

Indice

1	Il problema della focalizzazione dei raggi X	3
1.1	Introduzione storica al problema	3
1.2	Missioni di astronomia X del presente e del futuro	5
1.3	Necessità di ottiche focalizzanti in astronomia dei raggi X duri.	6
1.4	La problematica della riflessione nei raggi X	10
1.4.1	Definizioni ed equazioni fondamentali	10
1.4.2	Comportamento dell'indice di rifrazione al variare dell'energia	11
1.4.3	Il fenomeno della riflessione totale	14
1.5	Coperture multistrato riflettenti per raggi X	16
1.5.1	Principi generali di funzionamento	16
1.5.2	Riflettività del singolo strato	17
1.5.3	Comportamento di un doppio strato	19
1.5.4	Multilayer a spaziatura variabile (depth-graded)	21
1.5.5	Calcolo della riflettività di un multilayer	22
1.6	Ottiche ad incidenza radente	23
1.6.1	Le Geometrie Wolter	25
1.6.2	Altre geometrie basate su superfici di rivoluzione.	27
1.6.3	Aspetti geometrici delle ottiche basate su doppia superficie di rivoluzione	29
2	Problema dell'ottimizzazione di film multistrato	33
2.1	Il Problema dell'ottimizzazione	33
2.2	Algoritmi di ottimizzazione classici	35
2.2.1	Raster scan.	35
2.2.2	Metodi Hill Climbing	36
2.2.3	Downhill Simplex	36
2.3	Algoritmi di ottimizzazione globale	39
2.3.1	Simulated Annealing	39
2.4	Metodo iterated simplex	41
2.4.1	Descrizione del metodo	41

Indice

2.4.2	Note sul linguaggio di programmazione utilizzato	42
2.4.3	Implementazione dell'algoritmo	43
2.5	Test dell'algoritmo utilizzato	45
2.5.1	Descrizione del problema di prova	45
2.5.2	Test del software per l'analisi dei risultati	48
2.6	Ottimizzazione di film multistrato col metodo iterated simplex	52
2.6.1	Possibili approcci dal punto di vista matematico	52
2.7	Applicazione pratica del metodo iterated Simplex	54
2.7.1	Applicazione alla riflettività di un multilayer	54
2.7.2	Aspetti pratici dell'ottimizzazione	56
3	Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)	59
3.1	Problemi aperti in astronomia dei raggi X duri risolvibili con l'uso di ottiche focalizzanti	59
3.2	Futuri progetti di astronomia nei raggi X duri	62
3.2.1	HEXIT	62
3.2.2	XEUS	63
3.2.3	Constellation X	66
3.3	Pacchetti software sviluppati	67
3.3.1	Linee guida e criteri seguiti per lo sviluppo software	67
3.3.2	Descrizione dei programmi sviluppati	68
3.4	Risultati	72
3.4.1	Premesse	72
3.4.2	HEXIT	74
3.4.3	Constellation X	85
3.4.4	XEUS	90
4	Misure sperimentali di riflettività in raggi X su film multilayer a larga banda	101
4.1	Campioni analizzati	101
4.2	Misure di riflettività in raggi X: apparato sperimentale	102
4.3	Risultati sperimentali	105
5	Conclusioni	109

Il problema della focalizzazione dei raggi X

1.1 Introduzione storica al problema

L'astronomia X è un campo dallo sviluppo relativamente recente (la prima sorgente X extrasolare, Sco X-1, fu scoperta nel 1962 [Giacconi et al. 1962]). Infatti l'atmosfera appare opaca alla radiazione X, ragion per cui si è dovuto attendere lo sviluppo di mezzi in grado di portare la strumentazione al di sopra di essa. Ciò è stato reso possibile solo a partire dalla fine degli anni '50, dapprima tramite razzi (le prime osservazioni della radiazione X solare furono condotte su razzi V2 recuperati, subito dopo la fine della II guerra mondiale) e palloni stratosferici, poi con l'impiego di satelliti [Charles, Seward]. Un'ulteriore difficoltà è costituita dal fatto che i raggi X sono caratterizzati da elevata energia ed alto potere penetrante. Di conseguenza la loro focalizzazione per mezzo di metodi tradizionali, cioè con lenti rifrattive o specchi riflettenti ad incidenza normale, è di fatto particolarmente problematico. Già Röntgen, nel 1896, nel corso dei primi esperimenti che hanno portato alla scoperta dei raggi X, evidenziò tali difficoltà e le mise in relazione con il fatto che l'indice di rifrazione dovesse essere, per la radiazione x, molto prossimo a 1 [Röntgen 1896].

E' comunque possibile un'alta efficienza di riflessione anche per i raggi X qualora l'angolo di incidenza sia molto radente (tipicamente dell'ordine di un grado o meno, dipendentemente dall'energia dei fotoni incidenti e dalla densità del materiale), per via del fenomeno della *riflessione totale*. Ciò fu provato sperimentalmente in modo definitivo da Compton nel 1923, che sfruttò il fenomeno per determinare, tra l'altro, un indice di rifrazione di 0.999995 a $\lambda=0.1279$ nm, per il cristallo di soda [Compton 1923], confermando così l'intuizione di Roentgen.

La necessità di incidenza radente costituì un ostacolo allo sviluppo di ottiche focalizzanti per raggi X, in quanto richiedeva la realizzazione di ottiche basate su geometrie del tutto

nuove rispetto a quelle utilizzate per la radiazione meno energetica. Una prima soluzione a questo problema (seppure pensata per applicazioni diverse dall'astronomia) fu fornita da Kirkpatrick e Baez nel 1948 [Kirkpatrick, Baez 1948] con un sistema a doppia riflessione su lamine a profilo parabolico tra loro perpendicolari. Come vedremo nei prossimi paragrafi pochi anni dopo H. Wolter propose, per applicazioni di microscopia in raggi X, una serie di soluzioni basate due superfici di rivoluzione di curve coniche. Tale approccio si sarebbe rivelato successivamente particolarmente adatto anche ad applicazioni di tipo astronomico. Le difficoltà tecniche per realizzare ottiche di tale tipo erano (e sono tuttora) comunque notevoli, basti pensare che il primo satellite con a bordo un telescopio focalizzante per raggi X di grandi dimensioni, *Einstein X-ray Observatory* (HEAO-2), fu lanciato solamente nel 1979 [Giacconi et al. 1979]. Al pari di *Einstein*, tutti i telescopi focalizzanti per raggi X realizzati finora sono stati basati su specchi a riflessione totale a singolo strato. La loro banda di lavoro è stata necessariamente limitata entro la cosiddetta cosiddetta "banda classica" dei raggi X, cioè tra 0.1 e 10 KeV. Infatti ad energie superiori a 10 KeV gli angoli di incidenza che danno luogo alla riflessione totale diventano estremamente piccoli e, a meno di non sopporre lunghezze focali molto elevate (diverse decine di metri), le superfici di raccolta delle ottiche sarebbero conseguentemente trascurabili.

Per estendere le possibilità osservative dei telescopi della prossima generazione anche nella banda energetica dei raggi X duri, da 10 a 100 KeV è necessario sfruttare un meccanismo di riflessione diverso. Tale meccanismo può essere fornito dai film multistrato (multilayer), la cui tecnologia è già stata ampiamente sviluppata per applicazioni nelle bande ottiche e UV, ma che, solo recentemente, grazie allo sviluppo di nuove tecniche di deposizione sotto vuoto basate sullo sputtering iniziata intorno agli anni '70, hanno trovato possibilità di impiego anche nei raggi X. Un film multistrato è formato da una successione di strati di materiali diversi, il suo funzionamento si basa sull'interferenza costruttiva tra le onde parzialmente riflesse da ogni strato, permettendo in questo modo di ottenere un'elevata efficienza di riflessione, analogamente a quanto avviene nella riflessione "alla Bragg" da parte dei cristalli naturali [Zachariasen 1994]. Tramite la tecnica dei film multilayer è anche possibile disegnare filtri in trasmissione (cioè caratterizzati da un riflettività molto bassa in una determinata banda spettrale) sfruttando l'interferenza costruttiva tra le onde elettromagnetiche riflesse a diverse profondità lungo la serie degli strati. Tali soluzioni trovano pure diverse applicazioni nella banda ottica/UV.

Gli specchi multilayer si compongono di una serie di bi-strati, ognuno dei quali è formato da un materiale ad alta densità sovrapposto ad uno a bassa densità (che ha funzione di separatore meccanico). Lo spessore caratteristico dei bistrati (che è l'analogo della distanza tra i piani atomici dei cristalli per una data orientazione) ha un'ordine di grandezza

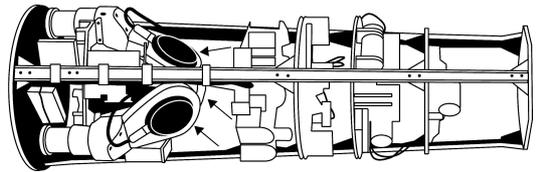


Figura 1.1: Apparato sperimentale del razzo con cui è stata individuata la prima sorgente X extrasolare. La posizione del rivelatore (un contatore Geiger) è indicata dalle frecce [Nobel Prize 2002].

generalmente vicino alla lunghezza d'onda della radiazione che deve essere riflessa. Poichè nei raggi X le lunghezze d'onda variano da frazioni di nanometro a frazioni di Angström, si spiega la difficoltà tecnologica di ottenere multilayers per questa banda spettrale. Storicamente i primi multilayer realizzati per applicazioni in raggi X multilayers avevano spaziatura costante, possedevano perciò una struttura periodica. Tali strutture sono tipicamente caratterizzate da picchi di elevata riflettività in bande spettrali molto strette alle lunghezze d'onda λ e agli angoli di incidenza θ in accordo (trascurando gli effetti rifrattivi) con la relazione di Bragg: $nd\cos\theta = m\lambda$, con m intero. Specchi multilayer di questo tipo trovano impiego principalmente in sistemi di monocromatizzazione per raggi X ad esempio in esperimenti in luce di sincrotrone. E' tuttavia possibile anche ottenere una risposta su larga banda variando lo spessore degli strati lungo la sequenza, facendo quindi in modo che le onde di diversa lunghezza d'onda siano riflesse a profondità diverse. Tali strutture multilayer con spaziatura variabile "depth-graded" sono anche chiamate "supermirror" sono state derivate da applicazioni in esperimenti con flussi di neutroni. Diverse principali missioni di astronomia delle alte energie del futuro saranno basate su questo tipo di specchi per permettere di adottare tecniche focalizzanti anche per telescopi in raggi X duri. A differenza del caso dei multilayers a spaziatura costante, per i supermirror non esiste una formula analitica capace di fornire gli spessori ottimali dei bistrati lungo la serie per ottenere un profilo di riflettività con caratteristiche desiderate. E' per questo motivo utile l'applicazione di tecniche di ottimizzazione numerica che forniscano risultati il più vicino possibile a quanto voluto.

Lo scopo di questo capitolo e' la presentazione del principio di funzionamento e delle caratteristiche fisiche dei film multistrato per radiazione X, la cui ottimizzazione per il caso di telescopi per raggi X duri ($E > 10$ keV) sarà l'oggetto di questa tesi. Verranno inoltre presentate le geometrie per ottiche X generalmente usate per applicazioni astronomiche, a cui è possibile applicare film multilayer come coperture riflettenti.

1.2 Missioni di astronomia X del presente e del futuro

Il miglioramento della sensibilità in flusso e della risoluzione angolare nella regione dei raggi X duri (10-100 keV) è uno degli obiettivi principali dell'astronomia spaziale del futuro. Nella seconda metà degli anni '90 è stato messo in orbita l'esperimento PDS [Frontera et al. 1997] a bordo del satellite BeppoSAX, dotato di una sensibilità senza precedenti nella banda 20-300 keV. Le osservazioni compiute con questo rivelatore hanno aperto nuove frontiere nell'astrofisica delle alte energie, sia Galattica che extragalattica. Tuttavia tale missione, impiegando rivelatori semplicemente collimati, offriva una sensibilità sostanzialmente limitata a causa dell'alto livello di fondo intrinseco, in aggiunta al problema della confusione tra sorgenti. Perciò, nonostante l'ottimo lavoro svolto tramite questo telescopio, una serie di importanti problemi astrofisici e cosmologici è rimasta irrisolta [Inoue 2002]. Anche se rivelatori collimati equipaggiati con maschere codificate (es. IBIS su INTEGRAL, lanciato nell'autunno 2002, e BAT su Swift, previsto per la fine del 2003) consentiranno un miglioramento nella risoluzione angolare, un sostanziale passo

avanti nell'Astronomia nei raggi X duri potrà essere compiuto solo con l'introduzione di ottiche focalizzanti dotate di elevate sensibilità e capacità di imaging.

Nella banda dei raggi X soffici (0.1-10 keV) ottiche focalizzanti in geometria Wolter I (parabola+iperbole) basate sul fenomeno della riflessione totale sono state già utilizzate con successo per le missioni Einstein, ROSAT, BeppoSAX, XMM-Newton, Chandra e JET-X/Swift. Le caratteristiche delle principali missioni spaziali per astronomia X basate su telescopio focalizzanti del passato e presente (nei raggi X soffici) e di alcune di quelle future (nei raggi X duri con l'impiego di ottiche basate su multilayer) sono riassunte nella tabella 1.1. Tali ottiche permettono di concentrare i fotoni provenienti da una sorgente su una piccola area del rivelatore, mentre i conteggi dovuti al fondo sono distribuiti in modo piuttosto uniforme su tutta area del rivelatore. Il risultato è un drastico salto di qualità sia in sensibilità sia in qualità di imaging, rispetto ai rivelatori collimati. Tuttavia, alle energie tipiche dei raggi X duri ($E > 10$ keV), la diminuzione dell'angolo massimo per cui avviene la riflessione totale rende tale meccanismo di riflessione poco efficiente e difficilmente sfruttabile per la focalizzazione.

Una possibilità per l'estensione delle tecniche di focalizzazione a tale regione spettrale è data dall'utilizzo di specchi con geometria analoga a quella usata nei raggi X soffici, ma con copertura riflettente basata su film multistrato (multilayer). L'utilizzo di questo tipo di ottiche è previsto per diverse missioni di astronomia X del futuro. In particolare l'Osservatorio Astronomico di Brera/INAF (presso cui è stato svolto questo lavoro di tesi) è impegnato nello sviluppo delle ottiche multilayer per raggi X duri per l'esperimento italiano su pallone stratosferico HEXIT (ASI, 2005), e per le missioni satellitari Constellation-X (NASA, 2010) e XEUS (ESA, 2015).

1.3 Necessità di ottiche focalizzanti in astronomia dei raggi X duri.

I telescopi finora impiegati in astronomia dei raggi X duri si basano su rivelatori semplicemente collimati (o "a vista diretta"). In questo tipo di strumenti (fig. 1.2) il rivelatore è esposto direttamente alla radiazione proveniente dall'intero campo di vista, che è limitato per mezzo di collimatori, l'area di raccolta coincide con l'area del rivelatore su cui incidono i fotoni. La presenza di un elevato segnale di fondo, dovuto sia al rumore intrinseco del rivelatore (rumore elettronico in aggiunta a quello generato dall'interazione della radioattività ambientale con lo strumento) che al fondo cosmico X (dovuto principalmente a sorgenti deboli non risolte), comporta la necessità di utilizzare elevate aree di raccolta per permettere la rivelazione di sorgenti deboli.

Sebbene rivelatori basati su maschere codificate possiedano capacità di imaging (con risoluzione comunque limitata ad alcuni minuti d'arco), spesso, con questo tipo di rivelatori, il segnale rivelato da sorgenti deboli è spesso inferiore alle fluttuazioni del rumore di fondo, è necessario perciò utilizzare lunghi tempi di esposizione per permettere ai conteggi dei fotoni provenienti da una sorgente reale di sommarsi, staccandosi in modo

1.3 Necessità di ottiche focalizzanti in astronomia dei raggi X duri.

Tabella 1.1: Caratteristiche e prestazioni di missioni con telescopi focalizzanti del passato e presente (nei raggi X soffici)(a) e del futuro (nei raggi X duri)(b) [Pareschi et al. 2002].

(a)

PARAMETER/ MISSION	Einstein	EXOSAT	ROSAT	ASCA	Beppo-SAX	JET-X Swift	SODART	Chandra	XMM-Newton	ASTRO-E	ABRIXAS
mirror profile	Wolter-Schwarzschild	Wolter I	Wolter I	double-cone	double-cone	Wolter I	double-cone	Wolter I	Wolter I	double-cone	Wolter I
aperture diameter	58 cm	28 cm	83 cm	34.5	162	30 cm	60 cm	120	70	40	164
number of mirror modules	1	1	1	4	4	2 (JET-X) 1-1 Swift	2	1	3	4	7
number of nested mirror shells per module	4	2	4	120	30	12	143	4	58	175	27
Shell thickness	~ 20 mm	3.5 mm	16 - 25 mm	0.127 mm	0.2 - 0.4 mm	0.65 - 1.1 mm	0.4 mm	35 mm	0.47 - 1.1 mm	0.155 mm	0.2 - 0.4 mm
Wall material	Fused Silica	Be	Zerodur	Al	Ni	Ni	Al	Zerodur	Ni	Al	Ni
geometric area per module	350 cm ²	80 cm ²	1140 cm ²	410 cm ²	123 cm ²	225 cm ²	3000 cm ²	1100 cm ²	2000 cm ²	580 cm ²	120
focal length	3.45 m	1.09 m	2.4 m	3.5 m	1.8 m	3.5 m	8.0 m	10.0 m	7.5 m	4.75 m	1.8
mirror coating	Ni	Au	Au	Au	Au	Au	Au	Ir	Au	Au/Pt	Au
Production technique	direct optical polishing	epoxy replication	direct optical polishing	Acrylic coated thin segm. foils	replication by Ni electroforming	replication by Ni electroforming	Acrylic coated thin segm. foils	direct optical polishing	replication by Ni electroforming	epoxy replication of thin segmented foils	replication by Ni electroforming
Imaging quality (HEW)	4"	19"	3"	200"	60"	15"	180"	0.5"	15"	100"	22

(b)

PARAMETER / MISSION	Constellation-X /SXT	XEUS	Generation-X
aperture diameter	140 cm	9900 cm	4500 cm
number of mirror modules	4	1	6
number of nested mirror shells per module	70	562	TBD
geometric area per module	7500 cm ²	300000 cm ²	125000 cm ²
focal length	10 m	50 m	100 m
mirror coatings	Au or Pt	TBD	TBD
Production technique	thin glass foils	TBD	TBD
Imaging quality (HEW)	10.0"	2.0"	0.1"

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

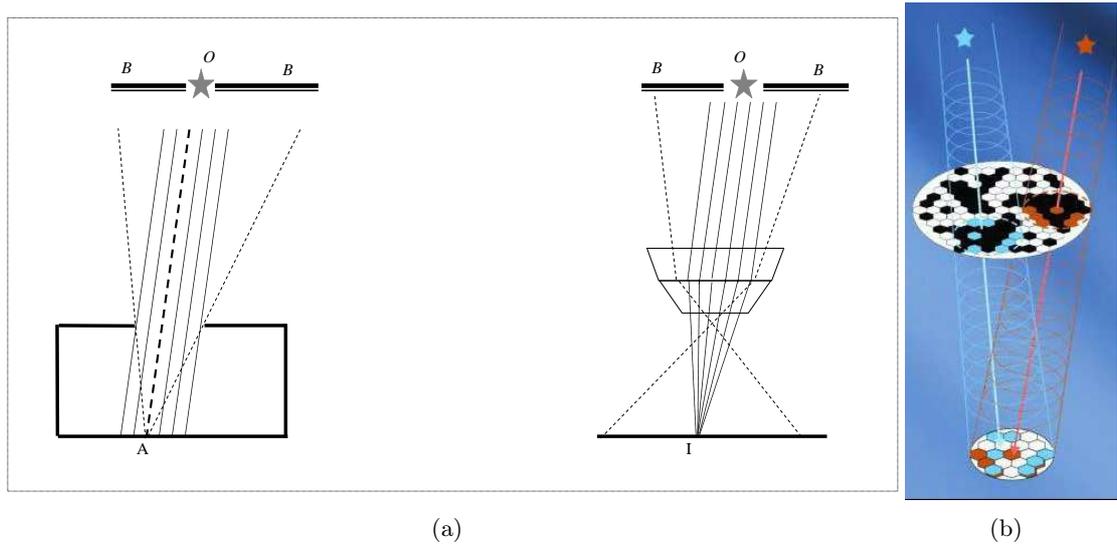


Figura 1.2: (a) Confronto tra rivelatori semplicemente collimati e telescopi focalizzanti. Nel primo caso (a sinistra) ogni punto del piano del rivelatore (come A in figura) che “vede” una sorgente O è raggiunto anche dal segnale di fondo proveniente da tutto il campo di vista (B). In un telescopio focalizzante la radiazione di una sorgente è concentrata in un punto I , raggiunto solo dal segnale di fondo della regione di cielo sovrapposta alla sorgente. Il segnale di fondo proveniente da altre direzioni si distribuisce sulla superficie del rivelatore. (b) Principio di funzionamento di un rivelatore a maschera codificata: la posizione delle sorgenti viene determinata dall’ombra proiettata sul rivelatore dalla maschera [Sito web ESA].

1.3 Necessità di ottiche focalizzanti in astronomia dei raggi X duri.

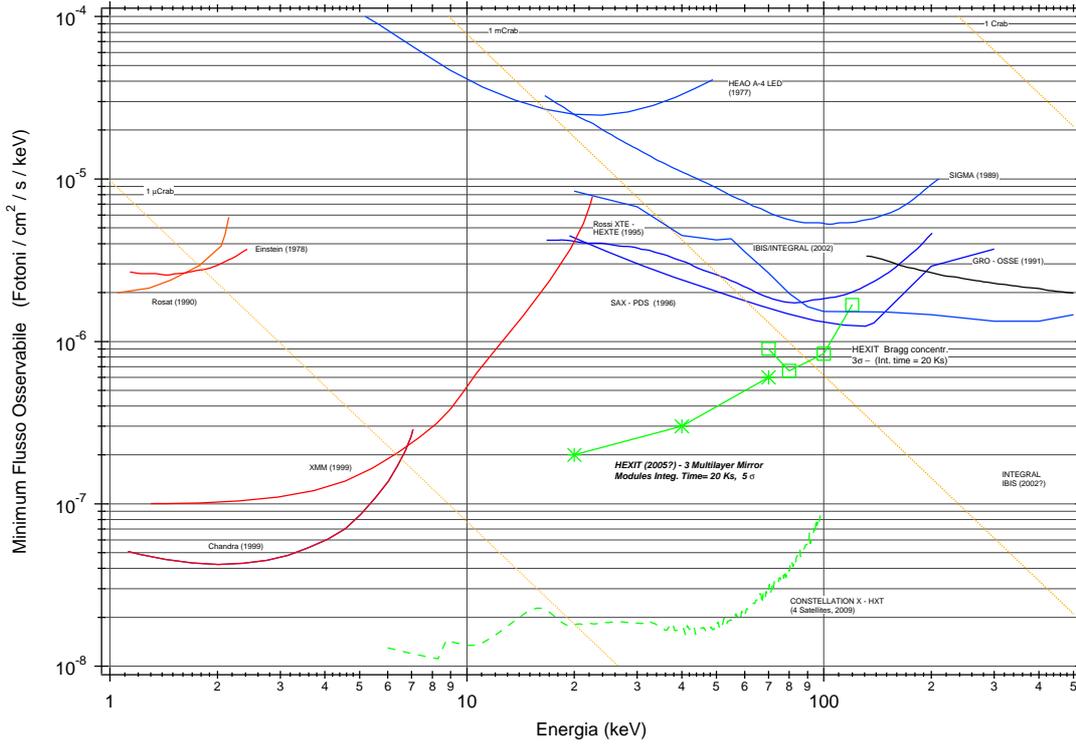


Figura 1.3: Confronto tra le sensibilità e bande energetiche operative di missioni di astronomia X con telescopi focalizzanti (in rosso) e senza (in blu). In verde sono mostrati dati relativi alle missioni HEXIT e Constellation-X, trattate in questa tesi. Le linee gialle diagonali indicano il flusso in frazioni di intensità della sorgente Crab.

netto dal segnale di fondo. I telescopi focalizzanti consentono di concentrare su una piccola area del rivelatore il flusso incidente sull'area di raccolta, di conseguenza il rapporto segnale-rumore è molto più alto, il che consente l'osservazione di sorgenti deboli altrimenti inosservabili. Il concetto è riassunto in fig. 1.2. Il miglioramento in sensibilità è evidenziato dalla figura 1.3 che confronta le sensibilità ottenute in diverse missioni, con e senza telescopi focalizzanti, nella banda X.

Si ricorda che un telescopio ad alta sensibilità deve essere necessariamente dotato anche di buona risoluzione angolare. Infatti, una buona qualità nelle immagini, non solo determina una migliore sensibilità, in quanto in grado di ottenere una maggiore concentrazione dei fotoni, ma è anche necessaria ad evitare la confusione tra sorgenti deboli presenti nello stesso campo di vista. Questo aspetto è particolarmente importante per studi a carattere cosmologico mirati per esempio allo studio del background X ed alla sua risoluzione di sorgenti discrete (si veda il cap. 3.1). In figura 1.4 viene riportata la relazione $\log(N) - \log(S)$ utilizzata per calcolare il numero di sorgenti per simulazioni per lo studio di fattibilità per la missione XEUS [XEUS 2000]. Una risoluzione angolare ancora maggiore può permettere di distinguere i dettagli della struttura di oggetti estesi. Un esempio del miglioramento ottenibile con l'aumento della risoluzione angolare è mostrato in fig. 1.4(b)

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

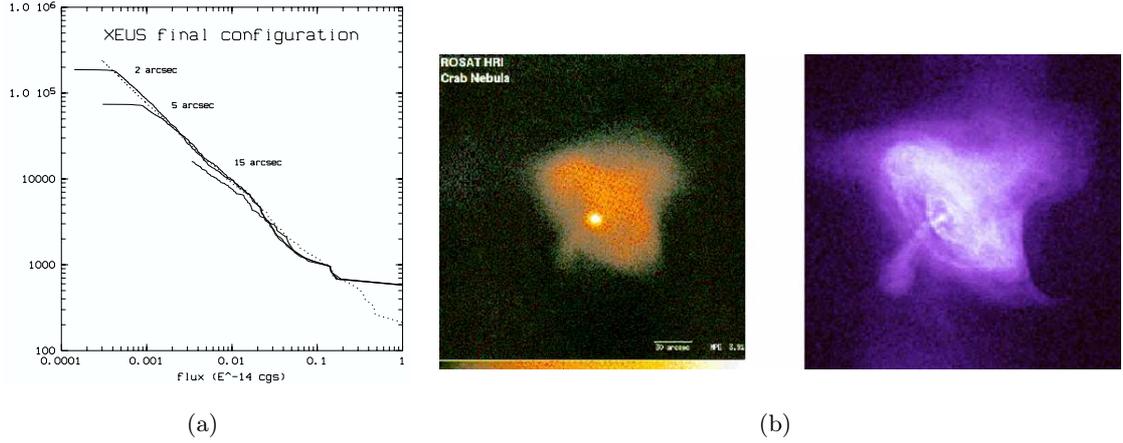


Figura 1.4: (a) Distribuzione $\log(N)$ - $\log(S)$ usata per simulare le sorgenti nel campo del telescopio XEUS II. Si noti come per non cadere oltre il limite di confusione tra sorgenti sia necessario avere una risoluzione angolare HEW di 2 secondi d'arco per un flusso limite di $0.01 \times 10^{-17} \text{ erg/cm}^2/\text{sec}$ (corrispondente alla sensibilità prevista per la missione). In (b) è illustrata la differenza tra le immagini della Crab Nebula ottenute (nei raggi X soffici) dalle missioni Rosat (risoluzione HEW $\sim 3''$, a sinistra) e Chandra (HEW $\sim 0.5''$, a destra). L'aumento della risoluzione angolare permette di distinguere maggiori dettagli della struttura.

1.4 La problematica della riflessione nei raggi X

1.4.1 Definizioni ed equazioni fondamentali

Le formule fondamentali che descrivono matematicamente il comportamento della radiazione incidente sulla superficie di separazione tra due dielettrici sono [Hecht 1998] la legge di Snell :

$$n_1 \cos \theta_1 = n_2 \cos \theta_2 \quad (1.1)$$

che definisce la direzione di propagazione nel secondo mezzo, e le equazioni di Fresnel:

$$r_{12}^{\perp} = \frac{n_1 \sin \theta_1 - n_2 \sin \theta_2}{n_1 \sin \theta_1 + n_2 \sin \theta_2} \quad (1.2)$$

$$r_{12}^{\parallel} = \frac{n_1 \sin \theta_2 - n_2 \sin \theta_1}{n_1 \sin \theta_2 + n_2 \sin \theta_1} \quad (1.3)$$

$$t_{12}^{\perp} = \frac{2n_1 \sin \theta_1}{n_1 \sin \theta_1 + n_2 \sin \theta_2} \quad (1.4)$$

$$t_{12}^{\parallel} = \frac{2n_1 \sin \theta_1}{n_1 \sin \theta_2 + n_2 \sin \theta_1} \quad (1.5)$$

1.4 La problematica della riflessione nei raggi X

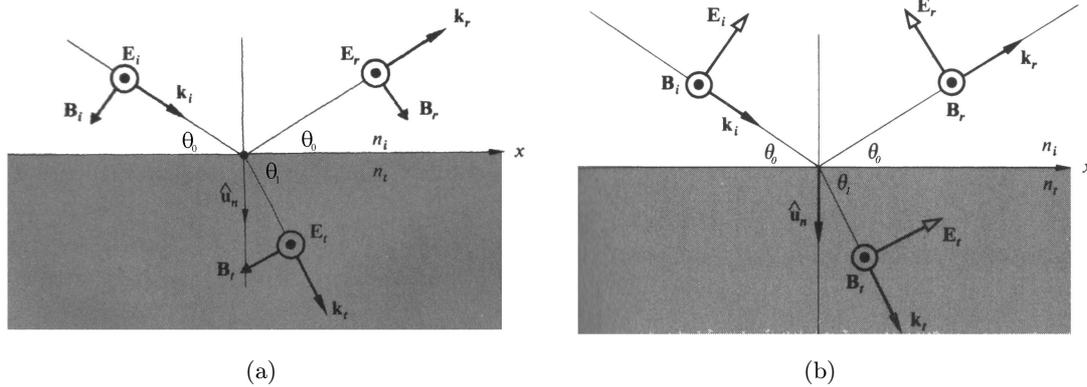


Figura 1.5: Incidenza della radiazione sulla superficie di separazione di due mezzi. I versi dei vettori nella figura indicano la convenzione seguita in questo lavoro per le polarizzazioni parallela (a) e perpendicolare (b) al piano di incidenza [Hecht 1998].

che fissano i valori dei coefficienti di riflessione e trasmissione r e t in funzione degli indici di rifrazione dei due mezzi n_1 ed n_2 , e degli angoli formati dalle direzioni di propagazione nei due mezzi con la superficie θ_1 e θ_2 (fig. 1.5).

I coefficienti di trasmissione e riflessione sono definiti come il rapporto tra le ampiezze dell'onda trasmessa (t) e di quella riflessa (r), i simboli \perp e \parallel si riferiscono alle due polarizzazioni della radiazione perpendicolare e parallela al piano di incidenza. È interessante notare come, dalle eq. 1.2-1.5, i coefficienti di trasmissione risultino sempre positivi, mentre quelli di riflessione possano assumere anche valori negativi, ricordando la definizione dei coefficienti di riflessione (per un'onda elettromagnetica espressa come $E(\vec{x}, t) = E_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x} + \phi)}$, $r \equiv \frac{E_{0r}}{E_{0i}}$), un valore negativo di r può essere interpretato come una differenza di fase di π nella riflessione all'interfaccia tra i due mezzi. Il cambiamento di fase nella riflessione è illustrato per le due polarizzazioni in fig. 1.6. In particolare nel passaggio da un mezzo ad un altro con indice di rifrazione maggiore, per piccoli angoli di radenza e per entrambe le polarizzazioni, si verifica uno sfasamento di un valore π .

1.4.2 Comportamento dell'indice di rifrazione al variare dell'energia

Per meglio comprendere il comportamento dei raggi X ed i motivi che ne rendono difficile la focalizzazione con metodi convenzionali (lenti e specchi ad incidenza normale) è necessario esaminare l'andamento, al variare dell'energia, dell'indice di rifrazione. È da notare come le equazioni 1.7 e 1.2 non contengano esplicitamente la lunghezza d'onda della radiazione, pur essendo dipendenti da questa per la dispersione dell'indice di rifrazione. La figura 1.7 mostra il tipico andamento di quest'ultimo al variare della frequenza della radiazione: l'indice di rifrazione tende ad aumentare al crescere della frequenza, ad

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

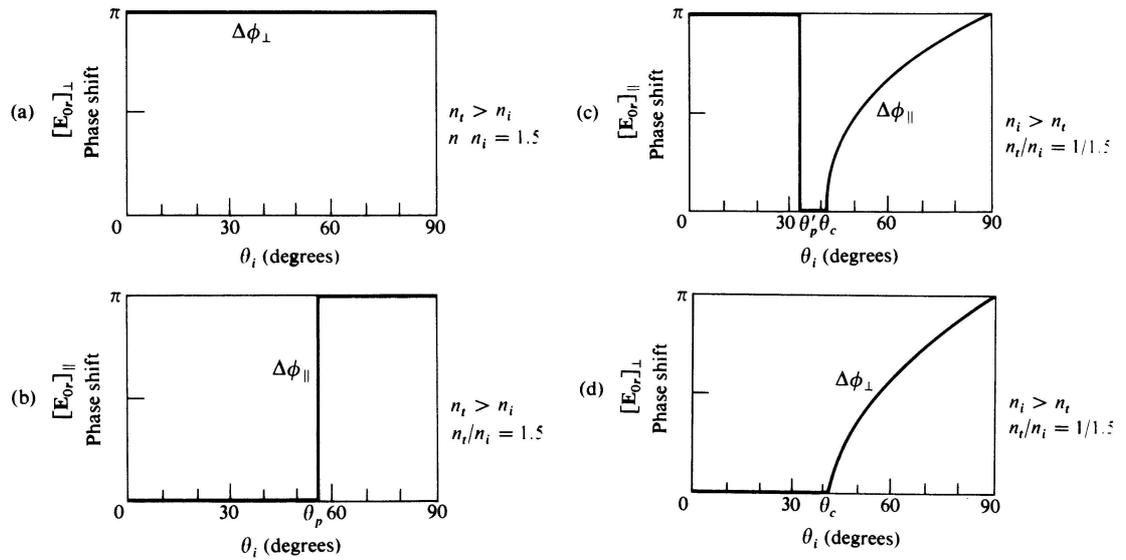


Figura 1.6: Cambiamento di fase della radiazione per la riflessione nel passaggio da un mezzo ad un altro con indice di rifrazione maggiore (a) e (b) o minore (c) e (d). L'angolo in ascissa è l'angolo formato dalla direzione di incidenza con la normale alla superficie. Si noti come per gli angoli tipici dell'incidenza radente, se il secondo mezzo ha indice di rifrazione maggiore del primo, si verifica un cambiamento di fase di π . In (c) e (d), l'angolo θ_c indica l'angolo critico per la riflessione totale [Hecht 1998].

1.4 La problematica della riflessione nei raggi X

eccezione delle zone in prossimità degli spigoli di assorbimento (dovuti ad effetto fotoelettrico ed alla eccitazione/deeccitazione degli elettroni atomici), dove si ha invece una rapida diminuzione del valore del parametro (fenomeno della dispersione anomala). Si noti che nella regione dei raggi X, dove, lontano dagli spigoli di assorbimento, l'energia della radiazione incidente è sempre superiore alle energie di oscillazione degli elettroni atomici, l'indice di rifrazione tende ad un valore minore di 1 [Attwood 1999].

Nel caso dei raggi X è comodo esprimere l'indice di rifrazione come un numero complesso $n = 1 - \delta - i\beta$ con δ e β reali .

Così facendo la parte complessa rende conto dell'assorbimento (che in questa regione spettrale è dominato dall'effetto Fotoelettrico), e risulta in particolare legata al coefficiente di assorbimento lineare μ dalla relazione: $\mu = \frac{2\pi\beta}{\lambda}$ [Spiller 1994].

L'indice di rifrazione complesso dipende dal coefficiente di scattering atomico f secondo la formula:

$$n = 1 - \delta - i\beta = 1 - \frac{N_{at}r_e\lambda^2}{2\pi}(f_1 + if_2) \quad (1.6)$$

in cui r_e ed N_{at} sono rispettivamente il raggio classico dell'elettrone ($r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2.8179 \cdot 10^{-17} cm$) e la densità atomica, mentre il coefficiente di scattering atomico $f = f_1 + if_2$ rappresenta il numero di elettroni liberi per atomo, corretto per tenere conto delle interazioni residue degli elettroni con gli atomi. Ad energie di molto superiori alle energie di legame degli elettroni, il valore di tale numero si avvicina in buona approssimazione, al numero di elettroni atomici Z . Da ciò si può dedurre che i materiali ad alta densità tendono ad assumere un valore per il parametro δ maggiore (e, di conseguenza, un indice di rifrazione minore) che per i materiali a bassa densità [Michette, Buckley 1993].

Tipicamente per i vari materiali il valore di n è molto vicino ad 1 con $\delta \simeq 10^{-2} \div 10^{-5}$ e $\beta \simeq 10^{-2} \div 10^{-6}$. Dalla 1.6 si nota come δ e β risultino essere proporzionali in buona approssimazione a λ^2 (alle alte energie per cui f può essere supposto costante e lontano dalle energie dei picchi di assorbimento) [Spiller 1994].

Dalle leggi di Fresnel si può ricavare che nei raggi X la riflettività ad angoli vicino alla normale risulta essere:

$$R = \frac{I}{I_0} \simeq \frac{\delta^2 + \beta^2}{4} \ll 1 \quad (1.7)$$

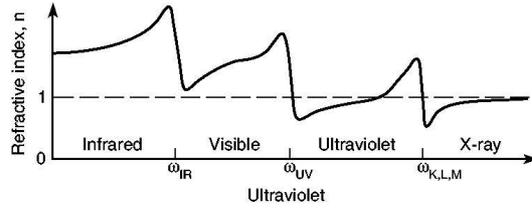


Figura 1.7: Andamento dell'indice (reale) di rifrazione in funzione della frequenza. I bruschi cambiamenti di pendenza corrispondono agli spigoli di assorbimento [Attwood 1999].

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

Quindi il fatto che $\delta, \beta \ll 1$ comporta, per i raggi X, che:

- gli effetti rifrattivi sono estremamente bassi, e conseguentemente ciò significa l'impossibilità di fatto di potere realizzare sistemi focalizzazione tramite lenti, a meno di non sopporre lunghezze focali elevatissime.
- l'efficienza di riflessione ad incidenza normale è quasi trascurabile.

Pertanto la focalizzazione dei raggi X tramite le tecniche comunemente utilizzate per la banda ottica, cioè tramite lenti rifrattive e specchi ad incidenza normale, risulta molto difficile se non impossibile.

1.4.3 Il fenomeno della riflessione totale

I telescopi per astronomia nella banda X finora utilizzati si basano sul fenomeno della riflessione totale. Per radiazione incidente da un mezzo con un dato indice di rifrazione n_1 ad uno con indice di rifrazione n_2 con $n_1 > n_2$ tale fenomeno si verifica per angoli inferiori ad un determinato valore critico θ_{crit} .

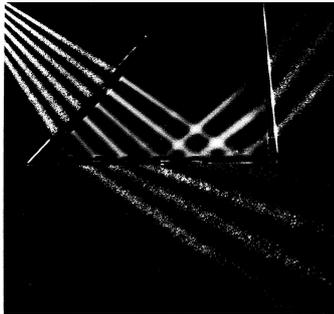


Figura 1.8: Passaggio della radiazione (nel caso in fotografia luce visibile) in un mezzo con indice di rifrazione minore. Per angoli minori dell'angolo critico la luce viene totalmente riflessa [Hecht 1998].

Esprimendo la legge di Snell (1.1) come $\cos \theta_2 = \frac{n_1}{n_2} \cos \theta_1$, risulta $\theta_1 > \theta_2$, cioè nella trasmissione dal primo al secondo mezzo la direzione di propagazione tende ad avvicinarsi alla direzione del piano della superficie di separazione tra i due mezzi. In corrispondenza dell'angolo limite di trasmissione nulla attraverso il secondo mezzo $\theta_2 = 0$, esisterà un angolo critico di incidenza θ_1 affinché si verifichi la riflessione totale:

$$\theta_1 = \theta_c = \arccos \frac{n_2}{n_1}$$

Per un angolo di incidenza minore dell'angolo critico $\theta_1 < \theta_c \Rightarrow \cos \theta_1 > \frac{n_2}{n_1}$, si avrà $\cos \theta_2 > 1$. In tal caso nessun valore reale di θ_2 può soddisfare la legge di Snell, l'equazione 1.1 può essere comunque soddisfatta assumendo valori di θ_1 immaginari. Le leggi di Snell e di Fresnel continuano a valere anche per angoli di incidenza minori dell'angolo critico, se si assume che le quantità in gioco (n e θ) possano assumere valori complessi (tuttavia con le sole parti reali che continuano ad avere significato fisico). Il risultato è che la radiazione non si trasmette attraverso il secondo mezzo ma viene totalmente riflessa alla superficie di separazione. Nel caso ideale

1.4 La problematica della riflessione nei raggi X

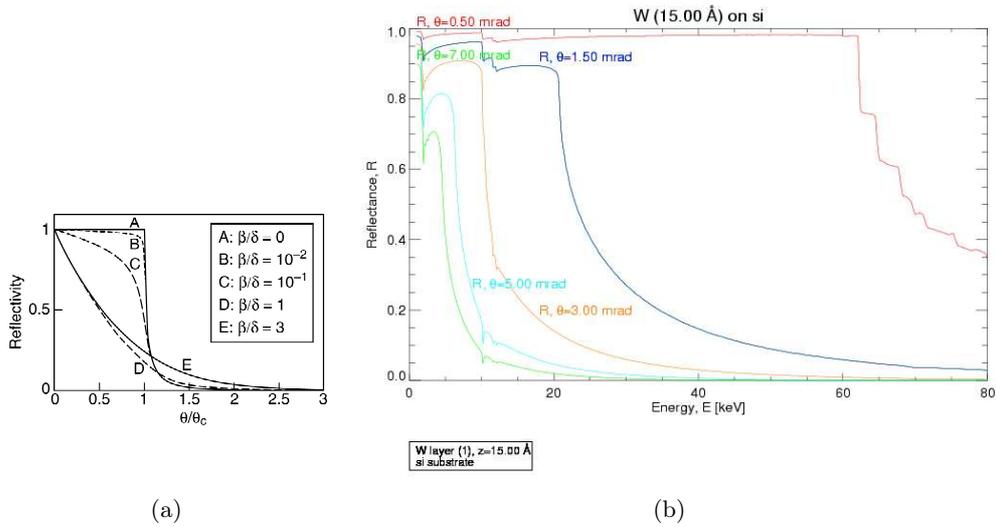


Figura 1.9: (a) Curve di riflessione teoriche, calcolate per vari valori di δ/β , il passaggio al regime di riflettività totale è tanto più brusco quanto minore è il valore di δ/β [Attwood 1999]. (b) Andamento della curva di riflettività per uno strato di tungsteno su substrato in silicio, calcolato con il software IMD [Windt 1998]. Si noti come la larghezza della regione energetica di riflettività totale dipenda dall'angolo di incidenza.

di rifrazione tra mezzi non assorbenti ($\beta = 0$), la riflettività è nulla per angoli inferiori all'angolo critico e uguale al 100% per angoli maggiori di tale angolo. In presenza di assorbimento, invece, la transizione dal regime di riflessione totale a quello di normale riflessione avviene tanto più gradualmente quanto più è elevato il valore del rapporto $\frac{\beta}{\delta}$ [Attwood 1999].

