq. 2.9. Usando l'Eq. 2.13 e noto il valore di  $\phi$ ,  $r_1$  é determinato, e tramite il suo valore, si puó calcolare  $z_1$  e  $\theta_1$ . La procedura deve essere ripetuta fino a coprire l'intera lente. Con la definizione di incremento:

$$\Delta\phi_j = 2 \arctan \left( \frac{\delta + \dim r/2}{r_{j-1} - \dim t - \delta} \right) \quad (2.14)$$

### Differenza energetica tra anelli contigui

L'energia del  $j$ -esimo cristallo differisce dal  $j+1$ -esimo per una quantità pari a:

$$\Delta E_j = E_j - E_{j+1} = \frac{hcF}{2d_{hkl}} \left( \frac{r_{j+1} - r_j}{r_j r_{j+1}} \right) \approx \frac{hcF}{4\pi d_{hkl}} \frac{c\Delta\phi_j}{r_j^2} \quad (2.15)$$

---

La differenza d'energia é piccola e evita qualsiasi problema circa la copertura della banda energetica grazie al piccolo valore di  $\Delta\phi_j$ .



## Capitolo 3

# Software di simulazioni delle lenti di Laue

*In questo capitolo verrà descritto il software utilizzato per lo studio delle proprietà delle lenti di Laue. Si tratta di una serie di librerie sviluppate in linguaggio python. La serie di librerie denominata Laue Lens Libraries (LLL) è stata sviluppata dal gruppo di astrofisica delle alte energie del Dipartimento di Fisica e scienze della Terra dell'Università di Ferrara [12].*

### 3.1 Laue Lens Libraries

La libreria di sviluppo per le lenti di Laue è costituita da 5 sezioni che lavorano dipendentemente l'una dall'altra, e che andremo separatamente a descrivere. Alcune funzioni all'interno delle librerie vengono chiamate direttamente dall'utente nella fase di esecuzione del software, altre invece sono sotto funzioni che vengono chiamate da altre funzioni e non vengono direttamente gestite dall'utilizzatore del software.

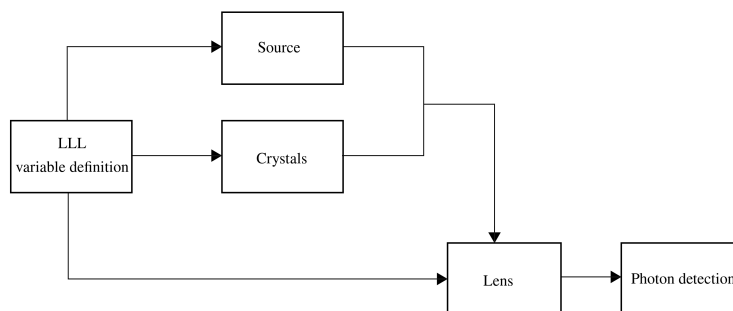


Figura 3.1: Diagramma illustrativo delle caratteristiche del software utilizzato in questa Tesi, con indicate le librerie e le interazioni fra di esse

In Fig. 3.1 è rappresentato un diagramma che descrive in forma generale l'interazione fra le varie librerie che compongono il LLL. Le librerie sono chiamate

fisica, costanti, sorgente, cristallo, lenti, rivelatore e nei paragrafi successivi verranno descritte per ciascuna di esse le funzioni principali. L'utente agisce sulle funzioni delle librerie attraverso una macro nella quale sono indicati i parametri principali del sistema ottico da simulare. Tale macro va ad interagire attraverso una serie di funzioni con le librerie del software. La differenza sostanziale fra librerie quali costanti e lenti sta nel fatto che la prima contiene funzioni non modificabili dall'utente mentre nella seconda libreria sono presenti funzioni richiamate direttamente dall'utente con parametri definibili dall'utilizzatore.

### 3.1.1 LLL: FISICA, COSTANTI

Le librerie FISICA e COSTANTI sono dedicate ai principi base della diffrazione e alla definizione delle costanti fondamentali che si utilizzano nei processi di diffrazione. Sono quindi librerie composte da funzioni non modificabili da chi usa il software dal punto di vista "utente". Non é infatti necessario modificare di volta in volta i parametri che governano il processo di diffrazione.

### 3.1.2 LLL: SORGENTE

La libreria sorgente individua il tipo di radiazione che viene utilizzata nel processo di simulazione di una lente di Laue. L'utente quindi può interagire all'interno di questa libreria indicando la banda energetica dei fotoni in arrivo sulla lente (definita successivamente), sia il tipo di spettro in ingresso. É possibile anche indicare se la radiazione provenga da una sorgente posta a distanza finita rispetto alla lente di Laue, sia che la sorgente di radiazione sia posta a distanza infinita (caso astrofisico). Mentre nel secondo caso la dimensione della sorgente non ha effetti sulle figure di diffrazione che ci interessano, nel caso di sorgente finita, anche la dimensione estesa della sorgente, o una sorgente puntiforme sono parametri che possono essere modificati dall'utente.

La libreria sorgente viene chiamata all'inizio del processo per definire le proprietà dei fotoni utilizzati nella simulazione ma viene richiamata anche successivamente alla creazione del cristallo, poiché la libreria sorgente si occupa anche dell'interazione fra ogni singolo fotone e cristallo (funzione fotone-cristallo, `phoXtal`).

### 3.1.3 LLL: CRISTALLO

Il cristallo é l'elemento base della lente di Laue. Un singolo cristallo viene definito da molteplici parametri che sono tutti descritti in questa libreria. L'utente, tramite la macro di accesso, definisce il materiale di cui é costituito il singolo cristallo, i piani di atomici impiegati per il processo di diffrazione (attraverso il parametro  $d_{hkl}$  e gli indici di Miller), la mosaicità e la dimensione dei microcristallini (nel caso in cui si tratti di cristalli a mosaico) e la curvatura esterna delle tessere cristalline, nonché delle dimensioni fisiche del cristallo stesso che, come vedremo, hanno anche un'importanza cruciale nella ottimizzazione della risoluzione angolare e del campo di vista di un telescopio basato sulla tecnologia delle lenti di Laue.

### 3.1.4 LLL: LENTI

I singoli cristalli vengono assemblati in diverse configurazioni seguendo le geometrie descritte nel Cap. 2. Le possibili geometrie sono quelle di singolo cristallo in diffrazione (classe banale che ricade nelle funzioni già scritte nella libreria cristallo), o lente costituita da una serie di cristalli posizionati ad anello (singolo anello) o su più anelli concentrici. È possibile anche definire una frazione di lente indicando gli angoli minimo e massimo di apertura, a creare quindi un settore detto anche petalo di lente di Laue.

### 3.1.5 LLL: RIVELATORE

Successivamente all'interazione fra fotoni prodotti e cristalli posti in configurazione di diffrazione, all'elemento della classe fotone viene associata una direzione differente rispetto alla direzione di incidenza. Tale deviazione viene ovviamente regolata dall'interazione delle funzioni appartenenti alle librerie sorgente, fisica, costanti. La posizione spaziale dell'elemento della classe fotone viene registrato in una matrice di dimensioni  $n \times m$  che rappresenta un rivelatore sensibile alla posizione costituito da  $n \times m$  pixels ciascuno di dimensioni definibili dall'utente. Il rivelatore ha anche caratteristiche spettrali nel senso che è possibile selezionare la banda energetica che si vuole rivelare e quindi visualizzare.

## 3.2 Esempi delle potenzialità del software

La grande duttilità del software ne permette l'utilizzo in diverse configurazioni (applicazioni spaziali o terrestri grazie alla possibilità di definire sia le dimensioni della sorgente di radiazione, sia la distanza fra sorgente e lente). In questo paragrafo mostriamo alcune simulazioni che ne dimostrano l'efficacia. Queste simulazioni ci sono utili poiché ci permettono di verificare la validità delle simulazioni effettuate in casi semplici quali le simulazioni di sorgenti in asse e con un numero limitato di cristalli, per avere maggior confidenza della correttezza delle simulazioni nei casi più complicati quali per esempio sorgenti fuori asse osservate con centinaia o migliaia di cristalli posti in diffrazione, e lo studio delle proprietà di tali lenti che è lo scopo finale di questa Tesi.

La libreria LENTI è costituita da diverse classi che permettono di simulare configurazioni diverse per la lente di Laue. Le classi comandabili sono:

1. SingleXtal;
2. Ring;
3. Rings;
4. Petal.

Ciascuna classe è stata implementata per un lavoro modulare, dato che una classe è figlia della precedente e ne mutua la maggior parte delle funzioni e delle caratteristiche. Per esempio la classe Ring è costituita da un insieme di oggetti della classe SingleXtal così come la classe Rings è costituita da un insieme di oggetti Ring. Inoltre l'impiego delle varie classi di volta in volta permette il

confronto fra le simulazioni e l'attività sperimentale in corso presso i laboratori LARIX di astrofisica delle alte energie del Dipartimento di Fisica e scienze della Terra dell'Università di Ferrara [13].

### SingleXtal

La classe `SingleXtal` è utilizzata per studiare la diffrazione da parte di un solo cristallo. Tale classe permette di studiare come viene prodotta la figura di diffrazione. In Fig. 3.2 possiamo osservare due figure di diffrazione prodotte da un cristallo di dimensione  $30\text{ mm} \times 10\text{ mm}$  in un caso piatto e nell'altro curvo.

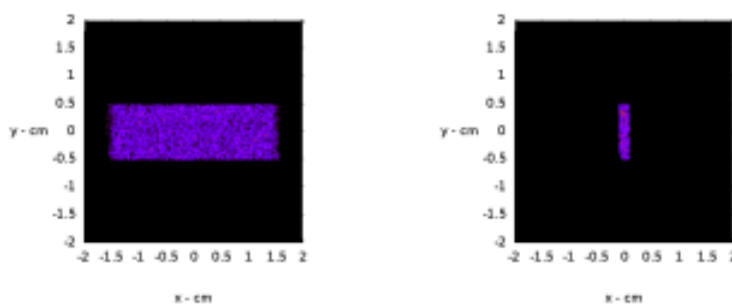


Figura 3.2: Simulazioni di figure di diffrazione ottenute tramite il software LLL considerando  $10^3$  fotoni incidenti su di un cristallo di dimensioni  $30 \times 10\text{ mm}^2$  nei due casi di cristallo piatto (sinistra) e cristallo con raggio di curvatura di 40 metri (pari al doppio della distanza focale).

Dalla Fig. 3.2 possiamo vedere che se il cristallo è piatto, produce un'immagine la cui dimensione è simile a quella del cristallo stesso. Il cristallo quindi proietta un'immagine di diffrazione identica alla sua area. Al contrario, se il cristallo è curvo la figura di diffrazione si concentra in un'area più piccola di quella del cristallo stesso. Tale effetto di focalizzazione è alla base dei recenti sviluppi di lenti di Laue del gruppo di Astrofisica del Dipartimento di Fisica e Scienze della Terra di Ferrara. Grazie ai cristalli curvi, i fotoni possono essere focalizzati lungo la direzione di curvatura del cristallo. La direzione perpendicolare invece non offre vantaggi di focalizzazione. In linea di principio i fotoni focalizzati dovrebbero essere raccolti su una linea la cui lunghezza è pari alla lunghezza del cristallo nella direzione di non focalizzazione. In realtà la mosaicità del cristallo produrrà un allargamento dell'immagine e tale effetto (che è presente anche nei cristalli piatti) è chiamato defocalizzazione mosaico (*mosaic defocusing*). L'immagine è quindi alta tanto quanto è la dimensione tangenziale del cristallo (nel caso in esempio 10 m) e larga 1-1.5 mm così come detto in precedenza per opera della mosaicità del cristallo.

La classe `SINGLEXTAL` è utile per confrontare le simulazioni con i risultati sperimentali ottenuti al laboratorio LARIX dell'Università di Ferrara. L'utilizzatore infatti può impostare il software in modo da poter simulare esattamente le condizioni sperimentali, con una sorgente di fotoni posizionata ad una distanza finita dal bersaglio, con una distribuzione di fotoni nel range energetico emesso dalla sorgente radiogena in uso, da un anodo emittente di dimensioni infinitesime (sorgente puntiforme) o di dimensioni finite. In Fig. 3.3 sono mostrate le simulazioni del fascio diffratto prodotto da un cristallo  $30\text{ mm} \times 10\text{ mm}$  curvo



con raggio di curvatura di 40 m e con differenti combinazioni di posizione della sorgente e focale della lente:

1. Sorgente posta all'infinito e distanza focale di 20 m;
2. Sorgente posta ad una distanza di 26.5 m dal cristallo ed una distanza focale di 20 m;
3. Sorgente posta ad una distanza di 26.5 m dal cristallo e rivelatore posto alla distanza di miglior focalizzazione di 11.5 m.