Si noti come l'angolo critico risulti dipendere dall'energia. Se il primo mezzo materiale è dato dal vuoto ($n_1 = 1$), essendo $\delta_2, \beta_2 \ll 1$, si ottiene dallo sviluppo in serie: $\theta_c \cong \sqrt{2\delta_2}$ e, da quanto detto nel paragrafo 1.4.2 risulta: $\theta_c \propto E^{-1}$. La dipendenza dell'angolo critico dall'energia fissa un'energia massima per la quale si può sfruttare il fenomeno della riflessione totale. Infatti, come vedremo nel paragrafo 1.6.3, l'area di raccolta di un telescopio ad incidenza radente è proporzionale al quadrato dell'angolo massimo per cui avviene la riflessione (cioè l'angolo critico). Di fatto la dipendenza dell'angolo critico dall'energia limita lo sfruttamento del fenomeno della riflessione totale per la costruzione di ottiche solamente per energie inferiori a 10 keV. Per energie superiori l'area geometrica dei telescopi ad incidenza radente diviene troppo piccola per consentire l'arrivo al rivelatore di un adeguato numero di fotoni, a meno di non sopporre lunghezze focali molto grandi (diverse decine di metri).

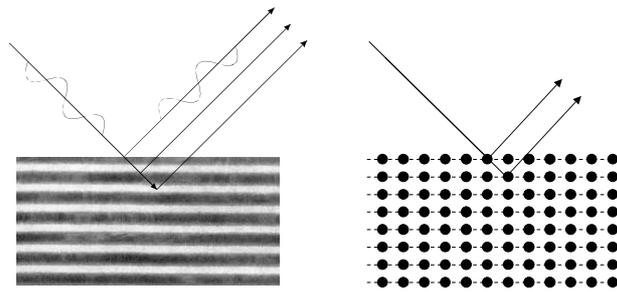


Figura 1.10: Il funzionamento di un multilayer si basa sull'interferenza costruttiva tra le onde parziali riflesse ad ogni interfaccia, analogamente a quanto avviene per la riflessione di Bragg da parte dei cristalli, in cui le onde vengono riflesse dai piani atomici.

1.5 Coperture multistrato riflettenti per raggi X

1.5.1 Principi generali di funzionamento

Un multilayer è formato da una successione di lamine sottili di materiali diversi, depositate su un substrato necessario per dare al film un sostegno meccanico. Ad ogni interfaccia tra due strati parte della radiazione viene trasmessa e parte riflessa, in accordo con le formule di Fresnel (eq. 1.2-1.5), le onde parzialmente riflesse si sommano in fase e ampiezze, dando luogo a interferenza, costruttiva o distruttiva a seconda delle lunghezze d'onda. E' possibile calcolare la riflettività totale di un multilayer utilizzando una procedura ricorsiva che applica ad ogni interfaccia le formule di Fresnel, ricavando l'onda riflessa e quella trasmessa ed incidente sullo strato successivo; l'onda riflessa dal multilayer è data dalla somma delle onde riflesse ad ogni interfaccia.

Il fenomeno è l'analogo della riflessione di Bragg da parte dei cristalli naturali, tanto che la possibilità di impiego di simili strutture per esperimenti sui raggi X fu considerata fin dagli anni '30, nel tentativo di ottenere strutture con maggiore precisione e versatilità rispetto a quelle disponibili in natura [Underwood, Barbee 1981]. Le difficoltà di ottenere strati di spessore di ordine di grandezza comparabile alla distanza tra i piani atomici nei cristalli, necessari per tali applicazioni, sono comunque notevoli e si è dovuto attendere fino alla fine degli anni '60 per la realizzazione pratica delle prime strutture stabili di questo tipo [Dinklage 1967]. Come vedremo in seguito, nel campo dei raggi X, è conveniente utilizzare un'alternanza di un materiale ad alta densità (detto anche *assorbitore*) con uno a bassa densità (*spaziatore*). La figura 1.10 illustra il funzionamento di un multilayer, confrontato con quello di un cristallo naturale: l'analogia è evidente se si immagina di ridurre a zero lo spessore dell'elemento assorbitore e di sostituire lo spaziatore con il vuoto. Nella pratica la differenza tra i due casi consiste principalmente nella presenza, nel caso dei multilayer, di assorbimento nell'attraversamento dei materiali che compongono gli strati. Inoltre, come si vedrà al paragrafo seguente, la differenza tra gli indici

di rifrazione degli strati comporta un cambiamento della direzione di propagazione della radiazione, fatto di cui bisogna tenere conto in una trattazione rigorosa.

1.5.2 Riflettività del singolo strato

Esaminando il comportamento generale di un singolo strato tra due mezzi (fig.1.5.2), si nota come l'onda riflessa sia data dall'interferenza tra le due onde riflesse alle due interfacce.

Riferendosi alla figura 1.5.2, per un dato angolo di trasmissione θ_1 la differenza di fase sperimentata dall'onda nell'attraversamento dello strato (dal punto A al punto B in figura) è quantificato dalla formula:

$$\Delta\phi = \frac{2\pi\Delta\Lambda}{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda}n_1d_1\sin\theta_1 \quad (1.8)$$

In cui $\Delta\Lambda$ è la differenza tra i cammini ottici. La differenza di cammino ottico tra le onde riflesse dalle due interfacce risulta essere, per una struttura in cui $n_2 < n_1 < n_0$ (oppure $n_2 > n_1 > n_0$ [Hecht 1998]):

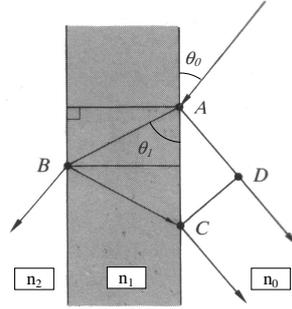


Figura 1.11: Interferenza tra onde parzialmente riflesse da uno strato e differenza dei cammini ottici.

$$\Delta\Lambda = 2n_1d_1\sin\theta_0 \quad (1.9)$$

Si ha un picco di interferenza costruttiva ($\Delta\Lambda = m\lambda$) per :

$$n_1d_1\sin\theta_1 = n_1d_1\sqrt{1 - \cos^2\theta_0} = m\lambda \quad m = 1, 2, \dots \quad (1.10)$$

ed un massimo di interferenza distruttiva ($\Delta\Lambda = (m + \frac{1}{2})\lambda$) per:

$$n_1d_1\sin\theta_0 = (m + \frac{1}{2})\lambda \quad m = 1, 2, \dots$$

L'equazione 1.10 (formula di Bragg corretta per la rifrazione) è l'analogo della condizione di Bragg per l'interferenza costruttiva nella rifrazione da parte di cristalli [Bragg 1992] e ad essa si riduce nel caso si trascurino gli effetti rifrattivi (cioè si ponga $n_1 = n_2 \Rightarrow \theta_1 = \theta_0$).

Per un dato angolo di incidenza, si hanno quindi vari picchi di riflettività per le lunghezze d'onda che soddisfano l'equazione 1.10 per valori interi di m (ordine del picco di Bragg). Considerando la riflettività in funzione dell'energia e ricordando la relazione

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

$E = \frac{hc}{\lambda} \cong \frac{12400 eV \cdot \text{\AA}}{\lambda}$, se l'indice di rifrazione fosse indipendente dalla frequenza si avrebbero picchi di riflettività (assorbimento) a energie uguali a frazioni intere (semiinteri) di quella corrispondente al picco di ordine 1, in realtà la piccola variazione di n con l'energia introduce un lieve spostamento nella posizione dei picchi.

L'utilizzo di multilayer rende quindi possibile aumentare, rispetto agli specchi a riflessione totale, l'angolo massimo per cui si ha riflessione ad una data energia, infatti le condizioni per la riflessione sono [Hoghoj et al. 1997]:

- per specchi a riflessione totale $\theta \leq \theta_c \Rightarrow \frac{\theta}{\lambda} \leq 7.0 * 10^{-2} nm^{-1}$ per Iridio $\Rightarrow E[keV]\theta[mrad] \leq 86$
- per multilayer $\frac{\theta}{\lambda} \cong \frac{1}{2d} \Rightarrow E[keV]\theta[mrad] \leq 6.2 * 10^2 / d[nm]$

Si noti come l'energia dei picchi di riflettività sia inversamente proporzionale agli spessori degli strati, fatto che spiega le difficoltà tecniche della realizzazione di multilayer operanti alle energie tipiche dei raggi X, in quanto richiede la realizzazione di strati estremamente sottili (dell'ordine del nanometro per energie tipiche dei raggi X duri ed incidenza radente).

Riassumendo l'andamento della riflettività in funzione dell'energia per un dato angolo d'incidenza, si avrà, alle energie più basse (per le quali $\theta_c(E) > \theta$), una regione di riflessione totale, e una serie di picchi di riflettività alle energie per le quali si ha interferenza costruttiva. L'intensità dei picchi di riflettività diminuisce all'aumentare dell'ordine del picco, quindi dell'energia. Il discorso si può trasferire dalle energie agli angoli, cioè, fissata l'energia della radiazione, si avrà per la riflettività in funzione dell'angolo un'andamento analogo, con picchi di riflettività agli angoli che soddisfano la 1.10.

Si ricorda che nel caso di incidenza da un mezzo con un dato indice di rifrazione ad uno con indice minore, per piccoli angoli di incidenza, si verifica, per entrambe le polarizzazioni, uno sfasamento di 90° , perciò, nei casi in cui $n_1 < n_2, n_3 < n_2$, oppure $n_2 < n_1, n_2 < n_3$, per angoli piccoli ($\theta_0 \lesssim 60^\circ$), si deve introdurre tale ulteriore sfasamento nel secondo membro della 1.9. Come risultato i picchi di interferenza costruttiva e distruttiva saranno tra loro invertiti.

Il suddetto comportamento può essere ricavato, oltre che nel modo appena descritto, direttamente dalle leggi di Fresnel e di Snell, le quali ci permettono di calcolare con precisione la riflettività di una data interfaccia per ogni angolo di incidenza ed energia. E' quindi necessario per un tale calcolo, valutare le formule di Fresnel per ogni energia e angolo per tutte le superfici di separazione tra strati di materiali diversi, e sommare tra loro le onde riflesse. Il calcolo è abbastanza laborioso, ma può essere facilmente effettuato da un computer utilizzando pacchetti software appositi. In questo lavoro è stato spesso utilizzato IMD [Windt 1998], che permette di effettuare numerosi calcoli relativi ai multilayer al variare dei vari parametri e di tracciare grafici basati su di essi. In questo lavoro il programma è stato utilizzato principalmente per la verifica del buon funzionamento dei programmi realizzati e per il controllo dei risultati, oltre che per

l'analisi dei risultati sperimentali al cap.4. In figura 1.9(b) si può vedere un esempio del tipo di grafici che possono essere calcolati e tracciati da tale programma: il grafico mostra la riflettività teorica (per interfacce lisce) per uno strato di tungsteno su substrato di silicio.

1.5.3 Comportamento di un doppio strato

Alle alte energie tutti i materiali hanno indici di rifrazione molto simili, per cui, dalla 1.11, la riflettività, è praticamente nulla per angoli grandi ($R \simeq 10^{-3} \div 10^{-2}$), mentre la possibilità di ottenere una riflettività considerevole utilizzando un gran numero di strati è impedita dall'assorbimento [Michette, Buckley 1993] e dalla diffusione per effetto della rugosità superficiale (par. 1.5.5). Invece per piccoli angoli di incidenza, la riflettività assume un valore rilevabile, seppur piccolo. La riflettività di un singolo strato resta comunque molto bassa, nei multilayer questa bassa riflettività viene sfruttata ponendo più strati in pila in modo che le riflessioni parziali da parte dei singoli strati diano luogo ad interferenza costruttiva.

La riflettività alla j -esima interfaccia è calcolabile dalle formule di Fresnel (1.2), approssimabili per entrambe le polarizzazioni e per angoli maggiori dell'angolo critico ($\sqrt{2}\delta \sim \theta_c \ll \theta \ll 1$) e $\beta \ll \delta \ll 1$ (sempre vera alle energie considerate) da :

$$r_j = \frac{(\delta_j - \delta_{j+1})}{2 \sin^2 \theta_j} \quad (1.11)$$

da cui si vede che tale riflettività, fissato l'angolo, è tanto più alta quanto più sia maggiore la differenza tra le parti reali degli indici di rifrazione dei due mezzi. Di conseguenza, per ottenere un'elevata riflettività ad ogni interfaccia, è conveniente utilizzare un'alternanza di due materiali, rispettivamente ad alto δ (quindi dalla 1.6 con alta densità) e a basso δ (bassa densità). I due materiali vengono anche detti rispettivamente *assorbitore* e *spaziatore*. Nel campo dei multilayers è usuale considerare la struttura del multilayer come una successione di *bistrati* e parlare dello spessore del bistrato d e del rapporto Γ tra lo spessore dello strato a maggior densità e lo spessore del bistrato.

Un multilayer a *spaziatura costante* (o *periodico*) è un multilayer in cui gli strati dello stesso materiale hanno tutti lo stesso spessore, in questo tipo di multilayer la struttura è interamente determinata dai due parametri d e Γ . Lo sfasamento tra le onde riflesse da due interfacce dello stesso tipo (spaziatore-assorbitore o assorbitor-spaziatore) è costante lungo tutto il multilayer, per cui risulta conveniente [Joensen et al. 1995, Protopopov, Kalnov 1998] suddividere l'onda totale riflessa dal multilayer in due componenti: una risultante dalle riflessioni tra strato leggero e pesante (onde 3 e 4 in fig. 1.12), l'altra dalle riflessioni tra strato pesante-leggero (1 e 2). La massima interferenza costruttiva tra onde appartenenti alla medesima componente, si ha per $\Delta\Phi_j + \Delta\Phi_{j+1} = m\pi$, in cui $\Delta\Phi_j$ è la differenza di fase sperimentata dall'onda nell'attraversamento del j -esimo

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

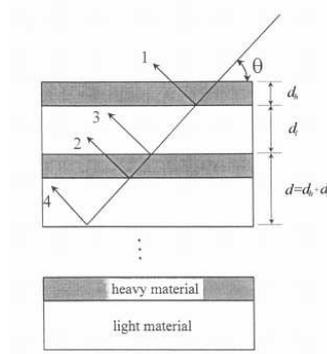


Figura 1.12: Riflessione da parte di un multilayer a spaziatura costante. Le onde parzialmente riflesse da ogni strato si sommano in fase e ampiezza. [Protopopov, Kalnov 1998].

strato. Considerando invece l'interferenza tra le due componenti (quindi tra le onde riflesse alle due interfacce di ogni strato), si ha la massima interferenza costruttiva per $\Delta\Phi_j = \frac{\pi}{2}$, in quanto che (vedi 1.6), nella riflessione all'interfaccia tra il materiale pesante e quello leggero (quindi alla prima interfaccia degli strati dello spaziatore ed alla seconda di quelli dell'assorbitore), si verifica un ulteriore sfasamento di π .

Una struttura che soddisfa entrambe queste condizioni viene usualmente definita *struttura a quarto d'onda* (*quarter wave structure*) [Spiller 1994], essa è ottimale per situazioni in cui non si ha assorbimento (per esempio nella riflessione di neutroni). Per multilayer con assorbimento è conveniente utilizzare un Γ più basso rispetto alla struttura a quarto d'onda (per la quale¹ $\Gamma \sim 0.5$), riducendo l'assorbimento e permettendo alla radiazione di penetrare più in profondità, in modo da far partecipare alla riflessione un maggior numero di strati [Joensen et al. 1995, Spiller 1994, p.140]. Tale idea è confermata da varie formule, ricavate con metodi diversi, che forniscono il valore di Γ per cui si ha massima riflessione per un bistrato ad una data profondità² [Joensen et al. 1995, Protopopov, Kalnov 1998, Vinogradov, Zeldovich 1977]. Il valore di Γ ha particolare influenza sui picchi di Bragg di ordine superiore al primo, per esempio è facile mostrare che per una struttura a quarto d'onda, i due strati dello stesso bistrato danno, alle lunghezze d'onda del secondo picco di Bragg, onde riflesse che sono esattamente in opposizione di fase, annullando la riflettività alla lunghezza d'onda in questione.

¹A causa degli effetti rifrattivi il rapporto Γ tipico di una struttura a quarto d'onda si discosta leggermente dal valore 0.5 (secondo la 1.8, la differenza di fase sperimentata nell'attraversamento di uno strato dipende da angolo e indice di rifrazione per cui per avere la stessa differenza di fase nei due materiali sono necessari spessori diversi). Tuttavia, alle energie tipiche dei raggi X, gli indici di rifrazione (e di conseguenza gli angoli) sono molto simili, per cui in prima approssimazione tali effetti possono essere trascurati.

²in generale il valore ottimale di Γ dipende dall'assorbimento subito nell'attraversamento degli strati superiori, per cui in un multilayer a spaziatura costante non è possibile avere la massima riflettività da parte di tutti i bistrati.

1.5 Coperture multistrato riflettenti per raggi X

blocco	numero di strati	$d(\text{\AA})$
1	5	46-50
2	8	40
3	13	36
4	18	33

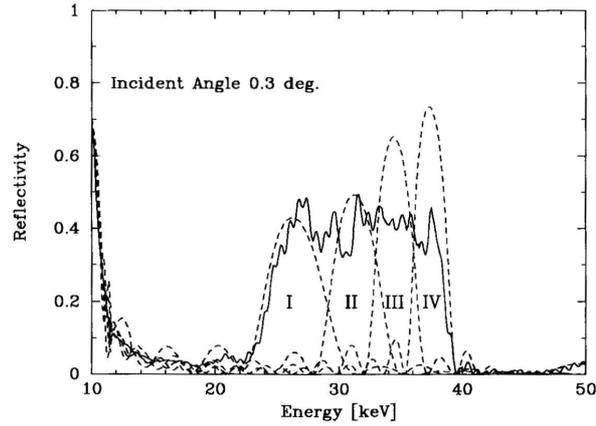


Figura 1.13: Multilayer a larga banda costituito da quattro blocchi con struttura periodica [Tamura et al. 2003].

1.5.4 Multilayer a spaziatura variabile (depth-graded)

I multilayer a spaziatura costante permettono di realizzare strutture caratterizzate da elevata riflettività in una banda piuttosto ristretta intorno al picco di Bragg. Nelle applicazioni astronomiche è richiesta riflettività su una banda (energetica o angolare) ben più ampia. La riflessione totale da parte di metalli pesanti offre una banda sufficientemente larga per i raggi X soffici (1-10 KeV), mentre nei raggi X duri tale possibilità è limitata dalla già vista dipendenza dell'angolo critico con l'energia; per ottenere una riflettività su banda larga nella regione 10-100 KeV (in realtà tale banda potrebbe essere ulteriormente estesa almeno fino ai 200 KeV [Windt et al. 2000, Craig et al. 2000]) è stato proposto l'uso dei multilayer *a spaziatura variabile*. L'idea di base di tali multilayer è quella di utilizzare strati di diversi spessori, in modo che gli stretti picchi di riflettività di Bragg corrispondenti agli spessori degli strati si sommino per dare riflettività su larga banda. Tali picchi sono evidenti nella figura 1.13, in cui è mostrata la riflettività di un multilayer studiato da Tamura e collaboratori [Tamura et al. 2003] per la missione *Infocμs* e basato su quattro gruppi di bistrati con valori costanti di d e Γ . Generalmente l'assorbimento fa sì che i fotoni di energia minore possano penetrare solo gli strati più superficiali, per cui è conveniente porre all'esterno gli strati più spessi che riflettono tali fotoni ed a maggiore profondità gli strati più sottili per la riflessione dei fotoni più energetici, per i quali la distanza di penetrazione è maggiore. Tale criterio è rispettato anche nel multilayer della suddetta figura, l'assorbimento delle energie maggiori è ben visibile confrontando le riflettività individuali di ogni gruppo di bistrati (linee tratteggiate), con la riflettività totale (linea continua).

L'uso ad incidenza radente di multilayer a spaziatura variabile fu proposto per la prima volta per applicazioni relative alla polarizzazione e riflessione di neutroni [Mezei 1976,

Mezei, Dagleish 1977], che, a differenza dei raggi X non subiscono assorbimento e per i quali è quindi possibile utilizzare un gran numero di strati, ottenendo una riflettività maggiore del 95% su una banda larga 3-4 volte quella di riflessione totale [Mezei 1992].

1.5.5 Calcolo della riflettività di un multilayer

Lo studio del comportamento di un multilayer può essere condotto secondo due diversi approcci teorici [Underwood, Barbee 1981, Spiller 1994, cap.7]:

- La *teoria cinematica* tratta le riflessioni da parte dei singoli strati come indipendenti e assume che l'onda riflessa sia la somma vettoriale (ampiezza e fase) delle onde parzialmente riflesse. Ciò corrisponde a trascurare gli effetti rifrattivi e, nel calcolo della riflessione da parte di ogni strato, l'attenuazione dovuta alle riflessioni degli altri strati, considerando solo quella dovuta all'assorbimento. La teoria è quindi particolarmente adatta a trattare strutture con pochi strati o situazioni in cui la riflettività del singolo strato è bassa (lontano dai picchi di Bragg e dalla regione di riflessione totale). Sebbene le approssimazioni della teoria cinematica siano spesso non accettabili, la notevole semplificazione introdotta rende possibile un approccio analitico al problema, permettendo di ricavare relazioni utili o regole generali. E' inoltre possibile, sotto opportune condizioni, introdurre nella teoria cinematica termini correttivi per gli effetti trascurati [Protopopov, Kalnov 1998, Spiller 1994, par. 7.2], ottenendo modelli più simili alla realtà.
- La *teoria dinamica*, seguita in questa tesi, tiene conto di tutte le interazioni della radiazione con i diversi strati, fornendo un calcolo molto rispondente alla realtà. L'approccio analitico a questa teoria è stato sviluppato da Darwin nel limite di un numero infinito di piani non assorbenti, e successivamente modificata da Prins includendo gli effetti dell'assorbimento. Per casi non strettamente periodici e con numero finito il calcolo può più convenientemente essere effettuato con metodi computazionali [Underwood, Barbee 1981], secondo il metodo descritto nel seguente paragrafo.

Formula ricorsiva per il calcolo della riflettività

Nell'ambito della teoria dinamica della riflessione è possibile calcolare la riflettività totale di un generico multilayer composto da N strati di materiali diversi, a partire dalle formule relative al singolo strato viste nel paragrafo 1.5.2. Il metodo seguito in questa tesi e utilizzato nei prossimi capitoli per l'ottimizzazione dei multilayer, è stato proposto da Parratt [Parrat 1954] con alcune approssimazioni e successivamente rivisto e generalizzato da Underwood e Barbee [Underwood, Barbee 1981].

Introducendo per il j -esimo strato il termine $g_j = n_j \sin \theta_j = \sqrt{n_j^2 - n_0 \cos^2 \theta_0}$ è possibile esprimere le formule di Fresnel (eq. 1.2) in funzione dei soli indici di rifrazione e dell'angolo

di incidenza sul primo strato. Le prime due formule di Fresnel si possono quindi scrivere, per l'interfaccia tra il j -esimo ed il $j + 1$ -esimo strato, come :

$$r_{j,j+1}^{\perp} = \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)^{\perp} = \frac{g_j - g_{j+1}}{g_j + g_{j+1}}$$

$$r_{j,j+1}^{\perp} = \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)^{\perp} = \frac{\frac{g_j}{n_j^2} - \frac{g_{j+1}}{n_{j+1}^2}}{\frac{g_j}{n_j^2} + \frac{g_{j+1}}{n_{j+1}^2}}$$

La differenza di fase nell'attraversamento del j -esimo strato diventa 1.8:

$$\Delta\Phi = e^{-i\frac{\pi}{\lambda}g_j d_j}$$

Il metodo consiste in una procedura ricorsiva che parte dal calcolo della riflessione da parte del substrato (il cui fondo viene assunto perfettamente assorbente), risalendo lungo la pila di strati e sommando vettorialmente l'onda riflessa da ogni strato, fino al raggiungimento della superficie.

Effetto delle imperfezioni superficiali

Le equazioni di Fresnel e Snell, usate finora, permettono di descrivere con precisione il comportamento della radiazione incidente sull'interfaccia tra due mezzi se si suppone che questa sia perfettamente liscia, nella realtà l'effetto delle imperfezioni superficiali alle alte energie non è trascurabile e deve essere preso necessariamente in considerazione. Nella riflessione da parte di una superficie non perfettamente liscia si ha una riduzione dell'intensità della radiazione riflessa rispetto al valore teoricamente previsto. Ciò avviene perchè parte della radiazione non viene riflessa specularmente, ma viene diffusa dalle irregolarità della superficie.

L'equazione di Nevot-Croce [Joensen et al. 1995]:

$$r'_j = r_j \exp \left[-\frac{8\pi^2}{\lambda^2} (n_1 \sin \theta_1) (n_1 \sin \theta_1) \sigma^2 \right] \quad (1.12)$$

introduce un fattore di correzione dipendente dalla rugosità, espressa dal valore rms σ , che, moltiplicato per il coefficiente di riflessione in assenza di rugosità r_j , dà il coefficiente di riflessione corretto r'_j .

1.6 Ottiche ad incidenza radente

Per definizione, la focalizzazione della radiazione consiste nella trasformazione di raggi provenienti da un punto di origine O in raggi convergenti su un punto immagine in cui si ponga il rivelatore. Tale problema è risolto (per una singola riflessione) da una famiglia

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

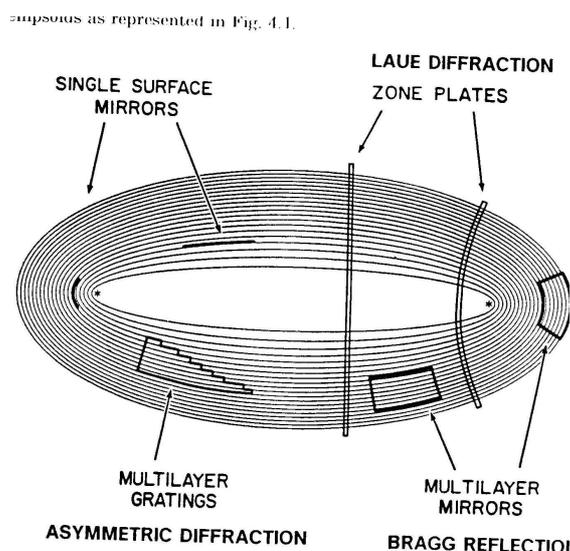


Figura 1.14: Sezione dell'insieme di ellissoidi che garantisce la focalizzazione dei raggi provenienti da O in I, il sistema ha simmetria rotazionale intorno all'asse I-O. Dei metodi focalizzanti illustrati in figura, quelli di maggiore interesse in astronomia X sono i "single surface mirrors" (ottiche a riflessione totale) e i multilayer mirrors (1) (multilayers)[Spiller 1994].

di ellissoidi di rotazione aventi come fuochi i due punti O e I [Spiller 1994], che diventano paraboloidi se si pone il punto O all'infinito (è quello che avviene in astronomia). A differenza dei normali specchi parabolici per la radiazione ottica, in cui si utilizza per la riflessione la parte del paraboloide prossima al vertice, nel caso della radiazione X si ha una buona riflettività solo a piccoli angoli (inferiori a θ_c per le ottiche a riflessione totale), perciò la regione intorno al vertice può essere eliminata, dando luogo ad un tronco di parabola. La possibilità di costruire un telescopio per astronomia X sfruttando la geometria parabolica fu studiata già nel 1960 da Giacconi e Rossi [Giacconi, Rossi 1960] (è da notare che la prima sorgente X extrasolare, Sco X-1, fu scoperta solo nel 1962), ma, a parte alcuni prototipi per esperimenti su palloni [Aschenbach 1985], tale geometria non venne mai utilizzata per astronomia X, poichè, seppur esente da aberrazione sferica, presenta una forte aberrazione di coma.

L'aberrazione di coma è un'aberrazione monocromatica primaria [Hecht 1998], consistente nella focalizzazione dei fotoni provenienti da una sorgente fuori asse, su punti diversi del piano focale, a seconda del punto di incidenza sullo specchio. Ciò comporta l'impossibilità di osservare oggetti su un ampio campo di vista, rendendo lo specchio inadatto all'uso astronomico.

Perchè un'ottica sia esente da coma, deve essere soddisfatta la condizione di Abbe sui

seni [Born e Wolf 1993], che per sorgenti all'infinito è:

$$\frac{h}{\sin \alpha_i} = R \quad (1.13)$$

in cui h è la distanza del punto di riflessione dall'asse ottico e α_i l'angolo tra la direzione di incidenza sul fuoco e l'asse ottico, R una costante arbitraria. Il significato della 1.13 è che, per annullare l'aberrazione di coma, la superficie definita dalle intersezioni tra i raggi incidenti sul telescopio e quelli da esso riflessi (*superficie principale*) deve giacere su una sfera di raggio R , centrata nel punto focale. Per un singolo specchio tale superficie coincide con quella dello specchio stesso (su cui avviene la deviazione dei raggi), per cui la superficie di un singolo specchio ad incidenza radente non solo non può soddisfare la condizione di Abbe, ma anzi si discosta in massima parte da questa, proprio per il fatto di formare un piccolo angolo con i raggi incidenti. In particolare, uno specchio a sezione parabolica approssima la condizione di Abbe solo nella zona vicina al vertice, in cui la superficie approssima una sfera e che, come già detto, non viene utilizzata negli specchi ad incidenza radente.

1.6.1 Le Geometrie Wolter

Come appena visto, un ottica ad incidenza radente basata su una sola riflessione è fortemente affetta da aberrazione di coma. E' possibile, invece, progettare soluzioni che si basano su una doppia riflessione¹ su superfici di rivoluzione confocali e coassiali e che permettono di eliminare o ridurre l'effetto di tale aberrazione.

Una soluzione di questo tipo fu proposta (in tre varianti note come Wolter I, II e III) nel 1952 da H. Wolter per la microscopia X [Wolter 1952a]. Essa si basa su due superfici a profilo di curva conica e permette, con un opportuno progetto, di soddisfare in buona approssimazione la condizione di Abbe, soprattutto nella regione parassiale. In particolare la Wolter I si è rivelata, per i motivi elencati al prossimo paragrafo, molto utile in astronomia, tanto che su di essa (o sulla sua approssimazione a doppio cono) si basa la quasi totalità delle missioni di astronomia X con telescopi focalizzanti (si veda la tab. 1.1).

La configurazione Wolter I (fig. 1.15) utilizza una coppia di superfici iperboloidi-paraboloidi aventi un fuoco in comune. Il punto immagine si trova nel punto di fuoco non in comune dell'iperboloidi. La figura 1.15 mostra l'assetto delle geometrie Wolter .

Le tre geometrie Wolter sono equivalenti per quel che riguarda la soddisfazione della condizione di Abbe [Aschenbach 1985] e sono in grado di offrire ottime prestazioni per sorgenti vicine all'asse. Infatti la superficie principale ha la forma di un paraboloidi di

¹Sono state esaminate anche soluzioni basate su un numero maggiore di superfici (la condizione di Abbe ne richiede un numero pari [Aschenbach 1985, Burrows et al.]), tuttavia queste, a fronte di alcuni indubbi vantaggi (aumento dell'area di raccolta e riduzione dell'angolo di incidenza) si rivelano poco pratiche per usi astronomici, in particolare a causa dell'aumento di peso che comportano [Gorenstein 1993].

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

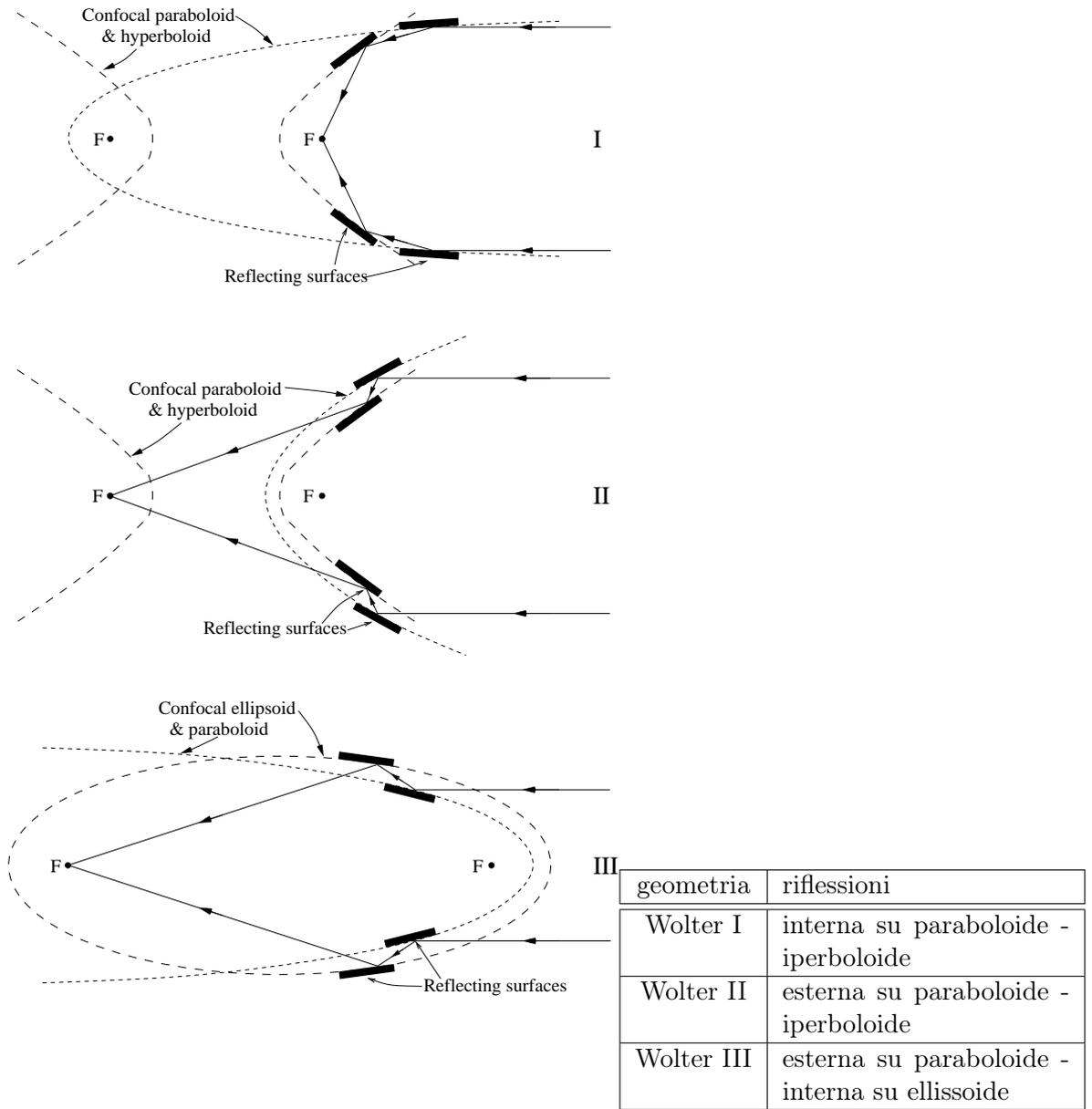


Figura 1.15: Configurazioni Wolter I,II,III.

rivoluzione intorno all'asse ottico che, nella regione parassiale, approssima bene una sfera. Per elevati angoli fuori asse il coma cresce linearmente con la distanza dall'asse ottico, ma sono dominanti altri tipi di aberrazione a dipendenza quadratica, come l'*astigmatismo* e la *curvatura di campo*¹ [Harvey et Al. 2001]. Quest'ultima diventa ben presto dominante al crescere della distanza dall'asse ottico, limitando il campo di vista utile del telescopio a poche decine di minuti d'arco.

In un ulteriore articolo [Wolter 1952b] Wolter propose un diverso tipo di geometria (usualmente detta Wolter-Schwarzschild) che, per mezzo di lievi deviazioni dei profili degli specchi dalle curve coniche, soddisfa perfettamente la condizione di Abbe, eliminando ogni ordine di coma [Aschenbach 1985]. Questa geometria, pur presentando altre aberrazioni, ha, soprattutto fuori asse, prestazioni teoricamente migliori della Wolter I [Harvey et Al. 2001]. Essa comporta però alcune difficoltà costruttive, dovute in particolare al brusco cambio di pendenza tra le due superfici, che la rendono di fatto raramente utilizzata in astronomia X (tra le principali missioni per astronomia X l'unica che la utilizzi è **Einstein**, si veda tab. 1.1).

1.6.2 Altre geometrie basate su superfici di rivoluzione.

In generale le geometrie basate su doppia riflessione interna (Wolter I e sue derivazioni) godono di diversi vantaggi per le applicazioni astronomiche, che ben spiegano il successo ottenuto in questo campo dalla geometria Wolter I, tra cui i principali:

Possibilità di essere nidificate: gli specchi ad incidenza radente hanno generalmente un'area di raccolta molto piccola (dell'ordine di qualche cm^2 , si veda tab. 1.1), per cui è fondamentale avere la possibilità di aumentarne il valore montando diverse shell coassiali e confocali 1.16, in modo da sommare le aree di raccolta dei singoli specchi. La relazione tra area di raccolta e parametri dello specchio sarà trattata in dettaglio nel prossimo paragrafo.

Semplificazione dei problemi costruttivi: possono essere fabbricate sia a partire da un singolo pezzo, riducendo i problemi di allineamento e assicurando una maggiore precisione costruttiva e stabilità strutturale, sia a partire da più pezzi, permettendo la realizzazione di ottiche più sottili, leggere ed economiche (anche se con prestazioni inferiori).

Versatilità: E' possibile approssimare le superfici di iperbole e parabola della geometria Wolter I con due tronchi di cono, facilitando la produzione e riducendo i costi. Ciò rende possibile la realizzazione di ottiche più sottili e leggere [Gressler, Harvey 1994] permettendo di aumentare il numero di specchi nidificati, quindi l'area di raccolta

¹Consistente nel fatto che la superficie focale sia curva e non coincida quindi con il piano del rivelatore. La costruzione di rivelatori con superficie curva, che porrebbero rimedio all'aberrazione, può presentare notevoli difficoltà. Una soluzione "a basso costo" spesso adottata è quella di spostare leggermente il rivelatore, ottenendo una superficie, in media più simile alla superficie focale, sebbene leggermente fuori fuoco anche al centro del campo [Conconi, Campana 2000].

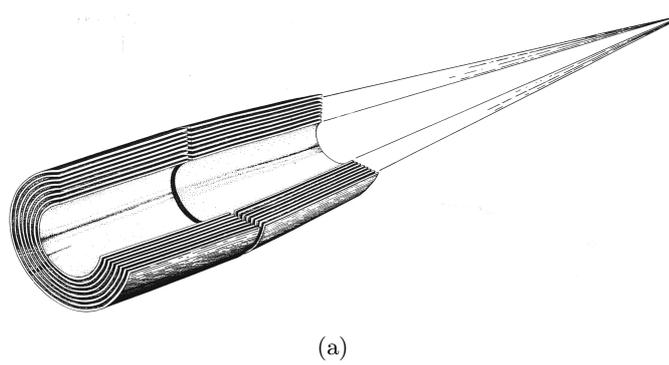
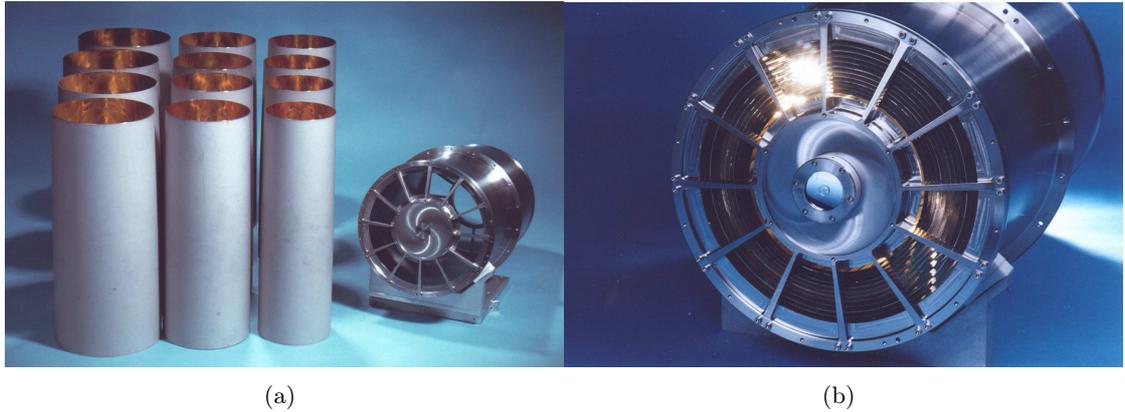


Figura 1.16: (a) Spaccato di un'ottica di tipo Wolter I composta da diverse shell nidificate. (b) Gli specchi del telescopio di JetX/Swift insieme al loro alloggiamento, realizzati presso OAB. (c) Gli specchi di JetX montati nel loro alloggiamento.



[Spiller 1994]. In alternativa, utilizzando profili a simmetria rotazionale diversi da parabola e iperbole, è possibile ottimizzare la forma dell'ottica in base al tipo di prestazioni desiderate, bilanciando tra loro gli effetti negativi.

Un esempio di quanto detto nell'ultimo punto è costituito dalla geometria a doppio cono proposta da Serlemitsos [Serlemitsos, Soong 1995] ed utilizzata in diverse missioni di astronomia X. Questa soluzione comporta un peggioramento della risoluzione angolare dell'ottica, che però spesso è controbilanciato (ciò dipende dagli scopi dagli scopi dell'ottica) dai vantaggi messi in luce sopra.

L'approssimazione delle ottiche Wolter da parte di ottiche a doppio cono è tanto più buona quanto maggiore è il rapporto f /number (rapporto tra lunghezza focale e diametro d'apertura) [Petre, Salermitos 1985]. In particolare la risoluzione di questo tipo di specchio risulta essere:

$$HPD \sim \frac{LR_0}{F^2}$$

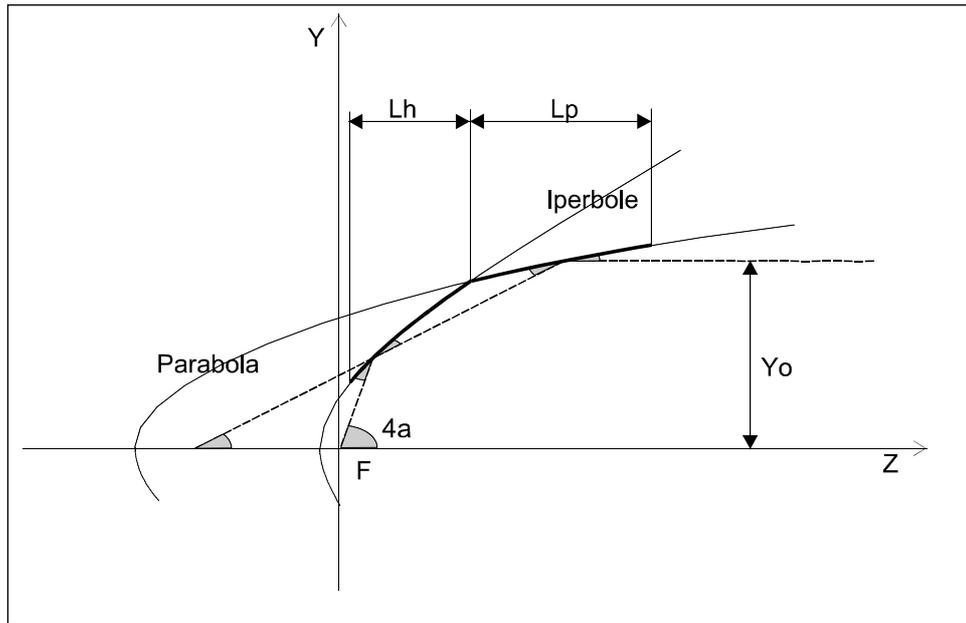


Figura 1.17: Parametri geometrici in gioco per un'ottica tipo Wolter I. L'angolo di incidenza sul fuoco F2 è uguale a quattro volte l'angolo di incidenza sullo specchio primario. La lunghezza focale (F) è misurata dalla giunzione tra i due specchi .

dove HPD è la risoluzione angolare espressa come *half power diameter*¹, L ed F sono rispettivamente le lunghezze dello specchio primario e della focale, ed R_0 è il raggio dell'ottica alla giunzione tra le due superfici. Poichè, come si vedrà nel prossimo paragrafo, vale $R_0 = F \tan 4\theta$, con θ angolo di incidenza sullo specchio primario (corrispondente all'angolo formato dalla superficie dello specchio primario con l'asse ottico), si avrà una migliore risoluzione per piccoli angoli di incidenza su specchi corti e per focali lunghe.

1.6.3 Aspetti geometrici delle ottiche basate su doppia superficie di rivoluzione

Per quel che riguarda le proprietà geometriche, i tipi di ottiche citati nel paragrafo precedente sono quasi equivalenti e vengono ben approssimate dalla geometria a doppio cono.

Riferendosi all'fig. 1.17, l'angolo di incidenza dei fotoni sui due specchi è uguale, inoltre l'angolo di incidenza sul rivelatore è uguale a 4 volte l'angolo di incidenza sullo specchio primario. E' facile ricavare la relazione tra raggio e lunghezza focale:

$$R_0 = F \tan 4\theta \cong 4F\theta \quad (1.14)$$

¹il diametro angolare nel piano focale su cui cade la metà dei fotoni focalizzati

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

dove l'approssimazione vale per piccoli angoli di incidenza ed è quindi molto buona nel caso in considerazione.

Per poter essere focalizzato sul rivelatore un fotone deve colpire la superficie dello specchio primario. L'area di raccolta del telescopio è data quindi dalla proiezione di tale specchio sul piano perpendicolare all'asse ottico, risulterà essere quindi:

$$A_{coll} = 2\pi R_0 \Delta R = 2\pi R_0 L \tan \alpha \cong 8\pi F L \theta^2$$

Dove L è la lunghezza dello specchio primario (tipicamente i due specchi hanno lunghezza uguale) ed R_0 il raggio alla giunzione.

Si noti che nel caso di specchi confocali nidificati, gli angoli di incidenza crescono con il raggio. Perciò la riflessione dei fotoni più energetici avverrà con maggiore facilità da parte degli specchi interni, che però hanno una bassa area di raccolta, mentre gli specchi esterni offriranno una minore riflettività alle alte energie, ma un'area di raccolta molto elevata, soprattutto per le basse energie. Più precisamente si definisce area efficace di uno specchio il prodotto di area di raccolta ed efficienza¹dello specchio, essa corrisponde all'area di raccolta di un telescopio con efficienza 100% che focalizzi lo stesso numero di fotoni del telescopio in questione. L'area efficace dipende dall'energia, risulta:

$$A_{eff}(E) = A_{coll} \mathcal{R}_\theta^2(E) \cong 8\pi F L \mathcal{R}_\theta^2(E) \theta^2 \quad (1.15)$$

in cui $\mathcal{R}_\alpha(E)$ è la riflettività del singolo specchio, l'elevamento al quadrato è dovuto al fatto che si verificano due riflessioni successive con lo stesso angolo sui due specchi. Ricordando la dipendenza dell'angolo critico dall'energia ($\theta_c \propto E^{-1}$, 1.4.3), uno specchio a riflessione totale che formi un'angolo θ con l'asse ottico avrà riflettività (quindi area efficace) elevata solo alle energie per cui $\theta < \theta_{crit}(E)$ e sarà altamente inefficiente (bassa riflettività, quindi bassa area efficace) ad energie maggiori. Per telescopi con angoli di radianza tipici (\sim mrad), l'energia massima per la quale si ha una riflettività apprezzabile può essere fissata intorno ai 10 KeV. Per estendere la capacità di riflessione del telescopio è possibile:

- utilizzare specchi basati su multilayer a larga banda al posto di specchi monostrato per ottenere riflettività elevata ad angoli maggiori dell'angolo critico (HEXIT, Constellation X, XEUS).
- realizzare telescopi con dimensioni finora atipiche, come lunghezza focale molto elevata (\gtrsim 30 m, Simbol X) o raggi molto piccoli (\lesssim 10 cm, HERO [Ramsey et al. 1999]), riducendo così, in virtù della 1.14, l'angolo di incidenza sullo specchio primario e portandolo al di sotto dell'angolo critico, anche per energie elevate. Nel caso di ottiche di piccolo raggio, poichè, per la 1.15, l'area efficace della singola shell è piccola, riveste particolare importanza la realizzazione di ottiche strettamente nidificate.

¹intesa come rapporto tra il numero di fotoni riflessi e quello di fotoni incidenti

I due concetti possono essere anche utilizzati congiuntamente, per esempio la missione XEUS prevede, al fine di ottenere un'elevatissima area efficace, l'impiego di una focale molto lunga (50 m) associata a shell di raggi molto ampi (3-5 m). Il concetto originale di tale missione prevede l'impiego di ottiche monostrato a riflessione totale, recentemente è stata proposta l'idea di utilizzare specchi multistrato sulle shell più interne al fine di estendere la banda energetica operativa. D'altro canto, anche per la missione HERO, di cui è già stato effettuato un volo prototipo che ha fornito la prima immagine focalizzata nei raggi X duri, non viene escluso l'utilizzo di ottiche basate su multilayer al fine di estendere il range energetico osservabile.

Nei seguenti capitoli sarà affrontata l'ottimizzazione degli specchi per le missioni HEXIT, Constellation X e XEUS.

1 Il problema della focalizzazione dei raggi X

Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

Le attuali tecniche di deposizione consentono di realizzare multilayer in cui lo spessore di ogni strato può essere fissato individualmente, a partire da uno spessore minimo intorno alla decina di Å, permettendo la realizzazione di specchi con caratteristiche di riflettività molto diverse tra loro. Volendo progettare un multilayer per una specifica applicazione, si pone il problema di determinare gli spessori (ed eventualmente il numero ed i materiali) degli strati allo scopo di ottenere la curva di riflettività più adatta.

Come si è visto nel capitolo precedente, la riflettività di un multilayer per un dato angolo di incidenza ed una data energia, dipende dalla sequenza degli spessori degli strati: questi determinano le differenze di cammino ottico tra le onde riflesse da ogni interfaccia, comportando interferenza costruttiva o distruttiva per le diverse lunghezze d'onda. Nel caso dei multilayer a spaziatura costante, è possibile ricavare dalla legge di Bragg gli spessori che diano un picco di riflettività ad una data lunghezza d'onda. Per i supermirror, invece, risulta molto difficile determinare un metodo per ricavare la scelta degli spessori che diano luogo ad una curva di riflettività (in funzione di angolo o energia) con caratteristiche date.

2.1 Il Problema dell'ottimizzazione

Il problema appena definito rientra nella categoria dei *problemi di ottimizzazione*, di cui si incontrano esempi in molti campi. Solitamente la procedura seguita nell'affrontare questo tipo di problemi si compone delle seguenti fasi:

- Definizione dei parametri del problema e dello *spazio dei parametri* in cui cercare la soluzione, ad ogni scelta dei parametri corrispondono le coordinate di un punto nello spazio dei parametri.

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

- Individuazione di una *funzione di merito* (FOM), opportunamente definita sullo spazio dei parametri, il cui valore dia una stima della qualità del risultato ottenuto per ogni scelta di valori per i parametri.
- Ricerca dei massimi della FOM

I problemi di ottimizzazione vengono spesso visti come *problemi di massimizzazione o di minimizzazione*¹, riferendosi alla ricerca degli estremi della FOM. Spesso (come nel caso trattato in questo lavoro) l'alto numero di parametri e la complessità della relazione che li lega alla FOM rende improponibile la ricerca dei massimi per via via analitica. In tali casi si rende necessario l'utilizzo di *tecniche di ottimizzazione*² basate sul calcolo numerico.

In generale queste possono essere suddivise in due filoni:

Metodi locali: A partire da un punto nello spazio dei parametri, muovendosi per successive valutazioni della funzione di merito, si propongono di individuarne un punto di minimo locale.

Metodi globali: Utilizzando le informazioni ottenute su una popolazione di punti, per mezzo di successive modificazioni della popolazione, cercano di localizzare un *ottimo globale*.

Il traguardo propostosi dalle tecniche globali è notevolmente più impegnativo di quello delle tecniche locali. Basti pensare che, se le tecniche di ottimizzazione locale consentono perlomeno di verificare (nei limiti dell'accuratezza del computer) il raggiungimento di un minimo locale, è facile mostrare che, in mancanza di informazioni sulla forma della FOM, nessuna tecnica può garantire, neanche a posteriori, l'individuazione di un ottimo globale³. Di conseguenza non esiste un algoritmo ideale, in grado di risolvere globalmente ogni problema di ottimizzazione. Il comportamento e l'efficacia dei vari algoritmi dipendono fortemente dalle caratteristiche del problema affrontato. Nel valutare le prestazioni di uno di essi, può essere utile considerare i seguenti aspetti:

Precisione: L'accuratezza numerica della soluzione trovata e la sua reale vicinanza al punto di minimo individuato.

¹I due casi sono equivalenti, in quanto che, per passare da una situazione all'altra, è sufficiente cambiare il segno della FOM. Tuttavia alcuni termini (*"hill climbing"*, *"downhill simplex"*) si riferiscono esplicitamente all'uno o all'altro caso. Nei seguenti paragrafi, sarà mantenuta la terminologia corrente, pur considerando l'ottimizzazione come un problema di minimizzazione.

²In particolare in questo lavoro considereremo l'impiego di metodi *stocastici*, nei quali non si assumono conoscenze a priori sulla forma della FOM e che quindi devono procedere per successive valutazioni di questa su sottoinsiemi di punti nello *spazio dei parametri*.

³Se il calcolo della FOM (ed eventualmente delle sue derivate) è stato effettuato su un insieme finito di punti, si può immaginare una funzione con gli stessi valori di FOM e derivate nei punti sperimentati, ma con minimi globali in altri punti.

Globalità: La confidenza di aver individuato un ottimo globale.

Carico computazionale: Il tempo di calcolo richiesto dall'algoritmo è un fattore determinante nella scelta dell'algoritmo (è inutile avere un algoritmo in grado di fornire soluzioni ottime, se ciò non può essere fatto in un tempo accettabile). Alcuni algoritmi tentano di ridurre il numero di valutazioni della FOM richieste, a spese del tempo di calcolo utilizzato per determinare i punti in cui effettuare tali valutazioni, altri seguono l'approccio opposto.

Scalabilità: La crescita della complessità e del numero di valutazioni della FOM all'aumento del numero di dimensioni dello spazio dei parametri è un fatto inevitabile. Tuttavia alcuni algoritmi (in particolare quelli successivamente descritti come "metodi globali") si comportano meglio di altri nel trattare problemi dipendenti da un elevato numero di parametri, altri metodi comportano un carico computazionale accettabile solo per problemi di piccola dimensione.

Robustezza: La capacità di un metodo di determinare un minimo effettivo (anche locale).

Insieme ai suddetti fattori in un'applicazione pratica vanno necessariamente considerate la facilità di implementazione e d'utilizzo dell'algoritmo. Come vedremo, alcuni di questi algoritmi offrono ottime prestazioni, ma necessitano di una difficile messa a punto dei parametri operativi, basata su ripetuti tentativi empirici. Nel lavoro di questa tesi si sono privilegiate tecniche di ricerca che non necessitano di tale fase, questo sia per garantire la certezza del risultato che per limitare i tempi del lavoro.

Nel seguito saranno descritti alcuni degli algoritmi di ottimizzazione di uso comune, con particolare enfasi sul metodo *simplex*, a partire dal quale si individuerà un metodo per la ricerca di soluzioni globali per il problema trattato in questa tesi.

2.2 Algoritmi di ottimizzazione classici

2.2.1 Raster scan.

Il metodo *Raster scan* appare come il metodo di ottimizzazione più elementare. Esso consiste nel calcolo della FOM su una griglia di valori nello spazio dei parametri, con la scelta del punto in cui si ottenuto per la FOM il migliore risultato. Chiaramente non si ha alcuna garanzia che il valore trovato corrisponda ad un effettivo punto di minimo (anzi, ciò è molto difficile). E' comunque abbastanza facile ovviare a tale inconveniente, facendo seguire alla ricerca con raster scan una procedura di ottimizzazione locale (generalmente con metodi hill climbing) a partire dal miglior punto individuato. Tale sistema vengono usualmente definiti metodi *single start*. Un'alternativa è offerta dalle tecniche *best start*, nei quali viene effettuata una ricerca con un metodo locale ogni qual volta si incontri, nel corso del raster scan, un punto con un valore della FOM migliore di tutti quelli precedentemente trovati.

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

A dispetto della sua banalità, i metodi raster scan sono ampiamente utilizzati¹, sia per la semplicità d'uso e d'implementazione, sia per il fatto che, se il campionamento dello spazio dei parametri è sufficientemente fitto e la FOM non presenta picchi stretti e ripidi, possono garantire l'individuazione di un massimo.

Tali metodi si prestano comunque solo per problemi dipendenti da un ridotto numero di dimensioni, in cui lo spazio dei parametri è abbastanza piccolo o la FOM molto veloce da calcolare. Al crescere del numero di dimensioni del problema il numero di valutazioni della FOM N_{ev} cresce come $N_{ev} = (N_p)^n$ in cui N_p è il numero di punti di campionamento per dimensione, ed n è il numero di dimensioni, per problemi dipendenti da un numero maggiore di parametri si impone l'uso di algoritmi più sofisticati.

2.2.2 Metodi Hill Climbing

I metodi *Hill Climbing* sono le tecniche di ottimizzazione più studiate dal punto di vista matematico. Essi consistono nell'individuare, a partire da un punto, una serie di spostamenti che porti al progressivo avvicinamento ad un minimo locale. Principalmente tali metodi si distinguono per il modo in cui determinano la direzione dello spostamento e la lunghezza dello stesso e per il diverso utilizzo delle informazioni sulle derivate direzionali ottenute nei passaggi precedenti. La maggior parte dei metodi hill climbing sfrutta il calcolo delle derivate direzionali per determinare la direzione da seguire negli spostamenti. Tra i metodi di questo tipo, approfonditamente trattati in [Press et al. 1996], citiamo il metodo di Powell e il metodo Steepest Descent.

2.2.3 Downhill Simplex

L'algoritmo *simplex* di Nelder e Mead [Nelder, Mead 1965] è sicuramente uno dei metodi di ottimizzazione in assoluto più utilizzati. Un "simplex", in uno spazio n -dimensionale, è definito come una figura geometrica ottenuta congiungendo tra loro $n + 1$ punti (un triangolo in spazi bidimensionali, un tetraedro in spazi di dimensione, 3 ecc.). Il metodo prevede una serie di passaggi che, partendo da un simplex iniziale, per mezzo di progressive trasformazioni geometriche della figura, portano all'avvicinamento di tutti i punti del simplex ad un punto di minimo locale, l'algoritmo si arresta quando i punti coincidono a meno di una tolleranza prefissata.

La fig. 2.1(a) mostra lo schema operativo dell'algoritmo, la fig. 2.1(b) illustra le possibili operazioni. La sequenza dei passaggi previsti dall'algoritmo è la seguente:

1. si tenta la riflessione del punto in cui la FOM è minore, se questa ha successo (la FOM è maggiore nel nuovo punto rispetto al vecchio) viene tentata una successiva espansione nella stessa direzione, che può essere accettata o meno, a seconda che porti ad un ulteriore miglioramento.

¹Ad esempio, un'applicazione di tali metodi al problema dell'ottimizzazione di multilayer per astronomia X è stata trattata in [Mao et al. 1999].

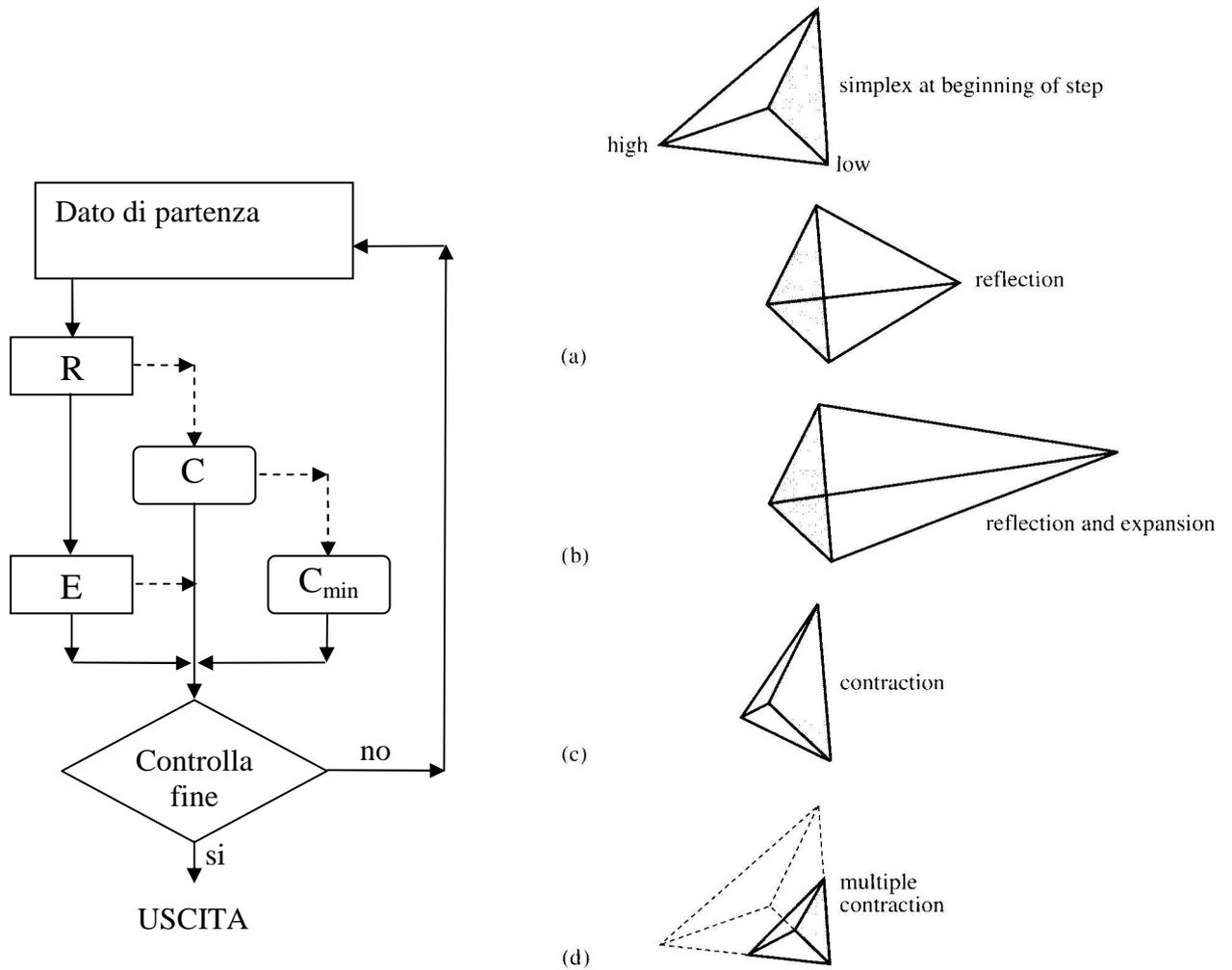


Figura 2.1: Schema dell'algoritmo simplex: Le operazioni vengono effettuate nella sequenza indicata dalle frecce piene. Le frecce tratteggiate indicano passaggi alternativi effettuati in caso di insuccesso del precedente (di cui si annullano gli effetti). Le operazioni possibili sono illustrate a destra (da [Press et al. 1996]) e sono precisamente: R-riflessione (a), E-espansione (b), C-contrazione del punto di massimo (c) e C_{min} -contrazione multipla verso il punto di minimo (d).

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

2. se la trasformazione precedente non ha avuto successo si prova la contrazione del vertice per il quale la FOM è minore nella direzione individuata dal baricentro degli altri vertici.
3. se neanche la precedente mossa ha successo si effettua in ogni caso (sia che porti a miglioramento o meno) la contrazione della figura nella direzione individuata dal vertice che offre il migliore valore per la FOM e che resta fisso. Si valuta la FOM nei nuovi vertici.
4. Se non si è raggiunta la precisione prefissata, si riparte dal punto 1.

Di conseguenza ogni passaggio richiede il calcolo della FOM solo nei nuovi punti esplorati. L'algoritmo simplex può essere visto come una via di mezzo tra algoritmi hill climbing e algoritmi genetici, infatti esso pur partendo da una configurazione iniziale e spostandosi verso un minimo locale sfrutta, nel far ciò, le informazioni ricavate sull'insieme dei punti del simplex, con un comportamento simili a quello di algoritmi genetici con una popolazione di punti molto ristretta.

La strategia adottata dal metodo simplex è molto particolare¹ e conferisce al metodo proprietà che potremmo definire "semi-globali", come confermato dai risultati mostrati in 2.5.1. Tra le più importanti caratteristiche dell'algoritmo ricordiamo:

- La particolare strategia adottata conferisce al metodo una grande robustezza, assicurando la convergenza ad un minimo locale. Il fatto di non richiedere il calcolo delle derivate direzionali, oltre a comportare una notevole semplificazione per problemi con funzioni di forma complessa, permette all'algoritmo di evitare arresti prematuri in punti non di minimo, come può avvenire per algoritmi di altro tipo (in particolare metodi downhill).
- L'algoritmo in sé non prevede limiti per lo spazio dei parametri, si adatta perciò allo studio di problemi in cui è difficile determinare una regione dello spazio dei parametri in cui inquadrare la soluzione. Tale caratteristica sarà spesso sfruttata in questo lavoro (par. 3.4). Tuttavia nell'applicazione all'ottimizzazione di multilayer, esisteranno limiti sia per motivi fisici (dimensioni degli spessori depositabili), che matematici (l'utilizzo della parametrizzazione attraverso la legge di potenza 2.4 impone dei limiti algebrici sui parametri), saranno quindi considerate modifiche all'algoritmo.
- Il metodo possiede una grande accuratezza, come sarà visto in 2.5.1 è possibile ottenere la convergenza del simplex al punto di minimo con una precisione grande a piacere, anche se il raggiungimento di precisioni elevate richiede molte iterazioni, di conseguenza un lungo tempo di calcolo. Tale fattore sarà considerato con attenzione più avanti.

¹La sequenza di movimenti dei punti del simplex ha fatto meritare alla routine presentata in [Press et al. 1996] il nome (piuttosto azzeccato) di "amoeba".

- L'algoritmo sopra descritto fornisce un metodo di ottimizzazione generale per spazi n -dimensionali. Di conseguenza una routine scritta per l'applicazione del metodo, come quella descritta in [Press et al. 1996] ed utilizzata con opportuni adattamenti (par. 2.4, 3.3) in questo lavoro, può facilmente essere applicata a problemi con diverso numero di dimensioni. Il metodo, tuttavia, è efficiente solo per problemi con ridotto numero di dimensioni, al crescere del numero dei parametri il tempo di calcolo aumenta rapidamente a causa dell'aumento delle possibili mosse. Inoltre la maggiore dimensionalità diminuisce la probabilità di individuazione di minimi globali [Charbonneau 1998], rendendo il metodo (anche nella versione iterata 2.4) inadatto a ricerche globali.

L'algoritmo simplex è quindi un buon sistema di ottimizzazione per problemi locali con un numero di dimensioni ridotto, esso garantisce l'individuazione di minimi locali dipendenti dai punti di partenza scelti. Per ovviare a questo inconveniente si studierà in 2.4 una procedura iterata che consentirà di utilizzare il metodo simplex per ricerche globali in spazi dei parametri di bassa dimensionalità.

2.3 Algoritmi di ottimizzazione globale

2.3.1 Simulated Annealing

Il metodo Simulated Annealing (SA) [Press et al. 1996, Kirkpatrick et al. 1983] si richiama allo studio dei processi fisici termodinamici, ed in particolare del raffreddamento dei materiali e alla formazione dei cristalli. Alle alte temperature il materiale di origine del cristallo si trova allo stato fluido con gli atomi liberi di muoversi determinando il continuo cambiamento di configurazione del sistema, attraverso un progressivo raffreddamento il sistema raggiunge la configurazione di minima energia. La giusta velocità di raffreddamento, è un fattore chiave nel determinare la crescita di un cristallo perfetto: se la diminuzione della temperatura è troppo rapida, il cristallo non sarà in grado di raggiungere la configurazione di minima energia e si otterrà una configurazione amorfa o policristallina.

Ad ogni temperatura, all'equilibrio termico, la probabilità che il sistema si trovi in una data configurazione X è data dalla distribuzione di Boltzmann

$$P(X) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (2.1)$$

In cui $Z(T)$ è una costante di normalizzazione (funzione di partizione) dipendente dalla temperatura, E l'energia associata alla configurazione X e k la costante di Boltzmann. L'analogia tra il sistema fisico che tende alla configurazione di minima energia e i problemi legati alla ricerca di minimi globali e locali è sintetizzata nei due punti seguenti:

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

1. I possibili stati di un sistema fisico sono analoghi alle possibili soluzioni del problema di ottimizzazione, ognuna delle quali corrisponde ad un punto nello spazio dei parametri.
2. L'energia associata ad ogni stato fisico è analoga alla FOM associata ad ogni punto dello spazio dei parametri.

Basandosi su queste analogie, il metodo sfrutta l'algoritmo sviluppato da Metropolis [Metropolis et al. 1953] per la simulazione numerica del processo di raffreddamento e partendo da un punto nello spazio dei parametri (corrispondente ad una configurazione del sistema termodinamico) cerca di raggiungere, attraverso una serie di passaggi successivi, una posizione di minimo assoluto (corrispondente alla configurazione di energia minima).

La funzione

$$P_T(j) = \begin{cases} 1 & \text{se } f(j) < f(i) \\ \exp\left(\frac{f(i)-F(j)}{T}\right) & \text{se } f(j) > f(i) \end{cases} \quad (2.2)$$

definisce la probabilità di accettazione di un nuovo punto j . f è la figura di merito, T è un numero reale positivo analogo alla temperatura in un processo naturale di raffreddamento, esso viene chiamato temperatura anche nel contesto dell'algoritmo SA e viene fatto decrescere durante il progredire dei passaggi dell'algoritmo, in analogia con i processi di raffreddamento.

Ciò che distingue SA¹ dagli algoritmi di ottimizzazione classici è la funzione che determina se il punto successivo nel cammino di ricerca viene accettato o rifiutato: anche i punti che portano ad un peggioramento della FOM rispetto al precedente hanno una probabilità diversa da zero di essere accettati. In analogia con i sistemi fisici, la probabilità di tali transizioni decresce col diminuire della temperatura. Ciò permette all'algoritmo, specialmente nella prima fase della ricerca (temperatura alta), di superare regioni circostanti i minimi locali.

Ogni passaggio si compone delle seguenti operazioni a partire da un punto:

1. Viene scelto casualmente un nuovo punto in un intorno del punto dato. Il raggio dell'intorno in cui viene effettuata la scelta dipende della temperatura (nella fase iniziale il raggio è tale da comprendere l'intera area di ricerca). Il meccanismo per la scelta del nuovo punto e dell'intorno di ricerca varia a seconda dell'implementazione e costituisce un fattore critico per l'efficienza del metodo [Press et al. 1996].
2. Il nuovo punto j viene accettato o rifiutato secondo la probabilità $P_T(j)$ definita dalla 2.2: il punto viene accettato sicuramente se porta ad un miglioramento della FOM, altrimenti può essere accettato o meno con probabilità decrescente con l'abbassarsi della temperatura.

¹parimente agli algoritmi genetici

3. La temperatura viene diminuita gradualmente secondo uno schema prefissato (la scelta dell'andamento della temperatura nel corso dei passaggi è uno dei parametri più critici, e determina spesso la buona o cattiva riuscita del metodo).

La scelta dei parametri dell'algoritmo è molto importante. Se ad esempio la temperatura iniziale è troppo bassa, l'algoritmo potrebbe non avere abbastanza libertà per esplorare l'intera area all'inizio della ricerca, se il valore è troppo elevato, al contrario, i tempi di calcolo si allungano inutilmente. Il metodo SA offre il vantaggio di riuscire ad esplorare una vasta regione dello spazio dei parametri in maniera in buona misura indipendente dalla scelta del punto iniziale e risentendo poco della presenza di minimi locali.

Il metodo è stato ampiamente impiegato in problemi di ottimizzazione globale [Press et al. 1996, Shafer 1994, Revillard 1994] ed è implementato in diversi programmi commerciali [Zeyher 1994].

2.4 Metodo iterated simplex

2.4.1 Descrizione del metodo

Come già visto nel paragrafo 2.2.3, l'algoritmo simplex di Nelder e Mead è un metodo di ottimizzazione locale: il minimo individuato dall'esecuzione dell'algoritmo dipende dai punti di partenza scelti e non necessariamente (anzi, in molti casi pratici, piuttosto raramente) costituisce il minimo globale del problema. Il metodo *iterated simplex* cerca di ovviare a questa deficienza effettuando diverse esecuzioni dell'algoritmo simplex a partire ogni volta da punti diversi dello spazio dei parametri¹ e selezionando i migliori risultati. Se lo spazio dei parametri è campionato con sufficiente densità, tale approccio consentirà l'individuazione del minimo globale, o perlomeno di una buona soluzione del problema trattato. La probabilità di successo nell'individuazione del minimo globale è legata alla probabilità (peraltro generalmente ignota) di successo della singola esecuzione dell'algoritmo simplex [Charbonneau 1998]. Infatti, indicando con p la probabilità di successo della singola prova, si ha che, nell'esecuzione di N prove, la probabilità di non ottenere neanche un successo su tutte le prove è $(1-p)^N$, da cui si ottiene, per l'esecuzione del metodo iterated simplex con N prove, la probabilità di successo P_N :

$$P_N = 1 - (1 - p)^N$$

Le probabilità di successo in funzione del numero di prove per vari valori di p sono mostrate in fig. 2.2, si nota che, se la probabilità di successo di una singola prova è bassa, il numero di prove necessario ad assicurare buone probabilità di riuscita può divenire elevatissimo. Se è vero che il metodo non garantisce l'individuazione del minimo globale (d'altronde si è già detto che nessun metodo può garantire il successo in tale senso)

¹Nel seguito di questo lavoro le diverse esecuzioni dell'algoritmo simplex saranno chiamate *prove*, per evitare confusione col termine *iterazioni*, utilizzato per definire i diversi passaggi della singola esecuzione dell'algoritmo simplex.

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

esso permette (nei casi considerati nel seguito di questo lavoro) di individuare una soluzione “ragionevolmente buona” e non necessariamente lontana, come valore della FOM, dall’ottimo globale, considerate anche le capacità pseudo-globali del metodo simplex (dimostrate sul problema di prova al par. 2.5.1). Di contro il metodo iterated simplex eredita dall’algoritmo simplex la bassa scalabilità: al crescere del numero di dimensioni dello spazio dei parametri la percentuale di successi dell’algoritmo simplex si riduce notevolmente, diminuendo di conseguenza le probabilità di successo del metodo *iterated simplex*.

Nella versione sviluppata in questa tesi i punti di partenza per le diverse prove vengono scelti casualmente in una regione prefissata dello spazio dei parametri, mentre non vengono fissati limiti (se non quelli matematicamente necessari) per i “movimenti” del simplex. Tale scelta permette di individuare con buone probabilità il minimo globale nella regione fittamente campionata dai dati di partenza, consentendo allo stesso tempo di sfruttare la capacità dell’algoritmo simplex di funzionare in assenza di limiti, per individuare punti di minimo esterni alla zona dei parametri di partenza. Quest’ultima situazione si verificherà con una certa frequenza nei casi pratici trattati al cap. 3, in tali situazioni potrà risultare conveniente effettuare una nuova ricerca scegliendo i dati di partenza nella regione circostante ai migliori punti minimo trovati.

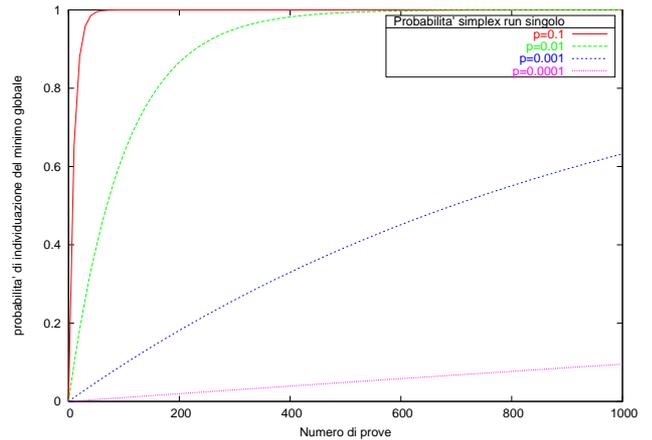


Figura 2.2: Probabilità di individuare il minimo globale per il metodo Iterated simplex in funzione del numero di prove, per diversi valori della probabilità di successo della singola esecuzione dell’algoritmo simplex.

2.4.2 Note sul linguaggio di programmazione utilizzato

I programmi sviluppati in questa tesi (con l’eccezione del programma accessorio descritto in 3.3, realizzato in Visual Basic) sono stati scritti in Fortran 90 nell’ambiente di sviluppo “Microsoft Developer Studio / Fortran Powerstation 4.0” [MSDS User’s Guide], su un PC con sistema operativo Windows ’98.

In generale un programma in Fortran si compone di un *programma principale* e diversi *sottoprogrammi* [Metcalf, Reid 1990]. I sottoprogrammi sono unità di programma dipendenti che possono essere utilizzati (*chiamati*) dal programma principale o da altri sottoprogrammi. Tra programma (o sottoprogramma) chiamante e sottoprogramma chiamato vi può essere il passaggio dei valori di variabili (*argomenti*) che servono al sottoprogramma per effettuare le operazioni da esso previste e per restituire al programma chiamante

i risultati ottenuti. I sottoprogrammi possono essere di tipo *interno*, cioè comprese nel listato del programma chiamante e compilate insieme ad esso, od *esterno*, cioè contenute in un file a parte e compilate separatamente, venendo successivamente collegate (*linked*) alle altre unità di programma.

Esistono due tipi di sottoprogrammi interni ed esterni: *funzione*, che restituisce un valore calcolato a partire dagli argomenti, o *subroutine*, che effettua operazioni prefissate eventualmente modificando e restituendo al programma principale il valore degli argomenti. Indicheremo come programma l'insieme di programma principale e sottoprogrammi (o *procedure*), riferendosi quest'ultimo termine genericamente a funzioni e subroutine. I programmi sviluppati impiegheranno anche file (in genere file di testo) di dati o di impostazione, contenenti, i primi, i dati di partenza da utilizzare nell'elaborazione o i risultati di questa, i secondi, i valori per una serie di variabili che determinano le modalità di esecuzione dei programmi.

2.4.3 Implementazione dell'algoritmo

E' stato sviluppato un primo programma che consente di eseguire ripetute minimizzazioni con il metodo simplex a partire da punti diversi dello spazio dei parametri. Il programma principale si occupa di generare in modo casuale una serie di dati di partenza, ognuno nella forma di una matrice $n + 1 \times n$, che esprime le coordinate, nello spazio dei parametri n -dimensionale, di ognuno degli $n + 1$ punti di ogni simplex di partenza. Successivamente il programma carica i dati in memoria uno alla volta, lanciando per ognuno la subroutine SIMPLEX. Questa esegue l'ottimizzazione col metodo simplex a partire dai dati ogni volta forniti. E' da notare che l'algoritmo di ottimizzazione è predisposto per un numero qualsiasi di dimensioni. Infatti il numero effettivo di dimensioni viene determinato dalla matrice passata alla subroutine. In questo primo programma i parametri dell'ottimizzazione, come il numero di prove e di iterazioni sono contenuti in variabili il cui valore viene fissato all'interno dei sottoprogrammi. La procedura FUNZIONE che effettua la valutazione della FOM, è inserita nel programma come funzione esterna in un file a sè stante. Il funzionamento delle varie unità è riassunto nella tabella 2.1.

Il programma così sviluppato costituirà il nucleo dei programmi di ottimizzazione di multilayer descritti al paragrafo 3.3. L'algoritmo di ottimizzazione, contenuto nel sottoprogramma SIMPLEX, si basa sulla routine "amoeba" di Nelder e Mead [Nelder, Mead 1965] presentata in [Press et al. 1996]. Il programma originale è stato adattato per registrare, su file di dati, diverse informazioni utili (par. 2.5.2) sui diversi passaggi dell'algoritmo. Vengono anche generati diversi file di istruzioni (con estensione .plt) per il programma "gnuplot"¹ [Williams, Hecking 2002] per il plot dei risultati (par. 2.5.1).

Inoltre, spesso sarà utile introdurre dei limiti sui valori accettabili dei parametri. Per fare ciò si è modificata la routine in modo che, qualora una trasformazione (espansione o

¹gnuplot è un programma gratuito per il plot di dati e funzioni 2d-3d in grado di accettare comandi da file batch, permettendo di generare grafici anche da grandi numeri di file di dati. In questo lavoro si è fatto largo impiego di tale programma: il software ISOMX genera diversi file di comandi per gnuplot che, lanciati da questo, generano automaticamente diversi grafici a partire dai risultati ottenuti.

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

Tabella 2.1: Schema del programma Iterated simplex.

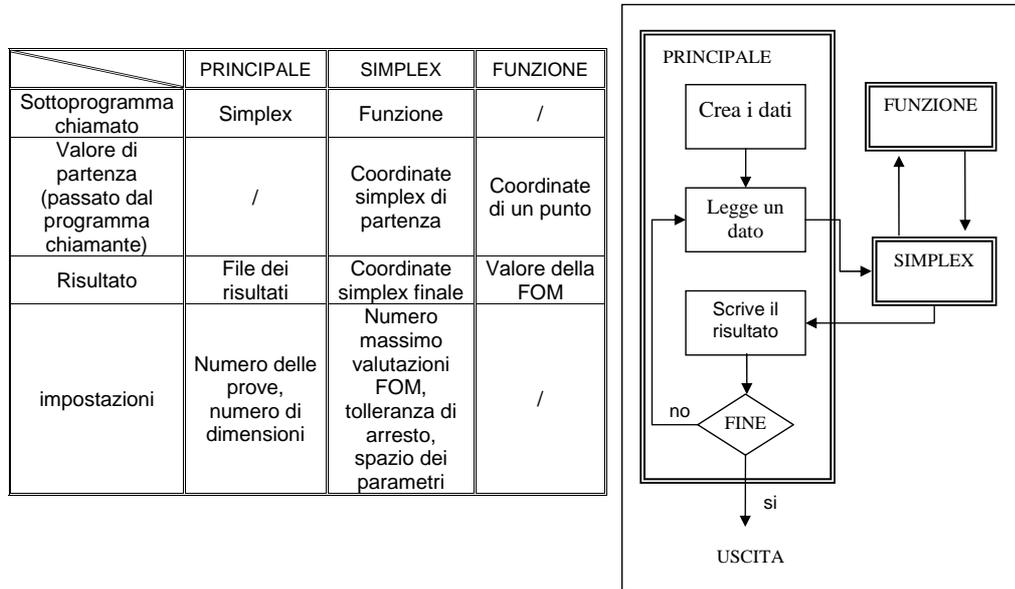


Tabella 2.2: Numero di valutazioni della FOM a seconda dell'operazione effettuata.

MOVIMENTO	n valutazioni
riflessione	1
riflessione+espansione	2
contrazione del punto di massimo	2
contrazione rispetto al minimo	n+1

riflessione) preveda il superamento dei limiti da parte di un punto (fig. 2.3), si sostituisca al valore originariamente calcolato il valore del punto sul bordo corrispondente alla direzione dell'espansione (o della riflessione).

Il programma termina quando la massima differenza tra i valori della FOM nei vertici del simplex, rapportata al valore medio dei punti, è inferiore ad un valore fissato, oppure se viene superato un numero massimo di valutazioni della funzione senza che tale condizione sia soddisfatta. E' da notare che il numero di valutazioni della FOM non coincide con il numero di trasformazioni del simplex, in quanto, secondo quanto detto in 2.2.3, il numero di valutazioni della FOM effettuato ad ogni iterazione in cui si effettui una data trasformazione è riportato in tabella 2.2.

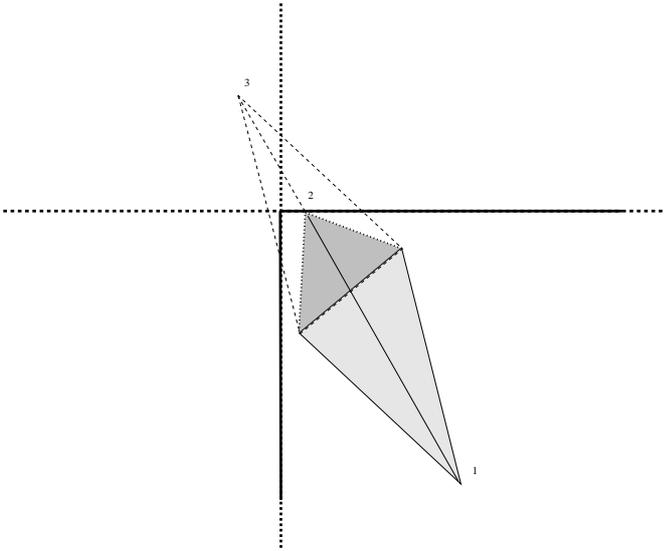


Figura 2.3: Comportamento del programma al superamento dei limiti dello spazio dei parametri.

2.5 Test dell'algoritmo utilizzato

2.5.1 Descrizione del problema di prova

Per provare l'efficacia del metodo sviluppato ed il buon funzionamento del nucleo del software, si è provato ad utilizzare una prima versione del programma su un problema di ricerca dei minimi della superficie bidimensionale data dall'equazione:

$$f(x, y) = -\cos^2(9\pi r)e^{-\left(\frac{r}{0.15}\right)^2}, \quad r^2 = (x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2$$

con $x, y \in [0, 1]$. La funzione descritta ha valori nell'intervallo $[-1, 0]$ e possiede simmetria cilindrica rispetto all'asse $(0.5, 0.5, z)$. La superficie corrispondente è mostrata in fig. 2.4, si nota la presenza di una serie di anelli concentrici equispaziati alternativamente di minimi e massimi locali. I minimi si trovano a $r = \frac{n}{9}$ (con n intero da 0 a 6), i massimi a $r = \frac{n+\frac{1}{2}}{9}$, ($n = 0 \div 6$). Il picco attorno al minimo globale è quindi piuttosto stretto. Questi fattori rendono tale minimo difficile da individuare con gli usuali metodi locali basati sul calcolo delle derivate direzionali. Anche il fatto che la superficie considerata sia praticamente piatta al di fuori della regione centrale (per $r \gtrsim 0.5$ si ha $FOM \gtrsim -10^{-6}$, si veda anche il profilo in scala lineare mostrato in fig. 2.5) può facilmente trarre in inganno tali metodi, inducendoli ad arrestarsi prematuramente.

Il programma descritto al paragrafo precedente ha eseguito 1000 prove dell'algoritmo simplex, i risultati, elaborati secondo le modalità descritte al paragrafo seguente, sono mostrati in figura 2.5.

La seguente tabella mostra la distribuzione dei risultati ottenuti:

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

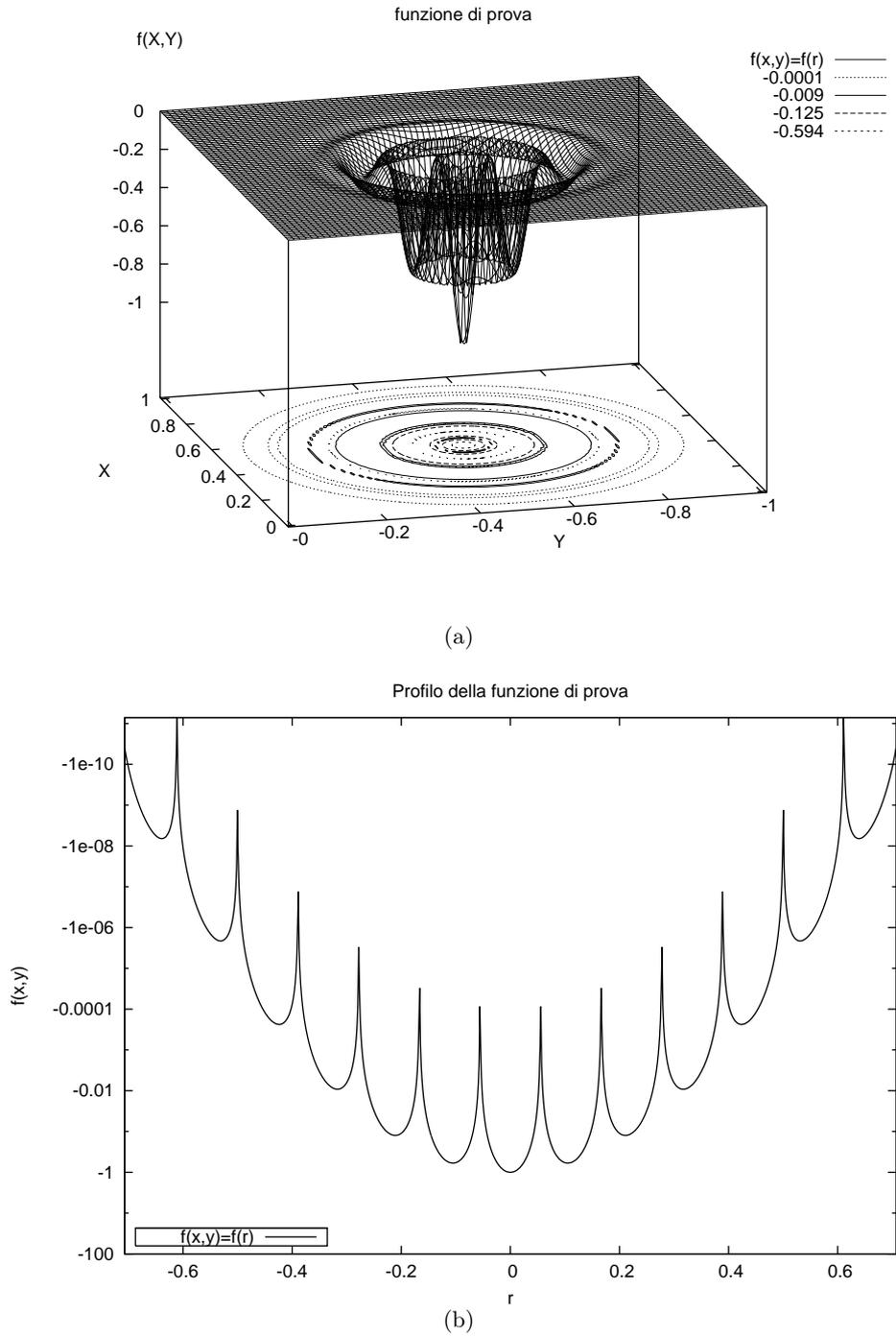


Figura 2.4: Superficie e profilo (in scala logaritmica) del problema di prova.