Quando la sorgente é posta ad una distanza infinita dal cristallo curvo, la focalizzazione avviene, per ragioni geometriche alla distanza di 20 metri dal cristallo (fuoco del cristallo/lente). Questo é il caso astrofisico che purtroppo per ovvie ragioni non si può riprodurre in laboratorio. Ecco il motivo per cui nel software sono state implementate le funzioni in grado di modificare le condizioni al contorno del sistema quali ad esempio la distanza sorgente/bersaglio. Nel laboratorio LARIX per esempio la sorgente di radiazione é posta a circa 26.5 metri dal bersaglio. Ponendo la sorgente a questa distanza finita rispetto al cristallo (che ha raggio di curvatura di 40 metri) si osserva sul rivelatore posto a 20 metri una distribuzione di fotoni non focalizzata. La miglior focalizzazione infatti si ottiene ad una distanza minore che é stata stimata essere dell'ordine di 11.5 metri nel caso di sorgente posta a 26.5 m. Le simulazioni sono in perfetto accordo con i risultati sperimentali [14].

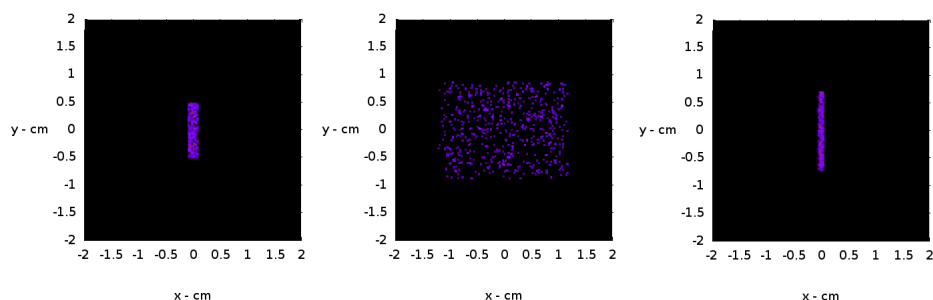


Figura 3.3: Figura di diffrazione prodotta da un cristallo curvo per una sorgente all'infinito per la quale il punto di focalizzazione é a metà del raggio di curvatura del cristallo (sinistra), diffratto di un cristallo curvo per una sorgente posta ad una distanza finita e per una focale pari alla metà del raggio di curvatura (centro), e figura di diffrazione prodotta da un cristallo curvo per una sorgente posta ad una distanza finita ( $D = 26.5$  m) per la quale si é posto il rivelatore alla distanza di 11.5 m (destra).

Abbiamo quindi verificato un aspetto del software che ci permette di prevedere e confermare la posizione della miglior focalizzazione a seconda della distanza a cui si trova la sorgente. Tale aspetto non é di secondaria importanza, e non solo utile in quanto verifica del funzionamento del software, poiché il comportamento delle lenti di Laue per sorgenti finite é già in corso, per possibili sviluppi in campo terrestre della tecnologia che si sta sviluppando per le ottiche Laue. Un esempio é quello di Lenti di Laue utilizzabili in campo medico, sia nei campi della diagnosi (imaging) che per la cura di pazienti in cui sono presenti cellule tumorali. Non meno importante, la possibilità di produrre un fascio di raggi X o Gamma paralleli, a partire da un fascio incidente prodotto da un classico tubo radiogeno. Un fascio parallelo può essere impiegato nella scansione di

ampie superfici senza avere effetti di deformazione dell'immagine dovuti alla divergenza.

Il software permette anche di simulare un fascio di radiazione proveniente sia da una sorgente puntiforme, sia da una sorgente estesa. In Fig. 3.4 sono mostrate le simulazioni del fascio diffratto da un cristallo di curvatura 40 metri quando viene tenuto conto della dimensione della sorgente. Nelle figure in alto sono mostrati gli effetti di sorgente estesa o puntiforme agente su un singolo cristallo quando la sorgente si trova all'infinito e, come aspettato, la figura di diffrazione non subisce effetti. L'effetto di sorgente estesa é invece molto evidente nelle figure sottostanti, relative a sorgente di radiazione posta a una distanza finita. Per amplificare l'effetto si é scelta una dimensione della sorgente pari a 2 mm. Le condizioni di laboratorio sono comunque molto prossime alla condizione di sorgente puntiforme dato che la sorgente di radiazione ha dimensione  $0.2 \times 0.2$  mm<sup>2</sup>.

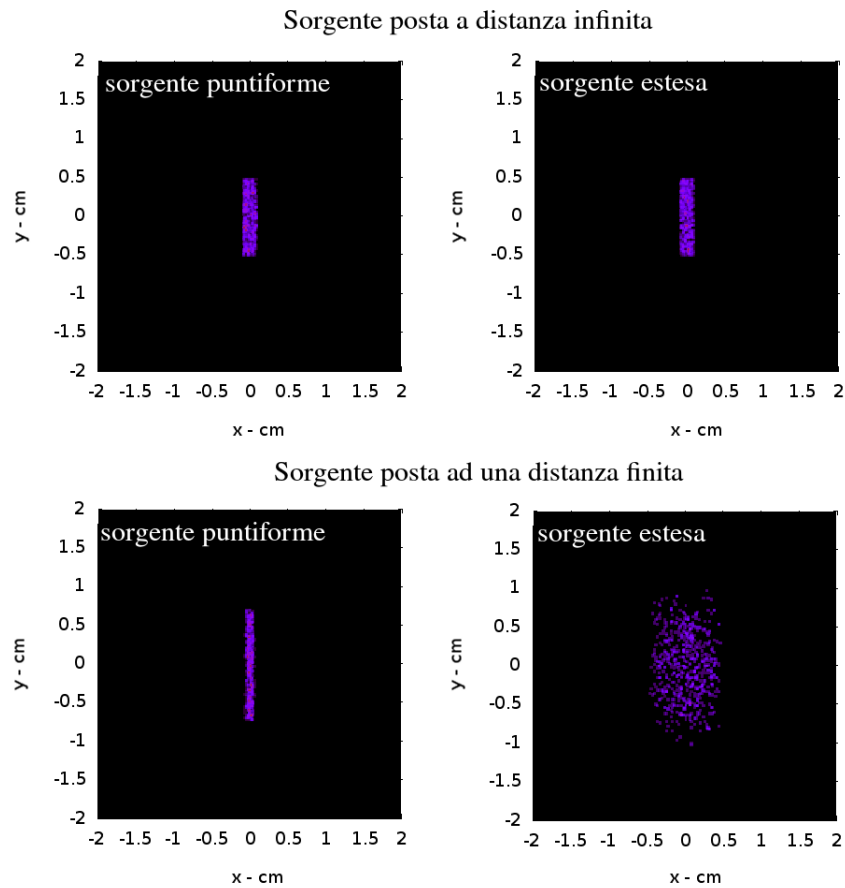


Figura 3.4: Figure di diffrazione prodotta sul detector da sorgente puntiforme e sorgente estesa, posta ad una distanza infinita e finita.

## Ring

Data una serie di cristalli é possibile costruire un anello di tessere cristalline con la classe RING. Per sorgenti in asse il processo di creazione della PSF per la classe RING prevede semplicemente di sommare il contributo di tutti i cristalli che agiscono in modo simile l'un l'altro data l'ovvia simmetria del sistema rispetto alla rotazione attorno all'asse ottico. La trattazione risulta invece meno ovvia nella creazione della PSF quando la sorgente si trova fuori asse, per cui la simmetria é rotta e i contributi di tutti i cristalli vanno trattati singolarmente. In Fig. 3.5 viene mostrata la distribuzione dei cristalli cosí come viene creata nella classe RING.

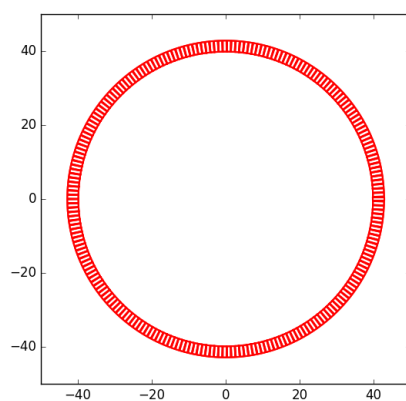


Figura 3.5: Geometria utilizzabile per una lente di Laue. Singolo anello di cristalli.

In Fig. 3.6 é invece mostrata la PSF ottenuta per un anello di cristalli facendo un confronto fra cristalli piatti (pannello in alto) e cristalli curvi (pannello in basso). Nel secondo caso si nota una dimensione della PSF molto piú piccola il che comporta la possibilitá di avere una risoluzione angolare nettamente migliore per uno strumento nel quale siano impiegati cristalli curvi.

Tra le funzioni del software vi é quella di poter posizionare il rivelatore a distanza variabile dalla superficie sulla quale vengono posizionate le tessere cristalline. Tale possibilitá é utile poiché permette di verificare che in posizione di fuori fuoco i cristalli focalizzano la radiazione in punti differenti l'uno dall'altro fino a mostrare una PSF nella quale tutti i contributi dei cristalli sono idealmente sovrapposti nel caso di posizionamento del rivelatore nel fuoco nominale della lente. Un esempio é mostrato in Fig. 3.7 nella quale la classe RING é stata utilizzata per simulare un anello di cristalli curvi ( $r = 40$  m) di dimensione  $30 \times 10$  mm<sup>2</sup> in cui il rivelatore é posto rispettivamente a 19.5 m e a 20 m dalla lente stessa.

Il software di ray-tracing indica quindi anche l'importanza di mantenere continuamente lente e rivelatore alla corretta distanza nominale poiché anche una variazione di pochi cm peggiora in modo evidente la larghezza della PSF. Data l'invarianza della PSF in funzione dell'energia, la classe RING é quella maggiormente impiegata nel prossimo capitolo nel quale ci concentreremo sugli effetti prodotti sulla PSF da sorgenti che si trovino spostate fuori dall'asse ottico.

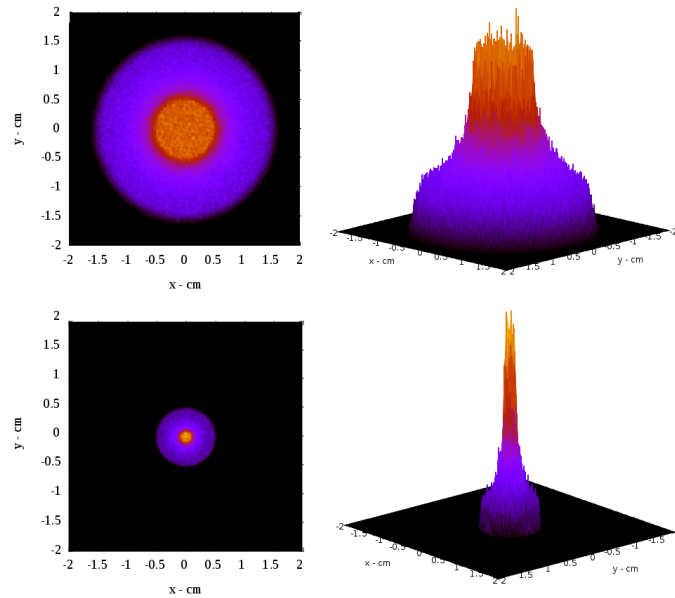


Figura 3.6: Simulazioni di figure di diffrazione ottenute utilizzando cristalli  $30 \times 10 \text{ mm}^2$  di spessore 3 mm nei due casi di cristalli piatti (pannelli superiori) e di cristalli curvi con raggio di curvatura pari al doppio della lunghezza focale della lente (pannelli inferiori), in questo caso con un raggio di curvatura di 40 m.

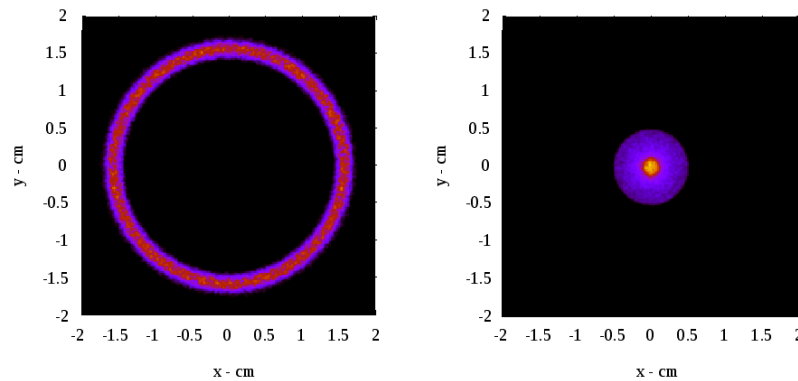


Figura 3.7: Figura di diffrazione prodotta da un anello di cristalli con il rivelatore posizionato alle distanze di 19.5 m (sinistra) e 20 m (destra) dalla lente.