2.5 Test dell'algoritmo utilizzato

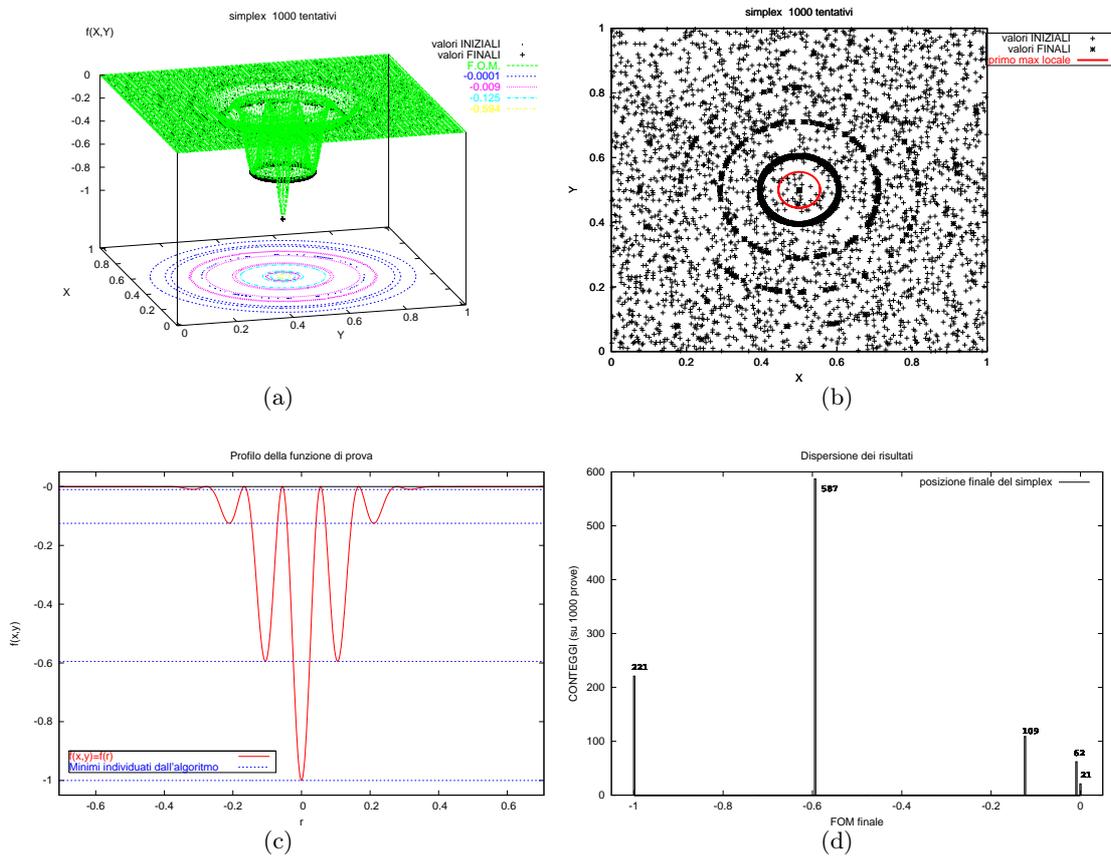


Figura 2.5: Risultati del problema di prova in rappresentazione 3d (a) e 2d (b), si noti la distribuzione dei risultati finali sui cerchi di minimo relativo. Nella figura (b) il cerchio rosso indica i punti di massimo circostanti al minimo assoluto. Si può vedere che solo un ridotto numero di esecuzioni dell'algoritmo parte da punti all'interno di tale cerchio. In (d) la distribuzione dei risultati finali sui punti di minimo relativo.

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

ordine del minimo	0	1	2	3	4+5
valore del minimo	-1	-0.594	-0.124	-0.009	$> -10^{-3}$
area tra massimi adiacenti (%)	1%	8%	15.5%	23.5%	52%
risultati trovati (%)	22.1%	58.7%	10.9%	6.2%	2.1%

Ogni prova del simplex converge ad un punto di minimo locale, che dipende dai punti di partenza. Nella maggior parte dei casi (58.7%) l'algoritmo simplex termina sul secondo minimo locale, tuttavia il secondo minimo più individuato è quello globale (22.1% delle prove), e questo avviene spesso anche se i punti di partenza sono ben al di fuori della regione del picco (si veda il paragrafo successivo). Il simplex riesce in questi casi a scavalcare gli anelli concentrici di minimi locali, che i metodi hill climbing basati sulle derivate riuscirebbero ad evitare solo partendo dalle vicinanze del picco. Per tali algoritmi il limite della *regione di attrazione* è molto plausibilmente determinato dal primo anello di massimi locali per $r = \frac{\pi}{18}$ (evidenziata in figura 2.5(b)), corrispondente ad un'area $A = \pi r^2 \simeq 1\%$ dello spazio dei parametri. Quindi, statisticamente (ogni prova impiega tre punti di partenza), solo il 3% circa delle prove parte con almeno un punto all'interno di tale regione (corrispondente al numero teorico di successi per metodi multi-start basati su algoritmi hill climbing). A dispetto di ciò il metodo simplex, utilizzando le informazioni su tutti i suoi punti, è in grado di individuare il minimo globale in una percentuale notevolmente più elevata di casi. Nel paragrafo seguente il comportamento del metodo simplex è analizzato in dettaglio con l'aiuto dei programmi sviluppati per l'analisi dei risultati.

2.5.2 Test del software per l'analisi dei risultati

Il programma sviluppato per l'ottimizzazione produce, durante l'esecuzione, un file contenente i dati ed uno contenente i risultati di tutte le prove.

Poichè il numero di queste è elevato (fig. 2.6), si sono sviluppati alcuni programmi per estrarre le informazioni sui risultati ottenuti, che è possibile utilizzare per esaminare in dettaglio il comportamento dell'algoritmo simplex. E' possibile selezionare i risultati in base al valore finale della FOM, impostando le regole di selezione (fig. 2.6) attraverso alcuni parametri contenuti in un file di testo. Il programma produce allo stesso tempo un file di dati contenente il numero di risultati complessivamente trovati per intervallo di valori della FOM (il numero di intervalli è modificabile dal file delle impostazioni) oltre al relativo file di plot.

Una volta selezionati alcuni risultati di interesse è possibile rilanciare il programma di ottimizzazione a partire da tali risultati e, modificando un *flag* nel file dei dati di partenza, attivare la registrazione dei risultati sui singoli passaggi dell'algoritmo simplex e la creazione dei relativi file di plot (posizione dei punti e curve di convergenza). Abbiamo selezionato in questo modo tre set di dati di partenza per risultati sul primo, secondo e terzo minimo. La figura 2.7 mostra i punti iniziali e finali delle tre esecuzioni, sono anche

2.5 Test dell'algorithmo utilizzato

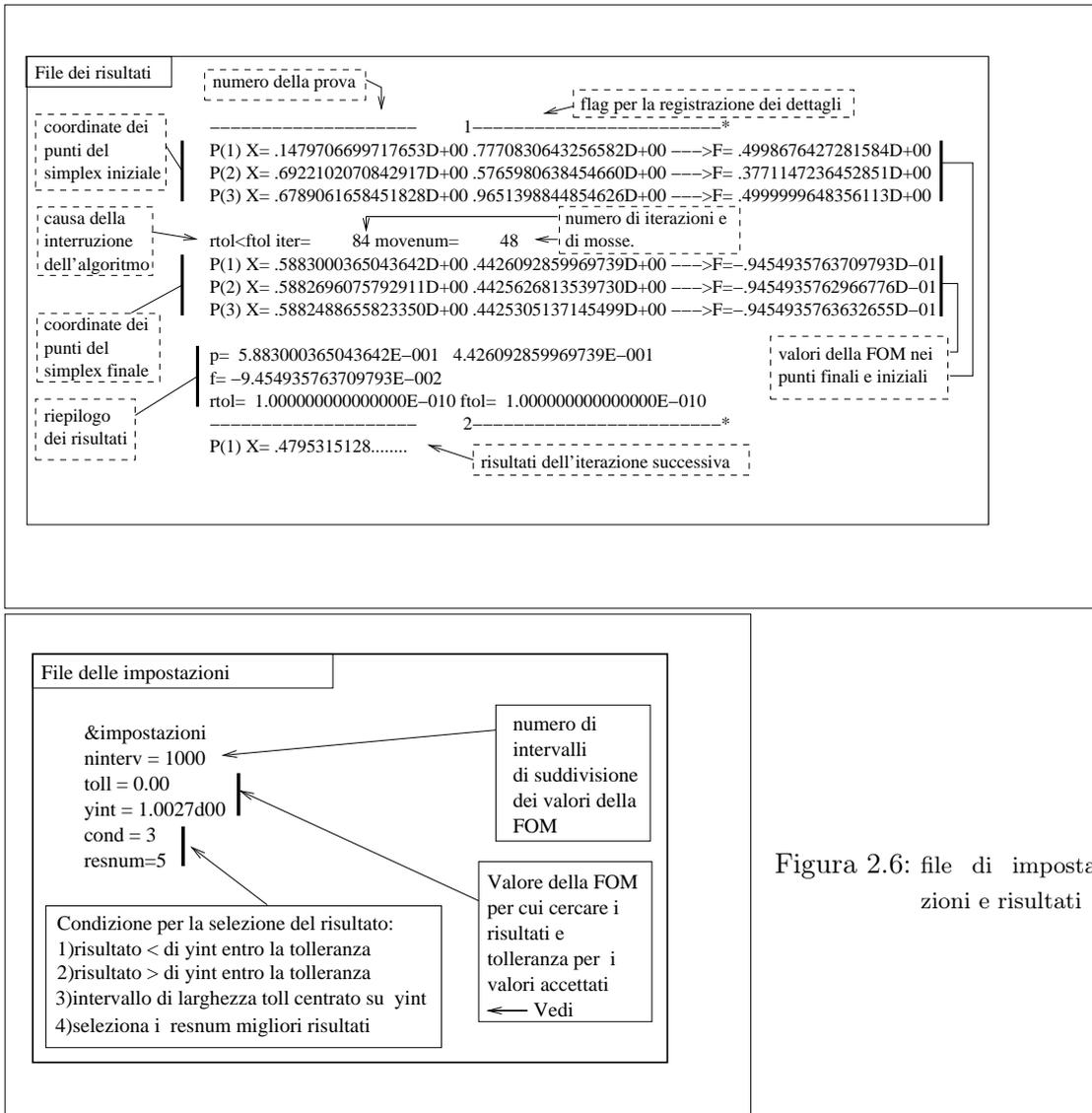


Figura 2.6: file di impostazioni e risultati

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

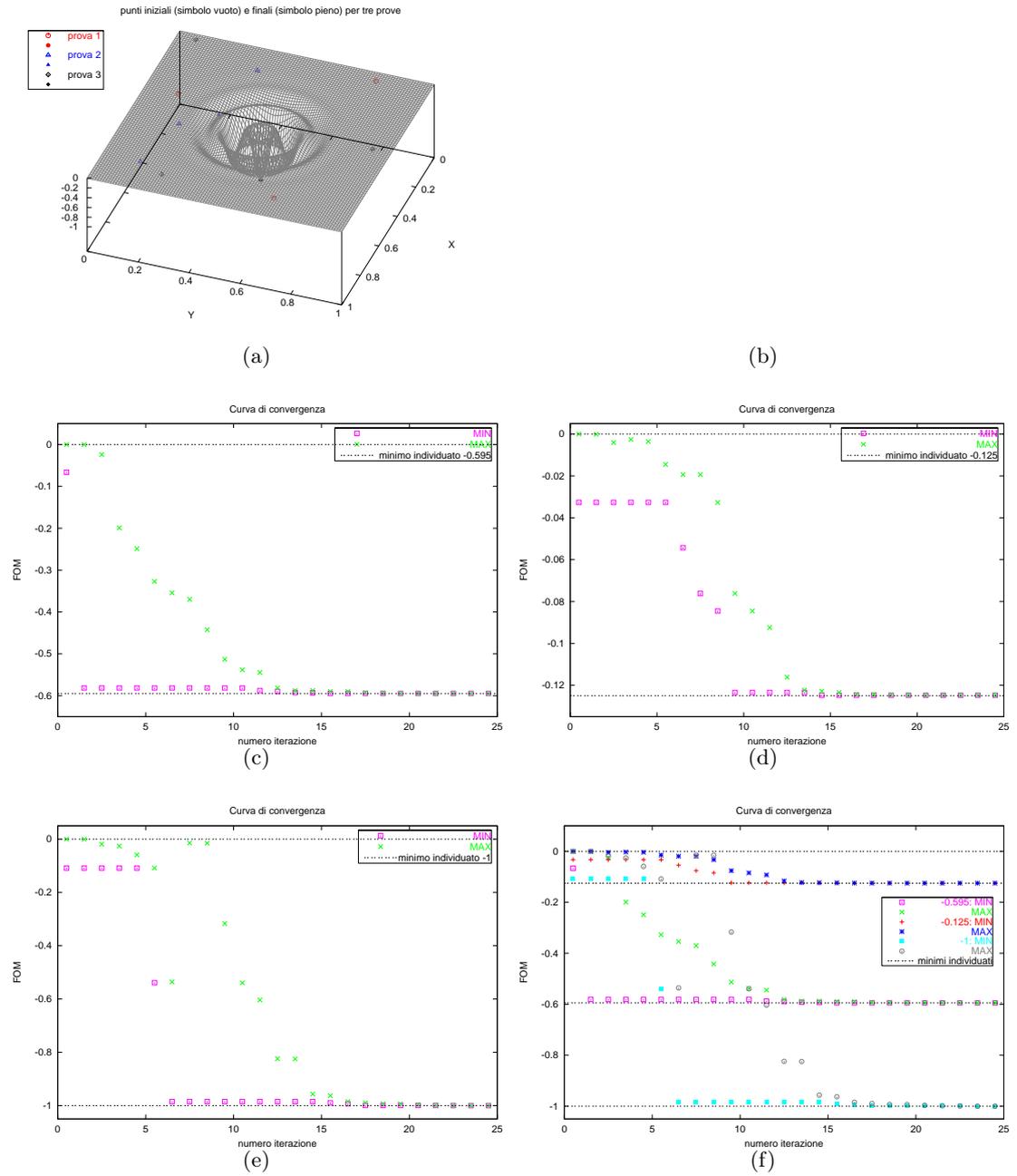


Figura 2.7: Punti iniziali e finali per le tre esecuzioni (terminate sui primi tre minimi locali) analizzate per il problema di prova (a,b) e relative curve di convergenza (c-e). La figura (f) presenta il confronto tra le curve di convergenza.

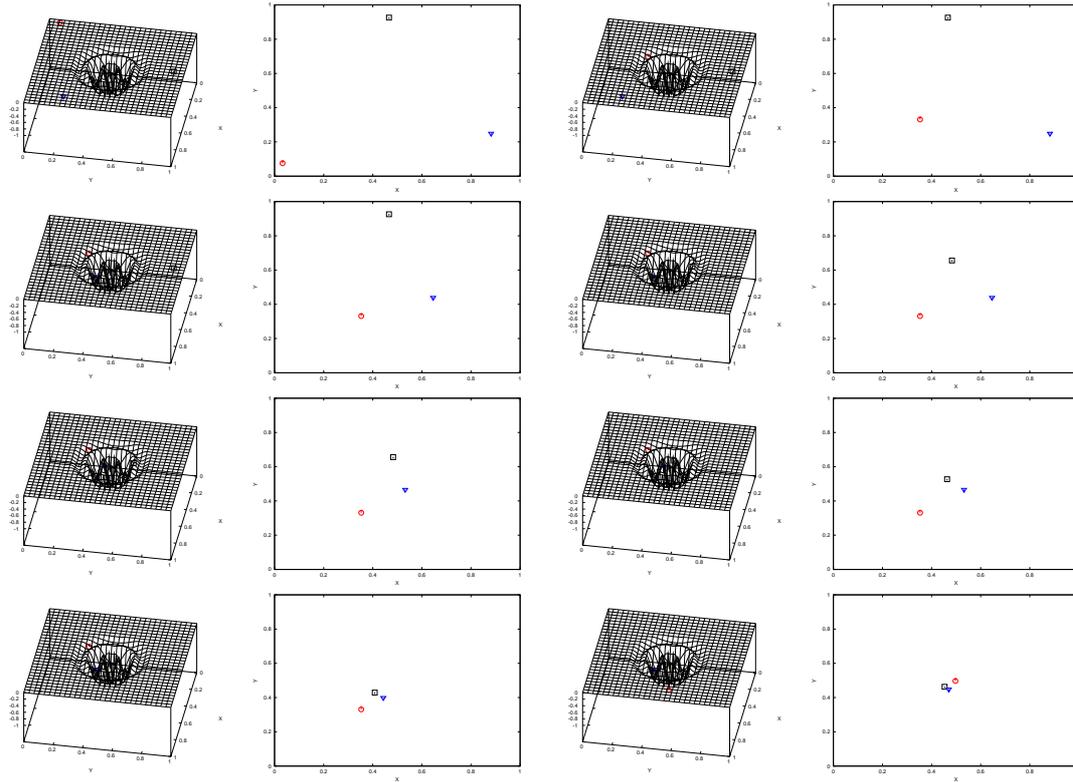


Figura 2.8: Sequenza dei passaggi effettuati dall'algoritmo simplex nel caso considerato.

mostrate in fig. 2.7(c-f) i valori della FOM per i punti con valori minimi e massimi tra i tre ad ogni passaggio¹.

La fig. 2.8 mostra l'evoluzione dell'algoritmo simplex per il set di dati che porta all'individuazione del minimo globale. E' interessante notare come in questo caso, il simplex di partenza abbia punti molto vicini al bordo dello spazio dei parametri (addirittura oltre il quarto cerchio di massimi). In una prima fase il minimo viene localizzato, per poi raffinare il risultato fino alla precisione richiesta. L'accuratezza del metodo simplex è notevole, tanto che è stata richiesta e raggiunta una precisione di 10^{-10} , bisogna anzi dire che, indipendentemente dal problema trattato, una volta localizzato il minimo, il metodo consente di raffinarne la posizione con una precisione a piacere, a costo però di un maggiore numero di valutazioni della FOM. Infatti la precisione raggiunta all' N -esima mossa è approssimativamente proporzionale al numero di mosse [Charbonneau 1998] la convergenza è perciò, rispetto ad altri metodi (es. il metodo di Powell converge con N^2 [Press et al. 1996]), piuttosto lenta. Nel problema trattato la convergenza è comunque veloce: nei tre casi considerati, la precisione di 10^{-3} viene raggiunta intorno al 20° passaggio, mentre sono necessari circa 50 passaggi per il raggiungimento della precisione finale di 10^{-10} , è facile prevedere un rapido peggioramento al crescere delle dimensioni.

¹Inteso come movimento effettivo e non semplice valutazione della FOM.

2.6 Ottimizzazione di film multistrato col metodo iterated simplex

2.6.1 Possibili approcci dal punto di vista matematico

L'ottimizzazione globale della copertura multistrato di un telescopio di tipo Wolter composto di una serie di shell nidificate, dovrebbe, in teoria, essere condotta globalmente sull'insieme delle shell, determinando per ognuna spessori, materiali e numero degli strati. Nella pratica però, anche considerando una singola shell e tralasciando gli ultimi due fattori, l'ottimizzazione globale dei singoli spessori di ogni strato è estremamente difficile da condurre e, almeno nella letteratura consultata, è stata effettuata (per esempio in [Lunt et al. 2001]) solo su un numero molto ridotto (qualche decina) di strati.

Le applicazioni per raggi X duri richiedono tuttavia, a causa dell'elevato potere di penetrazione della radiazione e della scarsa riflettività del singolo strato, un numero piuttosto cospicuo di strati, il che rende sicuramente l'ottimizzazione globale strato per strato al di fuori della portata degli elaboratori comunemente disponibili.

Anche l'approccio analitico al problema presenta notevoli difficoltà. In quest'ambito può essere utile richiamarsi a campi di applicazione in cui l'uso di multilayer è ampiamente diffuso e consolidato, come le applicazioni nell'ottico [Heavens, Liddell 1966] e nella riflessione di neutroni [Mezei 1976]. Tuttavia a differenza dei raggi X, l'assorbimento è in tali casi trascurabile¹, per la banda ottica grazie all'impiego, ad incidenza normale, di materiali trasparenti, per i neutroni a causa della scarsa interazione con la materia. Inoltre l'effetto della rugosità delle superfici riflettenti è meno influente rispetto al caso dei raggi X duri.

Nonostante ciò soprattutto il caso della riflessioni di neutroni ad incidenza radente presenta diverse analogie con quello raggi X. Per tali applicazioni, nell'ambito della teoria cinematica è possibile ricavare [Mezei 1976], con alcune semplificazioni non eccessivamente restrittive, un'equazione differenziale la cui soluzione fornisce gli spessori ottimali per gli strati. Considerando strati per i quali si hanno onde di riflessione parziale con differenza di fase entro $[-\alpha\frac{\pi}{4}, +\alpha\frac{\pi}{4}]$ rispetto all'onda riflessa dall' i -esimo strato, l'equazione che si ottiene è:

$$\frac{\delta d_i}{\delta i} = -\frac{d_i^5}{4d_c^4}$$

che ha come soluzione [Mezei, Dagleish 1977, Hayter, Mook 1989]:

$$d_i = \frac{d_c}{i^{0.25}} \tag{2.3}$$

¹ciò comporta in particolare la possibilità di impiegare indici di rifrazione reali, semplificando notevolmente il problema.

2.6 Ottimizzazione di film multistrato col metodo iterated simplex

Con $d_c = \frac{\lambda}{2 \sin \theta_{crit}}$. Nel caso dei neutroni l'assenza di assorbimento consente di utilizzare design basati su un gran numero di bistrati (intorno a 500) e struttura a quarto d'onda. Multilayer basati su design di questo tipo sono comunemente utilizzati e possono offrire una riflettività superiore al 99% su una banda larga 3-4 volte quella di riflessione totale [Mezei 1992]. Un'estensione della formula di Mezei, può essere ottenuta rilassando alcune restrizioni, come mostrato da Schelten e Mika [Schelten, Mika 1979]. La formula ottenuta per gli spessori è:

$$d_i = \frac{\mathcal{R}^{0.25} d_c}{\left\{ [1 + \alpha(i + b)]^{1/2} - 1 \right\}^{1/2}}$$

con $b = \frac{a^4}{\alpha} + \frac{2a^2}{\alpha}$, $a = \mathcal{R}^{0.25} \frac{d_c}{d_1}$

La formula utilizzata in questo lavoro per l'andamento degli spessori dei bistrati, è stata proposta in [Joensen et al. 1992], in base ad un'estensione della formula di Mezei 2.3:

$$d_i = \frac{a}{(b + i)^c} \quad (2.4)$$

in cui i parametri a , b e c sono da determinare. La formula si riduce alla formula di Mezei per $a = d_c$, $b = 0$, $c = 0.25$. Valgono per i parametri i limiti matematici $a, c > 0$, $b > -1$. In [Joensen et al. 1995] viene considerata l'applicazione, al caso dei multilayer per raggi X duri, di formule comunemente utilizzate per il design di specchi per neutroni (eventualmente corrette per rugosità e assorbimento), e sono mostrate le performances superiori di design ottenuti con la legge di potenza 2.4.

Un approccio analitico (con gamma costante) basato su una teoria cinematica con correzioni per le approssimazioni 1.5.5, simile a quello per i neutroni è discusso in [Protopopov, Kalnov 1998]. Dalla richiesta di riflettività costante su un determinato range angolare $\Delta\theta$ viene ottenuto un andamento della variazione Δd_i degli spessori, dato dalla sovrapposizione di un termine costante e di uno oscillante. La formula è:

$$\Delta d_i = \pm \bar{d} \frac{\Delta\theta}{\theta} \left\{ \frac{i - N/2}{N} \mp p \sin \left[2\pi \frac{\Delta\theta}{\theta} (i - N/2) \right] \right\} \quad (2.5)$$

con \bar{d} e $\bar{\theta}$ valori medi di angolo e spessore ignoti a priori, N numero di bistrati e $p \approx 1$ parametro arbitrario. Alcune ottimizzazioni alla ricerca della miglior scelta dei valori per i parametri della formula sono considerate dagli autori in [Protopopov et al. 1999] (con il metodo *needle variations*) ed in [Protopopov 2000] (con metodi *hill climbing*). In quest'ultimo articolo sono analizzate soluzioni, degli spessori dal bistrato più esterno a quello più interno, sia decrescenti che crescenti a seconda del segno considerato nella formula 2.5 le soluzioni con andamento decrescente degli spessori sembrano comunque offrire una riflettività lievemente maggiore. I risultati appaiono promettenti, tuttavia negli articoli citati vengono considerati multilayer composti da un numero di bistrati piuttosto ridotto (massimo 20), il che pone limiti molto stringenti sulla precisione con cui devono essere depositati gli spessori. Non sono noti tentativi di applicazione della formula a multilayer con un numero maggiore di strati.

Tabella 2.3: Parametri del multilayer e dell'ottimizzazione

numero di strati	500	numero di strati	250
rugosità	4.5 Å	numero massimo di iterazioni	500
angolo di incidenza	3.5 mrad	numero di prove	500
energia massima di integrazione della FOM	70keV	tempo di calcolo	7 h
materiali	W/Si	tolleranza di arresto	10 ⁻⁸

2.7 Applicazione pratica del metodo iterated Simplex

2.7.1 Applicazione alla riflettività di un multilayer

Per sperimentare l'applicazione del metodo *iterated simplex* all'ottimizzazione di multilayer, abbiamo utilizzato il programma *iterated Simplex*, descritto in 2.4, ad un caso già analizzato in letteratura [Joensen et al. 1995]. Nel lavoro citato è descritta l'ottimizzazione di un multilayer W/Si per applicazioni in sincrotroni o in spettroscopia di plasmi secondo un metodo best-start 2.2.1 basato sull'algoritmo simplex. La figura di merito è data dalla media della riflettività \mathcal{R} pesata per l'energia, secondo la formula:

$$\frac{\int dE \mathcal{R}(E) E}{\int dE E} \quad (2.6)$$

Abbiamo condotto un'analogia ottimizzazione, utilizzando, per gli spessori dei bistrati, la legge di potenza 2.4 ed una legge lineare $\Gamma_i = \frac{d_h}{d_i} = \Gamma_0 + i\Gamma_1$, con i indice del bistrato, per il rapporto gamma 1.5.3. Ciò comporta l'ottimizzazione su cinque parametri: a , b e c per la legge di potenza e Γ_0, Γ_1 per la relazione lineare. Si è quindi introdotto nel programma *iterated Simplex* un sottoprogramma (di tipo funzione) che:

- Calcola gli spessori a partire dai parametri dell'ottimizzazione
- Utilizza la procedura ricorsiva descritta in 1.5.5 per calcolare la riflettività a diverse energie (per l'angolo indicato), ottenendo la curva di riflettività in funzione dell'energia.
- A partire dalla curva di riflettività calcola il valore della funzione di merito¹ 2.6.

I dettagli dell'ottimizzazione eseguita sono descritti nel paragrafo seguente, le condizioni dell'ottimizzazione sono riportate in tab. 2.3. La fig. 2.9 mostra il confronto tra i risultati ottenuti e quelli citati.

¹Tale valore viene cambiato di segno, in modo da trasformare la ricerca del massimo in una minimizzazione.

2.7 Applicazione pratica del metodo iterated Simplex

parametri	risultato1	risultato2	risultati citati
a	102	108	81
b	1.316	0.44	-0.978
c	0.247	0.267	0.193
Γ_0	0.516	0.416	0.36
Γ_1	0.343	0.355	0.36
Valore FOM	0.4038	0.4131	0.3840

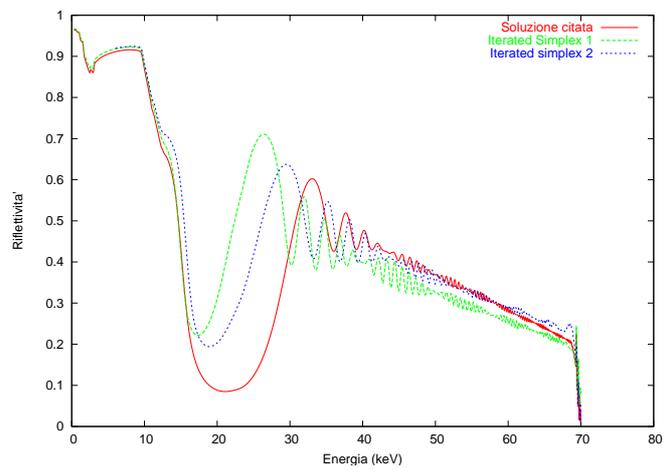


Figura 2.9: Confronto del risultato ottenuto con quello citato.

2.7.2 Aspetti pratici dell'ottimizzazione

Il calcolo della FOM in base a quanto descritto nel paragrafo precedente è influenzato, a causa degli errori di troncamento [Press et al. 1996, Cap. 1], dal modo in cui si calcolano gli integrali della formula 2.6. In particolare, considerando la curva della riflettività in funzione dell'energia (fig. 2.9), l'integrazione viene eseguita sommando i valori della FOM ottenuti per un certo numero di punti sull'asse delle energie, in cui si effettua il calcolo della riflettività, secondo la procedura ricorsiva descritta in 1.5.5. Poichè tale calcolo è piuttosto dispendioso in termini di tempo di elaborazione, è necessario fissare un numero di punti di calcolo più basso possibile, ma in grado di fornire risultati che ben approssimano il valore vero della FOM.

Durante la messa a punto della funzione per la valutazione della FOM, si sono sperimentati diversi valori del numero di punti, alcuni dei risultati ottenuti sono mostrati in fig. 2.10.

La curva di riflettività presenta diversi picchi ad energie ravvicinate, corrispondenti ai picchi di Bragg dei singoli strati o gruppi di strati vicini. Considerando la risoluzione finita di ogni applicazione reale, che rende spesso indistinguibili tra loro tali picchi, si è effettuata un'operazione di smussamento della curva di riflettività, mediando la riflettività calcolata in un punto dell'asse energetico con quella ottenuta in un certo numero di punti vicini. L'integrale della riflettività non viene modificato da questa operazione, tuttavia, qualora vengano considerate funzionali della riflettività di forma più complessa (saranno quasi sempre considerati funzionali dell'area efficace, quindi della riflettività al quadrato), lo smussamento fa sì che la FOM calcolata abbia maggiore significato fisico. Il numero di punti su cui effettuare la media è stato determinato in base ad una serie di tentativi, che hanno portato a fissare tale range intorno ad un decimo del numero totale di punti (fig. 2.10).

La figura 2.11 mostra la convergenza della FOM calcolata ad un valore fisso (corrispondente al limite per infiniti punti di integrazione), con l'aumento del numero dei punti.

2.7 Applicazione pratica del metodo iterated Simplex

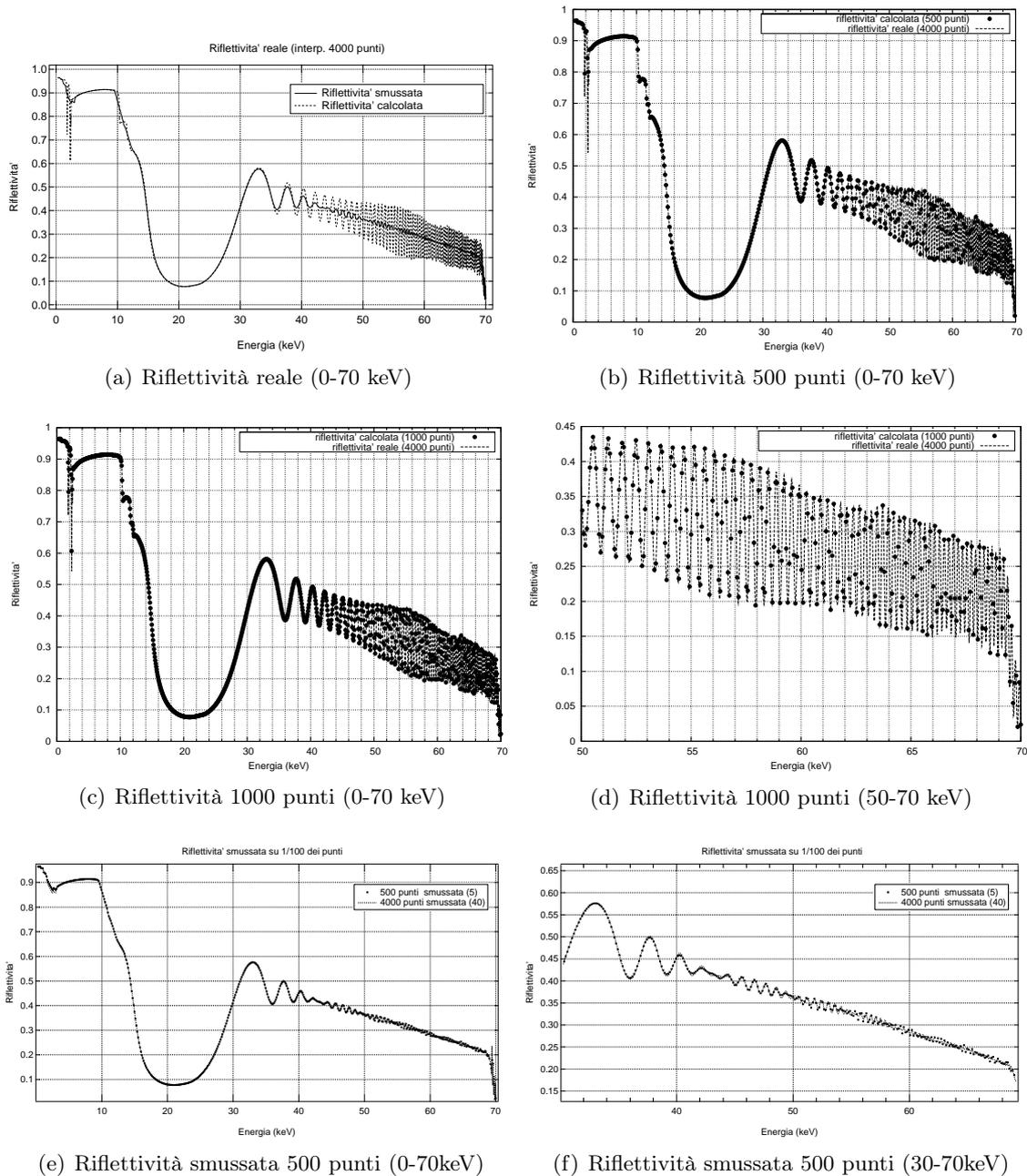


Figura 2.10: Simulazioni per diversi numeri di punti di integrazione e range di smoothing. In (a) è mostrata la curva di riflettività reale (interpolazione tra 4000 punti) con e senza smussamento. Nelle altre figure si mostra il confronto tra la curva di riflettività reale e quelle calcolate per numeri ridotti di punti, con smussamento [(e), (f)] e senza [(b), (c), (d)]. I risultati sulla FOM sono mostrati in fig. 2.11.

2 Problema dell'ottimizzazione di film multistrato

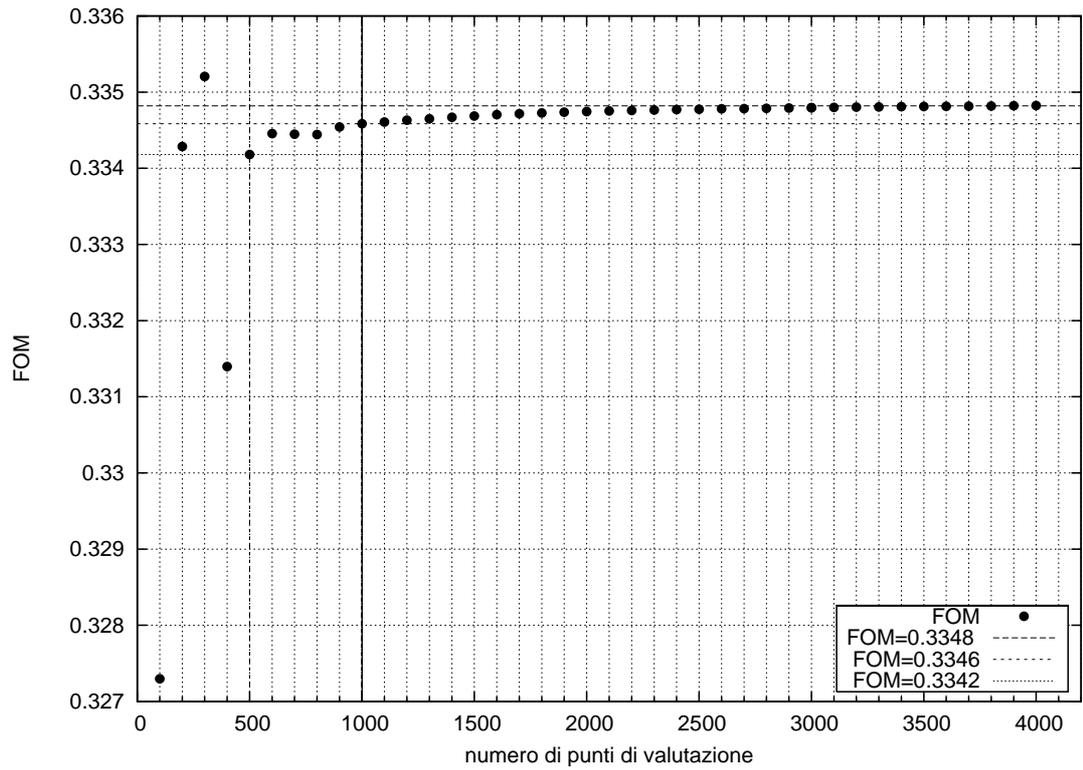


Figura 2.11: Valori della FOM nella forma 2.6 (integrale su energie da 0 a 70 keV) a seconda del numero di punti di integrazione.

Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

3.1 Problemi aperti in astronomia dei raggi X duri risolubili con l'uso di ottiche focalizzanti

Gli esperimenti di astronomia nei raggi X duri lanciati negli ultimi anni (in particolare HEXTE su Rossi-XTE e PDS su BeppoSAX) hanno visto l'impiego di rivelatori con caratteristiche di sensibilità senza precedenti in banda 20-300 KeV. Le succitate missioni fanno uso di rivelatori semplicemente collimati, che, oltre a non possedere capacità di imaging, sono fortemente limitati dall'elevato rumore di fondo e dalla confusione delle sorgenti, nonostante ciò, le osservazioni effettuate sono di grande interesse, in quanto la banda energetica in questione è praticamente inesplorata.

Come già menzionato, l'utilizzo di ottiche focalizzanti nella banda dei raggi X soffici (0.1 - 10 keV) ha portato ad un miglioramento determinante nella capacità di imaging ed in sensibilità in flusso rispetto ai rivelatori a vista diretta. Per dare un termine di paragone, la sensibilità raggiunta dal telescopio Chandra (lanciato nel 1999 e tuttora operativo) risulta essere 5 ordini di grandezza migliore della missione UHURU, pur avendo un'area di apertura simile. Una serie di problemi scientifici di astrofisica e cosmologia delle alte energie tuttora aperti (ad es. lo studio del background X cosmico in prossimità dell'energia di picco, la comprensione delle righe nucleari nelle supernove, l'origine delle code "dure" in galassie normali e ammassi di galassie) richiedono necessariamente un miglioramento sostanziale delle performances anche per la banda energetica dei raggi X duri, e ciò sarà possibile solo tramite l'utilizzo di tecniche focalizzanti.

Tra i principali problemi astrofisici aperti, risolvibili con l'impiego di ottiche focalizzanti nella banda dei raggi X duri vi sono:

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

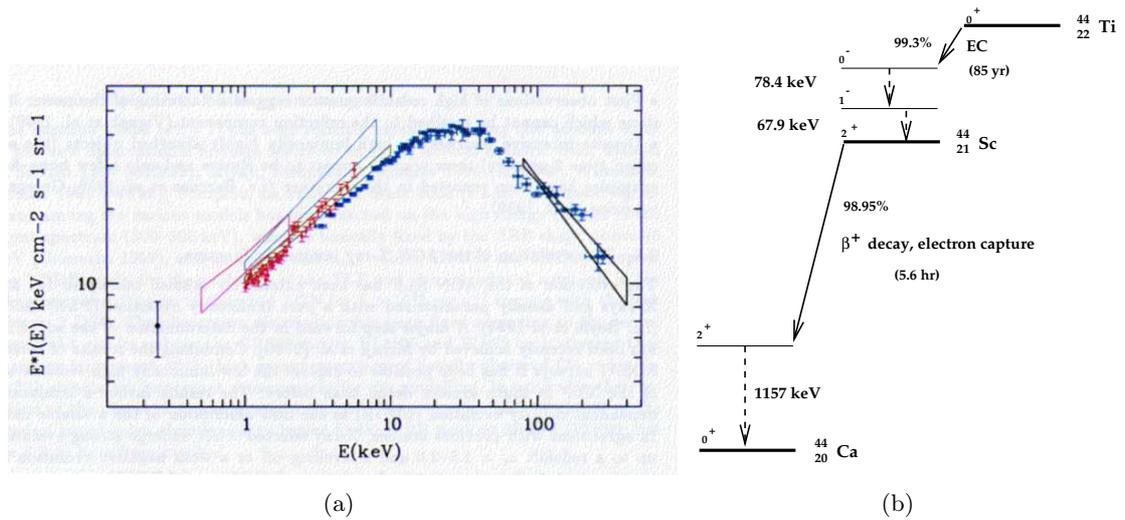


Figura 3.1: Due tra i principali obiettivi astronomici nei raggi X duri: (a) la discrepanza tra diverse misure del fondo X potranno essere risolte tramite l'osservazione con telescopi focalizzanti, determinando il reale contributo dovuto a sorgenti discrete (in particolare AGN fortemente assorbiti). (b) Schema di decadimento nucleare del ^{44}Ti . L'osservazione delle righe a 67.9 e 78.4 keV fornirà nuove importantissime informazioni per lo studio dei resti di supernova.