### Rings e sector

Nella libreria LENTI é prevista la generazione di intere lenti di Laue formate da anelli di cristalli concentrici o con cristalli distribuiti secondo una spirale di Archimede. La scelta dell'una o dell'altra configurazione dipende dal fatto che per tutti i cristalli appartenenti ad un singolo anello rispondono (nella trattazione in asse) alla stessa banda energetica mentre per cristalli posizionati secondo una spirale di Archimede, ciascun cristallo ha una posizione unica ed una risposta energetica diversa da tutti gli altri. Per focali corte il gap fra un

anello e l'altro ha effetti negativi sull'area efficace che risulterebbe non costante. Per focali lunghe ( $\geq 10$  m) le due configurazioni sono equivalenti e quella costituita di anelli concentrici è preferibile perché costruttivamente più semplice da realizzare. Nel software è possibile anche selezionare un angolo di apertura della lente, creando quindi settori circolari ad apertura variabile. Tali configurazioni sono schematizzate in Fig. 3.8. Ovviamente l'obiettivo finale di uno studio di lenti di Laue è quello della realizzazione di una lente completa per cui la classe rings è quella che offre i risultati più rilevanti. Tuttavia, la classe sector ha un'importanza basilare poiché consente di confrontare i risultati attesi con quelli sperimentali tuttora in corso nei quali è prevista la realizzazione di una frazione di lente di Laue (detta petalo) costituita da un numero limitato di cristalli curvi di Arseniuro di Gallio (GaAs).

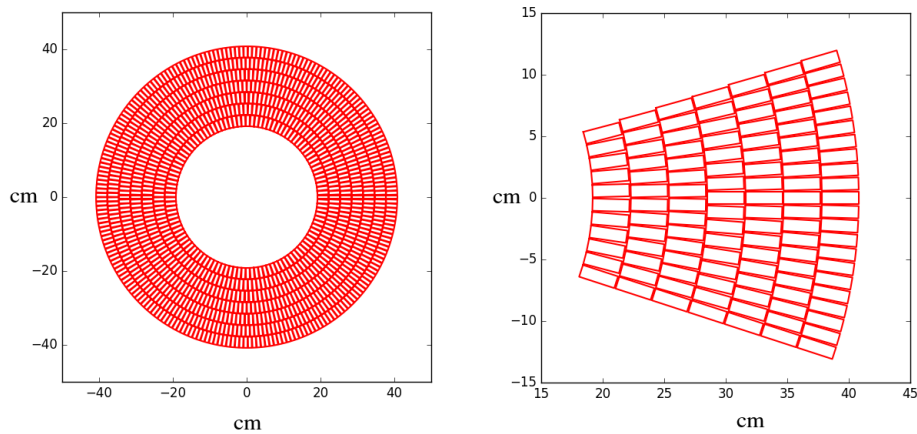


Figura 3.8: Schema esplicativo per una lente di laue formata da anelli concentrici (sinistra) e per una settore circolare (destra).



## Capitolo 4

# Studio della risoluzione angolare e del campo di vista di una lente di Laue

*In questo Capitolo verranno mostrate le simulazioni Monte Carlo effettuate modificando i parametri principali che caratterizzano una lente e che concorrono alla variazione della point spread function dell'ottica di Laue. I parametri che maggiormente influenzano tale psf sono le dimensioni delle tessere cristalline in uso e la mosaicit  dei campioni usati. Successivamente, sar  descritto il comportamento di una lente di Laue fuori asse e saranno studiati i suddetti parametri che permettono di avere una buona point spread function per un campo di vista il pi  possibile esteso.*

### 4.1 Introduzione

Data una sorgente puntiforme di radiazione incidente su di un'ottica, la point spread function (PSF) rappresenta la distribuzione dei fotoni focalizzati. La PSF caratterizza quindi le propriet  del sistema ottico. Alcune utili funzioni e quantit  possono essere ricavate da essa come il parametro che viene chiamato potenza a meta del raggio (half power radius, HPR) che   definito come il raggio all'interno del quale sono raccolti la met  dei fotoni diffratti.

La risoluzione angolare di un telescopio   definita come il minimo angolo che il sistema ottico   in grado di distinguere senza che l'immagine sul rivelatore diventi confusa. Minore   l'angolo limite del nostro apparato migliore sar  la capacit  di distinguere sorgenti astrofisiche vicine. Da un punto di vista qualitativo, possiamo controllare la risoluzione angolare dalle caratteristiche di larghezza e altezza della PSF. Infatti se nel campo di vista del telescopio sono presenti due sorgenti di radiazione puntiformi pi  le PSF sono strette e piccate meno interferiranno fra loro e, dunque, pi  facile sar  distinguere le sorgenti.

Un ottica focalizzante ha un campo di vista che dipende dalle caratteristiche del sistema ottico. La bont  della PSF al crescere dell'angolo di fuori asse definisce il campo di vista di un telescopio (field of view, FOV). Se una sor-

gente si trova ad un angolo di fuori asse significativamente grande, l'immagine sar  distorta da fenomeni di aberrazione e per essa non sar  possibile sfruttare appieno le potenzialit  del telescopio.

L'obiettivo di questa Tesi   quello di studiare il comportamento dell'immagine di una sorgente puntiforme proiettata sul rivelatore ottenuta dal fenomeno di diffrazione prodotto da una lente di Laue. Tutto il lavoro   stato realizzato mediante simulazioni Monte Carlo per ottimizzare il campo di vista e la risoluzione angolare per sorgenti fuori asse variando alcuni parametri che saranno descritti in seguito. Inizialmente si osserver  la dipendenza della PSF a seconda dell'energia per la quale la lente di Laue   stata progettata. Per lenti di Laue funzionanti a diverse energie (e quindi a diversi raggi) analizzeremo l'evoluzione della forma della PSF. Successivamente, sar  descritta la dipendenza che c'  tra le dimensioni delle tessere cristalline usate e il FOV e l'HPR. Si valuter  anche come la mosaicit  dei microcristallini influisca sull'ottimizzazione dei parametri.

#### 4.1.1 Parametri mantenuti costanti in tutte le simulazioni

Le successive simulazioni sono ottenute con il software nel quale un grande numero di variabili pu  essere modificato. Solo alcune di esse sono state considerate rilevanti per questa Tesi. Tutte le altre sono state mantenute costanti ed in questo paragrafo andiamo a discutere le pi  significative ed i motivi che ci hanno spinto a scegliere determinati valori.

Studiando un caso astrofisico, la sorgente di radiazione   stata posta a distanza infinita dalla lente di Laue e la dimensione della sorgente resa puntiforme.

Per le simulazioni che vedremo successivamente si   scelto di utilizzare cristalli con piani cristallini curvi di spessore 4 mm. Lo spessore delle tessere ha una rilevanza soprattutto per l'efficienza di diffrazione. Nel software   prevista l'ottimizzazione dello spessore, in dipendenza dall'energia ma questa opzione risulta dispendiosa in termini di tempo macchina quindi si   preferito mantenere invariato questo parametro. In realt  lo spessore delle tessere, specialmente per quanto riguarda cristalli perfetti, influenza debolmente la larghezza della PSF ma di tale allargamento non   stato tenuto conto. Le altre due dimensioni dei cristalli (lunghezza e larghezza) invece saranno variate come possibili parametri che ottimizzano il campo di vista e la risoluzione angolare dell'ottica. Le lenti di Laue simulate hanno tutte lunghezza focale di 20 metri. Tale valore permette di focalizzare i fotoni di una banda energetica di interesse 90-600 keV mantenendo il diametro dell'ottica di dimensioni 2-3 metri, e allo stesso tempo la distanza focale   sufficientemente limitata da poter essere ottenuta con un braccio telescopico che mantiene quindi lente e rivelatore su un singolo spacecraft senza il bisogno di introdurre il concetto di "volo in formazione" (due strumenti separati che sono mantenuti in volo continuamente alla stessa distanza) che risulta complicato e costoso da realizzare.

Nelle simulazioni, viene considerato un numero variabile di cristalli, dipendente dalla banda energetica alla quale la lente lavora (l'energia diffratta dipende dal raggio al quale le tessere vengono disposte e quindi varia il numero di tessere posizionabili su quel particolare anello). Si   deciso di mantenere una interdistanza fra le tessere cristalline di 1 mm. Questo valore rappresenta un compromesso fra un buon fattore di riempimento dell'anello (vi saranno spazi vuoti fra le tessere che concorreranno a limitare l'area efficace totale) e una distanza sufficiente fra i cristalli che ne permetta un montaggio agevole in fase costrutti-



va. Tuttavia, in una fase piú avanzata, nulla vieta la produzione di tessere dalla forma non rettangolare (in grado quindi di massimizzare l'area coperta) e con inter-distanza molto minore.

Per quanto riguarda le proprietá cristalline dei materiali, si sono usate tessere di Arseniuro di Gallio, con piani di diffrazione individuati dagli indici di Miller [220] con mosaicitá variabile e dimensione dei microcristallini di  $40 \mu\text{m}$  che é un valore plausibile per il tipo di cristalli. Nel caso invece dell'utilizzo di cristalli perfetti lo spread angolare corrisponde ad una larghezza di Darwin di circa 5 secondi d'arco. Infine, benché non abbiano effetto sulla forma e le dimensioni dell'immagine diffratta anche i parametri del rivelatore sono stati fissati, avendo posto le dimensioni dell'area sensibile pari a 4 cm con pixels di dimensione  $200 \mu\text{m}$  (quindi un rivelatore quadrato di  $200 \times 200$  pixels).

## 4.2 Parametri che influenzano la distribuzione dei fotoni sul piano del rivelatore

La trattazione che segue é volta all'analisi dei parametri che maggiormente influenzano la PSF e la sua forma sul piano focale. I parametri che sono stati considerati sono l'energia diffratta dalla lente (cioé la banda passante nominale della lente stessa), le dimensioni radiale e tangenziale delle tessere cristalline impiegate per la diffrazione e la mosaicitá dei campioni (o quasi-mosaicitá nel caso in cui si considerino cristalli perfetti). In questo paragrafo analizziamo il comportamento della lente nel caso in cui la sorgente sia posta in asse e successivamente nel paragrafo 4.3 ci concentreremo sugli effetti prodotti sulla PSF da una sorgente posta fuori asse.

### 4.2.1 Dipendenza dall'energia

La prima domanda che ci poniamo é se la distribuzione dei fotoni diffratti abbia dipendenza dall'energia nel caso in cui la sorgente sia in asse. Una lente di Laue lavora tra un massimo e un minimo di energia corrispondenti a cristalli posizionati a raggi via via crescenti dal centro della lente, perció modificare l'energia e studiare l'immagine prodottá vuol dire considerare il diffratto di una corona di cristalli rispetto ad un'altra.

Dati tre valori di energia  $E_1 > E_2 > E_3$ , corrispondenti a tre anelli rispettivamente a distanza dal centro  $r_1 < r_2 < r_3$  analizziamo se l'energia influenza o meno la forma e le dimensioni della PSF. In Fig. 4.1, é riportato uno schema semplificato con i tre anelli di cristalli. Se la sorgente é situata perfettamente in asse (cioé la direzione di arrivo dei fotoni coincide con l'asse della lente), tutti i fotoni verranno diffratti verso un punto sull'asse ad una distanza  $F$  che é il fuoco della lente di Laue.

Con l'aiuto del ray-tracer sviluppato in laboratorio abbiamo generato un set di configurazioni con anelli di cristalli perfetti (Fig. 4.2) che prevedono una sorgente di radiazione in asse, e tre diversi anelli di lente in grado di focalizzare le energie 100 keV, 200 keV e 300 keV. Ció che emerge dalle simulazioni é che non c'è dipendenza dall'energia benché nei tre casi le lenti fossero relative ad energie diverse e avessero quindi dimensioni diverse (diametro delle lenti di 322 cm, 251 cm e 135 cm rispettivamente per energie crescenti). L'effetto é analogo nel caso in cui non si utilizzino cristalli perfetti ma cristalli a mosaico. In Fig. 4.3 sono

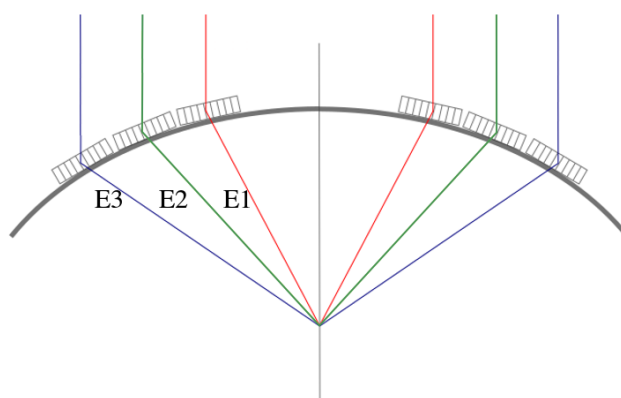


Figura 4.1: Schema illustrativo di una sezione di lente di Laue che mostra 6 cristalli corrispondenti (a due alla volta) a tre anelli concentrici. Ciascun anello di cristalli sar  responsabile di una particolare energia (o banda passante allargata principalmente dalla mosaicit  e dalla curvatura dei cristalli).