- L'origine del Fondo Cosmico a raggi X ed il legame tra galassie Seyfert 1 e 2, da studiare tramite deep survey di porzioni di cielo. L'utilizzo di ottiche focalizzanti permetterà l'analisi spettrale non solo di AGN estremamente assorbiti (NGC 1068 [Matt et al. 1999]) ma potrà anche essere usato per estendere il campione di AGN oscurati in una ampia finestra energetica. A questo riguardo si potranno condurre survey profonde di porzioni di cielo per risolvere la componente ad alta energia del background cosmico in raggi X. In particolare sarà molto importante effettuare survey profonde in limitate regioni di cielo per studiare e risolvere la componente ad alta energia (con picco tra 30 e 40 keV) del Background Cosmico in raggi X, con sensibilità a 40 keV tipicamente dell'ordine di $2 \times 10^{-14} \text{ erg/cm}^2/\text{s}$. Tali osservazioni permetteranno non solo una misura recente ed a più alta sensibilità del Background X proprio nella regione dove esso picca (fino a questo momento le ultime misure sperimentali, che presentano diverse incertezze, sono state effettuate dall'esperimento con rivelatore a vista diretta A4 che risale a più di 25 anni fa), una stima grossolana della curva log N - log S delle sorgenti che danno origine al fenomeno, e, tramite gli spettri ottenibili dagli oggetti risolti più brillanti, si chiarificherà la loro natura intrinseca.
- L'espulsione di ^{44}Ti nei resti di supernova e la sua localizzazione [Vink et al. 2001]. La possibilità di mappare l'emissione di ^{44}Ti dai giovani resti di supernova emerge per importanza. A causa della sua breve vita media (96 anni) il ^{44}Ti è una prova

3.1 Problemi aperti in astronomia dei raggi X duri risolvibili con l'uso di ottiche focalizzanti

dell'attività delle supernova nella Galassia durante gli ultimi secoli. L'esperimento COMPTEL è stato in grado di rivelare (entro 4σ) la riga di decadimento a 1.16 MeV del ^{44}Ti nel giovane resto di supernova Cas-A. Tale riga è dovuta al decadimento a catena $^{44}\text{Ti} \rightarrow ^{44}\text{Sc} \rightarrow ^{44}\text{Ca}$, che a sua volta dà luogo ad altre due righe, a 67.9 keV e a 78.4 keV. Recentemente, tali righe sono state osservate in Cas-A a 5σ tramite un'osservazione di 500 Ks con BeppoSAX/PDS. In questo contesto, la buona risoluzione angolare di HEXIT permetterà lo studio della nucleosintesi e dell'evoluzione dinamica degli shock prodotti dalle supernove dopo l'interazione con il mezzo interstellare (shock diretto) e con il materiale più lento del resto di supernova (shock inverso). La buona risoluzione spettrale di HEXIT (migliore di 1 keV a 70 keV) permetterà di studiare l'allargamento della riga dello ^{44}Sc e di misurare la velocità di espansione nelle varie direzioni. Obiettivi possibili sono tutti i resti di supernova giovani e brillanti. I resti di supernova sono anche siti di accelerazione per i raggi cosmici: le osservazioni della SN 1006 da parte di ASCA, ROSAT, Chandra, hanno fornito la prova diretta di elettroni con energie del TeV. L'imaging alle alte energie permette di studiare le regioni non-termiche nei SNR e di capire il loro ruolo nell'accelerazione dei raggi cosmici. I target osservativi migliori in tal senso sono SN 1006 e Vela, per la loro luminosità, vicinanza ed estensione.

- L'origine dell'emissione nei raggi X duri da parte degli ammassi di galassie e il suo legame con il campo magnetico interno ai cluster [Fusco-Femiano et al. 1999]. L'esperimento SAX/PDS ha anche osservato per la prima volta code ad alta energia negli spettri X di due ammassi di galassie (Coma e A2256). L'eccesso osservato in eccesso alla classica emissione termica di queste sorgenti emerge a circa 20 keV ed è consistente con una legge di potenza avente indice spettrale "poorly constrained" ($\gamma=2.0 \pm 1.4$ per COMA e $\gamma=1.0 \pm 0.7$ per A2256). Una possibile interpretazione è che l'emissione in raggi X duri sia prodotta da scattering Compton Inverso sul background dei fotoni a microonde da parte di elettroni non termici responsabili per l'alone radio dei cluster. In questa ipotesi un valore del campo magnetico può essere derivato confrontando lo spettro X e Radio. Le future osservazioni con ottiche focalizzanti permetteranno di confermare le osservazioni in COMA ed A2256 e nuove misure saranno possibili su altri ammassi di galassie vicini. Inoltre l'elevata risoluzione spaziale ottenibile con tecniche di focalizzazione ci permetterà di discriminare tra emissione diffusa oppure dovuta a sorgenti puntiformi (per es. AGN) casualmente presenti nel campo di SAX/PDS.
- La natura dell'emissione nei raggi X duri nelle galassie vicine [Trinchieri et al. 1999]. La sorgente M31 (Andromeda, la nostra galassia gemella) è stata osservata in raggi X duri dal rivelatore a collimazione passiva Beppo SAX. Il flusso misurato è stato attribuito ragionevolmente alla galassia, poiché non ci sono sorgenti di background note che possano determinare tale flusso. L'uso di ottiche focalizzanti multilayer permetterà di discriminare definitivamente da una possibile contaminazione da parte di una sorgente ancora non nota molto assorbita, non correlata ad M31,

determinando quanto flusso sia attribuibile al "bulge" e quanto alle sorgenti hard X nel disco della galassia nel disco o nei suo ammassi globulari.

- Lo studio dell'emissione ADAF (Advection Dominated Accretion Flow) nei transienti dei candidati buchi neri [Menou et al. 1999]. Altre "ovvie" sorgenti galattiche da studiare con ottiche focalizzanti per raggi X duri sono le stelle di neutroni e i buchi neri nei sistemi binari. In particolare, in candidati buchi neri sono interessanti perché i modelli di accrescimento ADAF prevedono un eccesso di raggi X duri rispetto allo spettro a raggi X molli (tale eccesso è dell'ordine di $10^{-14} \text{ erg/cm}^2/\text{s}$ a 40 keV).

3.2 Futuri progetti di astronomia nei raggi X duri

In questo paragrafo saranno descritti i concetti delle tre missioni trattate in questo lavoro di tesi. Due di esse (XEUS e Constellation X) sono tra i principali obiettivi futuri di NASA ed ESA. La terza (HEXIT), finanziata da ASI, è la più vicina in termini di data prevista per la realizzazione, e costituisce un'opportunità per riaffermare il ruolo primario dell'astronomia italiana nel campo dei raggi X, dopo il successo della missione Beppo SAX e la realizzazione delle ottiche per XMM-Newton e JET-X/Swift.

3.2.1 HEXIT

Il progetto **HEXIT** (High Energy X ray Imaging Telescope) è un esperimento basato su pallone e si propone come una delle prime missioni per osservazioni con l'uso di ottiche focalizzanti nei raggi X duri. L'esperimento, previsto per il 2005 e attualmente in attività, è coordinato da OAB/INAF (P.I. Giovanni Pareschi) e vede la partecipazione delle sezioni IASF/CNR di Milano, Bologna e Palermo, del dipartimento di Fisica dell'Università di Ferrara e dell'istituto IPCF/CNR di Pisa. Sono previsti voli transmediterranei (della durata di un giorno) e transoceanici (della durata di una settimana) sfruttando venti stagionali d'alta quota, con partenza prevista dalla base ASI di Trapani-Milo.

Il progetto di HEXIT prevede l'impiego di tre *moduli ottici* con identica geometria basati su multilayer, ognuno dei quali formato da 30 *shell* confocali e nidificate con geometria a doppio cono (par. 1.6.2); le ottiche saranno realizzate da OAB/INAF attraverso un processo di replica diretta tramite elettroformatura al Ni, secondo uno sviluppo della tecnica già utilizzata con successo per la produzione degli specchi (con copertura monostrato) degli esperimenti spaziali *Beppo Sax*, *JET-X/SWIFT* e *XMM/Newton*.

Per i rivelatori è previsto l'uso di sensori ad alta densità CdZnTe che, pur lavorando a temperatura ambiente, hanno prestazioni spettroscopiche confrontabili con quelle di rivelatori basati su Si e Ge. Questo tipo di rivelatore possiede dimensione compatte e offre una buona risoluzione spaziale (<0.5 mm), unitamente ad un'ottima risoluzione energetica ($<15\%$). L'elevato numero atomico (49-48) e l'alta densità del materiale (6.1 g/cm^3) sono in grado di offrire un'efficienza quantica molto buona (vicina al 100% per

3.2 Futuri progetti di astronomia nei raggi X duri

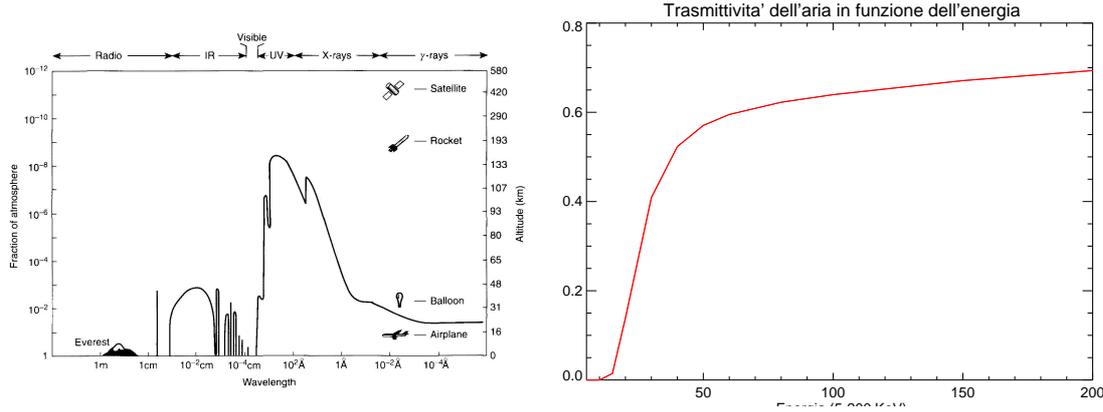


Figura 3.2: (a) penetrazione della radiazione nell'atmosfera terrestre. (b) Trasmittività dell'aria all'altitudine operativa di HEXIT e alla pressione di 3 mbar

un cristallo di 2 mm di spessore a 100 keV). E' previsto un sistema di schermatura attiva basato su scintillatori come BGO o NaI.

HEXIT permetterà di condurre osservazioni nella banda dei raggi X duri con caratteristiche di sensibilità e risoluzione finora mai raggiunte¹, fornendo tra l'altro un buon banco di prova per le future missioni satellitari come Constellation X e XEUS (trattate nei paragrafi seguenti). In particolare il progetto di Constellation X si basa su dei parametri (angoli, range energetico, tipo di ottiche) molto simili a quelli di HEXIT. La trasmittività atmosferica all'altitudine operativa di HEXIT (40 Km) è circa del $\sim 15\%$ a 20 KeV e del $\sim 40\%$ a 30 KeV (fig. 3.2), per cui sono previste osservazioni nel range 20-70 KeV, in cui il limite superiore è fissato soprattutto dall'orlo di assorbimento K del tungsteno, che, per gli angoli in gioco annulla la riflettività nella regione spettrale ad esso prossima.

3.2.2 XEUS

La missione XEUS (X-ray Evolving-Universe Spectroscopy Mission), la cui realizzazione si presenta come una vera e propria sfida tecnologica, costituisce il principale obiettivo scientifico dell'ESA per l'astronomia X del futuro. La missione, da realizzarsi nel secondo decennio del 2000, sarà basata sulla realizzazione di un telescopio per raggi X dotato di un'enorme area efficace ($30 m^2$ a 1 keV da confrontare con i $2.5 m^2$ per modulo di XMM-Newton!) a cui deve corrispondere, per evitare problemi di confusione tra sorgenti, una risoluzione angolare dello strumento di livello eccellente (Half Power Diameter di 2 arcsec da confrontarsi con i 15 arcsec di XMM-Newton). Cio' che maggiormente caratterizza il concetto della missione è l'utilizzo di una lunghezza focale molto lunga, 50 m (contro i

¹Si pensi, ad esempio, che la sensibilità richiesta (a 5σ) per l'energia di 40 KeV e per un tempo di esposizione di $2 \times 10^4 s$ è di 3×10^{-7} fotoni/cm²/s/KeV, cioè di un ordine di grandezza superiore ad un'esposizione di $10^5 s$ con SAX/PDS(fonte).

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

7.5 m di XMM-Newton), ottenuta ponendo il rivelatore su un satellite separato da quello delle ottiche e mantenendo i due in asse mediante un opportuno sistema di tracking.

I due satelliti *detector spacecraft* e *mirror spacecraft*, verranno posti in bassa orbita terrestre ad un'altitudine di circa 600 km, di poco superiore a quella della stazione spaziale internazionale Alpha. Ciò consentirà di sfruttare la stazione spaziale come piattaforma di assemblaggio per le ottiche, oltre che per eventuali operazioni di manutenzione o riparazione. Il progetto prevede l'impiego per le ottiche di un gran numero (circa 560) di shell di grande raggio confocali nidificate. La missione è articolata in due fasi distinte: nella prima (denominata XEUS I) il modulo con le ottiche comprenderà le circa 300 shell più interne, con diametri da 3 a 5 m. Dopo 4-6 anni è previsto un nuovo contatto tra la stazione spaziale e la mirror spacecraft per provvedere all'aggiunta delle restanti shell (XEUS II). Contemporaneamente è prevista la sostituzione della detector spacecraft originale, che nel frattempo avrà esaurito il suo combustibile, con una munita di strumentazione tecnologicamente più avanzata. La configurazione finale di XEUS II prevede 128 petali disposti in 5 anelli concentrici (2 per XEUS I e 3 per XEUS II), per un totale di circa 17500 segmenti.

Il grande numero e le notevoli dimensioni delle shell di XEUS (da 3 a 10 m) rendono conveniente rinunciare alla struttura "chiusa" a simmetria cilindrica (che garantisce un'alta rigidità meccanica). Gli specchi Wolter I saranno quindi formati da una serie di segmenti delle dimensioni medie di 1 m x 0.5 m, da assemblare una volta in orbita (Fig. 3). Tali segmenti vengono raggruppati in unità indipendenti corrispondenti a settori angolari, dette petali, ognuno dei quali contenente 100-200 segmenti di specchio.

Il concetto originale della missione XEUS prevede l'impiego di ottiche monostrato di materiali ad alta densità, al fine di ottenere un'enorme area efficace per energie nei raggi X soffici (con una soglia superiore di 20-25 keV), recentemente è stata proposta l'idea di estendere la banda operativa anche nella regione dei raggi X duri, possibilità considerata da ESA di grande importanza. Tuttavia, malgrado la lunghezza focale prevista sia molto grande (50 m), il fenomeno della riflessione totale da film a singolo strato non può efficacemente essere sfruttato poiché, per esigenze strutturali, il diametro minimo degli specchi di XEUS è attualmente fissato a 3 m, con un conseguente rapporto focale/diametro (quindi secondo quanto detto nel paragrafo 1.6.3 gli angoli) troppo elevato

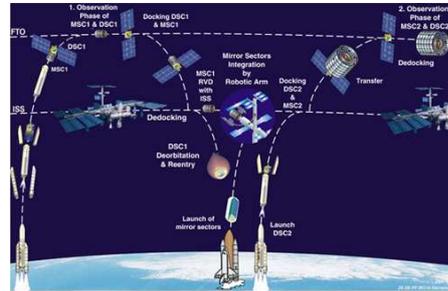


Figura 3.3: Schema operativo della missione XEUS. Le operazioni sui satelliti di XEUS vengono effettuati utilizzando la stazione spaziale internazionale. La configurazione finale di XEUS (XEUS II) viene raggiunta con l'aggiunta delle shell esterne alla *mirror spacecraft* e la sostituzione della *detector spacecraft*.

3.2 Futuri progetti di astronomia nei raggi X duri

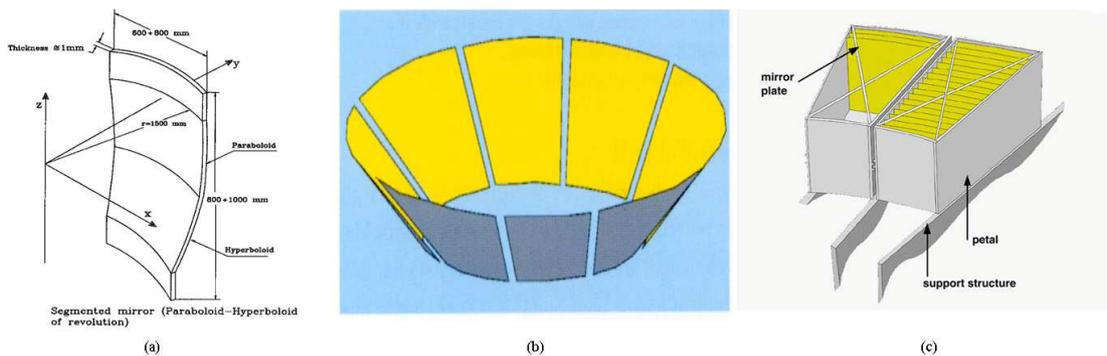
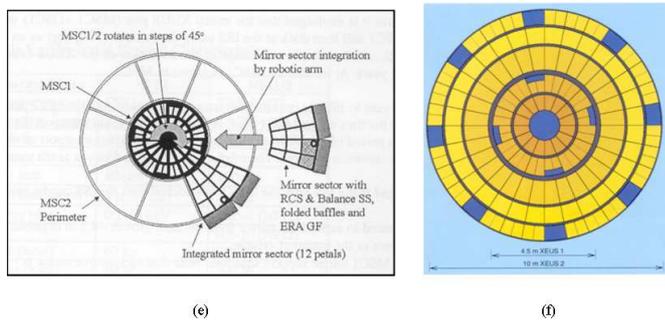


Figura 3.4: i segmenti (a) che compongono le shell (b) di XEUS vengono riunite in “petali” (c), a loro volta assemblati in settori circolari concentrici (d). La configurazione finale di XEUS II prevede la disposizione in 5 anelli concentrici, i primi 3 dei quali costituiscono la configurazione XEUS I.



per questa applicazione. L'utilizzo di coperture multistrato con struttura supermirror sulle shell più interne si propone come una possibile soluzione per l'estensione della banda operativa di XEUS nei raggi X duri. Il goal auspicato per la risoluzione angolare per tale telescopio non è stato ancora fissato, ma sarà sicuramente meno severo rispetto al caso dell'ottica di grande dimensione per i raggi X "soffici", poiché la densità di sorgenti con spettro "duro" è meno alta (un potere risolutivo HEW di 15-30 arcsec dovrebbe essere più che sufficiente).

Il progetto è sicuramente molto ambizioso, non solo per le evidenti difficoltà operative (tracking dei due satelliti assemblaggio delle ottiche in orbita), ma anche per gli aspetti tecnologici riguardanti la realizzazione e l'allineamento delle ottiche in fase di montaggio [Citterio et al. 2001].

La segmentazione degli specchi porta inevitabilmente alla perdita della solidità meccanica tipica delle shell Wolter I con struttura integrale a simmetria cilindrica, con conseguenti errori nel profilo geometrico dello specchio e degrado delle proprietà di imaging del telescopio. Per confronto, si noti in tabella 1.1 come le missioni basate su specchi segmentati realizzate finora (ASCA, ASTRO-E e SODART) siano state caratterizzate da una risoluzione angolare HEW molto peggiore rispetto ai telescopi a struttura chiusa. Inoltre, il rapporto Massa/Area-Geometrica previsto da ESA per la missione è molto ridotto (dell'ordine di 0.08 Kg/cm^2 , contro un valore di 0.24 Kg/cm^2 per XMM-Newton) a causa dei limiti imposti dal payload già molto elevato. Per ottenere il rapporto Massa/Area-Geometrica richiesto è necessario l'uso di specchi molto sottili e leggeri, rendendo ancora più arduo ottenere contemporaneamente un'elevata risoluzione angolare. A ciò si aggiunga il fatto che le ottiche devono poter operare, senza degradazione delle proprietà, in condizioni ambientali estreme, resistendo alle basse temperature tipiche dell'ambiente spaziale¹ ($\sim 30 \text{ }^\circ\text{C}$), ed esposte al flusso di ossigeno atomico, che in *low earth orbit* è relativamente intenso e che potrebbe determinare un precoce invecchiamento delle superfici riflettenti. L'elevato numero di segmenti che andranno a comporre le ottiche di XEUS, impone lo sviluppo di un processo industriale per la realizzazione delle ottiche, senza però rinunciare alle stringenti richieste qualitative riguardanti, performances, rugosità superficiale e resistenza agli stress. Le tecnologie attualmente impiegate sono inadatte a raggiungere gli obiettivi proposti, è perciò allo studio l'impiego di nuovi materiali leggeri.

3.2.3 Constellation X

La missione Constellation-X [NASA Publ. 1999, Tananbaum et al. 1999] è uno dei principali obiettivi della NASA per l'astronomia del futuro. Il concetto di missione prevede l'impiego di quattro satelliti identici in orbita attorno al punto Lagrangiano L2 del sistema terra-sole, esterno all'orbita terrestre ed ad una distanza dalla terra pari a circa 4 volte quella lunare. L'abbandono dell'orbita terrestre comporta condizioni particolarmente favorevoli, sia sotto l'aspetto della ridotta esposizione al flusso di particelle cosmiche,

¹viste le dimensioni l'impiego di sistemi di termalizzazione sarebbe energeticamente troppo dispendioso, oltre che tecnicamente difficile da realizzare con uniformità su tutta la struttura.

sia per quel che riguarda la gestione termica del sistema. L'utilizzo di quattro satelliti consente di ridurre i costi di produzione rispetto ad un unico satellite equivalente. Inoltre in questo modo vengono minimizzati i rischi di fallimento, in quanto il malfunzionamento di uno dei satelliti non comprometterebbe l'esito della missione.

La strumentazione prevede, a bordo di ognuno dei satelliti, due sistemi di telescopi focalizzanti tipo Wolter: SXT (Soft X-Ray Telescope) per il range energetico 0.25-10 keV, ed HXT (Hard X-ray telescope) per energie almeno fino a 40 keV, entrambi con focale di 10 m. Nel seguito ci occuperemo dell'ottimizzazione degli specchi per l'unità HXT. Questa è composta, per ogni satellite, da tre moduli uguali di 75 *shell* nidificate, con diametro massimo intorno ai 35 cm. Gli angoli in gioco vanno da 1.11 a 4.37 mrad.

La seguente tabella illustra le prestazioni richieste per la realizzazione delle ottiche di HXT.

tabella da: [Harrison et al. 1999]:

Prestazioni di base per le ottiche di HXT	
Banda energetica	6-40 keV
Area efficace	$\geq 1500 \text{ cm}^2$
Campo di vista	$\geq 8 \text{ arcmin HPD}$
Risoluzione angolare	$\leq 1 \text{ arcmin HPD}$
Prestazioni desiderabili (in ordine di rilevanza)	
Area efficace	$\geq 800 \text{ cm}^2, 40-80 \text{ keV}$
Banda energetica	$\sim 1 - \gtrsim 60 \text{ KeV}$
Risoluzione angolare	$\leq 30 \text{ arcsec HPD}$

3.3 Pacchetti software sviluppati

3.3.1 Linee guida e criteri seguiti per lo sviluppo software

In generale le ottimizzazioni effettuate per i progetti sopra descritti sono state strutturate in tre fasi (per ognuna delle quali sono indicati a piè di pagina i programmi realizzati):

1. Effettuazione, sulla sequenza di shell, di ripetute ottimizzazioni basate su diverse condizioni al contorno, come forma della FOM, dello spazio dei parametri, gruppi di shell, ecc..¹
2. Selezione dei risultati più interessanti dai gruppi di risultati per le varie condizioni al contorno².
3. Determinazione di una buona combinazione di risultati per le diverse shell e della risposta complessiva del sistema di shell³.

¹*multifomIS*

²*datmerger, anris, superplot*

³*somma, VBsum*

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

Nell'immediato seguito descriveremo brevemente le funzionalità del software realizzato per affrontare ognuno di questi passaggi. Nello sviluppo del software si è cercato di realizzare programmi che:

- Siano in grado di funzionare in maniera automatizzata richiedendo un intervento minimo, sia a livello di impostazioni del programma, sia a livello di esecuzione dello stesso. Nel caso siano necessari lunghi tempi di esecuzione il programma una volta avviato deve incorporare un sistema di gestione degli errori che permetta, in caso di interruzione (per errori del programma o dei dati, o per cause esterne) di ripristinare il funzionamento senza perdere i risultati ottenuti e di proseguire, saltando eventualmente i passaggi non validi. In questo modo è possibile eseguire procedure anche molto dispendiose in termini di tempo (alcune procedure di ottimizzazione hanno richiesto più di 100 ore) con un minimo intervento umano.
- Includano i risultati in una struttura ordinata dalla quale sia possibile ricostruire, per ogni blocco di risultati, i parametri e i dati a partire dai quali gli stessi sono stati ottenuti.
- Siano configurabili attraverso file esterni di impostazioni. Una struttura a blocchi dei programmi consente di semplificare notevolmente eventuali modifiche nel codice dei programmi.

I programmi sono stati progettati per svolgere una serie di operazioni, ognuna delle quali ha come dati di partenza i risultati ottenuti dalla precedente. I risultati ottenuti dai vari programmi sono disposti secondo una struttura standard di cartelle e sottocartelle (descritta al paragrafo seguente), nelle quali vengono inclusi file di descrizione delle operazioni effettuate. Tali file sono leggibili dai programmi, attraverso il costrutto Fortran *"namelist"* [Fortran Powerstation Programmer's Guide, Hahn 1994]. Un esempio di *namelist* è mostrato in fig. 3.5, esse consistono essenzialmente di un elenco di variabili convenzionalmente delimitato, leggibile da programma tramite apposite istruzioni. Così facendo è sufficiente indicare la posizione dei dati di partenza, perchè il programma individui i file con le impostazioni relative ai dati, generate alla fase precedente, regolandosi di conseguenza. In casi particolari è comunque possibile modificare le impostazioni secondo il bisogno.

Ogni programma è composto da una parte (comune con poche modifiche a tutti i programmi) che si occupa dell'esplorazione ricorsiva delle directory dei dati di partenza, individuando un blocco di dati e le impostazioni relative, e, partendo da questi, lancia la subroutine di elaborazione vera e propria (fig. 2.1). In questo modo i programmi realizzati riescono ad elaborare in una sola esecuzione diversi gruppi di dati ottenuti sotto condizioni diverse e per le diverse shell.

3.3.2 Descrizione dei programmi sviluppati

Descriveremo in questo paragrafo i programmi realizzati nell'ordine in cui essi vengono generalmente eseguiti:

Programma 1: *MultifomIS*

Come già visto l'esecuzione di un numero sufficiente di prove per il metodo iterated simplex richiede, a causa della difficoltà della valutazione della FOM, un tempo di calcolo non indifferente. Per questo, al fine di poter agevolmente sperimentare un certo numero di FOM e condizioni al contorno, si è creato un programma in grado di ripetere l'esecuzione del metodo *iterated simplex* per diverse scelte di ottimizzazione per una data sequenza di shell. I parametri vengono importati nel programma tramite *namelist* (fig. 3.5). Il programma *MultifomIS* parte da un unico file contenente un certo numero di sequenze di impostazioni come quella mostrata in figura, generando un pari numero di directory, in ognuna delle quali vengono posti i risultati dell'ottimizzazione corrispondente. Le funzioni Fortran per il calcolo della FOM vengono inserite nel programma come procedure esterne 2.4.2 e compilate con esso, esternamente al programma deve essere fornito un file di testo con la sequenza dei diametri delle shell.

Il programma salva il risultato di ogni prova aggiornando un file di conteggio, che tiene conto anche delle eventuali interruzioni del programma. In caso di ripetuto errore su un dato il programma passa al dato successivo, in caso di ripetuto errore sui dati di una stessa serie (la cui causa più probabile è un errore nei dati o nella funzione di valutazione della FOM), il programma passa alla funzione successiva ed al relativo blocco di dati.

La struttura delle directory generate dal programma è descritta in figura. Le directory sono strutturate su quattro livelli gerarchici e precisamente (dal più esterno al più interno, in parentesi sono riportati i nomi corrispondenti nella figura):

1. **Directory del progetto (WORKDIR):** Serve da contenitore per tutte le *cartelle dei risultati* appartenente allo stesso progetto. Il progetto è determinato dalla scelta dei materiali e dei diametri delle shell i cui dati sono contenuti in una cartella delle impostazioni ("af_files" in figura). Le FOM appartenenti ad una stessa *directory di progetto* devono condividere tali impostazioni. Tutte le altre impostazioni possono variare per ogni *directory della FOM*.
2. **Directory dei risultati (risultatiOTTIMIZZAZIONE, Fase1.., ..):** Ne esiste una per ogni fase dell'elaborazione con i programmi di **ISOXM** (ottimizzazione, unione dei dati, selezione, plot e somma). Una prima *directory dei risultati* ("risultatiOTTIMIZZAZIONE" in figura) viene generata dal programma *multifomIS* e contiene una serie di *directory delle FOM* (una per ogni FOM sperimentata). Ogni programma di **ISOXM** utilizza la *directory dei risultati* ottenuta dalla fase precedente elaborando in un passaggio i risultati di tutte le *directory delle FOM* e riproducendone la struttura in una propria cartella dei risultati. Questo permette di non modificare i dati di partenza e allo stesso tempo di ripetere le operazioni di analisi con impostazioni diverse senza cancellare i precedenti risultati (i nomi delle cartelle create sono impostabili da filee i programmi sono protetti da sovrascrittura). L'elenco delle *directory delle FOM* è contenuto in un file di testo in ogni

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

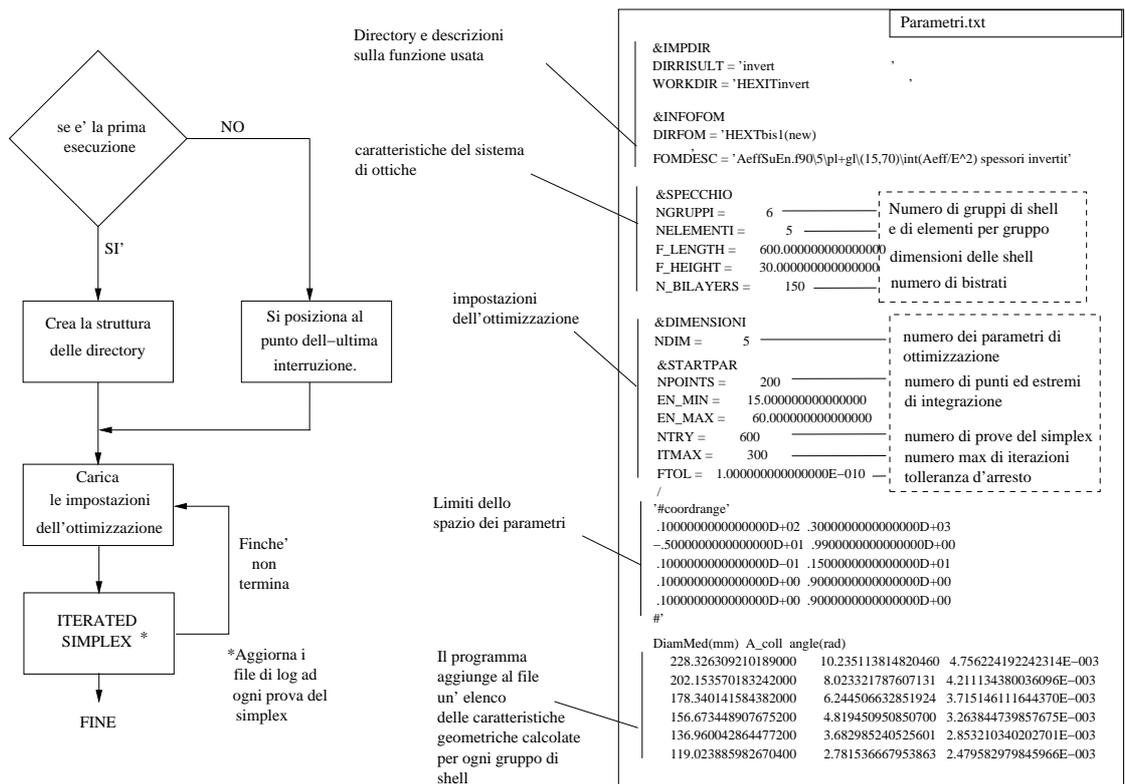


Figura 3.5: Impostazioni del programma MultifomIS

directory dei risultati, ciò permette di escludere da una fase dell'analisi (e automaticamente dalle successive) le cartelle delle FOM, cancellandone il nome dal suddetto file.

3. **Directory delle FOM (FOM1, FOM2, ..):** Ve ne è una per ogni FOM utilizzata. Ognuna di esse contiene un *file dei parametri* (la cui struttura è stata descritta in fig. 3.5) che definisce le impostazioni della FOM. Tipicamente, nell'ottimizzazione di una sequenza di shell nidificate, è usuale suddividere la serie di shell in gruppi, ottimizzando per i valori medi di angolo e diametro, il numero di gruppi e di shell per gruppo è contenuto nel *file dei parametri*, il programma provvede a calcolare i valori medi dei diametri per ogni gruppo. La *directory delle FOM* contiene una directory nuemrata per ogni gruppo.
4. **Directory dei gruppi (01, 02, ..):** Ognuna di essa contiene la serie di risultati per un gruppo di shell. I risultati sono nel formato già descritto al paragrafo 2.5.2 (fig. 2.6).

Programma 2: *Datmerger*

Il programma di ottimizzazione registra i risultati ottenuti su file nel formato già descritto in fig. 2.6a. In caso di interruzioni si ottiene dall'ottimizzazione una serie di files con risultati parziali sequenzialmente numerati. I file possono contenere dati troncati che devono essere eliminati manualmente¹ basandosi sul file di registrazione degli errori. Il programma *datmerger* analizza ricorsivamente le subdirectory, creando a partire dai file dei risultati parziali un unico file per ogni dirgrup.

Programma 3: *Anris*

Analizza i file prodotti dal programma al punto precedente e seleziona i risultati in base a criteri fissati nel file delle impostazioni, analogamente al programma descritto in 2.5.2, da cui *anris* è stato derivato. Vengono generati files contenenti i risultati (1 punto per simplex) scelti, oltre a file con i corrispondenti simplex iniziali e finali. Il formato dei file generati è compatibile con quello dei dati di partenza del programma di ottimizzazione. E' così possibile far partire una nuova ottimizzazione dai simplex iniziali o finali selezionati, eventualmente cambiando le impostazione. Ciò ha permesso, per esempio (riottimizzando a partire dai dati finali) di raffinare i risultati selezionati raggiungendo una maggiore precisione, oppure (partendo dai dati iniziali) di sperimentare condizioni diverse usando solo i dati che hanno fornito risultati di interesse.

¹La procedura manuale per l'eliminazione dei dati è stata preferita ad una automatica in quanto, non essendo l'al posizione del punto di troncamento prevedibile, essa consente un maggiore controllo.

Programma 4: Superplot

Genera a partire dai parametri dei risultati selezionati, i file con le informazioni (spessori degli strati e valori di riflettività e area efficace alle diverse energie) sulle soluzioni scelte. Genera inoltre un file di istruzioni che, passato al programma *gnuplot* [Williams, Hecking 2002], genera i grafici relativi ai risultati selezionati. Vengono anche creati dei file per il plot dei risultati delle singole sottocartelle.

Programma 5: Somma

Permette di sommare le aree efficaci ottenute al punto precedente, scegliendo, per ogni shell un'opportuna soluzione. In questo modo è possibile ottenere l'area efficace totale di un sistema di shell. Il programma fornisce anche i grafici delle somme parziali di shell ottenute dalla stessa FOM, in modo che sia possibile dall'osservazione di questi ricavare utili informazioni su correzioni da apportare alla scelta dei parametri per le diverse shell. (par.)

Programma accessorio: VBSum

E' stato inoltre realizzato un programma in *Visual Basic*, che permette attraverso un'interfaccia grafica, di visualizzare, a partire dai file ottenuti dal programma *Superplot*, i grafici di riflettività ed aree efficaci, mostrandone eventualmente la somma. Il programma è stato studiato per permettere una serie di operazioni finalizzate al confronto dei risultati come lo scorrimento rapido tra file della stessa cartella o l'attivazione/disattivazione della visualizzazione. L'operazione di confronto è molto utile per determinare la scelta di buoni parametri per il programma somma.

3.4 Risultati

3.4.1 Premesse

Utilizzando il software sviluppato ai capitoli precedenti si è condotta l'ottimizzazione delle ottiche per raggi X duri previste per HEXIT, XEUS I e Constellation-X/HXT. Le ottimizzazioni sono state effettuate considerando multilayer con strati di tungsteno-silicio, materiali che, per via della comprovata compatibilità chimica e delle buone prestazioni in riflettività, costituiscono uno standard in questo tipo di applicazioni. Tuttavia la presenza del bordo di assorbimento K del tungsteno a 70 keV riduce notevolmente la riflettività nella regione immediatamente superiore a tale energia. Tale regione è di notevole interesse astrofisico per via della presenza delle righe nucleari del ^{44}Ti a 68 e 78 keV, importante nello studio dei resti di supernova, e potrebbe essere recuperata utilizzando multilayer composti di materiali diversi da quelli considerati in questo lavoro. Un'alternativa promettente è offerta per esempio dalla coppia Pt/C che permetterebbe

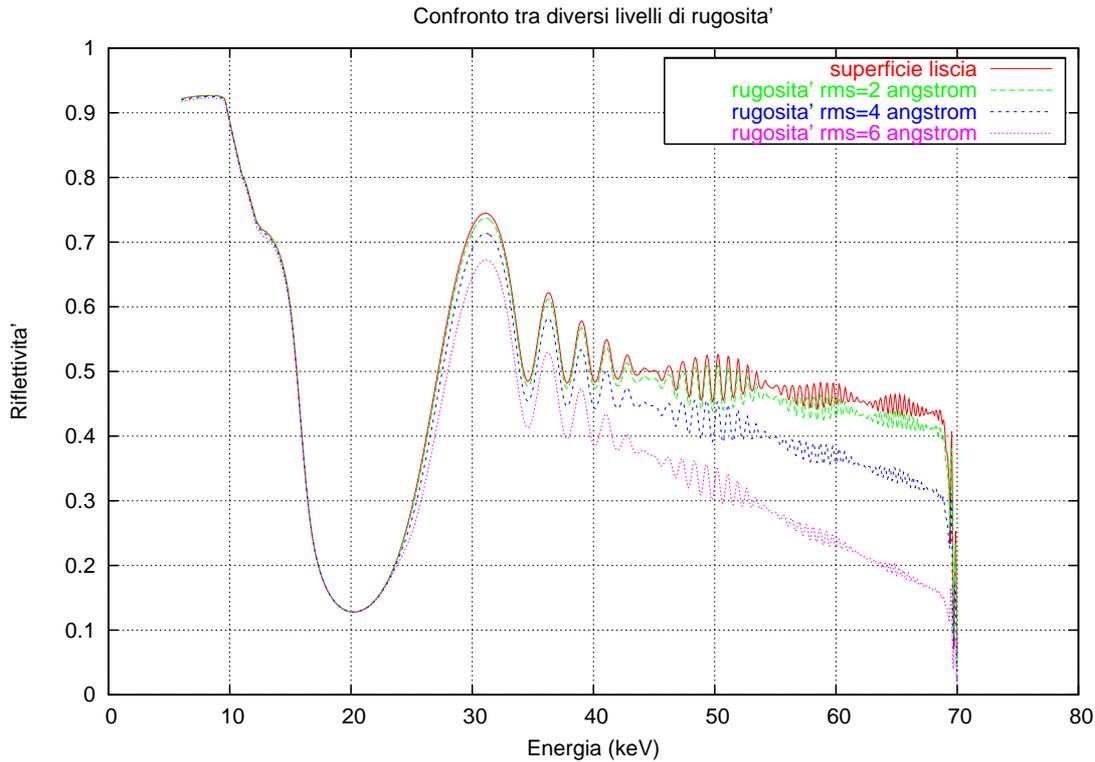


Figura 3.6: Effetto di diversi valori di rugosità (assunta uguale su tutti gli strati) sulla riflettività del multilayer, per un multilayer tra quelli ottenuti dall'ottimizzazione al par. 2.7.

di estendere il range osservativo fino agli 80 KeV dell'orlo di assorbimento del Pt. La combinazione W/Si tuttavia, oltre ad offrire una maggiore riflettività, in virtù del maggiore contrasto di densità, presenta caratteristiche particolarmente favorevoli per quel che riguarda la stabilità e le condizioni di deposizione. Uno studio particolareggiato di diverse combinazioni di materiali è presentato in [Ivan et al. 2000].

Nelle ottimizzazioni è stato assunto un valore di rugosità RMS conservativo di 4.5 \AA , è da notare che le attuali tecniche di deposizione permettono di raggiungere livelli più bassi di rugosità, per i quali sono già stati realizzati prototipi. Il valore della rugosità ha particolare importanza soprattutto per le prestazioni alle alte energie, come si può osservare dalla fig. 3.6.

Poste queste premesse, i fattori che determinano la curva di riflettività $\mathcal{R}(\mathcal{E})$ di una shell, sono, indipendentemente dalla situazione geometrica, il range energetico di calcolo e gli angoli di incidenza sulle shell. L'area efficace sarà poi ottenuta dalla formula¹ $A_{eff} = A_{coll} \mathcal{R}^2$, in cui A_{coll} dipende dalla geometria del telescopio. In particolare, i progetti Constellation-X ed HEXIT hanno shell che operano ad angoli simili (vedi tab. 3.1), ma nel secondo caso il range energetico è limitato inferiormente dall'assorbimento at-

¹per HEXIT bisognerà considerare la trasmissione atmosferica.

Tabella 3.1: Aspetti costruttivi delle tre missioni a confronto.

	HEXIT		Constellation X		XEUS	
Diametri min.-max. (cm)	11.23	23.94	8.86	35.00	151.30	350.50
angoli min.-max. (mrad)	2.34	4.99	1.11	4.37	3.78	8.76
aree di raccolta (1 shell) min.-max.(cm ²)	2.47	11.25	0.46	7.22	89.88	482.16
lunghezza specchi: primario - secondario (cm)	30	30	40	40	50	50
numero di moduli x shell	3x30		12x78		1x250	
geometria	shell integrali a doppio cono		Shell integrali Wolter I		shell Wolter I in segmenti	
metodo di realizzazione	replica diretta su Ni elettroformato		replica diretta o deposizione su foils approssimazione doppio cono		In fase di studio	
lunghezza focale (m)	6		10		50	

mosferico. Nel caso di XEUS, invece, le superfici riflettenti operano prevalentemente ad angoli differenti dagli altri due casi. La diversa natura dei problemi per quel che riguarda le caratteristiche del singolo telescopio come il numero di shell e moduli ottici rende inoltre conveniente approcci diversi, tuttavia, considerate le caratteristiche modulari del software sviluppato, è stato possibile utilizzare i programmi descritti al paragrafo precedente con relativamente poche modifiche.

Inizialmente si è studiata una serie di funzioni di prova applicate al caso di HEXIT, al fine di determinare gli effetti della scelta dei parametri della FOM sul tipo di risultati ottenuti. Le conclusioni tratte dall'esame dei risultati di queste ottimizzazioni forniscono indicazioni generali sulle scelte da adottare in base al tipo di risultati desiderati e saranno utilizzate nelle successive ottimizzazioni per HEXIT, XEUS I e Constellation X/HXT.

3.4.2 HEXIT

Le 30 shell confocali di ognuno dei tre moduli ottici di HEXIT operano ad angoli che vanno da 2.3 a 4.5 mrad, angoli per i quali si ha riflessione totale, per materiali come tungsteno o oro, rispettivamente fino a circa 35 keV e 18 keV. D'altro canto l'assorbimento atmosferico (fig. 3.2) impedisce la penetrazione di radiazione con energia minore di circa 20 keV, limitando di conseguenza la banda energetica operativa di HEXIT al di sopra di questo valore. Di ciò si è tenuto conto nella valutazione della FOM, l'area efficace è stata quindi moltiplicata per la trasmittività dell'aria secondo la formula:

$$A_{eff} = A_{coll} \mathcal{R}^2 T_{aria}$$

la FOM viene ottenuta come funzionale dell'area efficace risultante da questa operazione.

Per effettuare l'ottimizzazione si è suddiviso l'insieme di shell nidificate in 6 gruppi di 5 shell, ottimizzando sul diametro medio di ogni gruppo. Tale approccio è usuale in questo

tipo di problemi e permette di ridurre i tempi dell'ottimizzazione, senza pregiudicare troppo le prestazioni. Infatti la piccola differenza tra gli angoli di incidenza sulle singole shell di un gruppo e l'angolo d'incidenza medio comporta curve di riflettività molto simili per le diverse shell. Come esempio mostriamo in fig. 3.7 l'andamento di riflettività e area efficace in funzione dell'energia per le shell del gruppo più esterno, per una determinata scelta di spessori uguale per tutte le shell.

Le diverse figure di merito si distinguono tra loro principalmente per la forma matematica della FOM e per il range energetico su cui questa viene valutata. Riguardo al primo di questi fattori, il tipo più ovvio di figura di merito basate sull'area efficace è l'integrale di quest'ultima. In un caso più generale, la FOM si ottiene dall'integrazione dell'area efficace pesata per una qualche funzione dell'energia, nella forma:

$$FOM = \int_{\alpha}^{\beta} A_{eff} P(E) dE$$

con $P(E)$ funzione di peso. Ciò permette di privilegiare configurazioni con alta riflettività in determinate regioni spettrali (per esempio alle alte energie se si moltiplica l'area efficace per una potenza positiva dell'energia, come già fatto nel paragrafo 2.7).

Ottimizzazioni di prova e osservazioni generali Per mezzo del software **ISOXM**, la cui realizzazione è descritta in 3.3, si sono effettuate alcune ottimizzazioni di prova utilizzando diverse figure di merito applicate alle condizioni di HEXIT, al fine di determinare gli effetti sui risultati ottenuti con le diverse scelte dei parametri dell'ottimizzazione. Le funzioni di merito utilizzate sono riassunte nelle tabelle 3.2. Sono state sperimentate, su diversi intervalli di integrazione, tre funzioni (FOM da 1 a 3 in tab. 3.2) basate sull'integrazione dell'area efficace (comprensiva dell'assorbimento dell'aria) pesata con diverse potenze dell'Energia ed una quarta (FOM4), volta ad ottenere un'area efficace elevata il più possibile e allo stesso tempo costante sul range di valutazione. Il software permette di selezionare, secondo le opzioni descritte al par. 2.5.2, una serie di risultati, dei quali fornisce come risultato finale i grafici per Area efficace, riflettività e spessori degli strati. Inoltre permette utilizzare come dati di partenza per un'ottimizzazione i risultati ottenuti da una precedente, possibilità che sarà spesso sfruttata. Nel seguito sono riassunte alcune considerazioni generali ricavate dall'esame dei risultati delle ottimizzazioni di prova.

Convergenza dei risultati - numero di iterazioni Il numero di iterazioni richiesto per ottenere una convergenza accurata per ogni prova dell'algoritmo simplex può rivelarsi molto elevato. D'altro canto spesso non è determinante ottenere un grado di accuratezza elevatissimo, sia perchè questa è resa inutile a causa degli errori sugli spessori nel processo di deposizione dei multilayer, sia perchè può essere preferibile rinunciare ad un certo livello di precisione per riservare il tempo di calcolo ad una maggiore esplorazione dello spazio dei parametri, aumentando la probabilità di individuazione del minimo globale.

Un esempio di quanto detto è mostrato nel seguito in cui si analizza il comportamento dell'algoritmo sul caso pratico dell'ottimizzazione di HEXIT, secondo la funzione

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

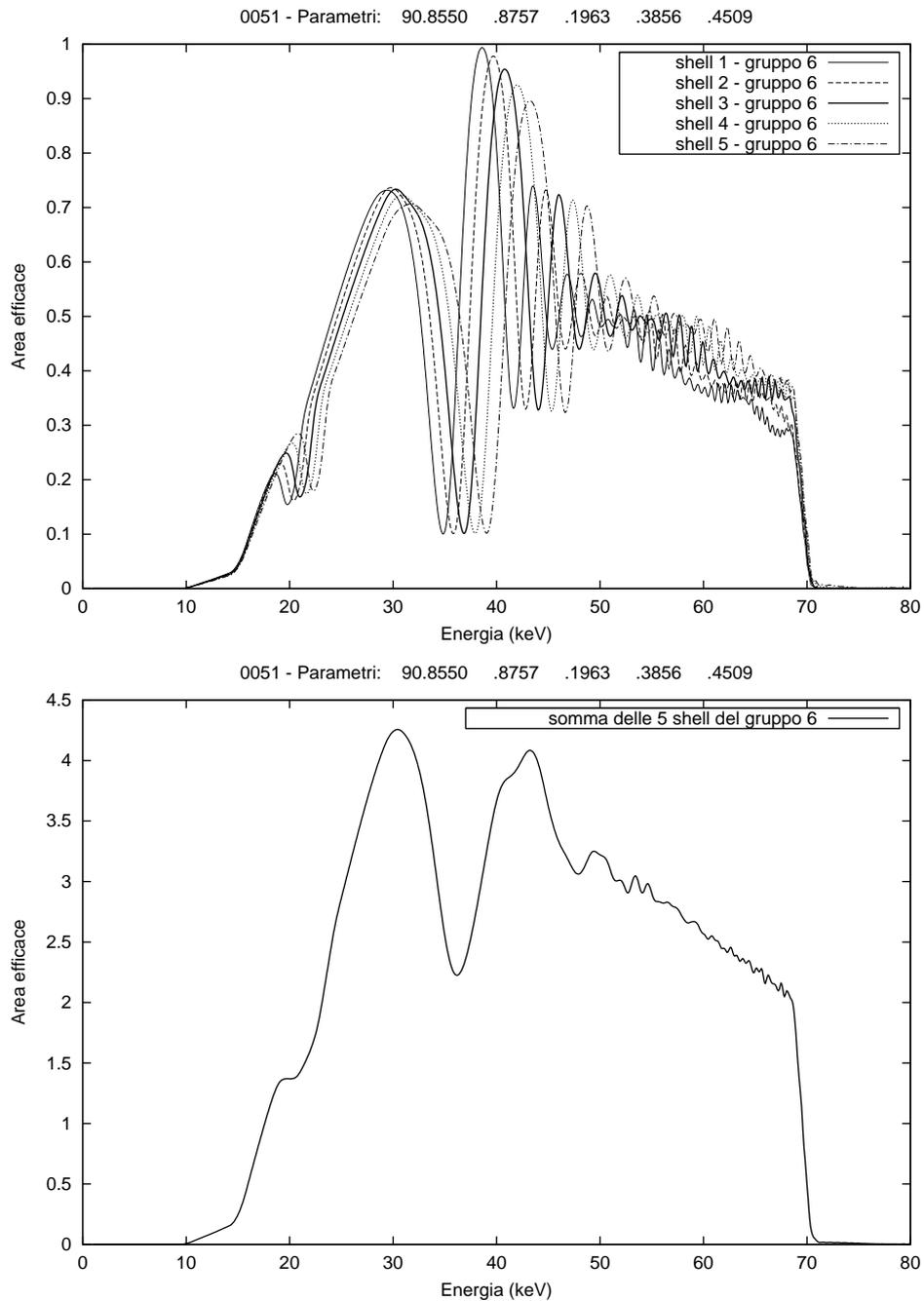


Figura 3.7: L'andamento della riflettività (quindi dell'area efficace) in funzione dell'energia è simile per shell dello stesso gruppo con uguali parametri di ottimizzazione. E' stato scelto di mostrare il gruppo 6 (shell più interne) perchè tale gruppo presenta la maggiore variazione di angolo per le shell all'interno di esso. E' anche mostrata la somma delle aree efficaci delle shell del gruppo, è evidente l'effetto di "livellamento" dei picchi ottenuto sommando le diverse curve.

# shell	diametro	angolo
1	23.94	4.99
2	23.38	4.87
3	22.82	4.75
4	22.28	4.64
5	21.75	4.53
media	22.83	4.76

Tabella 3.2: Descrizione delle FOM di prova utilizzate per HEXIT. Il numero nel nome della FOM indica la forma della funzione usata, la lettera la scelta dei parametri dell'ottimizzazione.

vera	$\int_{\alpha}^{\beta} A_{eff} \cdot E dE$			
α (keV)	15	15	15	15
β (keV)	70	70	70	30
# bistrati	250	180	150	250
# prove per gruppo	600	600	600	600
tempo di calcolo (h)	12	8.5	7.15	6
funzione	FOM1a	FOM1b	FOM1c	FOM1d

vera	$\int_{\alpha}^{\beta} A_{eff} \cdot E^2 dE$	$\int_{\alpha}^{\beta} \bar{A}^{-2} (A_{eff} - \bar{A})^2 dE$		
α (keV)	15	15	15	20
β (keV)	70	25	25	30
# bistrati	250	250	250	250
# prove per gruppo	300	100	300	300
tempo di calcolo (h)	8	10	6	6
funzione	FOM2a	FOM2b	FOM3a	FOM3b

La figura 3.8 riporta la distribuzioni dei punti relativi alle diverse *prove* dell'algoritmo simplex in varie fasi della procedura, fissate dal numero delle iterazioni. I risultati sono stati ottenuti effettuando l'ottimizzazione in fasi successive, ognuna delle quali con il numero massimo di iterazioni per ogni *prova* fissato a 100, utilizzando ogni volta i risultati della fase precedente come dati di partenza. Per ogni fase è mostrato un gruppo di quattro figure: le prime due riportano rispettivamente la distribuzione tridimensionale per i parametri a , b e c e quella bidimensionale di a e b (la relazione tra a e c , o tra b e c è simile), la terza mostra i valori di Γ del primo e dell'ultimo bistrato. Le figure rappresentano il migliore punto per ogni *prova* dell'algoritmo simplex e sono state ottenute dai file dei risultati di **ISOXM**, scrivendo un apposito file di comandi per gnuplot [Williams, Hecking 2002](già citato al par 2.4). La quarta figura di ogni blocco riporta l'istogramma del numero di risultati per valore della FOM, generato automaticamente dal programma **anris**. Le dimensioni della porzione dello spazio dei parametri rappresentata varia di figura in figura per includere tutti i punti considerati.

Il numero di iterazioni finale utilizzato per ottenere la convergenza con tolleranza 10^{-14} da parte di tutti i dati può essere considerato molto elevato e ha richiesto un lungo tempo di calcolo (dell'ordine della decina di ore). Si è ottenuta la convergenza con grande accuratezza (dell'ordine della tolleranza) di tutti i risultati su due punti di minimo con frequenza finale di 212 risultati per il primo (col più basso valore della FOM) e 88 per il secondo. Le figure (per esempio quella relativa alle 300 iterazioni) mostrano come durante l'esecuzione dell'algoritmo i punti si espandano, esplorando zone al di fuori della regione

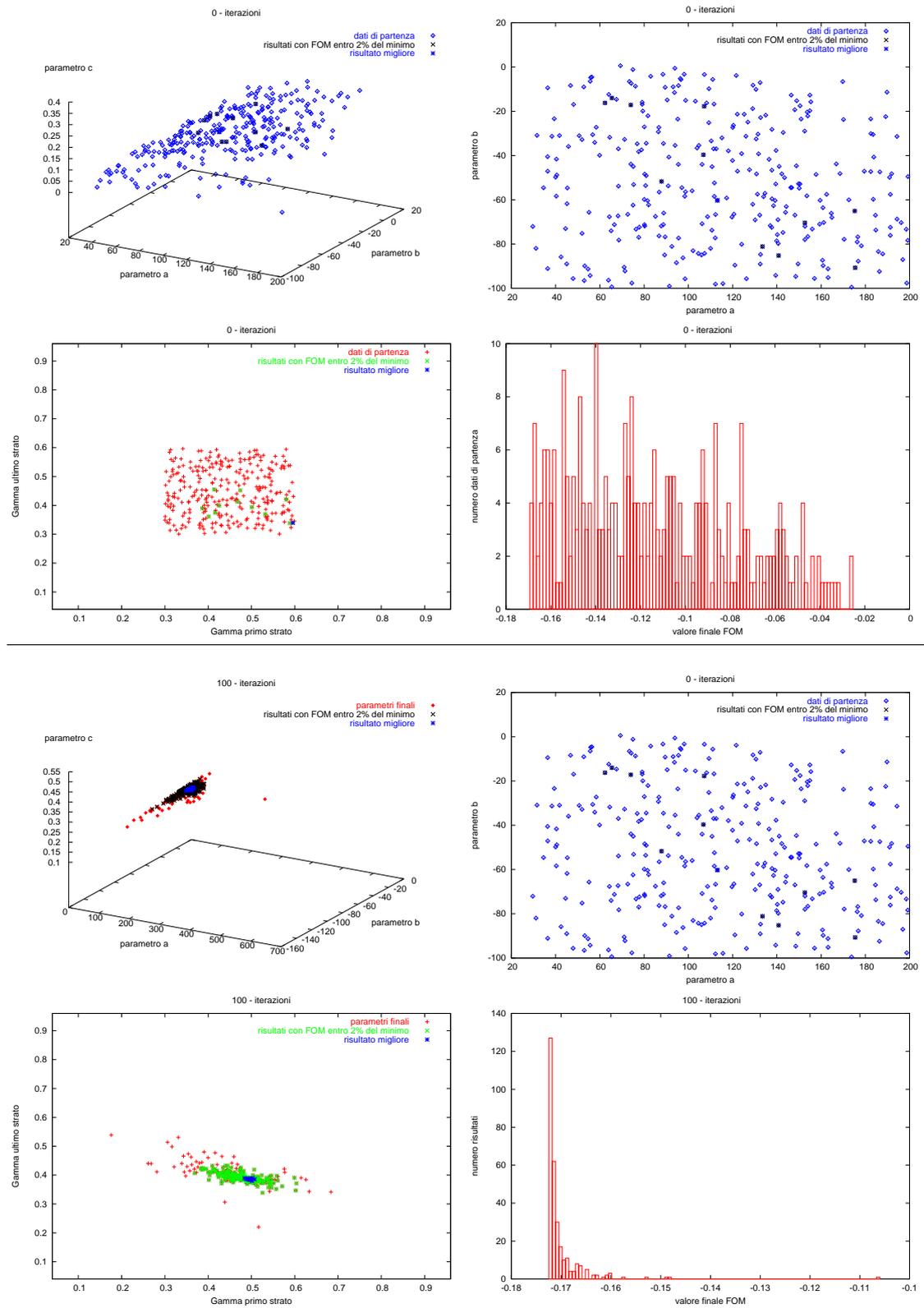
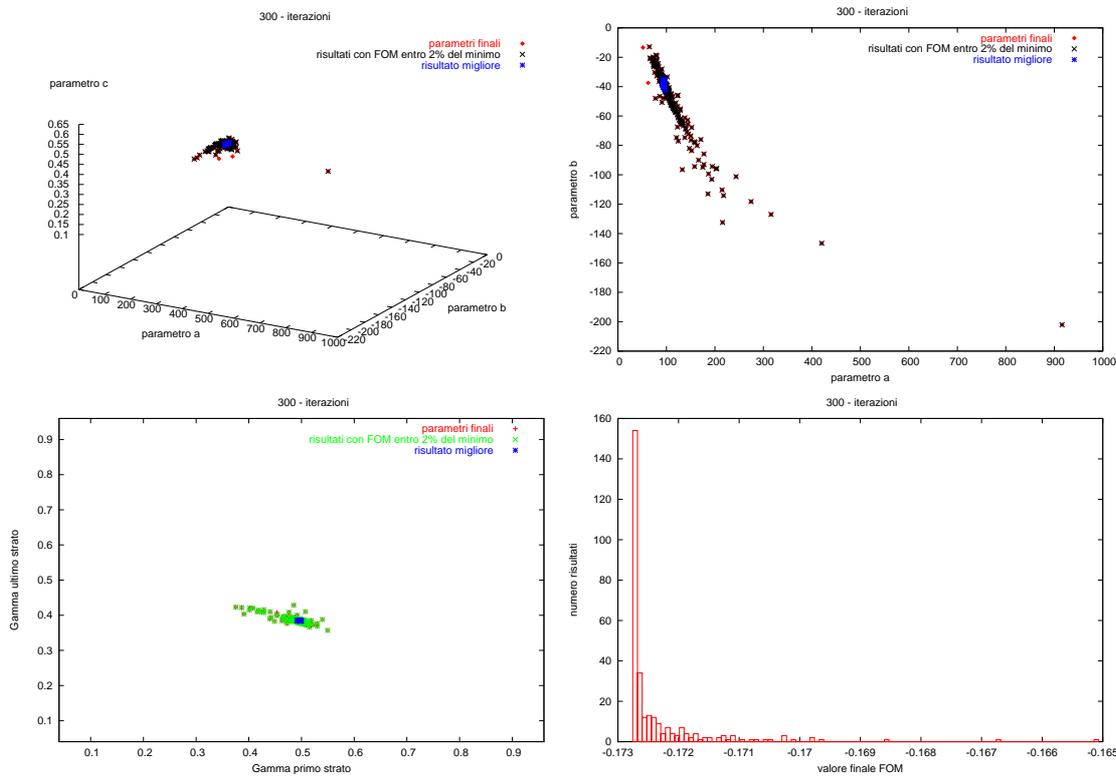
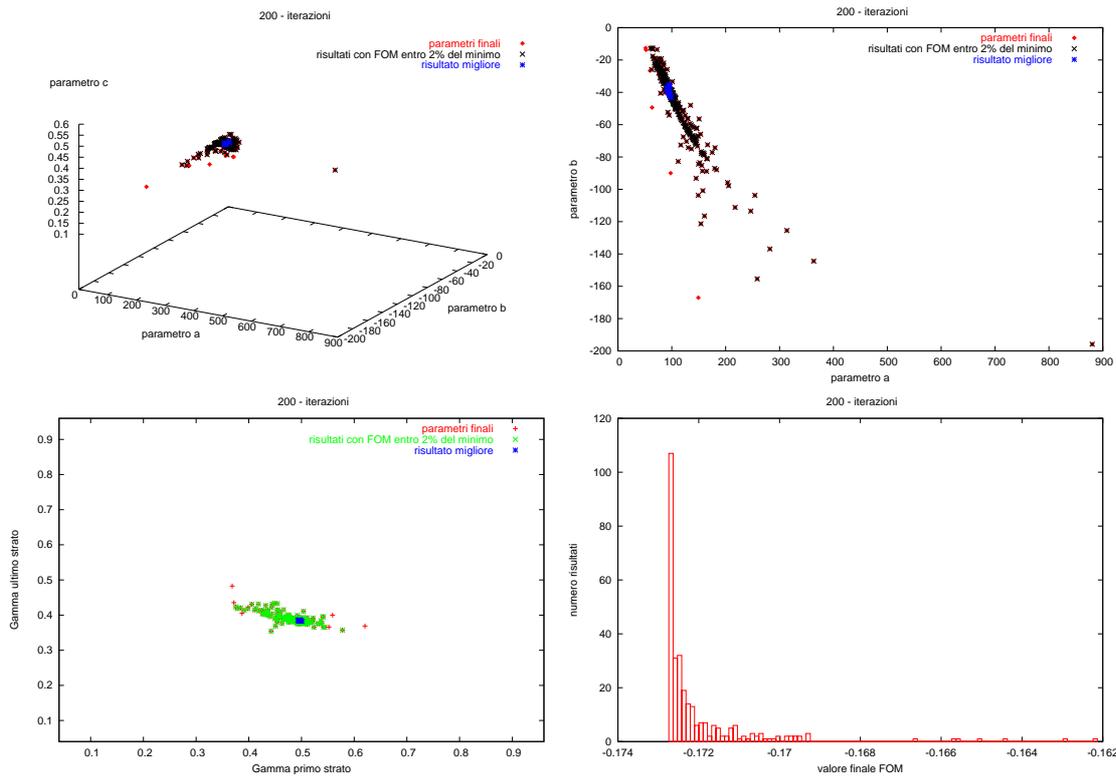
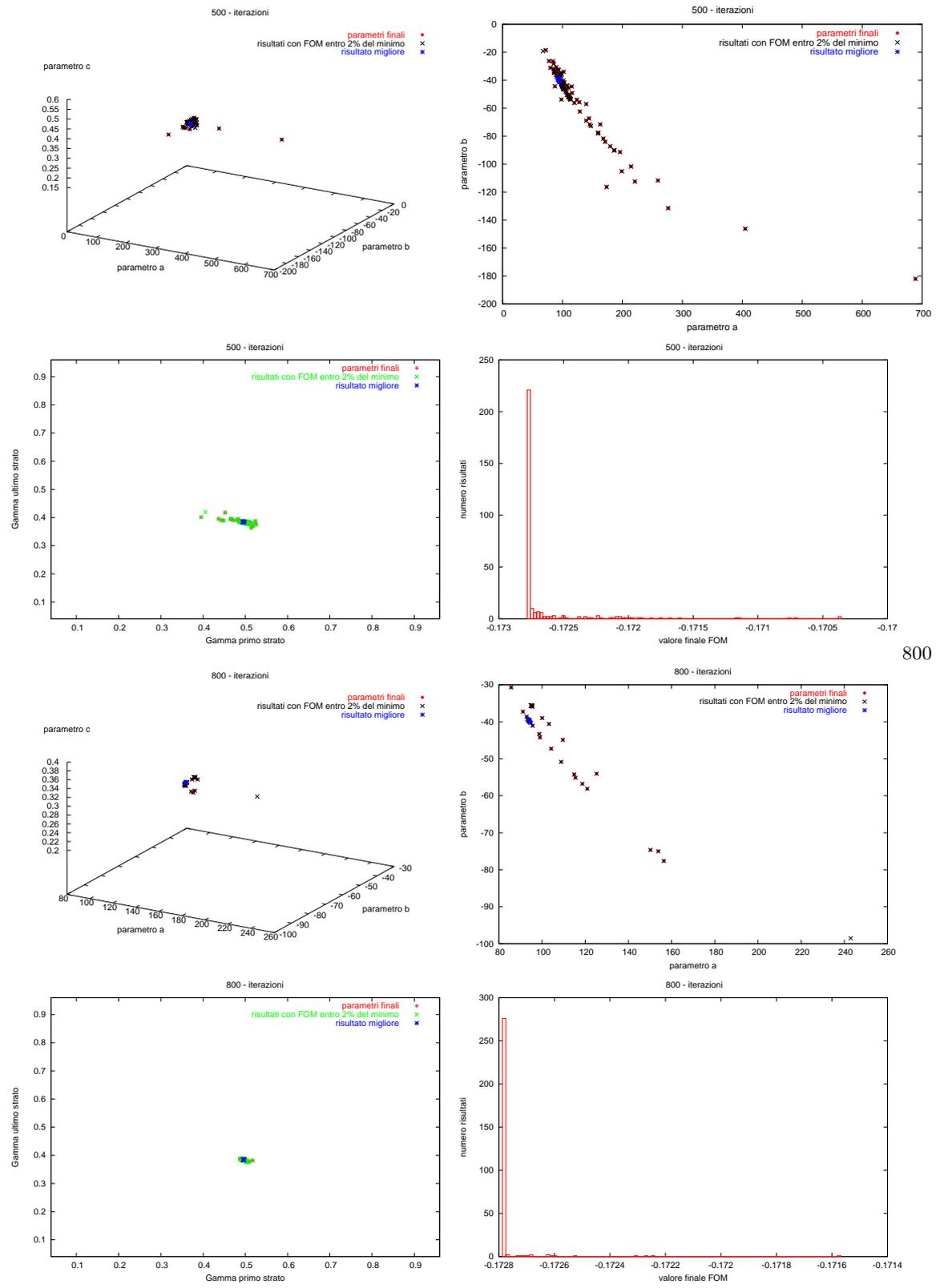
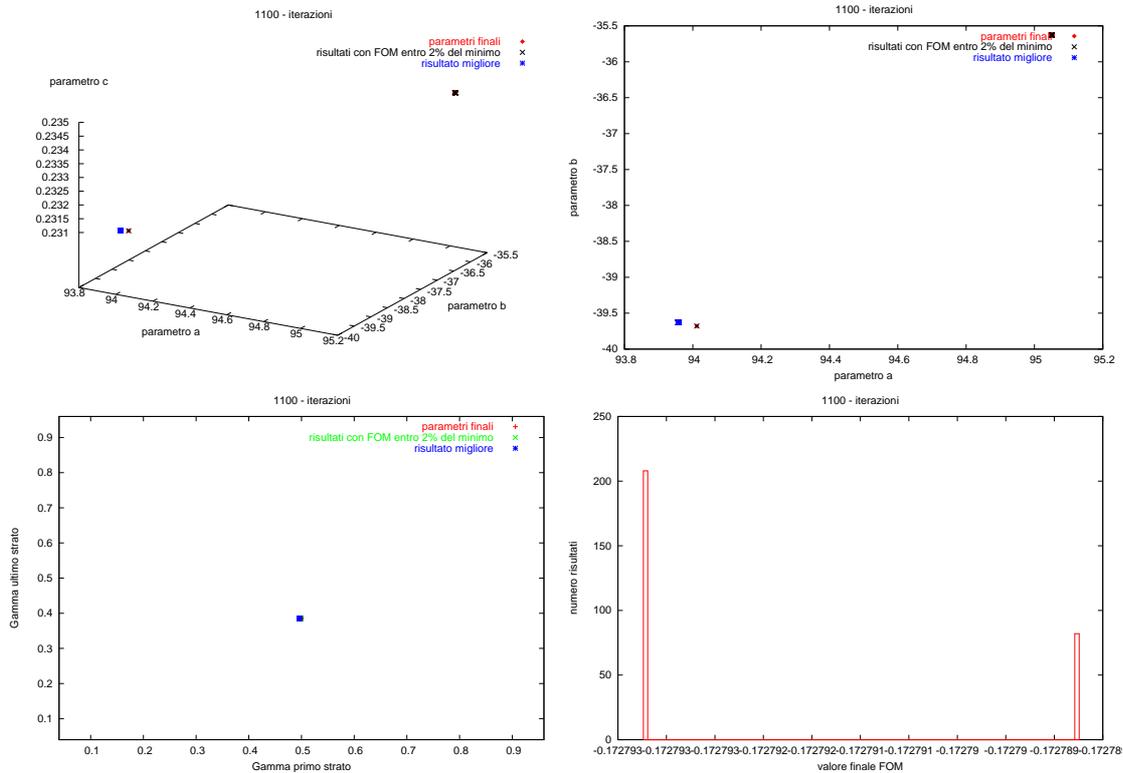
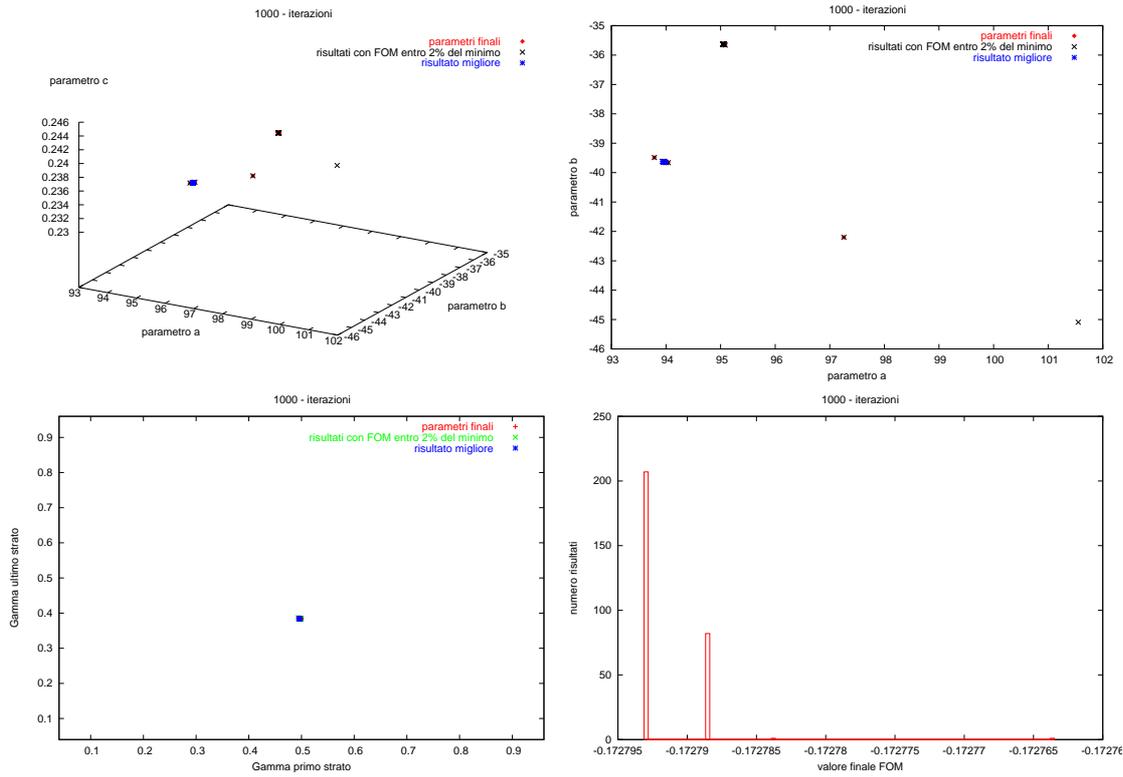


Figura 3.8: Evoluzione dei risultati per diversi numeri di iterazioni. La scala cambia per ogni figura racchiudendo la minima area che comprende tutti i punti (esclusa la terza di ogni gruppo rappresentante i valori di Γ per il primo e per l'ultimo strato). I numeri tra le figure indicano il numero di iterazioni relativo al gruppo di figure.







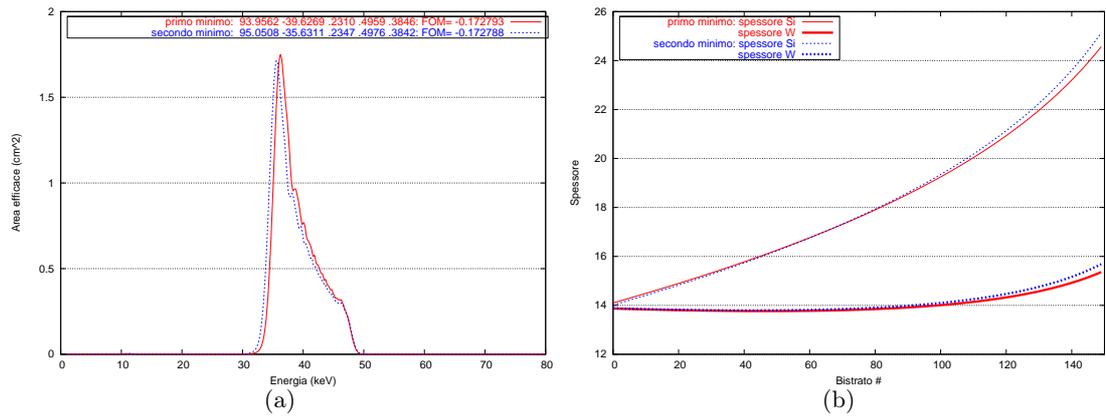


Figura 3.9: Confronto tra i due minimi individuati. La differenza tra i valori trovati è molto piccola sia in termini di valore della FOM che in termini di curve di riflettività (a). Le due soluzioni, sebbene numericamente differenti sono fisicamente identiche, come mostrato dal confronto degli spessori degli strati, per i quali la cui differenza nei due casi è nettamente inferiore alla precisione raggiungibile nella deposizione (dell'ordine dell'Å al massimo).

di origine, per poi retrocedere verso i tre minimi sopra menzionati. I minimi trovati sono molto vicini tra loro, sia come posizione nello spazio dei parametri, sia come valore della FOM, d'altronde la presenza di “valli” e “canali” ravvicinati è evidente dalla tendenza dei punti a radunarsi, nelle fasi intermedie, lungo linee parallele come si nota nelle figure che mostrano la relazione tra *a* e *b*. La figura 3.9 mostra le curve di riflettività associate ai valori dei due minimi.

E' da notare che un buon numero di punti converge verso il primo minimo (come si nota dall'osservazione degli istogrammi) già per un ridotto numero di iterazioni, per esempio 127 risultati già alla centesima iterazione. Il fatto che una qualsiasi delle singole esecuzioni del metodo simplex avrebbe condotto ad uno dei due risultati fisicamente identici (fatto che non poteva comunque essere predetto a priori), indica con molta probabilità¹ una scelta non felice delle dimensioni dello spazio dei parametri iniziali. In casi come questo può rivelarsi più efficiente effettuare un'ottimizzazione con un elevato numero di iterazioni, selezionando e successivamente affinando i risultati migliori. Questa strategia permette di esplorare una regione maggiore dello spazio dei parametri, aumentando la probabilità di individuare un minimo globale.

Risultati sul numero di strati I risultati ottenuti per diversi numeri di strati mostrano che l'influenza del numero di strati sulla curva di riflettività dipende fortemente dall'angolo. Esempi per gli specchi intermedi dei gruppi più esterno e più interno, ottimizzati secondo la figura di merito $FOM = \int_{15}^{70} A_{eff} E dE$ sono mostrati in fig. 3.11 e 3.10. Appa-

¹se si esclude l'esistenza di minimi molto stretti, quindi inutilizzabili nel caso pratico del design di multilayer, all'interno della regione campionata dai dati iniziali.

Tabella 3.3: Funzioni di merito utilizzate per l'ottimizzazione degli specchi di HEXIT. I tempi e i numeri di prove indicati sono quelli di prima esecuzione/raffinamento. L'ultima funzione riportata (FOM1c) è quella già calcolata all'inizio del paragrafo.

	$\int_{15}^{50} \frac{A_{eff}}{E} dE$	$\int_{15}^{70} A_{eff} dE$	$\int_{15}^{70} A_{eff} \cdot E^2 dE$	$\int_{60}^{70} \bar{A}^{-2} (A_{eff} - \bar{A})^2 dE$	$\int_{15}^{70} A_{eff} \cdot E dE$
# prove per gruppo	1000/300	1000/300	1000/300	1000/500	1000/300
tempo di calcolo (h)	2/8	1/7	1/10	3/15	2/10
funzione	FOM4	FOM5	FOM6	FOM7	FOM1c

re evidente come, mentre per gli strati più esterni un maggiore numero di strati consente di ottenere una banda di riflessione più larga, per quelli più interni il risultato ottenuto è lo stesso per i diversi numeri di strati sperimentati. La causa di ciò è da attribuire al fatto che, a parità di energia di riflessione, dalla legge di Bragg $nd\cos\theta = m\lambda$, per angoli minori occorrono spessori maggiori, con la conseguente penetrazione della radiazione attraverso un minor numero di strati. Sotto tali condizioni solo gli strati più esterni partecipano alla riflessione, rendendo superfluo, anche grazie alla maggiore riflettività dovuta al basso angolo di incidenza, l'utilizzo di un elevato numero di strati.

Ottimizzazione degli specchi di HEXIT

L'ottimizzazione degli specchi di HEXIT è stata effettuata utilizzando diverse funzioni di merito ritenute, in base alle considerazioni dei precedenti paragrafi, particolarmente adatte al problema, cercando di utilizzare funzioni di merito tra loro complementari sul range energetico trattato. Sfruttando la capacità del software **ISOXM** di effettuare nuove ottimizzazioni a partire da selezioni dei risultati di ottimizzazioni precedenti, si è seguito l'approccio di condurre una prima ottimizzazione utilizzando diversi gruppi di FOM e un ridotto numero (50) di iterazioni per ogni prova del simplex, selezionando e raffinando i risultati migliori. Sono stati considerati multilayer composti da 150 bistrati. I risultati ottenuti dalla FOM1c, citata nel paragrafo precedente, sono stati inclusi nella valutazione. Inoltre sono state considerate quattro FOM, le cui caratteristiche sono riassunte in tabella 3.3.

Le funzioni utilizzate privilegiano soluzioni con determinate caratteristiche. In particolare la FOM4 favorisce soluzioni con alta riflettività alle basse energie, la FOM7 è stata scelta invece in modo da favorire un'alta riflettività con risposta piatta nella banda tra 60 e 70 KeV, banda il cui le prestazioni sono tipicamente più basse, ma che ha grande interesse astrofisico (3.1). Per le altre funzioni l'intervallo di integrazione è stato fatto coincidere con l'intera banda energetica operativa di HEXIT, al fine di consentire la scelta delle soluzioni più performanti in relazione all'angolo di incidenza associato ad ogni shell. Le migliori soluzioni trovate per i diversi gruppi di shell e le diverse FOM sono riassunte in fig. 3.12.

I risultati ottenuti sono stati applicati alle diverse shell di ogni gruppo ottenendo la risposta della singola shell. Si è proceduto effettuando, con il programma *somma* di

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

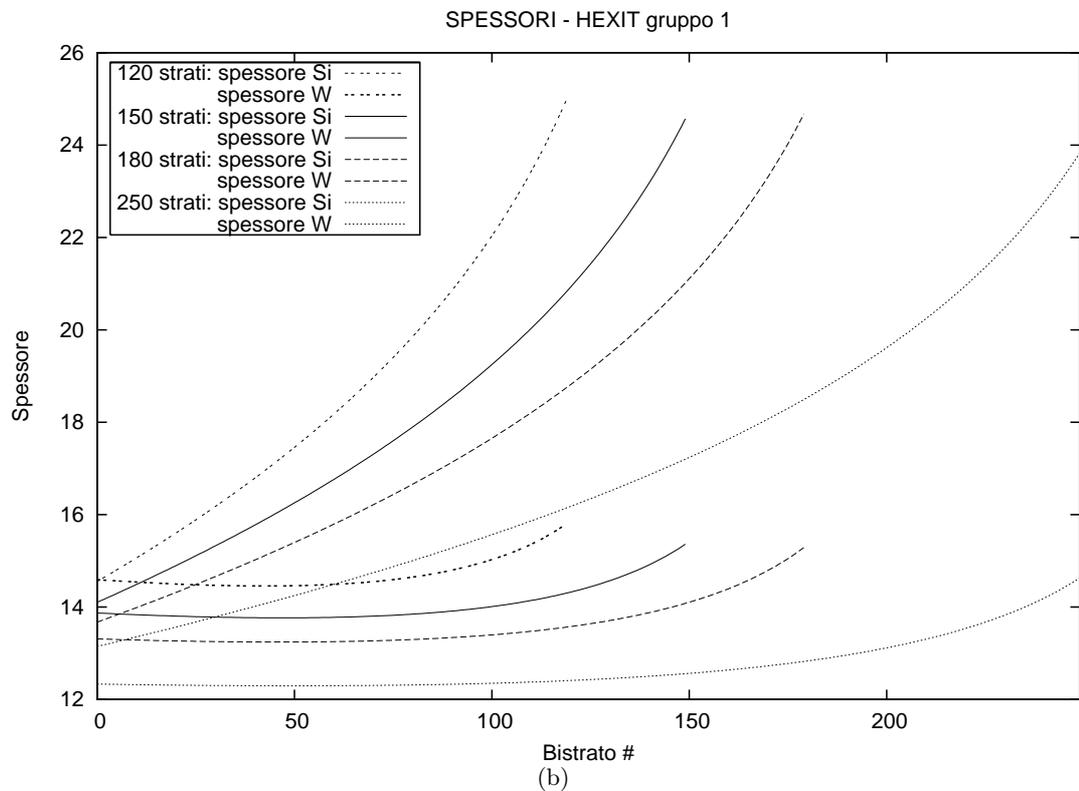
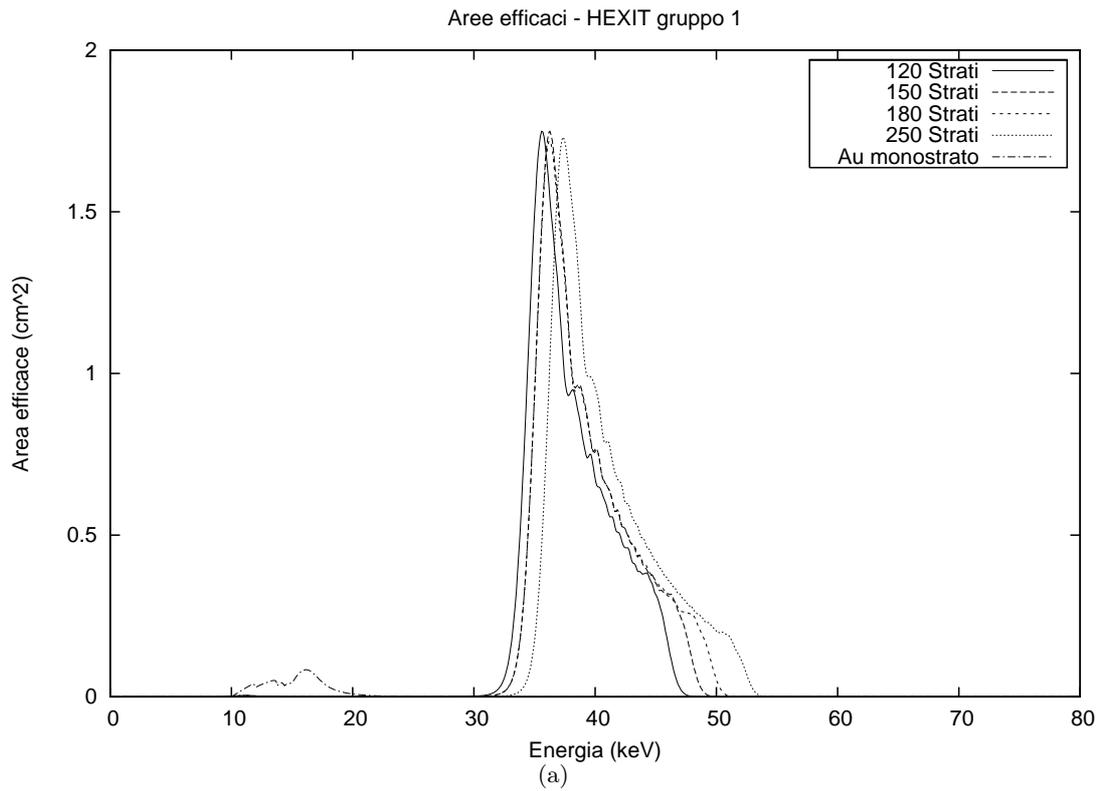


Figura 3.10: Risultati di ottimizzazioni con diversi numeri di strati sul gruppo di shell più esterne. Un numero maggiore di strati permette di ottenere una banda di riflettività più larga (a). La lieve differenza nella posizione del picco alla minima energia di riflessione corrisponde alla differenza in (b) tra gli spessori degli strati esterni (più spessi), la differenza tra le energie massime di riflessione a quelli interni (più sottili).

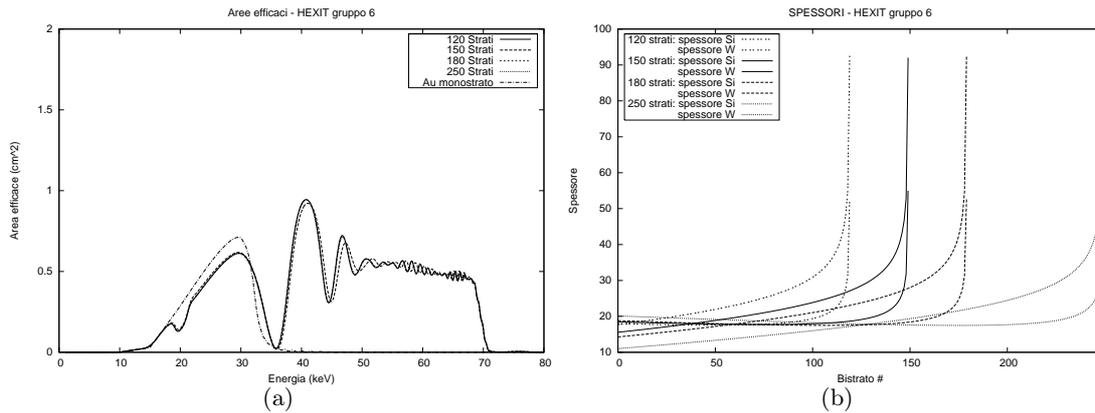


Figura 3.11: Nel caso del gruppo di shell più interne la curva di riflettività risulta, per i casi sperimentati, pressochè indipendente dal numero degli strati (a). Gli spessori ottenuti per gli strati esterni sono uguali nei vari casi. Ciò indica che gli strati più interni non partecipano alla riflessione.

ISOXM, la somma delle aree efficaci ottenute per le singole shell, per simulare l'area efficace totale del sistema di shell nidificate che compongono ognuno dei tre moduli ottici di HEXIT.

Le diverse funzioni di merito individuano configurazioni con risposta più o meno alta nelle diverse regioni spettrali. Sono state selezionate tre soluzioni particolarmente interessanti ottenute dalle FOM4, FOM5 e FOM7, che presentano una maggiore area efficace rispettivamente alle basse, medie ed alte energie.