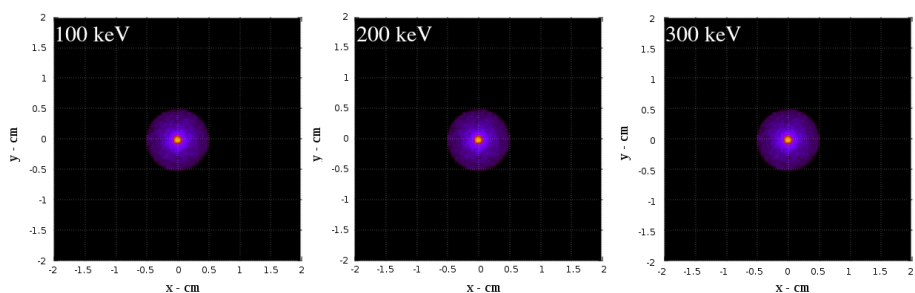


Figura 4.2: Figure di diffrazione per anelli di cristalli perfetti che lavorano rispettivamente a 100 keV, 200 keV e 300 keV per una sorgente in asse.

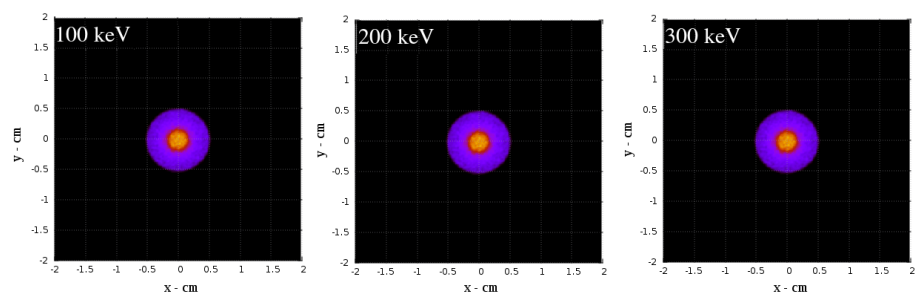


Figura 4.3: Figure di diffrazione per anelli di cristalli a mosaico (10 arcsec di mosaicit ) che lavorano rispettivamente a 100 keV, 200 keV e 300 keV per sorgenti in asse.

mostrate le figure di diffrazione ottenute per cristalli a mosaico con mosaicit  di  $10''$  e con sorgente in asse per le stesse energie precedenti di 100 keV, 200 keV e 300 keV. La differenza evidente fra le immagini presentate in Fig. 4.3 e quelli in Fig. 4.2   che la parte centrale   pi  estesa nel caso di cristalli a mosaico. Tale effetto   provocato dalla mosaicit  dei cristalli che allarga sensibilmente la figura di diffrazione.

### 4.2.2 Dipendenza dalle dimensione dei cristalli

In questa sezione sono viene studiata la dipendenza della PSF da entrambe le dimensioni radiale e tangenziale delle tessere cristalline che si impiegano in una lente di Laue (Fig. 4.4). Al contrario, in questa Tesi lo spessore delle tessere cristalline non é stato studiato in termini di influenza sulla forma e sulle dimensioni della PSF.

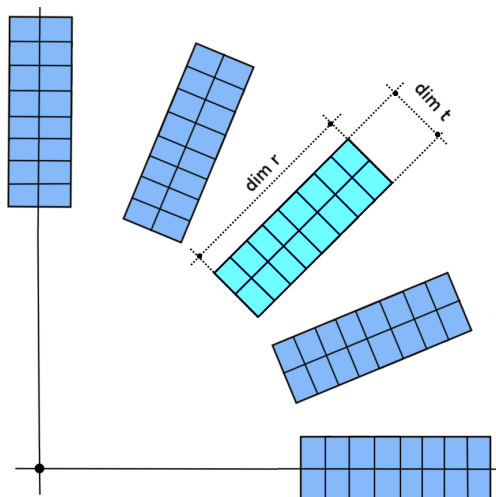


Figura 4.4: Schema illustrativo di una sezione di anello in cui individuiamo la dimensione tangenziale e radiale dei cristalli.

#### Influenza della dimensione radiale

Cristalli con piani di diffrazione incurvati possono essere ottenuti con una varietà di metodi. Vi sono sistemi meccanici che servono a mantenere l'appropriata curvatura sulla tessera, o metodi che si basano su lavorazioni superficiali (lappatura, indentazioni) che inducono uno stress che é in grado di mantenere una costante curvatura del campione. Tutti questi metodi provocano la creazione di una curvatura cilindrica dei piani di diffrazione con la conseguente realizzazione del fenomeno di focalizzazione in una sola direzione, la direzione radiale. Di conseguenza, in linea di principio la dimensione radiale del cristallo non dovrebbe avere influenza sulla dimensione del segnale diffratto da ciascuna singola tessera cristallina.

Per vagliare questa ipotesi, abbiamo simulato 3 condizioni diverse per un anello di lente di Laue dedicato alla diffrazione dei fotoni con energia di 200 keV (Fig. 4.5). Fissate le dimensioni tangenziali di tutte le tessere a  $dim_t = 30$  mm, abbiamo prodotto un fascio di  $10^6$  fotoni proveniente da una sorgente in asse per dimensioni radiali di  $dim_r = 10$  mm, 30 mm e 50 mm. In Fig. 4.5 sono riportate le immagini diffratte rispettivamente per le tre dimensioni radiali considerate che sono perfettamente sovrapponibili. Per rendere lo studio piú analitico é stato prodotto un profilo lungo la direzione  $x$  integrando tutti i conteggi lungo l'asse  $y$ . In questo modo l'immagine assume un profilo bidimensionale. In questo caso appare chiaro che i tre profili sono identici. Quindi, come atteso, non si

osservano differenze al variare della grandezza dei cristalli, dunque l'ipotesi che la dimensione radiale non influenza la PSF è corretta.

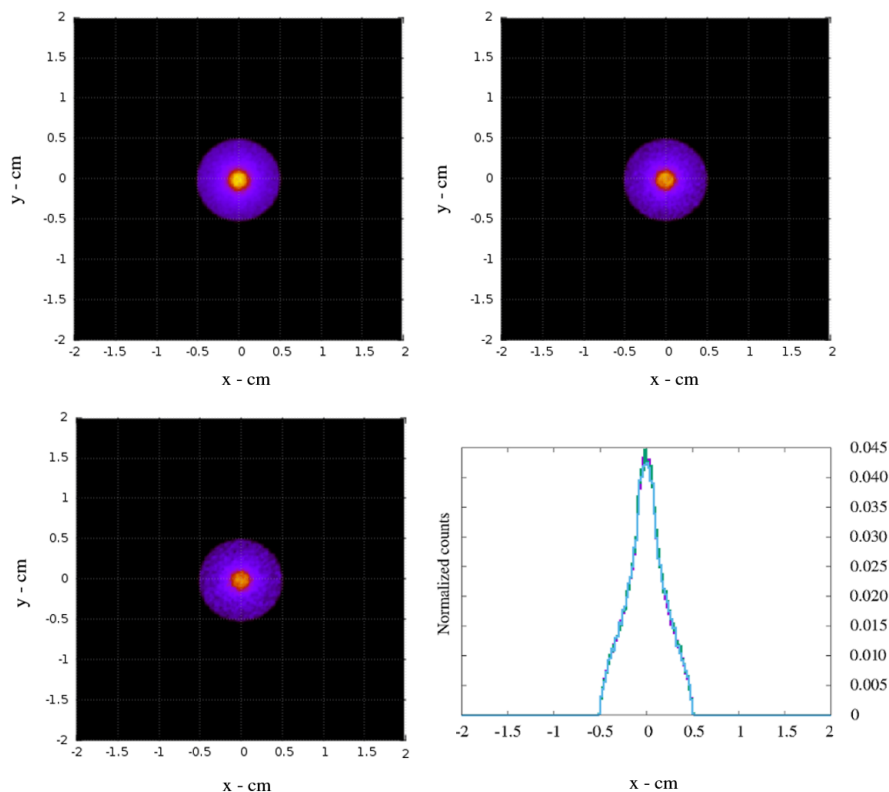


Figura 4.5: Figure di diffrazione generate da cristalli rispettivamente aventi dimensione radiale di 10 mm, 20 mm e 30 mm e le PSF di questi tre casi rappresentate nello stesso grafico.

### Influenza della dimensione tangenziale

Solamente studiando la formazione dell'immagine di diffrazione di un cristallo possiamo intuire che il ruolo della dimensione tangenziale sulla PSF gioca un ruolo molto importante, perciò possiamo immaginare che variando la dimensione tangenziale si produrranno differenze significative sulla risoluzione angolare e sul campo di vista. Procedendo metodicamente, abbiamo prodotto con il software un anello di cristalli dedicato alla diffrazione di fotoni di energia di 200 keV con cristalli di dimensione radiale fissa  $dim_r = 30$  mm e dimensione tangenziale di  $dim_t = 5$  mm, 10 mm, 20 mm, 30 mm, 40 mm, 50 mm e 60 mm.

In Fig. 4.6 mostriamo l'andamento della distribuzione dei fotoni sul piano del rivelatore al crescere della dimensione radiale dei cristalli. Si può osservare qualitativamente che si passa da una PSF concentrata in una regione molto limitata, a PSF il cui picco è meno evidente. Vi sono cioè due strutture, la prima che ha un picco centrale prodotta dalla sovrapposizione delle immagini prodotte da tutti i cristalli, e una secondaria (che chiameremo spalla) che rappresenta l'alone che circonda il picco centrale ed è prodotto dai singoli cristalli in diffrazione. Il comportamento risulta ancora più evidente se si visualizza il profilo lungo

$x$  come mostrato in Fig. 4.7. Da questi risultati osserviamo che le dimensioni tangenziali delle tessere in uso hanno una grande influenza sulla PSF.

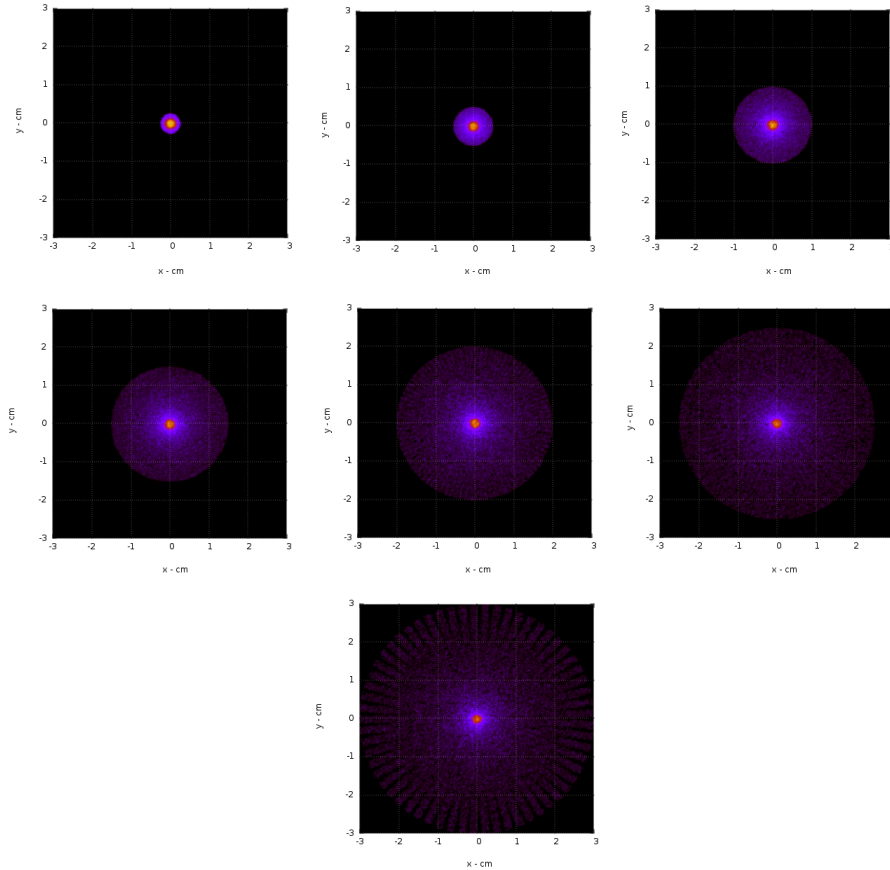


Figura 4.6: Figure di diffrazione prodotte al variare della dimensione tangenziale. Dall'alto verso il basso e da sinistra a destra: 5 mm, 10 mm, 20 mm, 30 mm, 40 mm, 50 mm e 60 mm.

Più estesa è la dimensione tangenziale più la PSF assume grandi dimensioni, meno intenso risulta il picco di diffrazione. Dalle immagini di Fig. 4.6 si osservano. Come vedremo successivamente, il campo di vista di un telescopio basato sulle lenti di Laue può essere influenzato moltissimo dalla presenza dei contributi di picco e di spalla.