I risultati ottenuti sulle somme sono mostrati in fig. 3.13, 3.14 e 3.15. E' pensabile che i tre moduli ottici di HEXIT possano essere ottimizzati diversamente l'uno dall'altro

3.4.3 Constellation X

La missione Constellation X prevede l'impiego di 75 shell basate su specchi multilayer. Per un tale numero di shell l'approccio all'ottimizzazione basato sulla suddivisione delle shell in piccoli gruppi di shell può richiedere un lungo tempo di elaborazione, mentre l'utilizzo di gruppi composti da un numero maggiore di shell può rivelarsi poco accurato a causa della differenza di angoli non trascurabile tra shell dello stesso gruppo. Per questi motivi si è provato a seguire una procedura che prevede l'ottimizzazione di ogni singola shell a partire dai migliori risultati ottenuti per la shell precedente. E' logico ipotizzare per shell vicine una variazione dei parametri ottimali, non eccessiva, motivo per cui un tale approccio può consentire l'ottimizzazione di ogni singola shell in tempi ridotti. A tale fine il programma *multifomIS* di **ISOXM** è stato adattato in modo da utilizzare

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

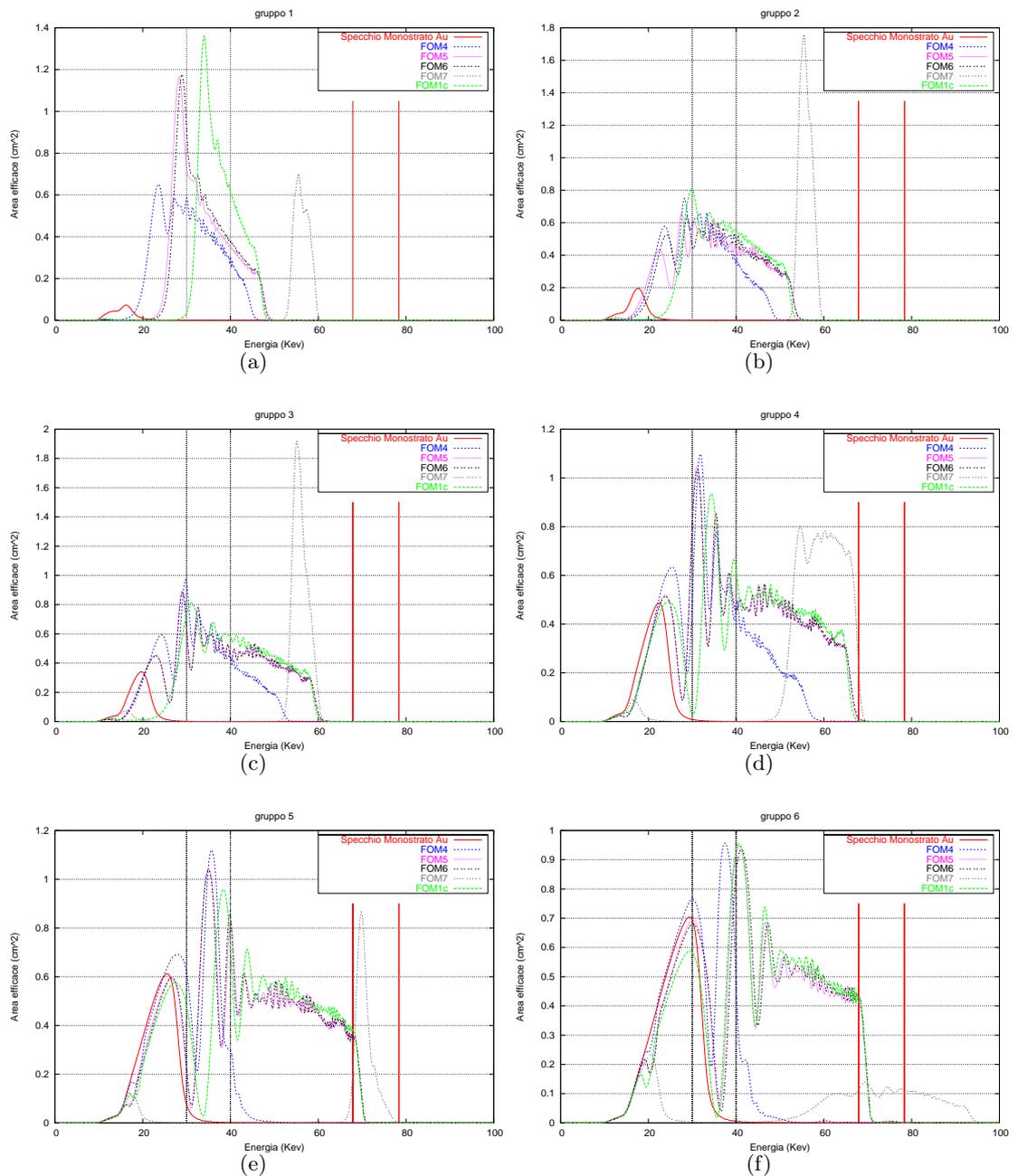


Figura 3.12: Risultati ottenuti per i gruppi di shell dal più esterno (a) al più interno (f). Le diverse curve in ogni figura indicano i risultati ottenuti con le diverse FOM. Nelle figure sono indicate le posizioni delle righe nucleari del ^{44}Ti a 67.9 e 78.4 keV e la regione di picco del background X da 30 a 40 keV. Nelle figure è anche mostrata la riflettività di uno specchio monostrato in oro.

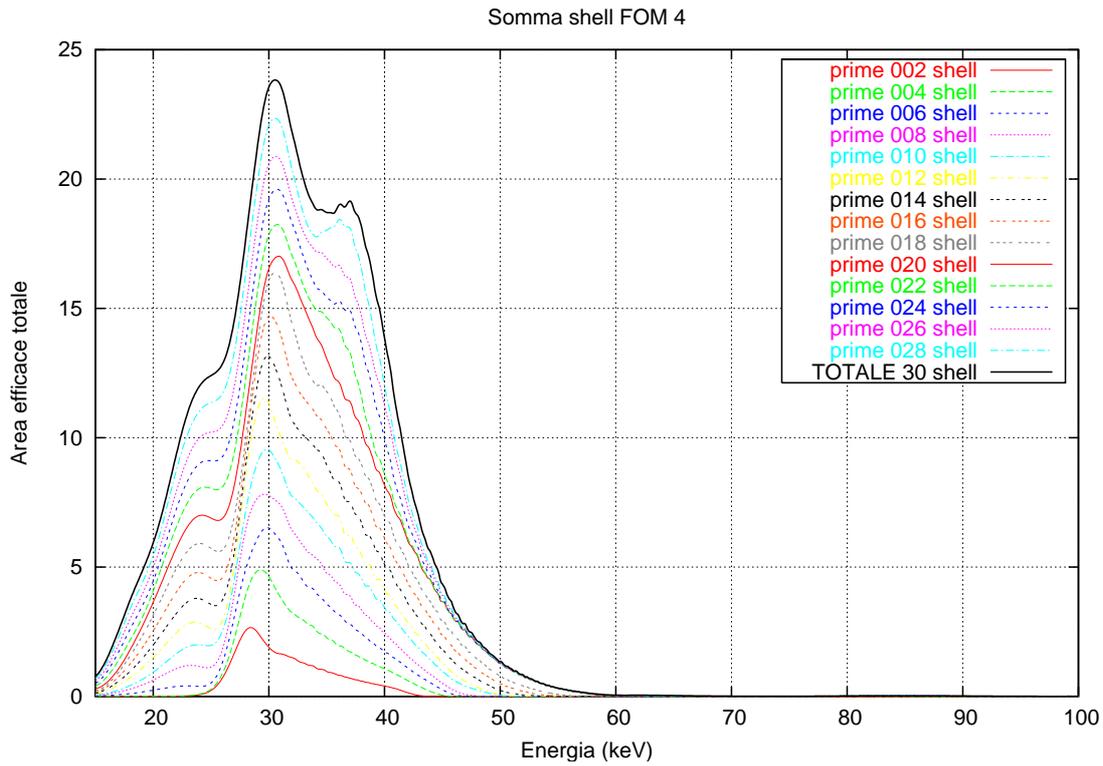


Figura 3.13: (a) Area efficace ottenuta dalla somma delle 30 shell di HEXIT ottimizzate secondo la FOM4. Il risultato si presta all'osservazione delle basse energie nella regione spettrale appena superiore al limite fissato dall'assorbimento atmosferico. I contorni di diversi colori indicano i valori delle aree efficaci per gruppi parziali di shell.

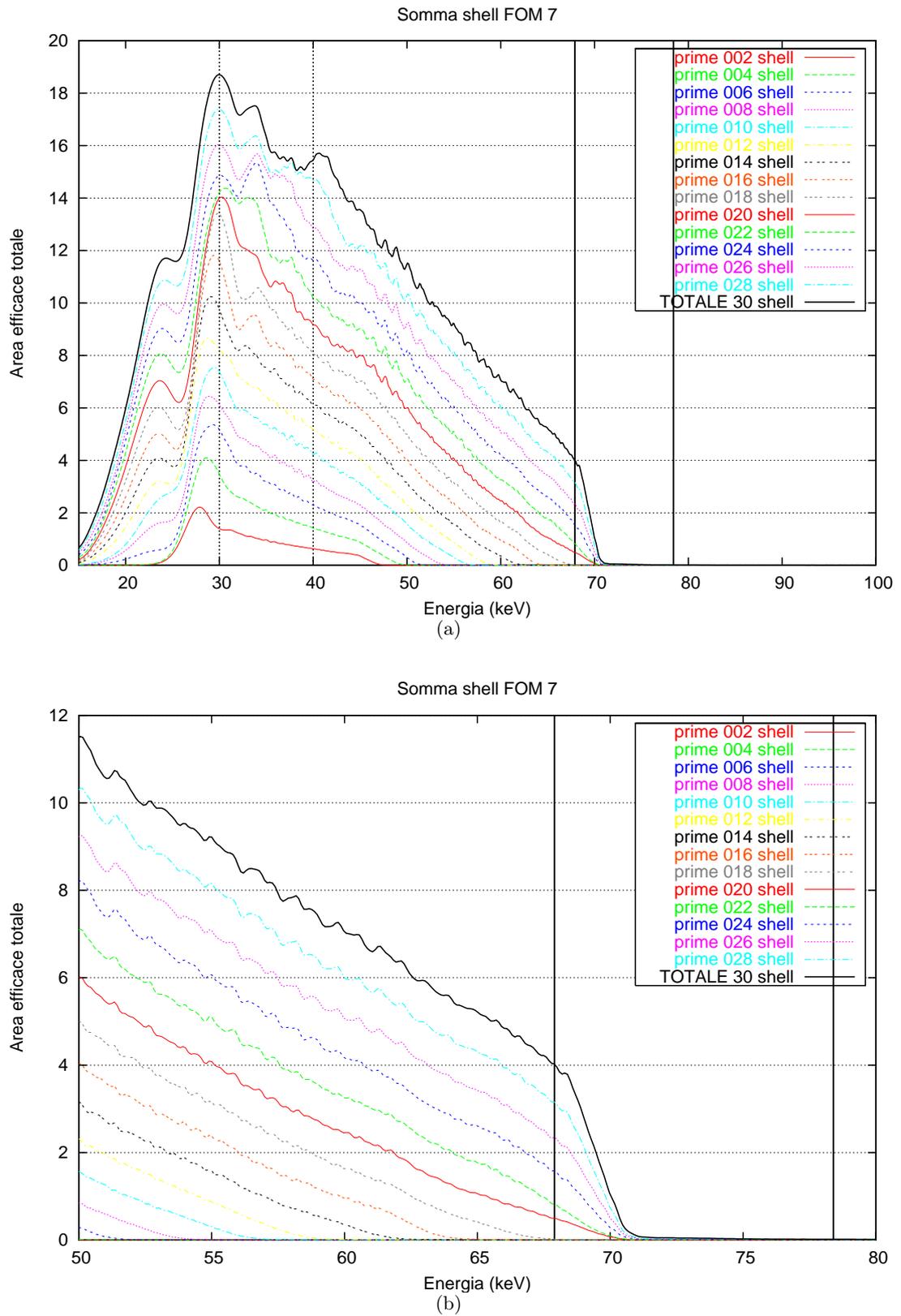


Figura 3.14: (a) Area efficace ottenuta dalla somma delle 30 shell di HEXIT ottimizzate secondo la FOM6. Il sistema offre una buona risposta su tutto il range energetico. In (b) è mostrato il dettaglio alle energie tra 60 e 80 keV.

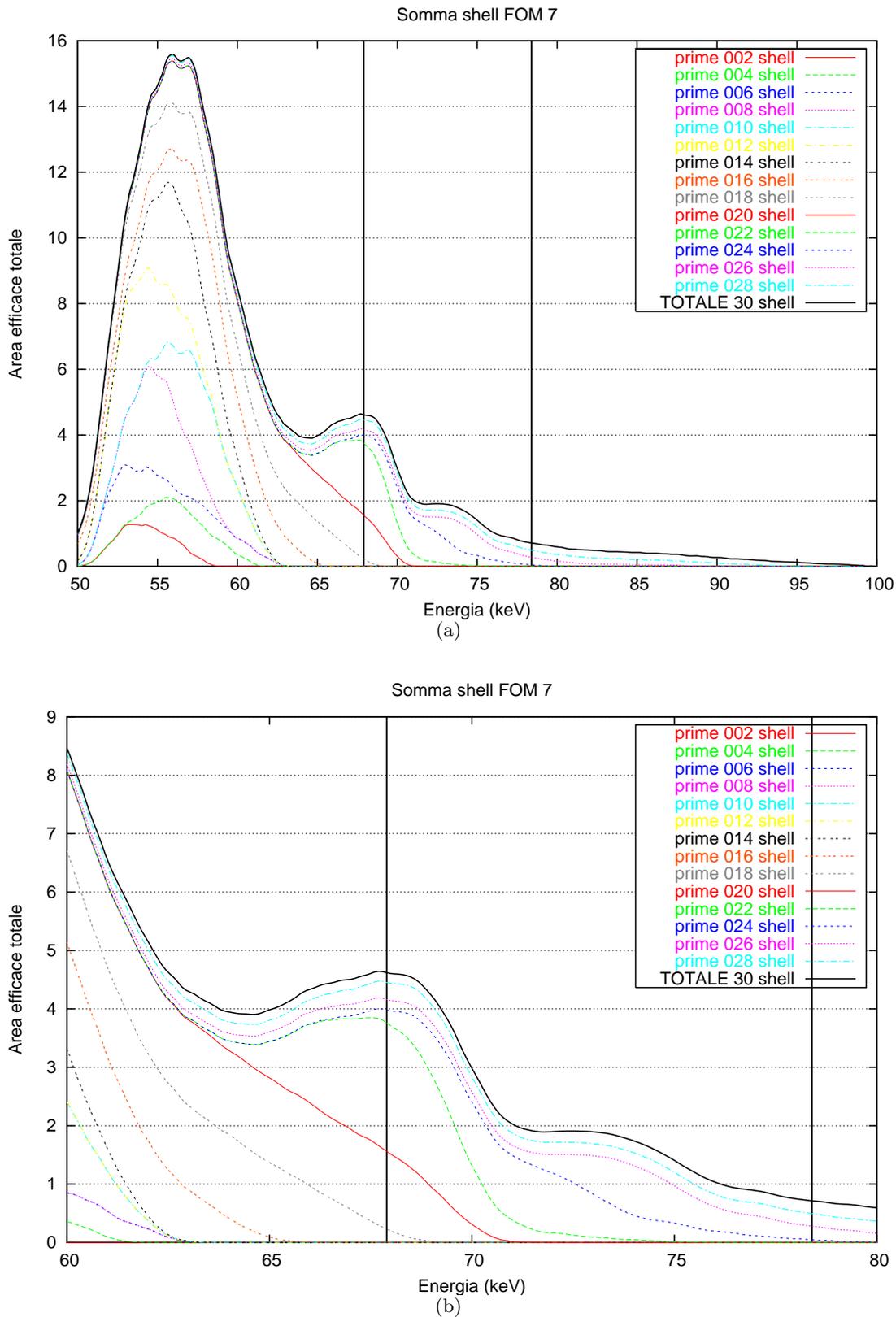


Figura 3.15: (a) Area efficace ottenuta dalla somma delle 30 shell di HEXIT ottimizzate secondo la FOM7. Il risultato dimostra la possibilità di utilizzare HEXIT per osservazioni alle alte energie. Il limite superiore è fissato intorno ai 70 keV dalla presenza del bordo di assorbimento K del W. In (b) è mostrato il dettaglio alle energie tra 60 e 80 keV. Sono indicate le posizioni delle linee di decadimento nucleare del ^{44}Ti .

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

come dati di partenza per l'ottimizzazione di ogni shell, il *set*¹ di risultati ottenuti dalla selezione dei risultati per la shell precedente.

L'ottimizzazione è stata effettuata utilizzando esclusivamente funzioni di merito basate sulla formula $\int A_{eff} \cdot E^2 dE$ e tra loro differenti per la scelta degli estremi di integrazione, al fine di ottenere i valori di ottimizzazione che comportino un'elevata area efficace su ristretti intervalli del range energetico. La procedura seguita può essere suddivisa nelle seguenti fasi:

- Si è effettuata un'ottimizzazione sulla prima shell utilizzando diversi intervalli di integrazione. Per ogni intervallo di integrazione si sono selezionati i migliori risultati, corrispondenti a diversi minimi locali.
- Si è effettuata l'ottimizzazione delle singole shell in sequenza a partire dai risultati ricavato al punto precedente, ottenendo un *set* di risultati per ogni dato di partenza.
- Utilizzando il programma *somma* di **ISOXM** è possibile sommare le aree efficaci in funzione dell'energia, selezionando, attraverso un file di impostazioni, il set ed la FOM per ogni shell.

Le FOM utilizzate sono:

FOM	estremo inferiore	estremo superiore
FOM1	65	85
FOM2	30	80
FOM3	50	85
FOM4	50	100
FOM5	45	70

Esempi di aree efficaci per le sequenze di risultati ottenuti, sono mostrate in fig. 3.16 e 3.17, rispettivamente per le FOM 2 e 4.

Sono stati verificati controlli a campione per verificare l'efficacia dell'ottimizzazione eseguita sequenzialmente, verificando, con buona approssimazione la coincidenza dei risultati ottenuti in questo modo con quelli ottenuti dall'ottimizzazione sequenziale. In fig. 3.18 uno di questi controlli effettuato sulla shell 35, ottimizzata con la FOM2.

In figura sono presentate le somme delle aree efficaci per tutte le shell per i valori ottenuti utilizzando le funzioni di merito sopra descritte.

Area efficace totale

3.4.4 XEUS

La strategia di ottimizzazione seguita nel caso di XEUS è la stessa usata nel caso di Constellation-X.

¹inteso come un insieme ristretto dei migliori risultati ottenuti, corrispondenti ognuno ad un minimo locale della funzione di merito.

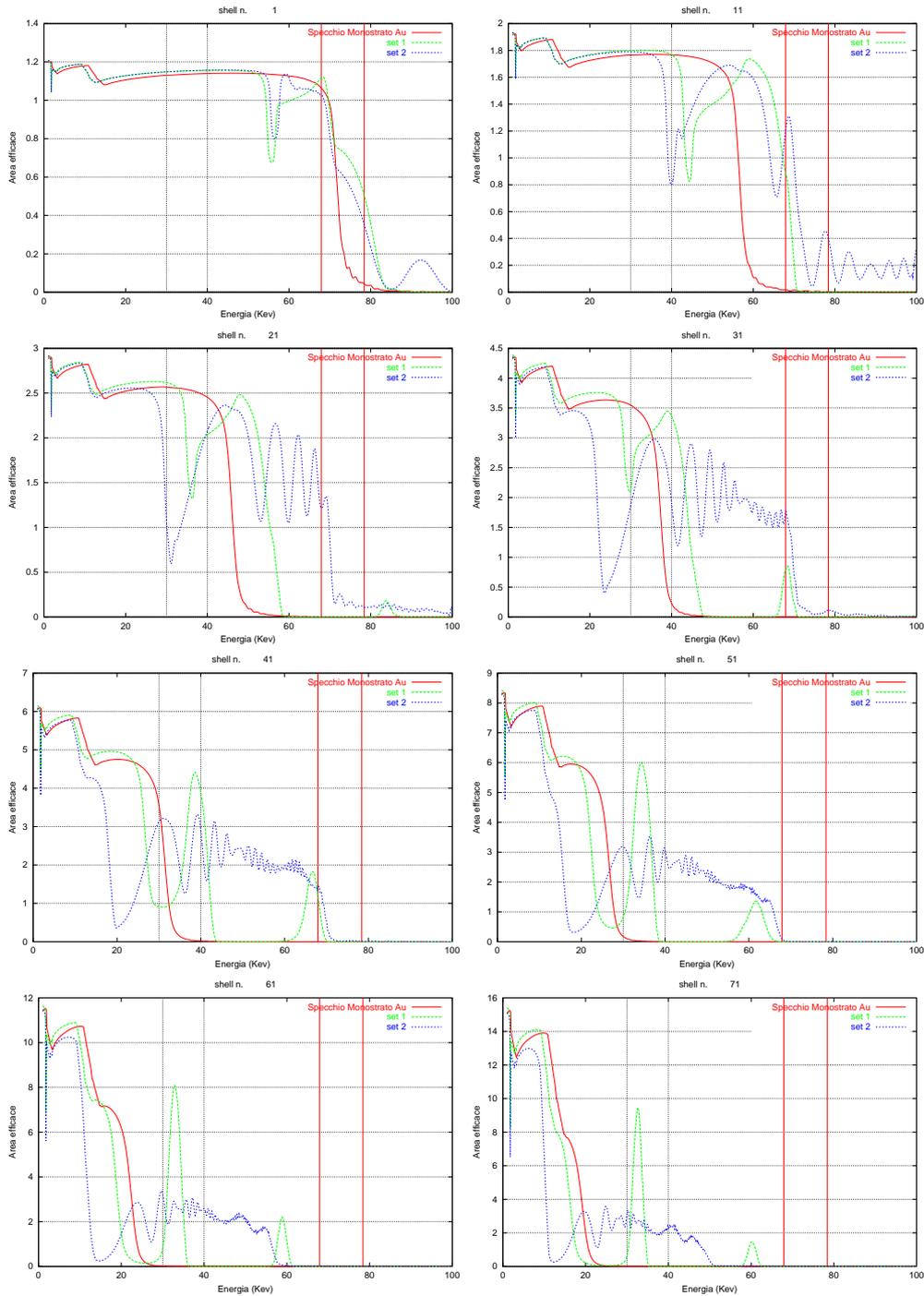


Figura 3.16: Risultati per alcune shell della sequenza (1, 11, 21, 31, 41, 51, 61, 71) ottenuti utilizzando la FOM2. E' mostrato un set di due risultati, il programma ISOMX offre le possibilità di: 1) sommare individualmente il primo o il secondo risultato per ogni shell; 2) sommare il migliore risultato tra i due per ogni shell; 3) selezionare da impostazioni il set e la FOM per ogni shell.

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

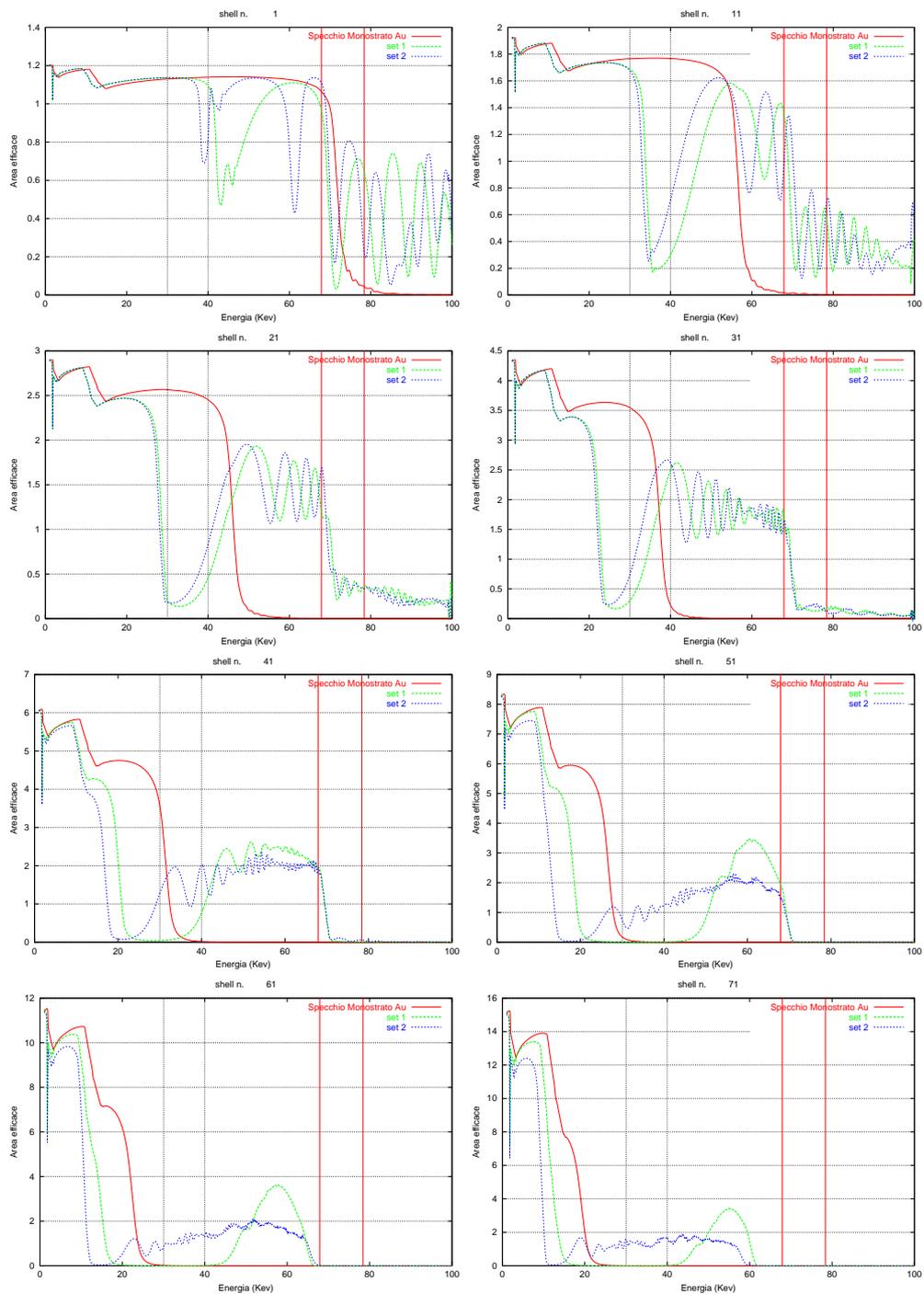


Figura 3.17: Risultati per alcune shell della sequenza (1, 11, 21, 31, 41, 51, 61, 71) ottenuti utilizzando la FOM4. E' interessante notare come per gli angoli in gioco sulle shell più interne sia possibile ottenere riflettività apprezzabile anche per energie superiori a quella del bordo di assorbimento del tungsteno.

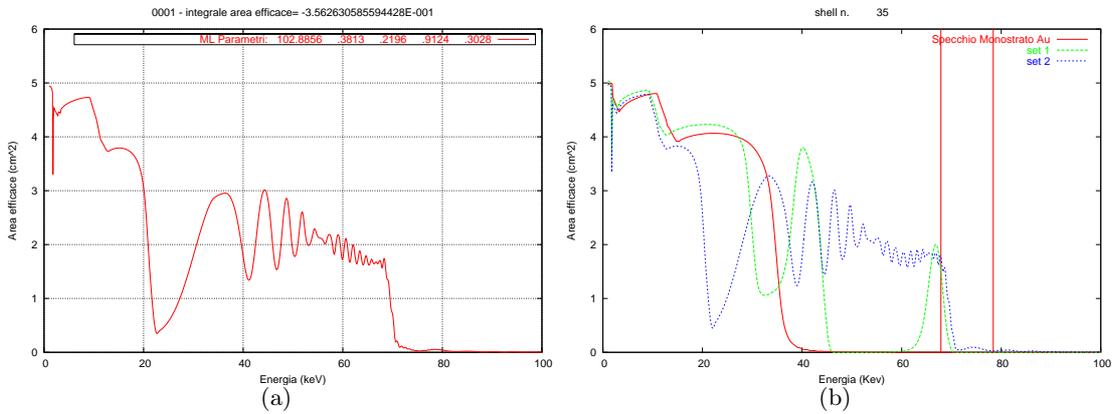


Figura 3.18: (a) Area efficace di una shell ottenuta dall'ottimizzazione singola. (b) Risultati appartenenti a due *set* per la stessa shell ottimizzata sequenzialmente.

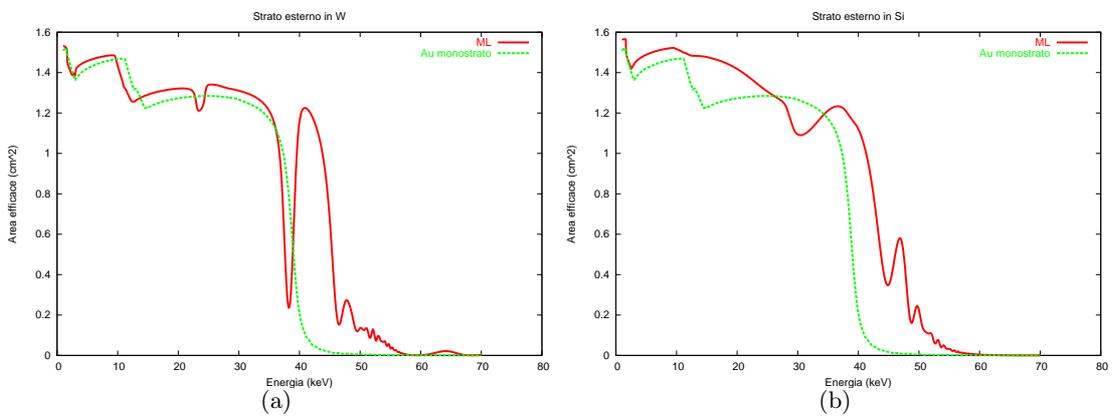


Figura 3.19: Confronto tra i risultati di un'ottimizzazione con range di integrazione fino a 50 keV, nei casi: (a) normale disposizione degli strati, sequenza W-Si con W esterno, (b) Strato di Si esterno. Il Si lascia penetrare la radiazione, influenzando relativamente poco sulle alte energie, ma innalza l'area efficace alle basse energie in virtù della riflessione totale.

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

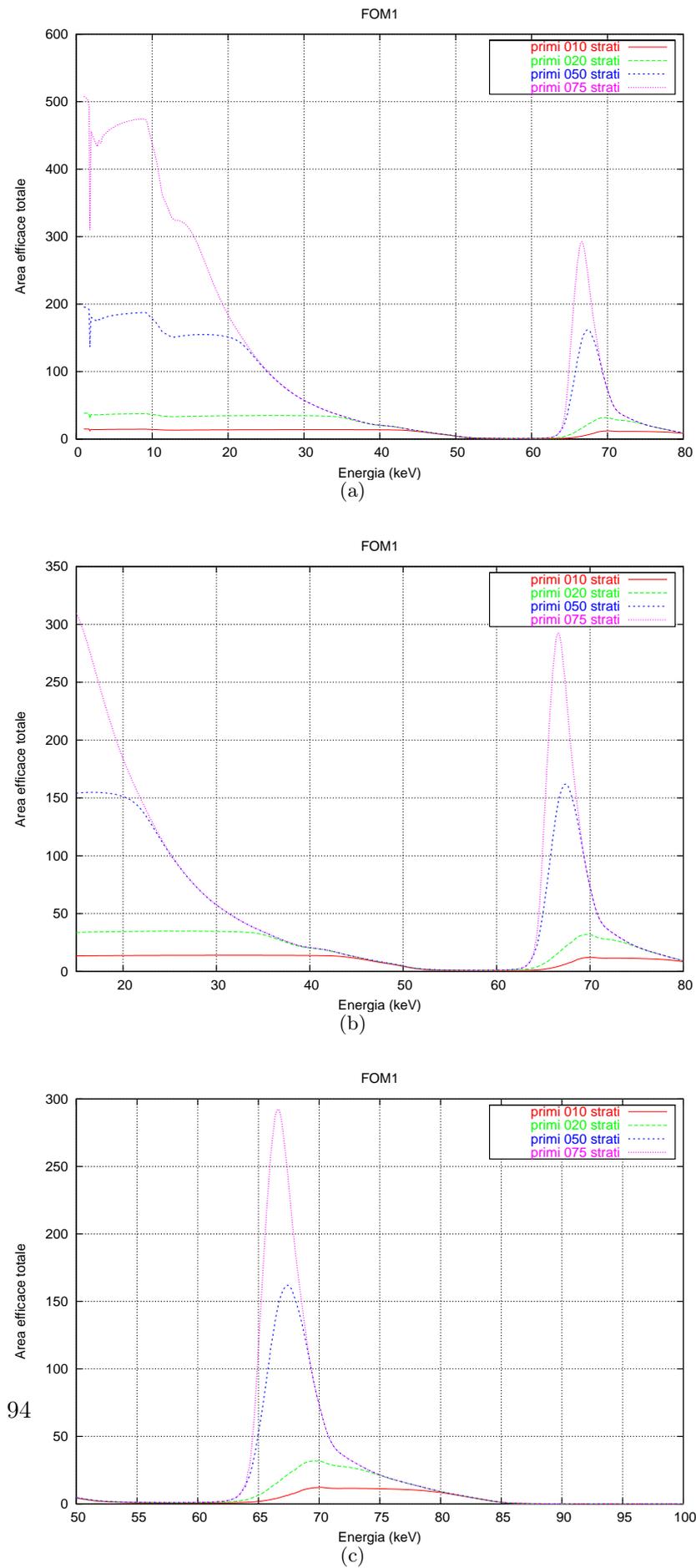


Figura 3.20: Somma delle aree efficaci ottenute con FOM1.

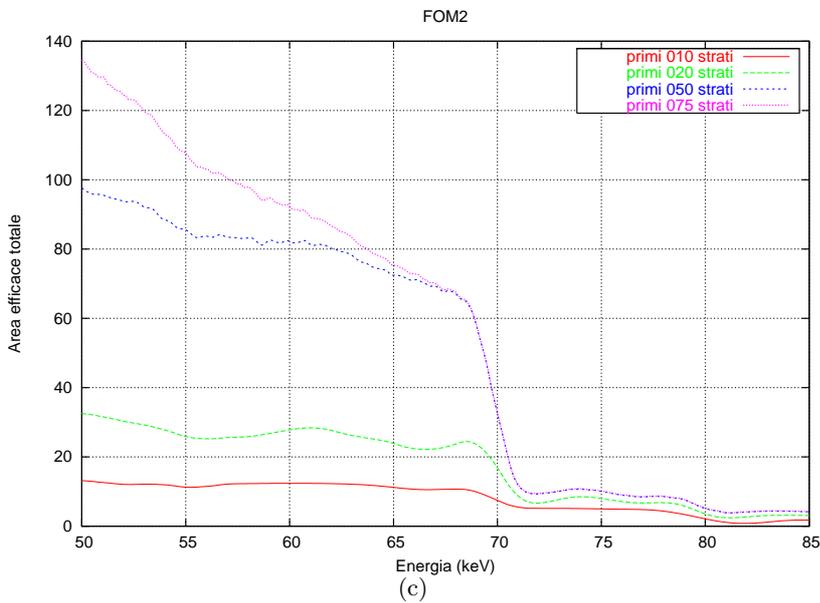
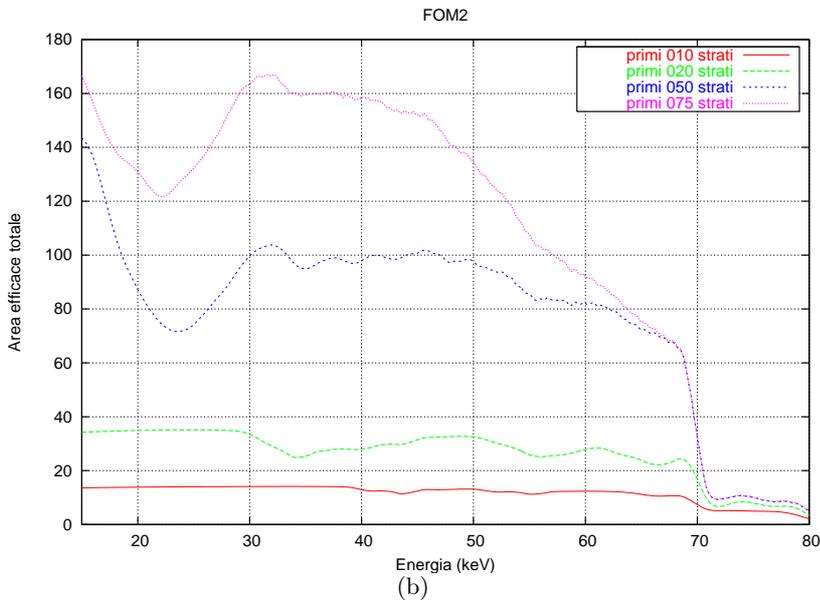
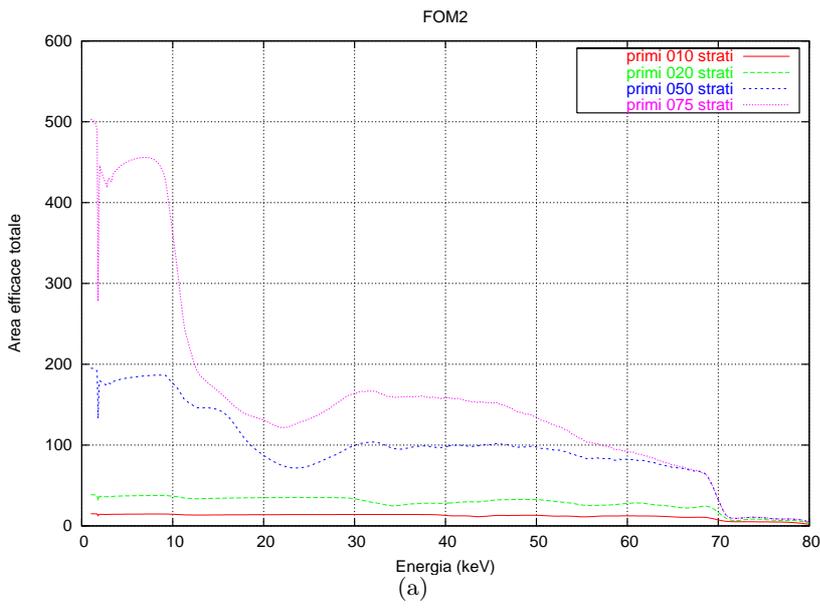


Figura 3.21: Somma delle aree efficaci ottenute con FOM2.

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

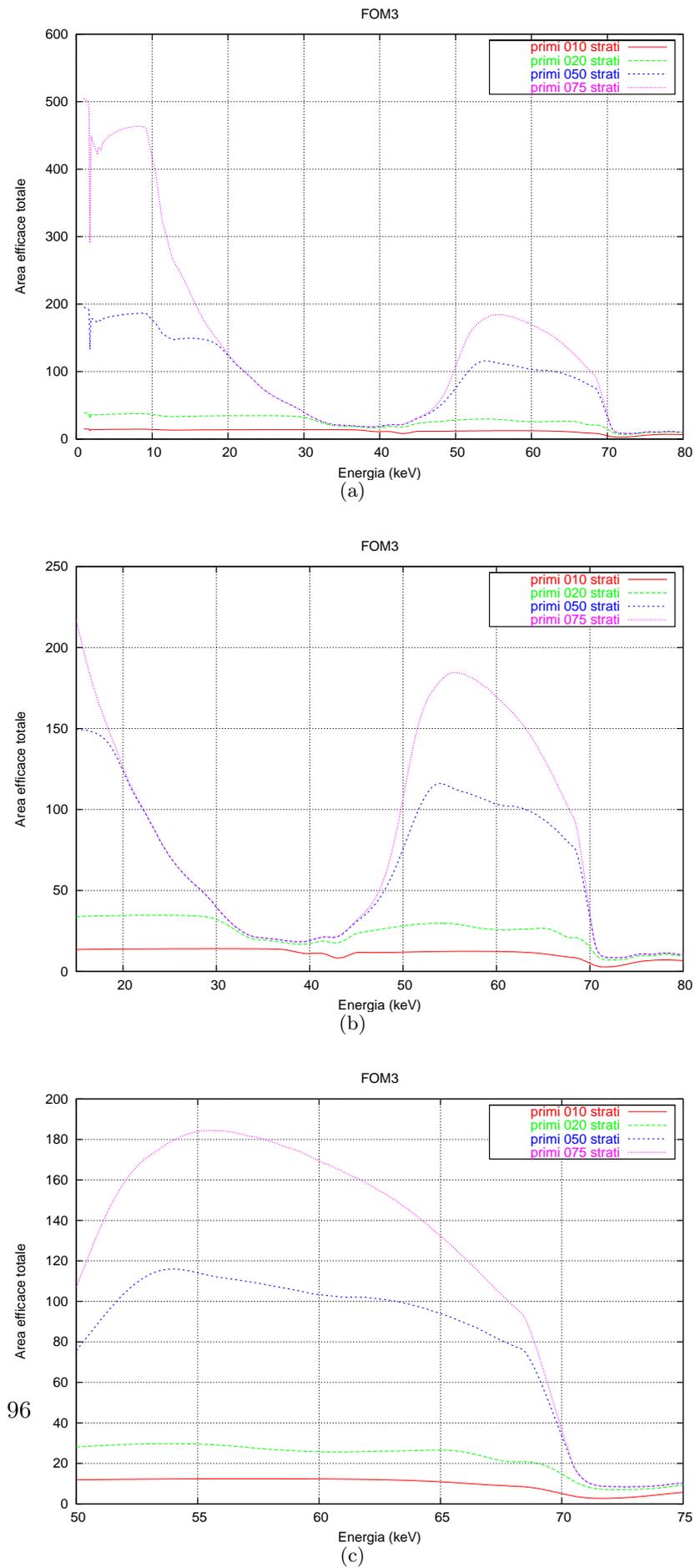


Figura 3.22: Somma delle aree efficaci ottenute con FOM3.

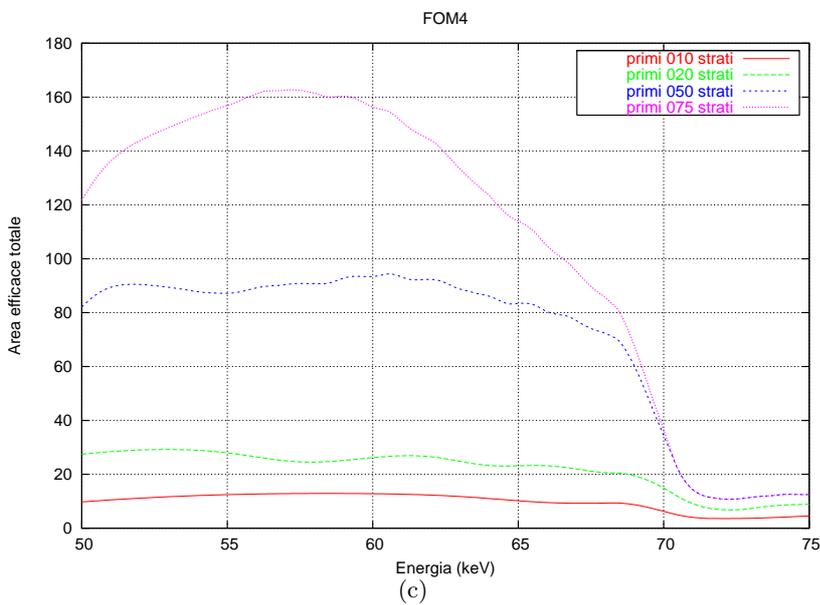
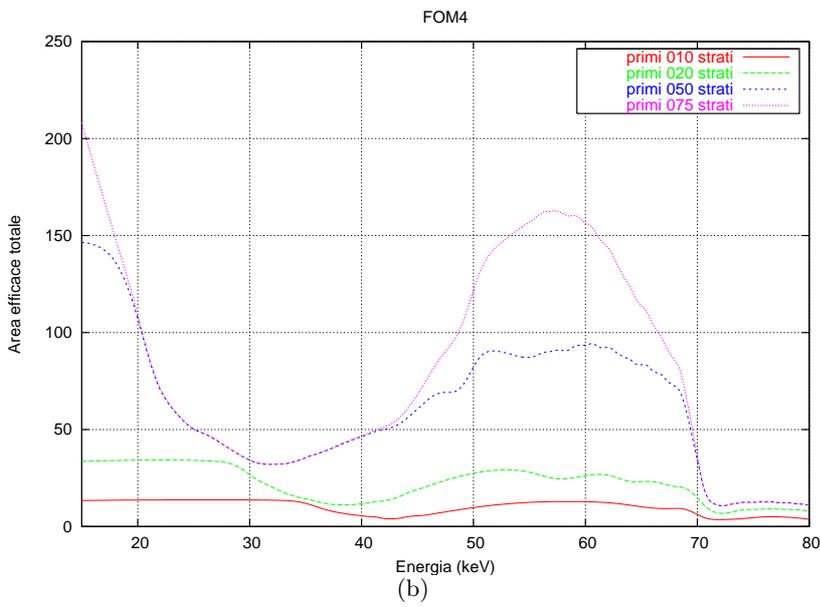
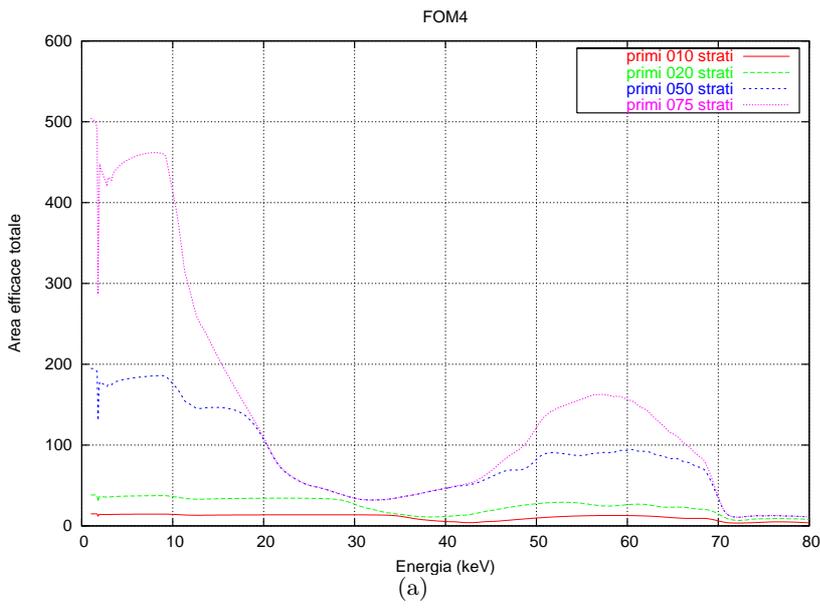


Figura 3.23: Somma delle aree efficaci ottenute con FOM4.