Per definire meglio la bontà di una PSF ci viene in aiuto il concetto di half power radius (HPR) che è un parametro che individua la regione radiale di detector nella quale viene raccolta la metà della potenza diffratta. Tale parametro è ovviamente legato a quanto la PSF è concentrata in un punto e correlato con la risoluzione angolare di uno strumento. L'HPR in funzione della dimensione tangenziale dei cristalli è mostrato in Fig. 4.8 e la relazione è di tipo lineare. Una buona risoluzione angolare si ottiene minimizzando l'HPR affinché le PSF di due sorgenti siano distinguibili sul detector, tenendo conto che le dimensioni delle tessere cristalline non possono essere ridotte a zero.

Da questa prima analisi per sorgenti in asse, possiamo concludere che per

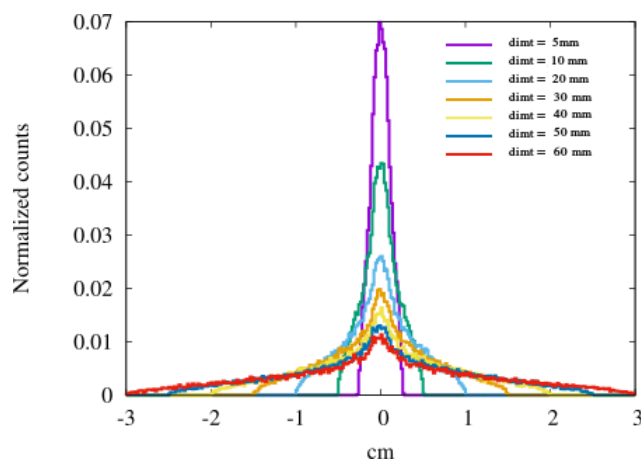


Figura 4.7: PSF al variare della dimensione tangenziale.

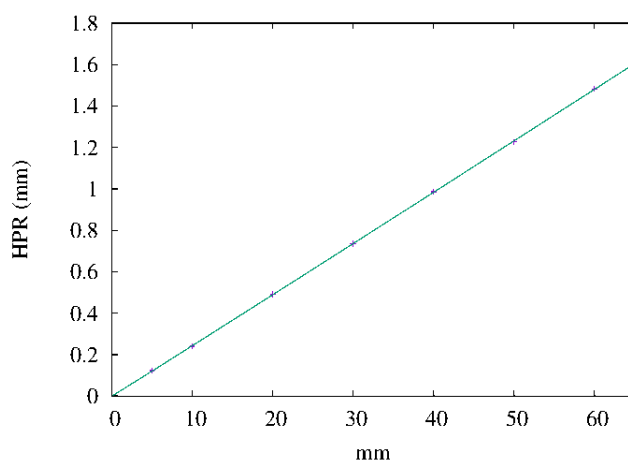


Figura 4.8: Half Power Radius in funzione della dimensione tangenziale dei cristalli.

ottimizzare le caratteristiche della lente bisogna trovare un compromesso tra risoluzione angolare e campo di vista. Per il cristallo  $30 \times 5 \text{ mm}^2$  l'HPR é tale per cui si potrebbe distinguere sorgenti molto vicine ma dall'altra parte il campo di vista é pessimo. Allo stesso modo con i cristalli con dimensione di  $30 \times 50 \text{ mm}^2$  e  $30 \times 60 \text{ mm}^2$  posso arrivare a studiare area significativamente estese del cielo ma con conseguenza che sarebbe difficile distinguere sorgenti vicine dato che l'HPR é molto grande. Inoltre bisogna considerare che per cristalli piú grandi dei  $30 \times 30 \text{ mm}^2$  sarebbe complicato disporli in modo da formare una lente funzionante in quanto ci sarebbero molti spazi vuoti. Nelle successive analisi verranno considerate come dimensioni plausibili soprattutto dal punto di vista tecnologico quelle di  $30 \times 10 \text{ mm}^2$ ,  $30 \times 20 \text{ mm}^2$ ,  $30 \times 30 \text{ mm}^2$  e scartate quelle troppo piccole ( $30 \times 5 \text{ mm}^2$ ) o troppo grandi ( $30 \times 50 \text{ mm}^2$  e  $30 \times 60 \text{ mm}^2$ ).

### Dipendenza dalla mosaicit 

La mosaicit  (o quasi mosaicit ) di un cristallo concorre ad allargarne al figura di diffrazione per mezzo del cosiddetto *mosaic defocusing*. La distribuzione dei microcristallini attorno ad al piano pi  probabile segue una distribuzione Gaussiana e tale configurazione porta sul piano del rivelatore fotoni di una banda passante non puntiforme, cio  una fascio policromatico, cosa che invece accadrebbe per cristalli perfetti. La figura di diffrazione risulta quindi allargata e la larghezza di questa immagine diffratta si pu  facilmente stimare per via analitica/geometrica. Prendiamo come riferimento la Fig. 4.9 nella quale sono schematizzati due cristalli investiti da un fascio di radiazione in asse.

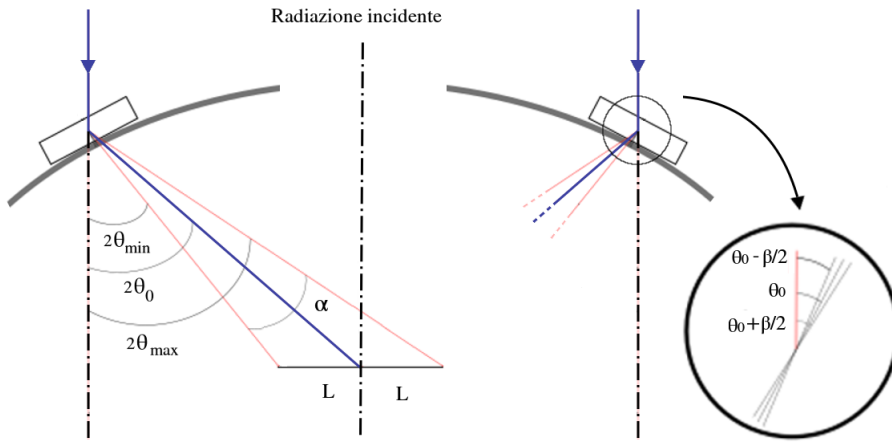


Figura 4.9: Schema illustrativo di diffrazione per un cristallo a mosaico per sorgente in asse (di colore rosso) e per sorgente fuori asse (di colore blu).

Dopo la diffrazione il fascio sar  allargato per effetto della mosaicit   $\beta$ . Tenendo conto che la focale  $F$  di una lente di Laue per applicazioni spaziali ha dimensioni ragguardevoli rispetto al raggio al quale viene posto il cristallo ( $r/F < 0.1$ ) tramite semplici considerazioni geometriche si determina che l'apertura del fascio sar  data da:

$$2 \cdot L \sim \alpha \cdot F = 2(\theta_{max} - \theta_{min}) \cdot F = 2\beta \cdot F \quad (4.1)$$

dove  $\theta_{max}$  e  $\theta_{min}$  sono definiti dalla mosaicit   $\beta$ :

$$\theta_{max} = \theta_0 + \frac{\beta}{2} \quad \theta_{min} = \theta_0 - \frac{\beta}{2} \quad (4.2)$$

Risulta quindi che la larghezza del fascio diffratto da un cristallo   proporzionale alla lunghezza focale della lente e al doppio della mosaicit  del cristallo. Ne consegue quindi che per avere una PSF di dimensioni limitate sul rivelatore occorrono cristalli la cui mosaicit  non assuma valori troppo elevati. L'analisi della dipendenza dalla mosaicit    stata svolta simulando un anello di cristalli in diffrazione all'energia di 200 keV con cristalli dalle dimensioni fissate in  $30 \times 10 \text{ mm}^2$  con un fascio di  $10^6$  fotoni da un sorgente posta in asse, variando la mosaicit  fra 5" e 50" ad intervalli di 5". In Fig. 4.10 sono mostrate le distribuzioni spaziali dei fotoni sul rivelatore.

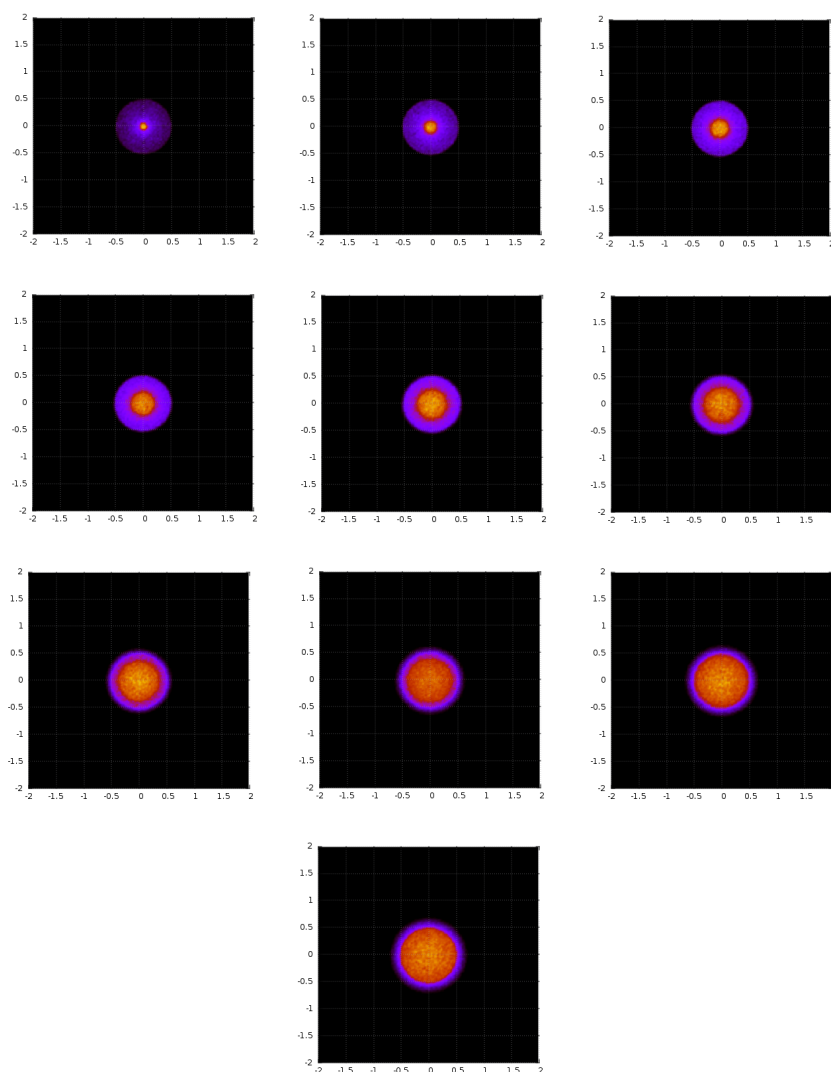


Figura 4.10: Figure di diffrazione prodotte al variare della mosaicità da valori di 5'' (in alto a sinistra) fino a valori di 50'' con passi di 5''.

Da una prima analisi qualitativa si può notare che la dimensione complessiva della PSF non cambia benché alle basse mosaicità si noti un picco più pronunciato che va progressivamente allargandosi per mosaicità maggiori. Contrariamente la porzione che abbiamo denominato spalla si restringe progressivamente passando da 5'' a 50'' di mosaicità. Questa prima osservazione suggerisce che piccoli valori di mosaicità portino ad una risoluzione angolare migliore rispetto a valori di spread mosaico superiori ai 30''. In Fig. 4.11 sono mostrati i profili integrati lungo la coordinata  $x$  per tutte le PSF per ciascun valore della mosaicità. La Figura evidenzia questo abbassamento dell'intensità di picco e l'arrotondamento dello stesso per valori di mosaicità elevati. Un'analisi più quantitativa è stata fatta determinando l'HPR in funzione della mosaicità come mostrato in Fig. 4.12



in cui si vede che la metà della potenza si ottiene per valori tra 2.3 mm e 3.6 mm per mosaicità nell'intervallo 5"-50". Per modellare i dati é stata utilizzata una funzione fenomenologia del tipo  $f(x) = a x^b + c$  i cui parametri di best fit sono inclusi nel grafico. In base a queste considerazioni e poiché l'accuratezza con la quale si riescono a posizionare le tessere cristalline é di circa 20" escludiamo dalle successive analisi studi di cristalli con mosaicità superiore a 20".

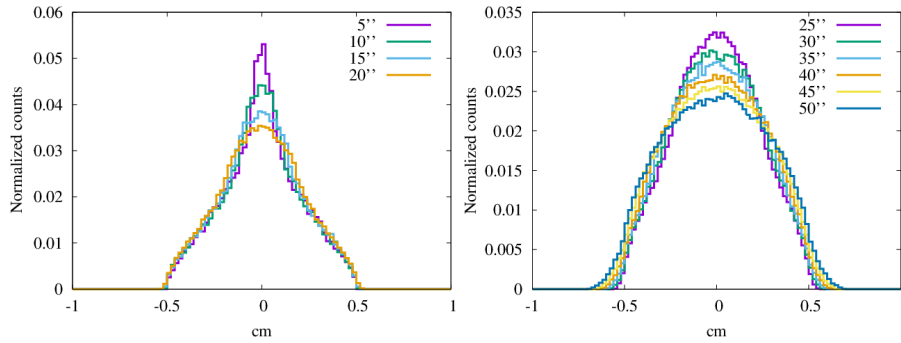


Figura 4.11: Profili integrati lungo la coordinata  $x$  del rivelatore per figure di diffrazione ottenute con cristalli a mosaico aventi mosaicità da 5" a 50" con passo 5" (si veda il testo per dettagli).

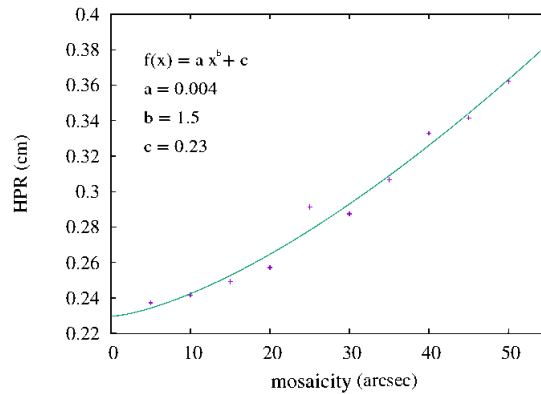


Figura 4.12: Dipendenza del'HPR dalla mosaicità. La linea verde rappresenta la funzione  $f(x) = a x^b + c$  i cui parametri di best fit sono indicati nella figura.

### 4.3 Analisi della PSF per sorgenti fuori asse

In questa Tesi ci occupiamo di analizzare anche gli effetti di degradazione della PSF all'aumentare dell'angolo di fuori asse. Con alcune generalizzazioni, le trattazioni geometrico/analitiche possono essere anche applicate al caso in cui le sorgenti vengano poste fuori asse. In generale, in funzione del valore di angolo di fuori asse si osservano deformazioni della PSF nei quali la parte piú luminosa é traslata rispetto al picco centrale fino all'apparizione di aloni dovuti ad effetti di aberrazione. Per esempio, in Fig. 4.13 si osservano due immagini di diffrazione con sorgente in asse (a sinistra) e con sorgente spostata di 1 arcmin fuori asse (a destra). Se viene prodotto il profilo lungo la direzione  $x$  si nota in modo ancora piú evidente lo shift del picco (Fig. 4.14) nella distribuzione dei fotoni per sorgente fuori asse rispetto a quella con sorgente in asse che risulta essere in questo esempio di circa 5.6 mm.

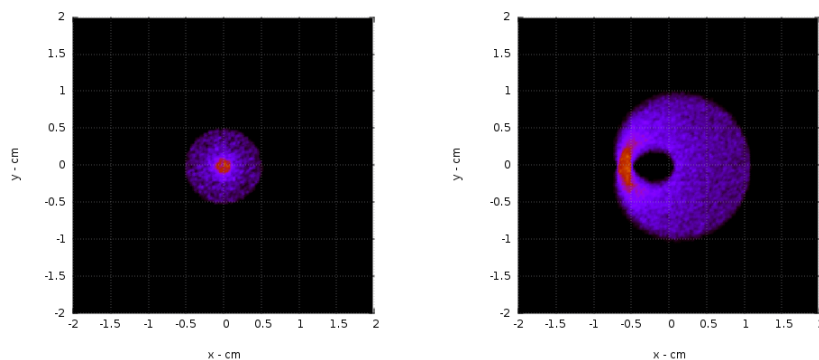


Figura 4.13: PSF simulate per una lente di Laue dedicata alla diffrazione di 200 keV con  $10^6$  fotoni prodotti in asse (sinistra) e con angolo di fuori asse di 1' (destra).

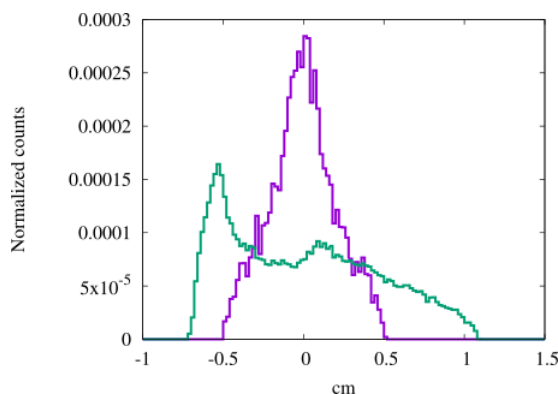


Figura 4.14: Point Spread Function per la configurazione in asse (di colore viola) e fuori asse (di colore verde).

Quando la sorgente di radiazione si sposta fuori asse, il punto nel quale la radiazione viene focalizzata cambia. In Fig. 4.15 é mostrato un disegno esemplificativo nel quale sono visualizzati solo due cristalli corrispondenti ad un singolo anello (e quindi ad una particolare energia). La linea rossa individua

una sorgente in asse la cui radiazione viene indirizzata nel fuoco  $O$  della lente. Se la sorgente é posta ad un angolo di offset  $\theta_{off}$  rispetto la direzione verticale la radiazione diffratta dai due cristalli verrà focalizzata in un punto  $O'$  traslato rispetto al punto  $O$ .

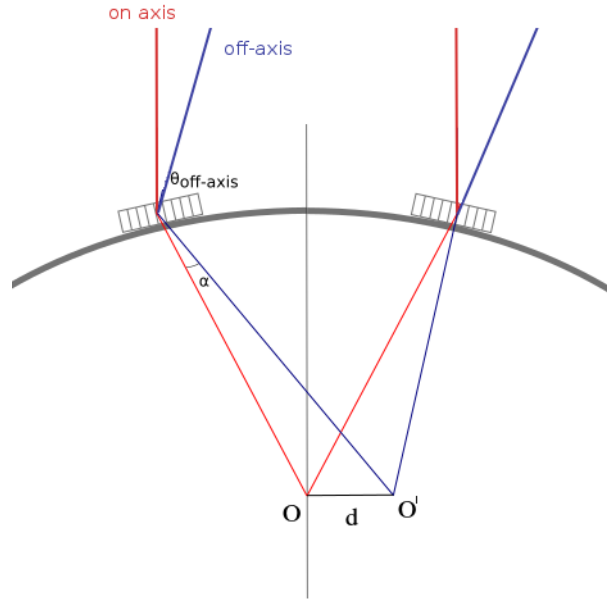


Figura 4.15: Schema esemplificativo che mostra due cristalli focalizzanti la radiazione nei due casi di sorgente in asse (rosso) e fuori asse (blu).

Chiamiamo  $d$  la distanza fra  $O$  ed  $O'$  che si può determinare per via geometrica come:

$$d = \alpha \cdot F \quad (4.3)$$

dove  $\alpha$  é dato dalla differenza fra gli angoli di incidenza della radiazione in asse  $\theta_{on}$  e fuori asse  $\theta_{off}$ . Chiaramente se si considera  $\theta_{on} = 0$ ,  $\alpha$  risulterà uguale a:

$$\alpha = \Delta \theta = \theta_{off} \quad (4.4)$$

percio, la traslazione sul piano del detector sarà uguale a:

$$d = \theta_{off} \cdot F \quad (4.5)$$

Ritornando al confronto fra sorgente in asse e fuori asse di Fig.4.14 osserviamo che il valore indicato é in accordo con quanto determinato dall'Eq. 4.5 ponendo una focale di 20 metri e un angolo di fuori asse di  $1'$  ( $d \sim 5.81$  mm).

Quanto detto fino ad ora é una trattazione semplificata valida per una coppia di cristalli appartenenti ad un anello, diametralmente opposti fra loro ed angolo di fuori asse della radiazione nella stessa direzione congiungente i due cristalli. Tuttavia, si può ripetere lo stesso ragionamento con una diversa coppia di cristalli appartenente ad un diverso anello e per ragioni geometriche si può

dimostrare che i due fasci diffratti uscenti dalla seconda coppia di cristalli focalizzerá nello stesso punto della coppia precedente. D'altra parte, dall'equazione 4.5 si deduce che la distanza  $d$  non dipende dall'energia o dal raggio al quale sono posti i cristalli, perciò é valida per ogni energia. Quindi, come già osservato nel Paragrafo 4.2.1, non vi sono effetti sulla PSF dovuti alla focalizzazione di diverse energie. Tale comportamento é confermato anche se la sorgente é posizionata fuori asse.

### Influenza della mosaicitá

Analogamente alle trattazioni precedenti una sorgente con un angolo di offset provoca uno spostamento dell'immagine la quale però non viene alterata nelle sue dimensioni dalla mosaicitá. La configurazione rispetto alla situazione in asse puó essere schematizzata come indicato in Fig. 4.16.

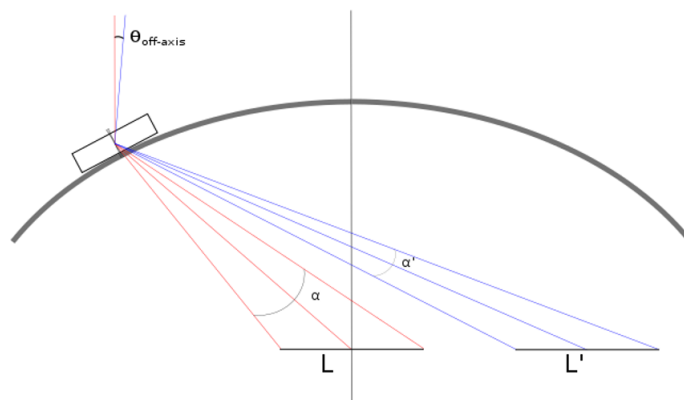


Figura 4.16: Schema illustrativo della diffrazione di un cristallo per sorgenti in asse (in colore rosso) e per sorgenti fuori asse (in colore blu).

L'apertura angolare é indipendente dall'angolo di arrivo della radiazione sul cristallo ( $\alpha' = \alpha$ ). La larghezza dell'immagine traslata sará proporzionale alla mosaicitá e, ricordando che la distanza focale é molto maggiore del raggio al quale il cristallo é posizionato, indipendente dall'angolo di fuori asse ( $L = L'$ ).

### 4.3.1 Ottimizzazione del campo di vista e della risoluzione angolare

Discussi i parametri che hanno effetti sulla PSF vogliamo cercare di selezionare la combinazione tra mosaicitá e dimensione tangenziale che ci permettano di ottimizzare campo di vista e risoluzione angolare di una lente di Laue. Dalle simulazioni precedenti abbiamo visto che valori ragionevoli di mosaicitá  $\beta$  possono essere 10", 15", 20". I cristalli possono avere dimensione radiale qualsiasi (la poniamo pari a 30 mm poiché é una dimensione facilmente riproducibile e maneggevole dal punto di vista sperimentale) e tangenziale  $dim_t$  di 10 mm, 20 mm o 30 mm.

Abbiamo prodotto 9 configurazioni combinando  $\beta$  e  $\dim_t$  alle quali abbiamo affiancato altre 3 configurazioni (cristallo perfetto con dimensione  $\dim_t$  variabile come in precedenza). Lo studio é stato condotto simulando di volta in volta  $10^6$  fotoni prodotti a una distanza infinita dalla lente con angoli di fuori asse da 0.0 primi fino ad 1.6 primi a passi di 0.2'.

Successivamente, dai dati prodotti dal software, abbiamo graficato l'andamento del HPR espresso in secondi d'arco, al variare dell'angolo di fuori asse cercando la funzione che meglio approssimava i dati. Come errore sul'HPR, abbiamo preso la dimensione dei pixel del detector: 0.02 cm. In ogni grafico di Fig. 4.17 il colore rosso é associato a cristalli con dimensione tangenziale di 10 mm, il colore blu é associato a cristalli con dimensione tangenziale di 20 mm e il colore verde é associato a cristalli con dimensione tangenziale di 30 mm. In ogni grafico é indicato il valore di mosaicitá dei cristalli simulati (cristalli perfetti nel primo pannello in alto a sinistra). La funzione empirica che meglio si adatta ai dati é una parabola:

$$f(x) = a \times x^b + c \quad (4.6)$$

dove i parametri di best fit a, b e c sono stati determinati con *gnuplot*.

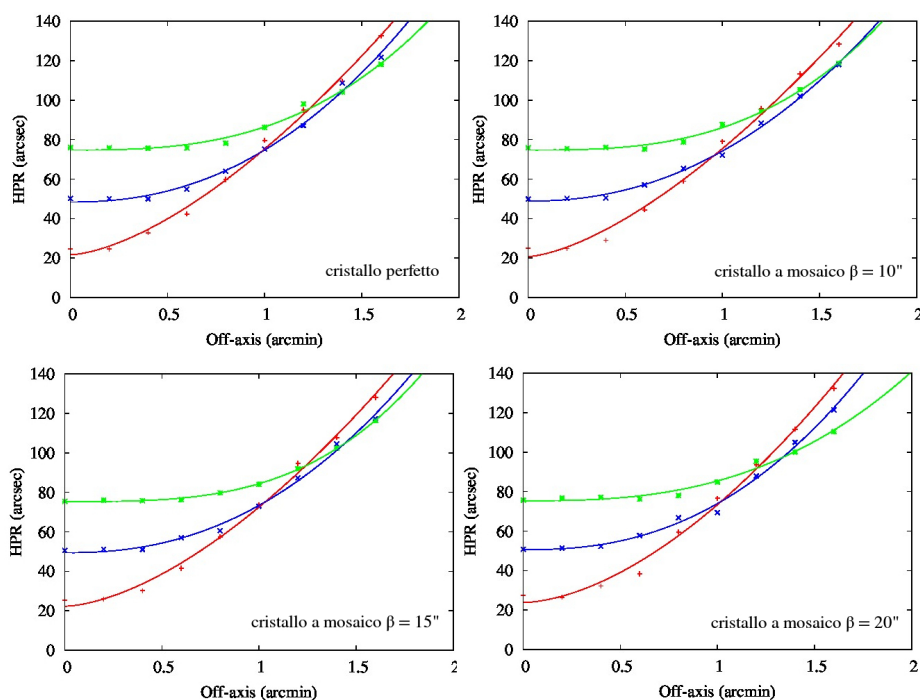


Figura 4.17: Half Power Radius, espresso in secondi d'arco, in funzione dell'angolo di fuori asse.

L'HPR espresso in secondi d'arco, esprime la risoluzione angolare della lente. In un sistema ottico é preferibile che l'HPR sia il piú costante possibile nel campo di vista dello strumento e allo stesso tempo il piú piccolo possibile (per ragioni legate alla sensibilità dello strumento) all'aumentare dell'angolo di fuori asse. Il caso ideale sarebbe quello in cui l'andamento dell'HPR in funzione dell'angolo di

fuori asse sia una retta parallela all'asse delle ascisse che intercetta l'asse delle ordinate in un punto prossimo all'origine.

Le funzioni rappresentate mostrano che inizialmente che il valore dell'HPR é costante, in particolare piú i cristalli hanno  $dim_t$  grande piú la funzione avrá inizialmente una leggera pendenza, dopo di che, superato un determinato valore di angolo di fuori asse, le funzioni divergono rapidamente. In Fig. 4.18 possiamo osservare la distribuzione dei fotoni sul piano focale con il crescere dell'angolo di fuori asse. Nelle prime immagini il picco della PSF rimane confinato all'interno dell'alone senza che la figura di diffrazione venga distorta eccessivamente. Successivamente aumentando l'angolo di fuori asse, oltre ad aumentare l'HPR, l'immagine del diffratto si degrada velocemente.

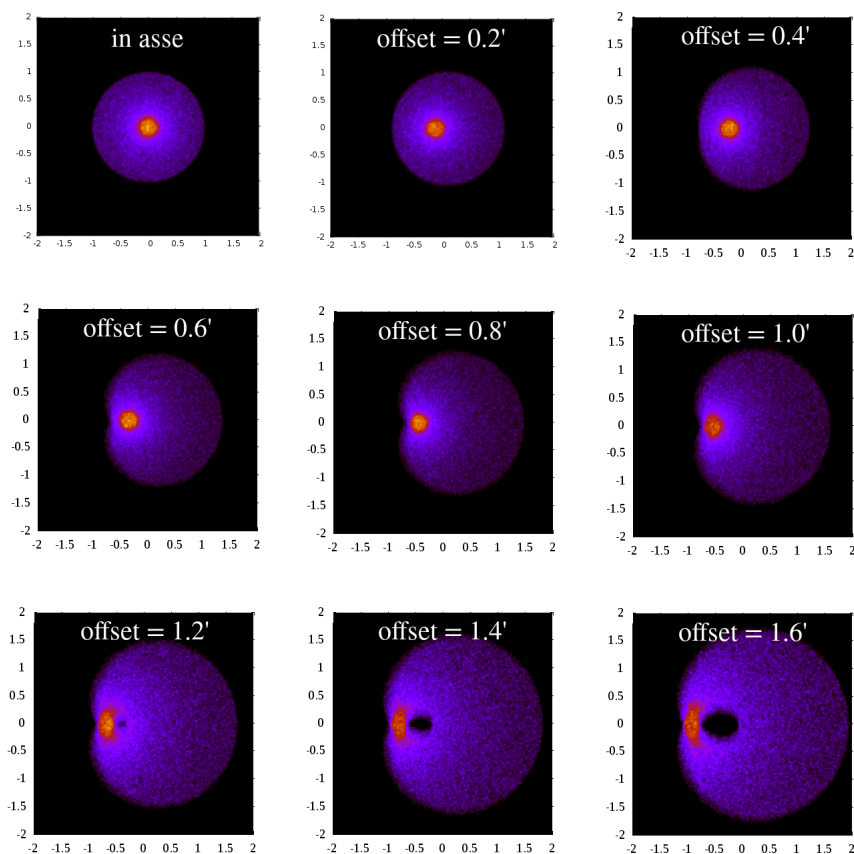


Figura 4.18: Immagini prodotte dalla diffrazione dei cristalli di una lente di Laue in cui aumenta l'angolo di fuori asse della sorgente astrofisica partendo da sorgente posta in asse fino a  $1.6'$  di angolo di fuori asse a passi di  $0.2'$ .

Dai grafici in Fig. 4.17, possiamo osservare che l'HPR aumenta all'aumentare delle dimensioni del cristallo. Inoltre si osserva che, benché la mosaicità abbia effetti non trascurabili sulla dimensione dell'immagine diffratta per una singola tessera cristallina, collettivamente il valore di HPR per tutti i cristalli non é

influenzato dalla mosaicit , infatti le curve corrispondenti alla stessa dimensione ma con diversa  $\beta$  hanno lo stesso andamento che vale anche per i cristalli perfetti.

Dai dati estrapolati dai grafici e utilizzando quelli generati dalle simulazione abbiamo compilato la Tab. 4.1 che ricapitola per ogni dimensione dei cristalli l'angolo di fuori asse al di l  del quale l'immagine inizia a diventare confusa, l'HPR medio per gli angoli di fuori asse per i quali il diffratto   accettabile. Gli errori associati ai singoli valori di HPR sono stati determinati tramite la *propagazione degli errori*.

Tabella 4.1: Al variare della dimensione tangenziale dei cristalli, varia l'HPR e l'angolo di fuori asse entro in quale l'immagine non diventa confusa.

Dimensione tangenziale	$\theta_{off-axis}$	HPR (cm)	HPR (secondi d'arco)
10 mm	$\sim 0.6'$	$(0.30 \pm 0.04) \text{ cm}$	$(31 \pm 4)''$
20 mm	$\sim 1.0'$	$(0.56 \pm 0.04) \text{ cm}$	$(58 \pm 4)''$
30 mm	$\sim 1.4'$	$(0.81 \pm 0.04) \text{ cm}$	$(84 \pm 4)''$

## 4.4 Stima dell'indice di asimmetria delle distribuzioni di fotoni

Successivamente abbiamo analizzato l'asimmetria dei profili delle distribuzioni dei fotoni sul piano focale in funzione dell'angolo di fuori asse. Per semplicit , dato che la mosaicit  non influenza il campo di vista, abbiamo lavorato solo sui dati prodotti dalle simulazione con cristalli perfetti.

In probabilit , il momento semplice o teorico di origine  $m$  e ordine  $k$  di una variabile casuale e definito come il valore atteso della  $k$ -esima potenza dei valori:

$$\mu_{m,k} = \sum_{i=1}^n (x_i - m)^k p_i \quad (4.7)$$

dove  $p_i$  denota la funzione di massa di probabilit  della variabile casuale. All'ordine 1 tale equazione rappresenta semplicemente la media pesata della variabile, mentre al secondo ordine riconosciamo l'espressione della varianza. Il momento centrale di ordine 3 caratterizza invece l'asimmetria di una distribuzione [15]. Se la distribuzione dei valori della variabile   simmetrica rispetto alla media ( $\bar{x}$ ), allora tutti i momenti di ordine dispari sono nulli. Infatti, se consideriamo

$$\mu_3 = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^3 p_i \quad (4.8)$$

se la somma é dispari, essendo simmetrica la distribuzione, ad ogni addendo positivo corrisponderá un addendo negativo uguale in valore assoluto in modo tale che la somma si annulli. Esso ha unità di misura uguale al cubo della variabile di partenza: per ottenere una grandezza adimensionale, lo si divide per il cubo dello scarto quadratico medio  $\sigma$ . La grandezza così ottenuta porta il nome di coefficiente di asimmetria e si denota usualmente con il simbolo  $\mathbf{S}$ :

$$S = \frac{\mu_3}{\sigma^3} \quad (4.9)$$

In Fig. 4.19 troviamo un grafico in cui sull'asse delle ordinate é riportato il grado di asimmetria  $\mathbf{S}$  e sull'asse delle ascisse l'angolo di fuori asse per tre simulazioni di cristallo perfetto con dimensione tangenziale variabile  $\dim_t = 10$  mm, 20 mm e 30 mm.

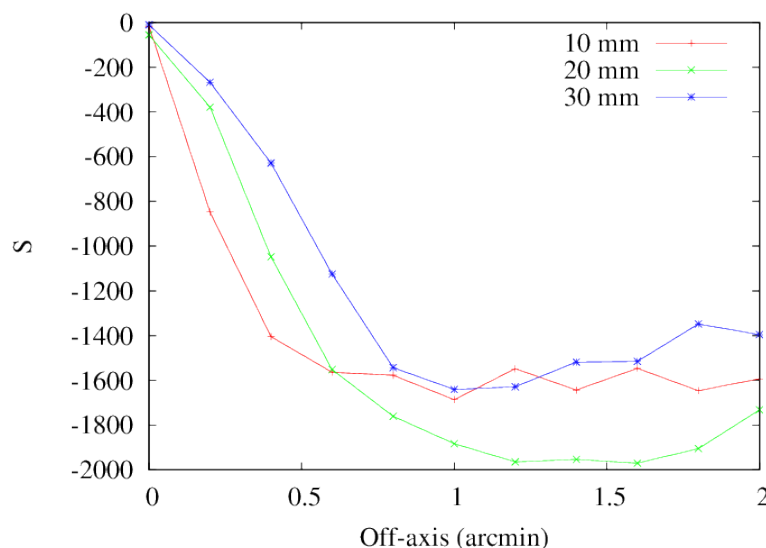


Figura 4.19: Parametro  $\mathbf{S}$  di asimmetria dei profili delle PSF in funzione dell'angolo di fuori asse.

Le curve, che hanno un comportamento simile sono interpretabili nel modo seguente. Inizialmente il grado di asimmetria é pressoché nullo poiché siamo di fronte a distribuzioni quasi simmetriche. Progressivamente, l'indice di asimmetria diminuisce piú o meno rapidamente (il che indica una asimmetria che aumenta progressivamente verso sinistra) fino a quando si raggiunge una regione in cui l'indice  $S$  é costante. Ai fini della nostra trattazione, é rilevante il primo intervallo, cioè quello in cui le funzioni hanno una pendenza negativa. Analizziamo ora le tre curve:

1. L'andamento per  $\dim_t = 10$  mm é molto ripida e cessa di diminuire a circa 0.5';
2. L'andamento per  $\dim_t = 20$  mm ha una decrescita molto piú dolce rispetto alla precedente e cambia pendenza a circa 1';



3. L'andamento per  $\text{dim}_t = 30 \text{ mm}$  é ancora meno ripida della precedente e si stabilizza intorno ad  $1.4'$ .

Piú la curva é ripida piú velocemente l'immagine si distorce, l'angolo al quale cambia la pendenza o si raggiunge la zona di stabilitá ci dá una stima del FOV. Raccogliamo nella Tab. 4.2 la risoluzione angolare e il campo di vista per le varie dimensioni dei cristalli:

Tabella 4.2: Al variare della dimensione tangenziale dei cristalli, sono rappresentate la risoluzione angolare e il campo di vista.

Dimensione tangenziale (mm)	Risoluzione angolare (arcsec)	Campo di vista
10 mm	$(31 \pm 4)''$	$\sim 1.2'$
20 mm	$(58 \pm 4)''$	$\sim 2.0'$
30 mm	$(84 \pm 4)''$	$\sim 2.8'$

Dall'ultima tabella possiamo trarre conclusioni interessanti. I cristalli di dimensione  $30 \times 10 \text{ mm}^2$  permettono di avere una risoluzione angolare soddisfacente dato che l'HPR ad essi associato é piccolo ma allo stesso tempo la Fig. 4.19 ci mostra la rapiditá con cui l'immagine sul detector si distorce, comportamento associabile ad un FOV molto limitato. I cristalli  $30 \times 30 \text{ mm}^2$  hanno una risoluzione angolare peggiore compensata però da una lenta distorsione della PSF. Tale comportamento é associato ad un campo di vista leggermente piú ampio. Infine, i cristalli  $30 \times 20 \text{ mm}^2$  rappresentano un compromesso tra una buona risoluzione angolare, dato che l'HPR associato ad essi é un valore intermedio fra i casi precedenti, e sufficiente campo di vista, in quanto l'indice di asimmetria S ha un andamento meno ripido al crescere dell'angolo di fuori asse.



# Conclusioni

Lo sviluppo tecnologico e scientifico va di pari passo con la curiosità, ogni uomo di scienza è spinto dalla voglia, quasi egoistica, di sapere sempre di più e sempre meglio come la natura funziona. L'uomo è sempre stato affascinato dal cielo; l'osservazione dell'*universo* fonda le sue radici agli albori della storia dell'uomo. Questa insensata voglia di conoscenza ha prodotto dopo anni, secoli e millenni di studi, osservazioni, modelli sempre più raffinati, dando vita alla moderna *Astrofisica*. Le nostre conoscenze sull'Universo derivano in larga parte dall'esame della radiazione elettromagnetica che raggiunge la Terra. A questo scopo gli scienziati si servono dei telescopi. Per indagare meglio l'Universo, è fondamentale che la tecnologia si spinga sempre più in alto superando i limiti imposti da altri strumenti.

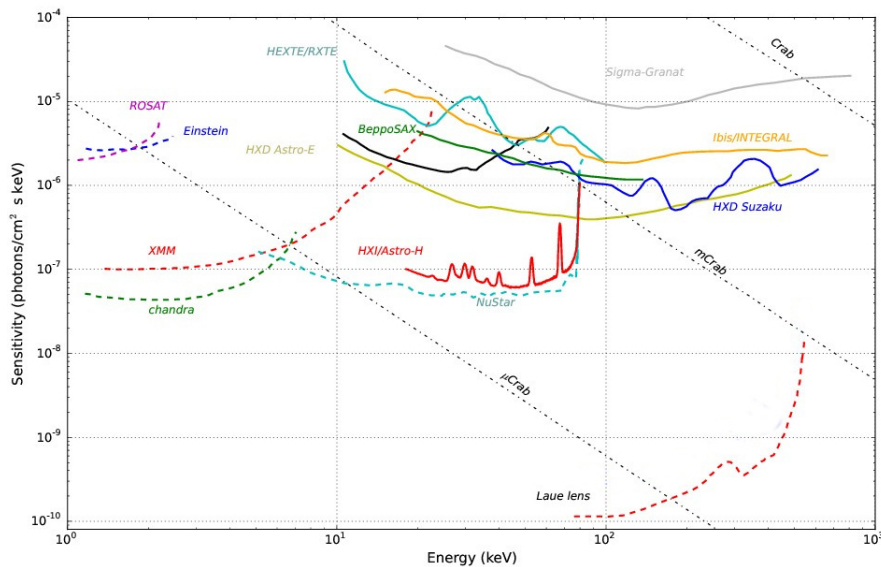


Figura 4.20: Rappresentazione della sensibilità dei telescopi in funzione dell'energia.

Sono molti gli oggetti del profondo cielo ad emettere raggi X. Dai gruppi di galassie ai buchi neri presenti nel nucleo delle galassie attive (AGN) fino ad arrivare alle stelle di neutroni e alle nane bianche. Per questo motivo è importante portare avanti gli studi su nuove tecnologie che migliorino l'osservazione del cielo per i raggi X. L'obiettivo del progetto delle lenti di Laue è ambizioso: nei laboratori del LARIX di Ferrara si vuole costruire una lente focalizzante con una sensibilità al flusso di fotoni migliore di 10-100 volte superiore agli strumen-

ti attuali e una risoluzione angolare migliore dei telescopi in uso attualmente. Nella Fig. 4.20 vediamo rappresentate, in funzione dell'energia, le sensibilità dei telescopi attuali e quella attesa per telescopi a focalizzazione con lenti di Laue.

Nei laboratori di Ferrara si è scelto di utilizzare cristalli di Arseniuro di Gallio (GaAs) che, mediante tecniche particolari, hanno una mosaicità  $\beta$  che oscilla tra i 10 arcsec ai 20 arcsec. I piani scelti per la diffrazione sono individuati dagli indici di Miller [2,2,0] e la costante interatomica è pari a  $d_{hkl} = 1.99A$ .

Dallo studio che si è fatto per sorgenti in asse e fuori asse possiamo concludere che la scelta dei cristalli è giusta in quanto abbiamo visto che i valori ottimali di mosaicità sono tra i 5 arcsec ai 20 arcsec e i cristalli di GaAs hanno un valore di  $\beta$  che appartiene a questo intervallo e in più, fintanto che  $\beta$  assume tali valori, la risoluzione angolare e il campo di vista non risente di cambiamenti. Abbiamo visto anche che la dimensione radiale dei cristalli non influenza le proprietà che vogliamo ottimizzare. Dall'altro lato, la dimensione tangenziale influenza molto la risoluzione angolare e il campo di vista. Lo studio riportato in questa Tesi suggerisce che la dimensione più appropriata per i cristalli sia di  $30 \times 20 \text{ mm}^2$ .

Utilizzando cristalli di Arseniuro di Gallio di dimensioni  $30 \times 20 \text{ mm}^2$  si ottiene una risoluzione angolare di 50 secondi d'arco e un campo di vista di  $\sim 2.5'$ .

In conclusione osserviamo la distribuzione dei fotoni sul piano del rivelatore quando due sorgenti vengono poste nel campo di vista della lente di Laue. In Fig. 4.21 sono mostrate due sorgenti una delle quali è posta in asse e la seconda ha un angolo di fuori asse variabile da  $0.4'$  a  $1.6'$ . Se la seconda sorgente è posta ad un angolo di fuori asse di  $0.4'$  (pannello A,  $\theta_{off} = 0.4'$ ) le due sorgenti sono visibili come due sorgenti ma non perfettamente distinguibili. Per angoli di fuori asse maggiore le sorgenti sono ben distinguibili (pannelli B,  $\theta_{off} = 0.6'$  e C con  $\theta_{off} = 1.2'$ ) mentre per angoli superiori (pannello D,  $\theta_{off} = 1.6'$ ) la sorgente fuori asse risulta completamente degradata rispetto alla sorgente in asse.

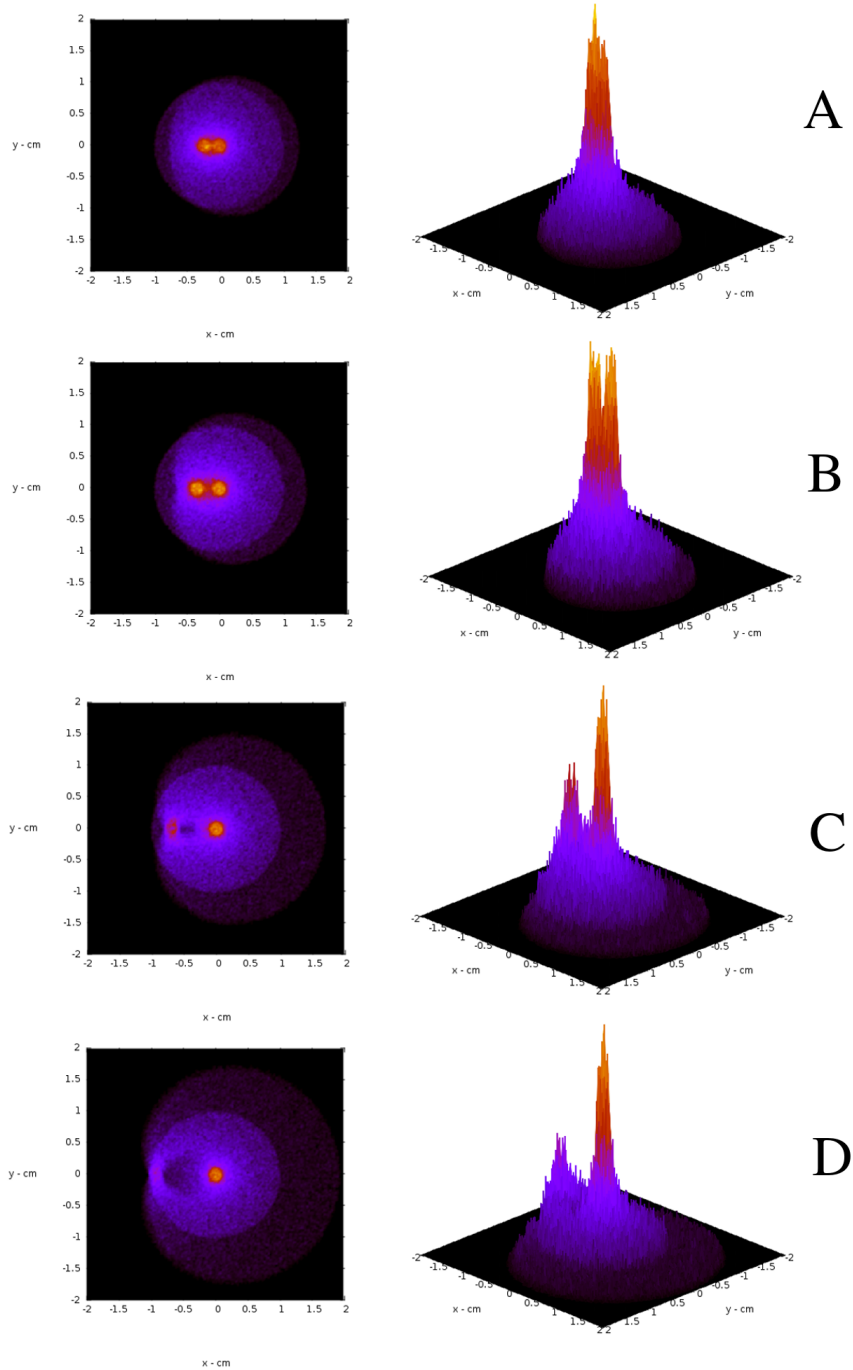


Figura 4.21: Immagini prodotte da due sorgenti e le corrispondi PSF nel caso in cui -una sorgente sia in asse e l'altre abbia un angolo di fuori assi pari a: 1) $\theta_{off-axis} = 0.4'$  2) $\theta_{off-axis} = 0.6'$  3) $\theta_{off-axis} = 1.2'$  4) $\theta_{off-axis} = 1.6'$ .



# Bibliografia

- [1] R. Giacconi and B. Rossi, “A ‘Telescope’ for Soft X-Ray Astronomy,” *Journal of Geophysical Research*, vol. 65, p. 773, Feb. 1960.
- [2] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 6th ed., 1986.
- [3] W. H. Bragg and W. L. Bragg, “The Reflection of X-rays by Crystals,” *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, vol. 88, pp. 428–438, July 1913.
- [4] A. Pisa, “Hard x-ray optics development: Feasibility study of a laue lens,” Master’s thesis, University of Ferrara - Physics and Earth Science Department, via G.Saragat, 1 44122 - Ferrara, 2002-2004.
- [5] C. G. Darwin *Phil. Mag.*, vol. 27, no. 315, p. 657, 1914.
- [6] C. G. Darwin *Phil. Mag.*, vol. 43, p. 800, 1922.
- [7] W. H. Zachariasen, *Theory of X-ray Diffraction in Crystals*. Wiley, 1945.
- [8] Malgrange, “X-ray propagation in distorted crystals: From dynamical to kinematical theory,” *Crystal Research and Technology*, vol. 37, 2002.
- [9] S. Keitel, C. Malgrange, T. Niemöller, and J. R. Schneider, “Diffraction of 100 to 200 keV X-rays from an  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  gradient crystal: comparison with results from dynamical theory,” *Acta Crystallographica Section A*, vol. 55, pp. 855–863, 1999.
- [10] V. Valsan, E. Virgilli, F. Frontera, and V. Liccardo, “Results of the simulations of the petal/lens as part of the LAUE project,” in *Proceedings of the SPIE*, vol. 8861, id. 886109 12 pp., 2013.
- [11] N. Lund, “A study of focusing telescopes for soft gamma rays,” *Experimental Astronomy*, vol. 2, pp. 259–273, 1992.
- [12] E. Virgilli, “The laue lens library,” 2013-2016.
- [13] G. Loffredo, F. Frontera, D. Pellicciotta, A. Pisa, V. Carassiti, S. Chiozzi, F. Evangelisti, L. Landi, M. Melchiorri, and S. Squerzanti, “The Ferrara hard X-ray facility for testing/calibrating hard X-ray focusing telescopes,” *Experimental Astronomy*, vol. 20, pp. 413–420, Dec. 2005.

- [14] E. Virgilli, F. Frontera, P. Rosati, E. Bonnini, E. Buffagni, C. Ferrari, J. B. Stephen, E. Caroli, N. Auricchio, A. Basili, and S. Silvestri, "Focusing effect of bent GaAs crystals for  $\gamma$ -ray Laue lenses: Monte Carlo and experimental results," *Experimental Astronomy*, vol. 41, pp. 307–326, Feb. 2016.
- [15] D. P. Doane and L. E. Seward, "Journal of statistics education, volume 19, number 2(2011) measuring skewness: A forgotten statistic?," 2011.