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

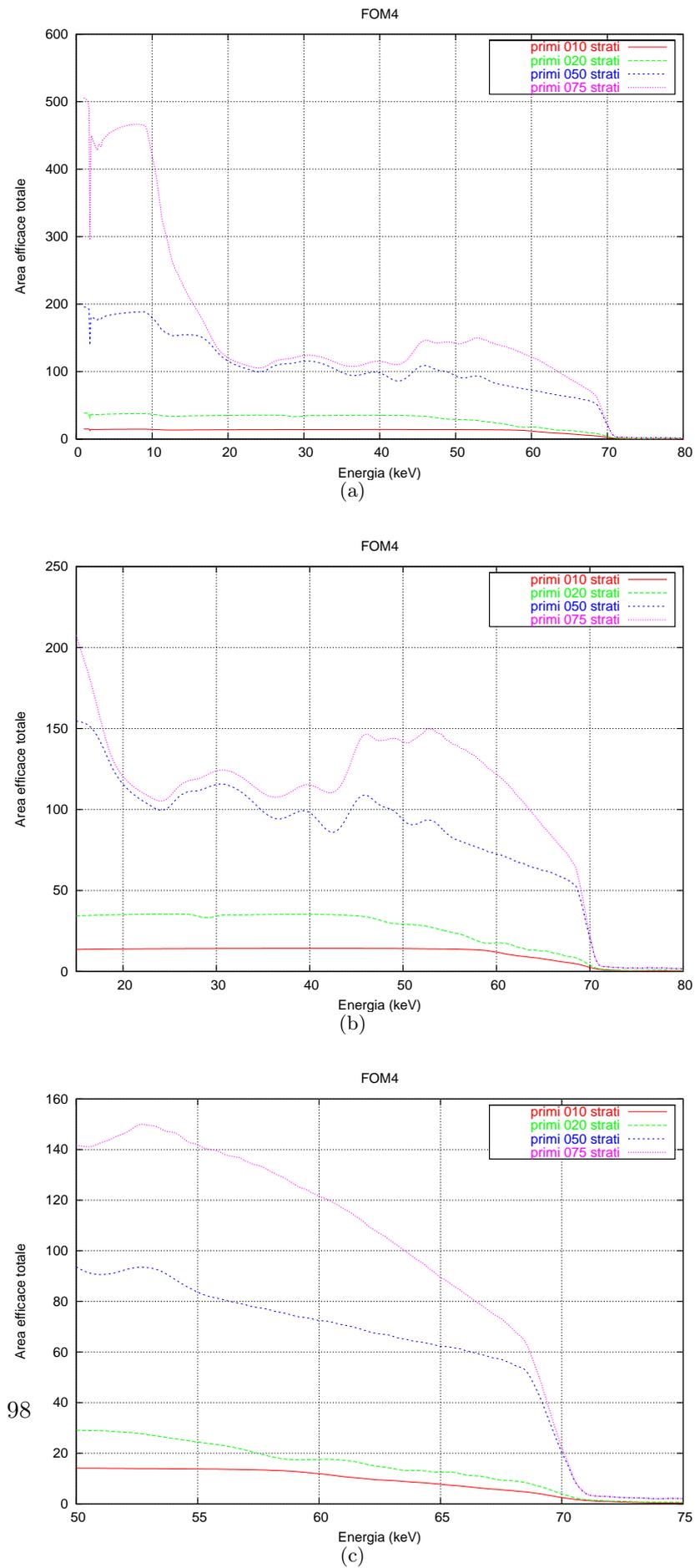


Figura 3.24: Somma delle aree efficaci ottenute con FOM5.

Tabella 3.4: Scelte degli specchi per XEUS.

# shell	funzione
1-12	FOM2
13-20	FOM1
21-30	FOM3
31-60	FOM4
61-130	FOM3
130-150	FOM4
151-180	FOM3
180-250	FOM4

Sono state utilizzate le seguenti funzioni di merito :

FOM	inf	sup	funzione
FOM1	60	70	A_{eff}
FOM2	50	70	$A_{eff} \cdot E$
FOM3	20	30	$A_{eff} \cdot E$
FOM4	20	70	$A_{eff} \cdot E^2$

In fig. 3.25 il risultato ottenuto sulla somma delle aree efficaci delle singole shell, secondo lo schema descritto in tabella

3 Ottimizzazione di multilayers per futuri progetti di astronomia nei raggi X duri (sopra i 10KeV)

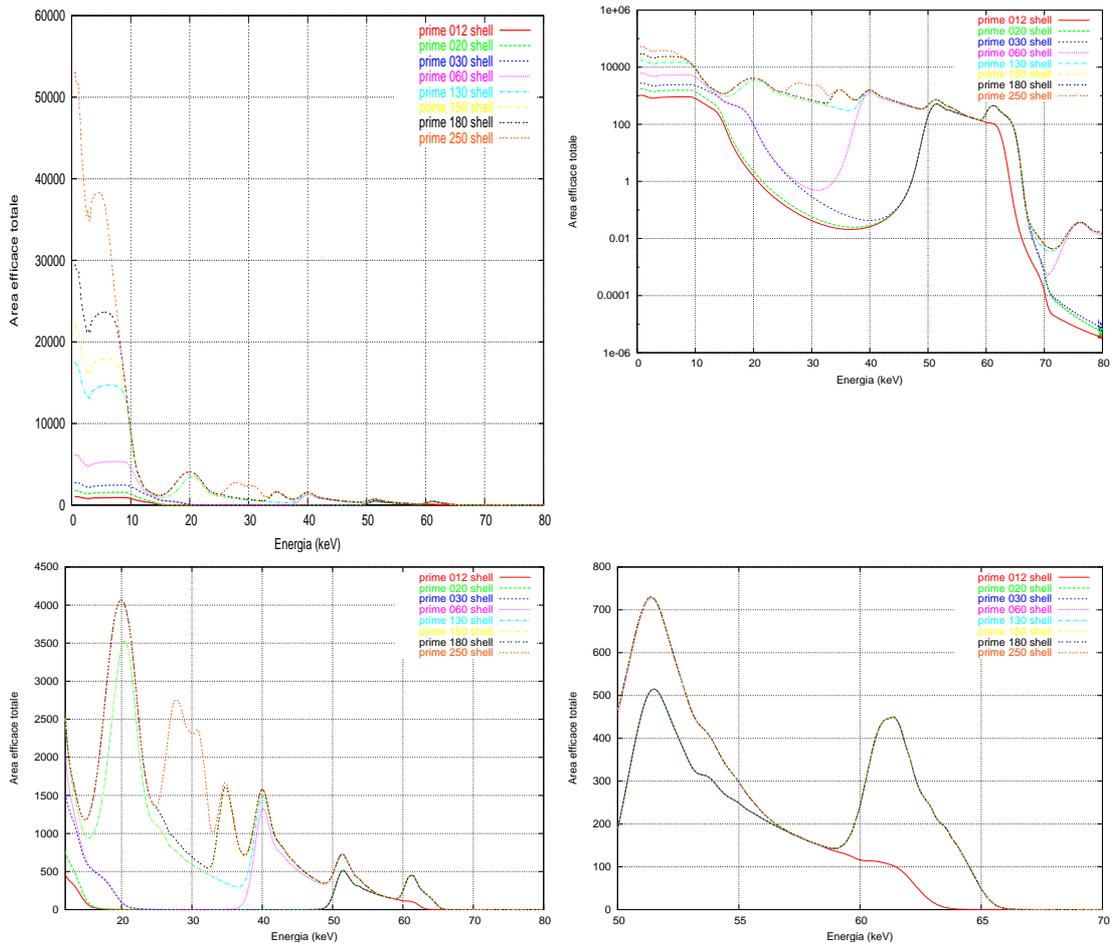


Figura 3.25: Dettagli dell'area efficace calcolata per i primi 250 specchi di XEUS I.

Misure sperimentali di riflettività in raggi X su film multilayer a larga banda

A conclusione di questo lavoro di tesi sono state effettuate misure sperimentali in raggi X di due campioni multilayer a larga banda. Tali specchi sono stati cresciuti presso l'Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics (CfA) di Cambridge (MA, USA) tramite magnetron sputtering.

La tecnica utilizzata per la crescita è il DC magnetron sputtering. La facility di deposizione utilizzata, descritta in [Ivan et al. 2000], è data da una camera ad alto vuoto in acciaio inossidabile di diametro 0.6 m ed altezza 0.35 m al cui interno sono installati due catodi magnetron DC in configurazione dual sputtering. Un motore posto in posizione centrale ruota una piattaforma su cui sono montati i substrati. La distanza dai target dei catodi al piano alla piattaforma può essere variata da 4 ad 11 cm. I campioni piani possono essere mossi in modo oscillatorio rispetto ai catodi in modo da ottenere una buona uniformità degli spessori cresciuti sulla superficie dei substrati e la rugosità interna dei film. La scarica del plasma è mantenuta dal flusso di argon con purezza 99.999%. La pressione del gas prima della deposizione è tipicamente 2×10^{-7} Torr. Un personal computer controlla i parametri del processo di deposizione: l'apertura e la chiusura degli shutter di fronte ai catodi, e la rotazione del portastrati. Il flusso di Argon è mantenuto costante da un sistema a ciclo chiuso basato su un flussometro di massa e su un manometro a capacitance. Le alte tensioni ai catodi sono controllati tramite regolatori di corrente.

4.1 Campioni analizzati

Sono stati analizzati due campioni multilayer con struttura supermirror realizzati in W/Si. Tungsteno e Silicio costituiscono una copia di materiali per specchi multilayer X

4 Misure sperimentali di riflettività in raggi X su film multilayer a larga banda

Tabella 4.1: Descrizione dei parametri di deposizione del campione A. Il blocco 1 è quello più vicino al substrato.

# blocco	N bistrati	d(Å)	Γ
1	28	29	0.48
2	22	32	0.44
3	15	36	0.49
4	10	41	0.47
5	8	45	0.47
6	5	54	0.45
7	3	70	0.45
8	1	98	0.45

ben nota e collaudata. Come visto nel capitolo precedente il tungsteno ha lo spigolo di assorbimento K a 69.5 keV ed ha una densità di 19.2 g/cm^3 , un alto punto di fusione ($T_f = 3695 \text{ °K}$). A causa dell'alta densità, il contrasto ottico con materiali leggeri utilizzati come spaziatori (Si o C) e' particolarmente pronunciato. Il basso rapporto tra le temperature del target durante il processo di sputtering e la temperatura di fusione $\frac{T}{T_f}$ da luogo a strati di tungsteno policristallini o amorfi a rugosità molto bassa. Il silicio presenta ratei di deposizione maggiori del carbonio durante i processi di sputtering, mentre le rugosità ottenibili sono confrontabili. Ad esempio, nella camera utilizzata per la produzione dei campioni analizzati in questo capitolo, i ratei di deposizione sono tipicamente di 1 Å/s e di 0.15 Å/s per Si e C rispettivamente.

Il primo campione analizzato (Campione A) è formato da 92 bistrati W/Si cresciuti su un substrato superpulito di silicio con microrugosità iniziale di 2 Å rms per lunghezze di scansione di $1 \text{ }\mu\text{m}$. Il profilo teorico di riflettività è stato ottenuto in questo caso tramite una serie di blocchi di bistrati, ciascuno dei quali caratterizzato da un dato spessore d , da un dato valore per il parametro del parametro Γ , e un dato numero di bistrati, secondo lo schema indicato in tabella 4.1

Il secondo coating è costituito da un supermirror in W/Si di 200 bistrati i cui spessori sono descritti da due leggi di potenza del tipo $d_i = \frac{a}{(b+i)^c}$ una per il W e l'altra per il Si aventi rispettivamente come parametri a , b , c :

- per il Tungsteno: $a=56.34$, $b=-0.95$, $c=0.25$
- per il Silicio: $a=48.83$, $b=-0.94$, $c=0.25$

4.2 Misure di riflettività in raggi X: apparato sperimentale

Sui campioni supermirror forniti dal CfA sono state effettuate misure di riflettività in raggi X. A tale scopo è stato utilizzato un diffrattometro a 3 assi installato presso la sede

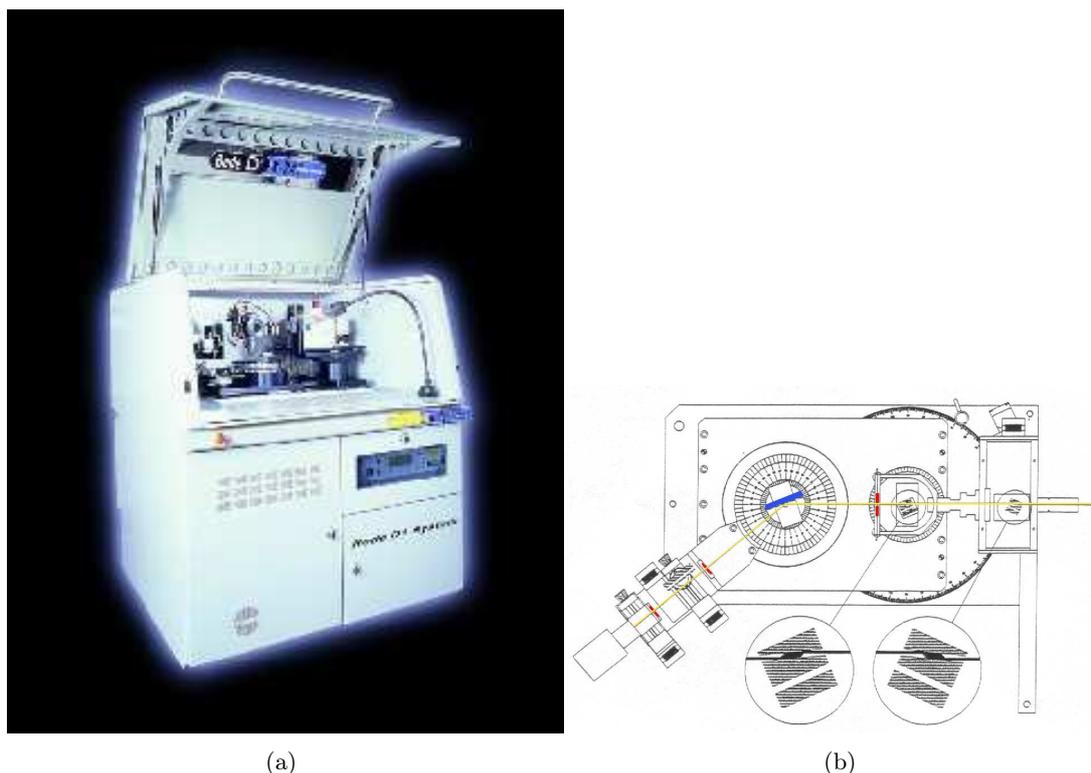


Figura 4.1: (a) diffrattometro per raggi X a tre assi BEDE D1-System, installato presso l'osservatorio di Brera. (b) schema ottico del diffrattometro. Il campione è posto sul goniometro a doppia rotazione su cui è anche montato il braccio del rivelatore, e ad esso reso solidale. In figura sono evidenziati i due cristalli di silicio usati per la monocromatizzazione.

di Merate (Lc) dell'Osservatorio Astronomico di Brera. Tale strumento, fornito dalla ditta Bede Scientific (UK) si basa su sorgenti convenzionali di raggi X che emettono radiazione di frenamento (Bremsstrahlung). Gli spettri caratteristici presentano uno spettro continuo a cui si sovrappongono le righe di fluorescenza caratteristiche del materiale utilizzato come anodo. In particolare, per il sistema adottato presso l'Osservatorio di Brera sono disponibili due sorgenti, una con anodo in Cu, la cui riga K-alpha1 è all'energia di 8.05 keV, e l'altro con anodo in Mo la cui riga K-alpha1 è all'energia di 17.47 keV. L'energia fornita da tali sorgenti in prossimità delle righe caratteristiche K è sufficientemente elevata per potere lavorare senza dovere produrre il vuoto poiché l'assorbimento da parte dell'aria non produce una riduzione significativa dovuta ad assorbimento fotoelettrico (anche tenuto conto della distanza piuttosto ridotta (90 cm) tra sorgente e rivelatore. La radiazioni in uscita dal tubo a raggi X viene monocromatizzata per diffrazione "alla Bragg" all'energia $K_{\alpha 1}$ caratteristica dell'anodo utilizzato da una coppia di cristalli di silicio channel-cut con orientazione (220) in geometria "non-dispersiva" [Loxley et al. 1995]. Ciascuno dei cristalli possiede due canali dove la radiazione incidente è convogliata, uno a taglio parallelo rispetto all'orientazione dei piani reticolari, l'altro con taglio assime-

4 Misure sperimentali di riflettività in raggi X su film multilayer a larga banda

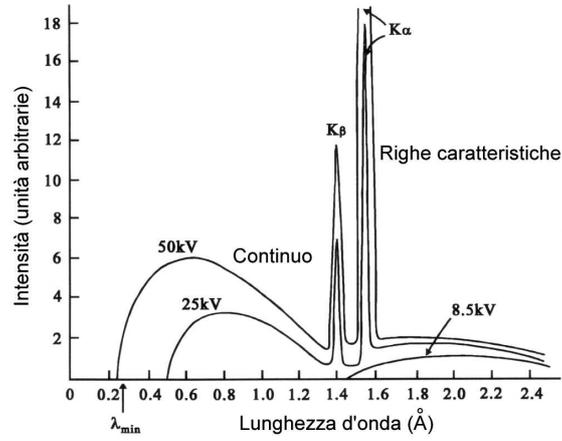


Figura 4.2: Spettri caratteristici della radiazione emessa per Bremsstrahlung da un tubo per raggi X basato su anodo in Cu.

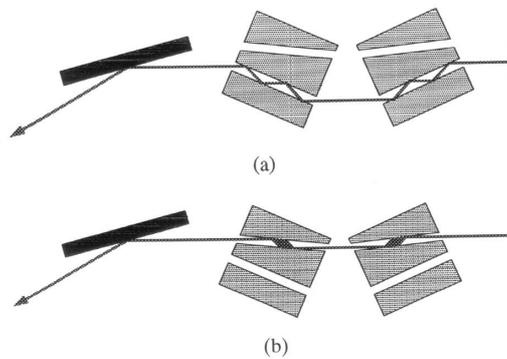


Figura 4.3: Schema ottico che mostra il principio di monocromatizzazione usato per le misure. (a) canale ad alta risoluzione. (b) canale ad alta intensità.

trico (17.65 e 4.8 deg rispetto ai piani cristallini rispettivamente per la radiazione Cu K-alpha e Mo-K-alpha). Nel primo caso (configurazione "ad alta risoluzione") si hanno 4 riflessioni per ogni cristallo ed all'uscita del sistema si ottiene una divergenza del fascio di 5 arcsec FWHM (Full Width Half Maximum); nel secondo caso (configurazione "ad alta intensità" si hanno due sole riflessioni per ogni cristallo, ottenendo una divergenza angolare di 12 arcsec FWHM. La dispersione in energia $\Delta E/E$ del fascio incidente sul campione è in entrambi casi di poco superiore a 10^{-4} . Il rivelatore utilizzato è basato su un cristallo scintillatore *YAP:Ce* accoppiato ad un fotomoltiplicatore. Tipicamente il conteggi di fondo durante le misure sono di 0.3 conteggi/secondo, mentre il rivelatore mantiene una buona linearità fino a 300000 conteggi/secondo.

In tutte le misure effettuate per questo lavoro di tesi è stato usato l'apparato di monocromatizzazione in configurazione "ad alta intensità".

4.3 Risultati sperimentali

In fig. 4.4 (a) e (b) vengono mostrati i profili sperimentali in scala lineare delle riflettività a 8.05 keV e 17.47 keV rispettivamente per i campioni A e B. Si noti come sia stato possibile misurare le riflettività su un ampio intervallo dinamico con un rapporto segnale rumore significativo. Nelle figure 4.5 gli stessi profili vengono mostrati in scala logaritmica con sovrainposti i modelli teorici assumendo una rugosità media di Debye-Waller di 3.5 Å per tutti gli strati. L'adattamento sembra essere piuttosto problematico per il campione A, mentre per il campione B può considerarsi buono. E' probabile che per quanto riguarda il campione A si siano verificati problemi di calibrazione degli spessori durante la crescita del film. In ogni caso entrambi i campioni costituiscono una prova sperimentale della fattibilità di specchi larga banda (supermirror) per raggi X.

4 Misure sperimentali di riflettività in raggi X su film multilayer a larga banda

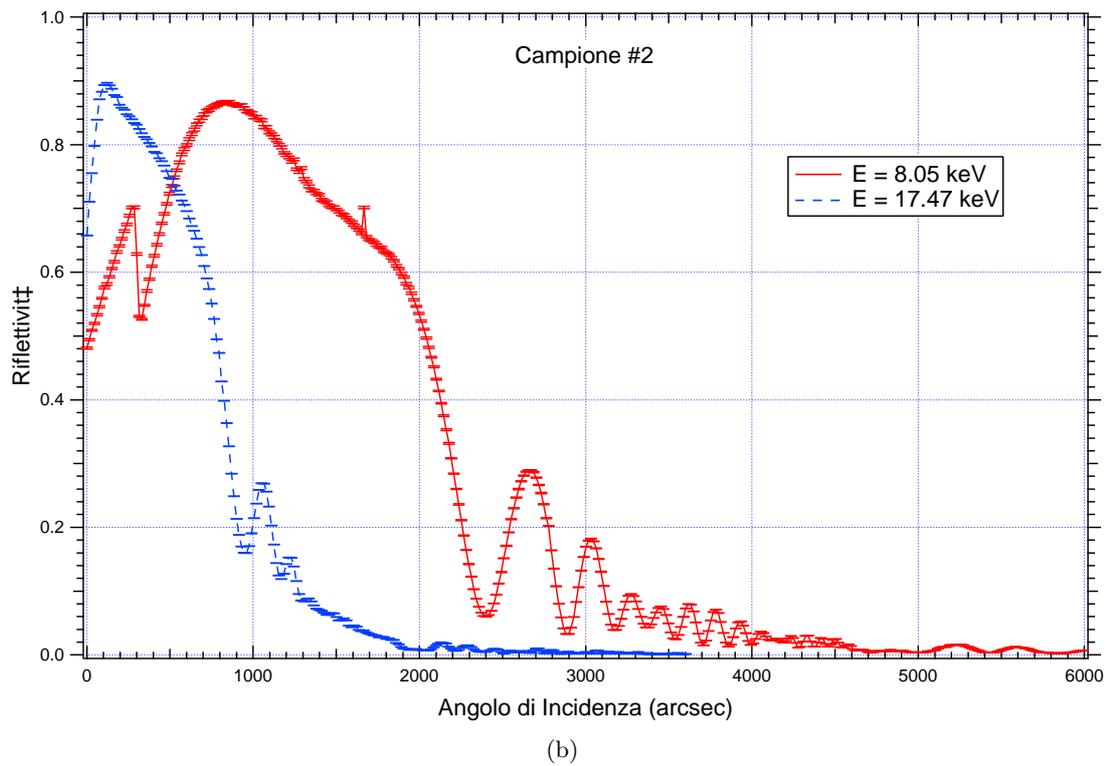
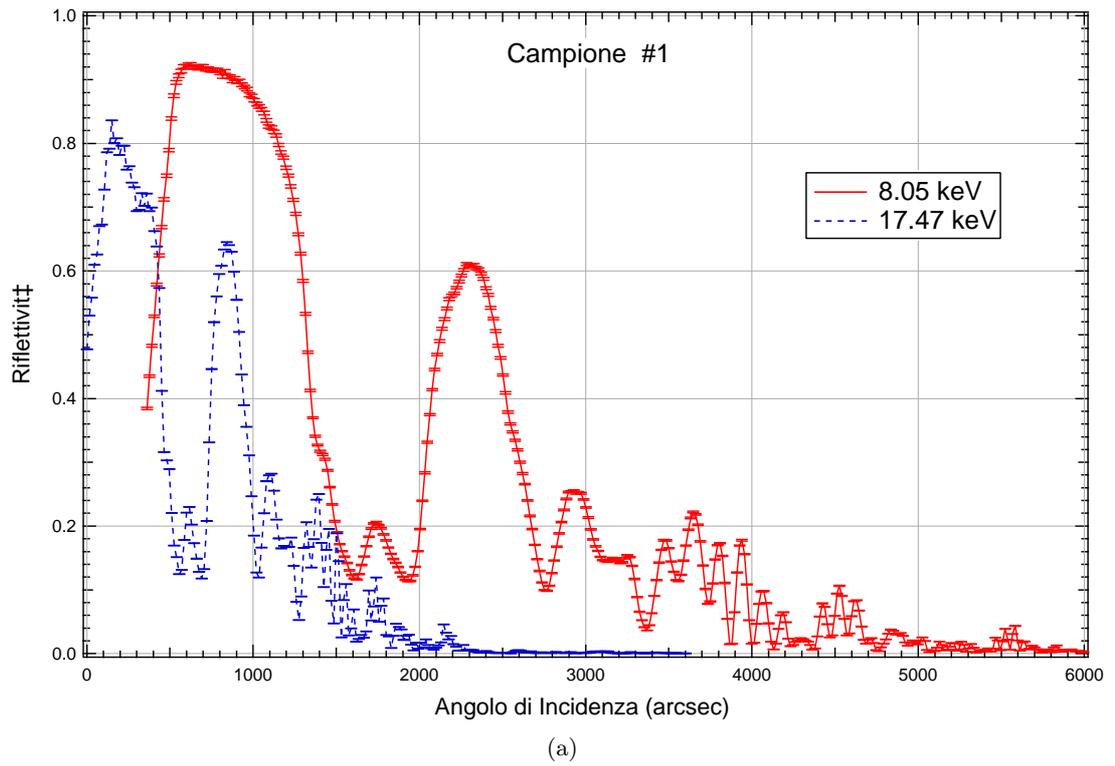
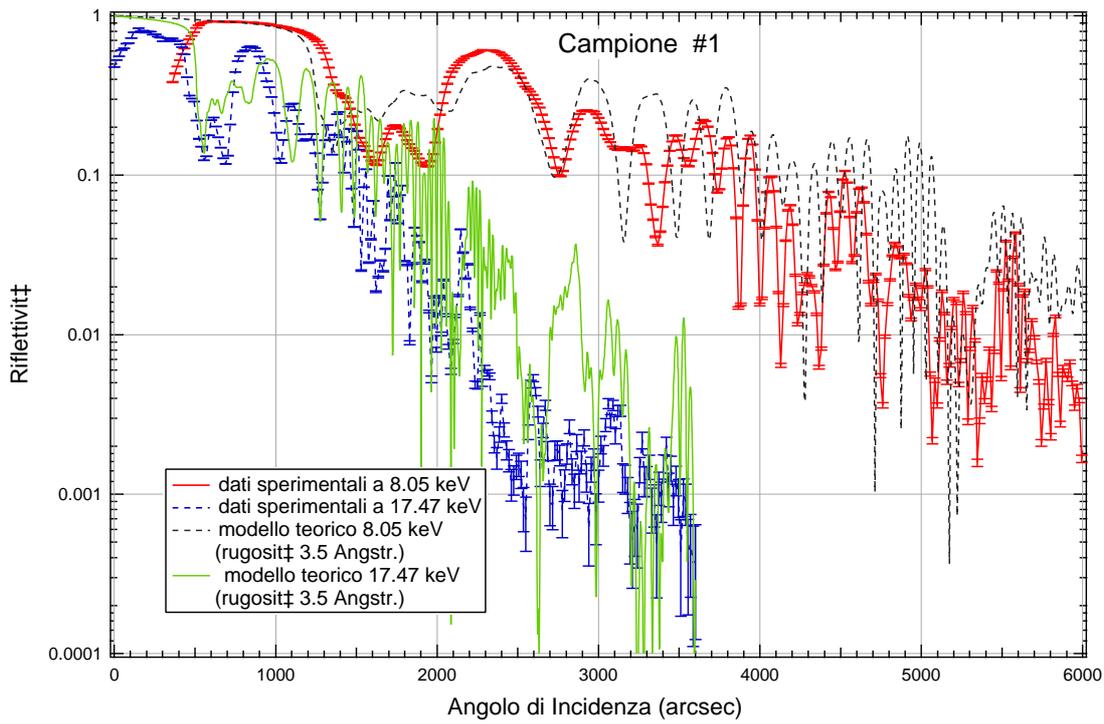
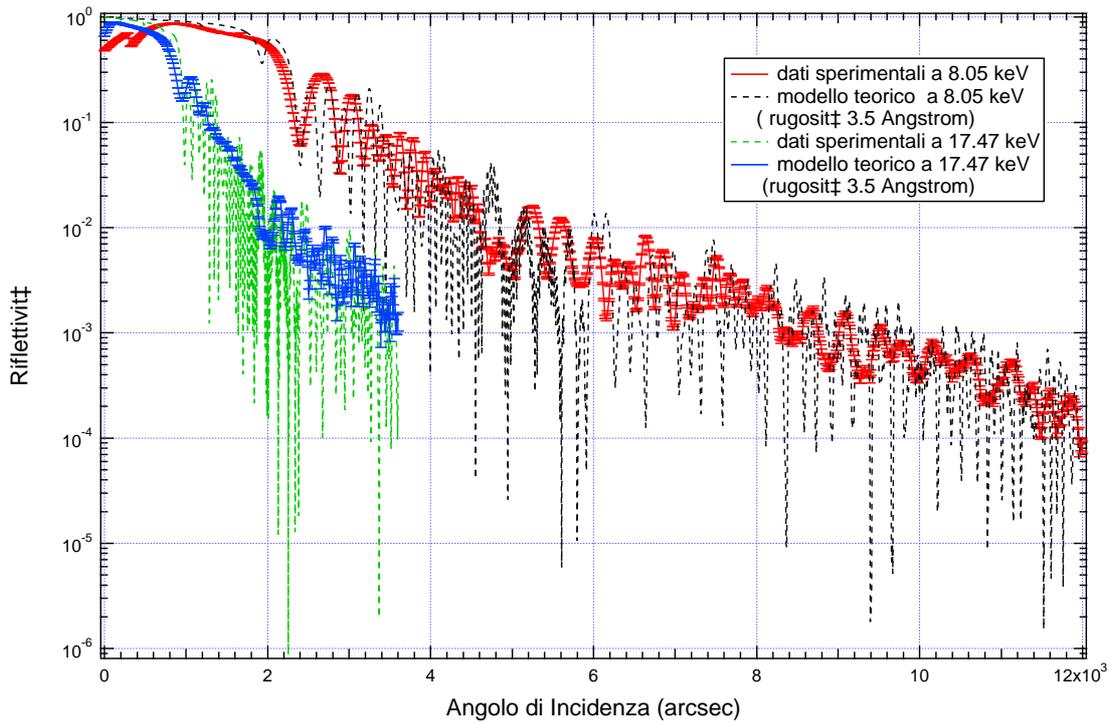


Figura 4.4: Riflettività (scala lineare) alle energie di 8.05 keV e 17.47 keV per il campione A (a) e B (b).



(a)



(b)

Figura 4.5: Riflettività (scala logaritmica) alle energie di 8.05 keV e 17.47 keV per il campione A (a) e B (b). Ai risultati sperimentali è sovrapposto il modello teorico.

4 Misure sperimentali di riflettività in raggi X su film multilayer a larga banda

Conclusioni

Al termine di questo lavoro di tesi è possibile affermare che una serie di risultati positivi sono stati ottenuti, in accordo con gli obiettivi che erano stati formulati all'inizio delle attività. In primo luogo è stata sviluppata una procedura software "general-purpose" chiamata **ISOXM** che permette l'ottimizzazione di specchi multilayer per telescopi X basata sull'algoritmo *iterated simplex*. Come già menzionato, si è scelto di seguire tale approccio poiché in grado di fornire soluzioni di tipo *globale* ai problemi di ottimizzazione, cioè in grado di trovare soluzioni di tipo *assoluto* nello spazio dei parametri da ottimizzare. Il software sviluppato è in grado di lavorare con diverse funzioni di merito, ed è quindi applicabile senza problemi all'ottimizzazione delle coperture riflettenti di ottiche X indipendentemente dagli obiettivi scientifici delle varie missioni. Il software è potenzialmente utilizzabile anche per l'ottimizzazione di ottiche multilayer in campi diversi dall'astronomia (ad esempio in applicazioni di fisica medica) o per applicazioni in bande diverse da quella dei raggi X (ad esempio per la progettazione di filtri in ottico o UV).

Una volta sviluppato il software, e dopo averne verificato le capacità, sono stati affrontati i problemi dell'ottimizzazione delle coperture multilayer per le future missioni HEXIT, Constellation-X e XEUS.

- Nel primo caso (HEXIT) si è trattato di ottimizzare gli specchi multilayer per un esperimento su pallone stratosferico (40 Km di altitudine in fase operativa) che sarà effettuato da gruppi di ricerca italiani dalla base di lancio dell'ASI di Trapani/Milo (Sicilia). La data di lancio è prevista nel 2005, con una durata di circa 24 ore. L'esperimento sarà basato su 3 moduli ottici multilayer con geometria Wolter I aventi una lunghezza focale di 6 m. Ciascun modulo è formato da 30 shell confocali. Per le ottimizzazioni è stato scelto di trattare il caso di film multilayer formati da 150 bistrati W/Si, suddividendo le shell in 6 gruppi ciascuno di 5 specchi. Sono state utilizzate diverse funzioni di merito, tutte basate sull'integrale dell'area efficace moltiplicata per una data potenza dell'energia su una serie di intervalli energetici.

5 Conclusioni

A causa dell'assorbimento da parte dell'atmosfera residua l'energia inferiore a cui si avrà area efficace diversa da zero si colloca intorno a 20 keV, fissando in questo modo l'estremo di integrazione inferiore su cui calcolare la figura di merito. Sono state ottenute diverse soluzioni interessanti che possono prestarsi di volta in volta allo studio ottimale di determinati problemi astrofisici e cosmologici come lo studio del background X cosmico o delle righe nucleari di ^{44}Ti in resti di supernova. Il gruppo di lavoro di HEXIT (a cui afferiscono ricercatori dell'Osservatorio di Brera e dell'Istituto IASF-CNR) selezionerà la soluzione più idonea alle sorgenti da osservare una volta fissato il piano di volo per l'esperimento.

- Nel caso del telescopio per raggi X duri (HXT) a bordo della missione Constellation-X si realizzeranno 12 moduli ottici di volo da distribuirsi su 4 satelliti orbitanti attorno al punto lagrangiano Terra-Sole L2 e tutti puntati sullo stesso campo osservativo. La lunghezza focale delle ottiche è di 10 m, mentre il numero di shell confocali è 75. In questo caso si è deciso di effettuare un'ottimizzazione separata per ogni specchio, usando i risultati ottenuti per lo specchio precedente come parametri di input per lo specchio successivo. Anche in questo caso sono state utilizzate una serie di diverse figure di merito, che danno luogo a soluzioni tra loro diversificate. I risultati ottenuti saranno discussi tra ricercatori dell'Osservatorio Astronomico di Brera, dell'Istituto Harvard-Smithsonian CfA (Cambridge, MA, USA) e dell'Istituto NASA/MSFC (Huntsville, AL, USA) nel contesto di una collaborazione in atto per la realizzazione di specchi prototipali per le ottiche HXT. E' previsto che film multilayer progettati in questo lavoro di tesi siano realizzati per prove sperimentali presso la facility di deposizione tramite dual magnetron sputtering installata presso l'Harvard-Smithsonian CfA.
- La missione XEUS, attualmente allo studio di ESA, si pone come una vera e propria sfida tecnologica. Si prevede infatti di mettere in orbita un telescopio di dimensioni enormi, avente come diametro esterno 10 m, una lunghezza focale di 50 m e formato da circa 600 shell confocali. Diversi gruppi sono attualmente al lavoro per sviluppare una tecnica per appropriata per la realizzazione degli specchi, che devono avere un'ottima risoluzione angolare (solamente 2 arcsec HEW) a dispetto delle grandi dimensioni e del rapporto massa/area geometrica molto basso. Mentre nel disegno della proposta iniziale si prevedeva l'uso di un singolo strato di Au come materiale riflettente (cioè come nel caso di XMM), ESA sta attualmente considerando l'applicazione di film multilayer alle shell più interne, in modo da estendere l'operatività del telescopio anche nella regione dei raggi X duri (cioè sopra 10 keV). Come nel caso di Constellation X, le ottimizzazioni sono state effettuate specchio per specchio, utilizzando i risultati dell'unità precedente come parametri di input per quella successiva. I vari risultati ottenuti saranno utili per un progetto avente come scopo lo studio di fattibilità dell'applicazione dei multilayer a XEUS (nell'ambito di una collaborazione tra l'Osservatorio di Brera e la ditta Media Lario (Bosisio Parini, Co)).

Nel presente lavoro di tesi sono state effettuate anche alcune misure sperimentali in

raggi X di campioni multilayer con struttura a larga banda forniti dall'Istituto Harvard-Smithsonian CfA. I test, effettuati alle energie di 8.05 keV e 17.47 keV utilizzando un diffrattometro a 3 assi installato presso l'Osservatorio di Brera, confermano la fattibilità di specchi supermirror per raggi X (risultato per altro già noto in letteratura).

Parte dei risultati ottenuti in questo lavoro di tesi saranno presentati durante conferenze internazionali che si svolgeranno prossimamente, ed in particolare

- presentazione orale “*Soft x-ray (0.1 - 10 keV) multilayer coatings for XEUS*”, autori G. Pareschi, V. Cotroneo, M. Ghigo, conferenza Optics for EUV, X-Ray, and Gamma-Ray Astronomy, parte dell'International Symposium on Optical Science and Technology, SPIE's 48th Annual Meeting, San Diego, CA USA, 3-8 Agosto-2003
- “*Global optimization of multilayers for X-ray optics*”, M. Sanchez del Rio. M. Miron, V. Cotroneo, G. Pareschi, conferenza: International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications (SNA'2003) Parigi, Francia , 22-24 Settembre 2003

5 Conclusioni

Ringraziamenti

A conclusione di questo lavoro di tesi vorrei esprimere la mia gratitudine ai relatori interni ed esterni Prof. L. Pasinetti, Dr. G. Pareschi e Prof. G. Chincarini per l'aiuto, le frequenti discussioni e l'opera di incoraggiamento che ho da loro ricevuto. Le attività sono state condotte presso l'Osservatorio Astronomico di Brera - INAF (sede di Merate). Vorrei ringraziare per l'ospitalità ricevuta tutto il personale di ricerca e tecnico, i borsisti e gli altri studenti di questo Istituto con cui ho interagito e consiviso momenti memorabili. Ringrazio per l'aiuto e il sostegno ricevuto, ma sicuramente non solo per quello, Paolo, Elisa e Aldo. Un ringraziamento particolare è rivolto a Renzo Valtolina che mi ha ospitato nel suo ufficio per un lungo periodo. La Dr. S. Romaine (Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge, MA, USA) ha fornito i campioni per le misure sperimentali di multilayer a larga banda.

5 Conclusioni

Bibliografia

- [Nobel Prize 2002] AA. VV., “The Nobel Prize in Physics 2002 - Information for the Public”, sito web della Royal Swedish Academy of Sciences: <http://www.nobel.se/physics/laureates/2002/public.html> (2002)
- [XEUS 2000] AA. VV., “X-Ray Evolving Universe Spectroscopy- The XEUS Science Case”, ESA Publ. Div. SP-1238 (2000)
- [Sito web ESA] AA. VV., <http://sci.esa.int>
- [SXI review 2001] AA. VV., SXI Mirror assembly critical design review, Doc. VG P23-0021, Raytheon Optical systems, Danbury, Conn. (1998)
- [Aschenbach 1985] Aschenbach B. : Rep. Prog. Phys. **48**, 579 (1985)
- [Attwood 1999] Attwood D., “Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation”, Cambridge University Press., Cambridge, UK (1999)
- [Bookbinder et al. 2001] Bookbinder J. and the Constellation-X Formulation Team, “The Constellation-X Mission and its Optics”, SPIE Proc. **4496**, 84 (2001)
- [Born e Wolf 1993] Born M., Wolf E., “Principles of Optics”, Pergamon Press., Oxford, Eng. (1993)
- [Bragg 1992] Bragg L., “The development of X-ray analysis”, Dover Publications, Mineola, NY (1992)
- [Burrows et al.] Burrows C., Burgs R., Giacconi R., “Optimal grazing incidence optics and its applications to wide-field x-ray imaging”, Ap.J. **392**, 760 (1992)
- [Cash et al. 1979] Cash W., Shealy D. L., Underwood J. H., “Astronomical applications of grazing incidence telescopes with polynomial surfaces” (1979)
- [Charbonneau 1998] Charbonneau P. “An Introduction To genetic Algorithms for Numerical Optimization” NCAR (National Center for Atmospheric Research) technical note 450+IA (1998)

Bibliografia

- [Charles, Seward] Charles P. A. , Seward F. D., “Exploring the X-ray Universe”, Cambridge University Press., Cambridge, UK (1995)
- [Citterio et al. 2001] Citterio O., Ghigo M., Mazzoleni F., Pareschi G., Parodi G., Bräuninger H., Burkert W., Hartner G., “Development of soft and hard X-ray optics for astronomy: progress report II and consideration on material properties for large-diameter segmented optics of future missions”, SPIE Proc., **4496**, 23 (2001)
- [Comastri 2001] Comastri A., Setti G., Zamorani G., Hasinger G., “The contribution of AGNs to the X-ray background”, A&A, **296**, 1 (1995)
- [Compton 1923] Compton: Phil. Mag. **45** 1121 (1923)
- [Conconi, Campana 2000] Conconi P., Campana S.: “Optimization of grazing incidence mirrors and its application to surveying X-ray telescopes”, A&A, **372**, 1088, 193 (2000)
- [Craig et al. 2000] Craig W. , Hailey C., Jimenez-Garate M., Windt D., Harrison F., Mao P., Ziegler E., Honkimaki V., Del Rio S., Freund A., Ohler M. SPIE Proc. **4012**, 626 (2000)
- [Dinklage 1967] Dinklage J., “X-ray diffraction by multilayered thin-film structures and their diffusion”, J. Appl. Phys. **38**, 3781 (1967)
- [Frontera et al. 1997] Frontera F., Costa E., dal Fiume D., Feroci M., Nicastro L., Orlandini M., Palazzi E., Zavattini G., “The high energy instrument PDS on-board the BeppoSAX X-ray astronomy satellite” Astron. Astrophys. Suppl. **122**, 357 (1997)
- [Fusco-Femiano et al. 1999] Fusco-Femiano R., Dal Fiume D., Feretti L., Giovannini G., Grandi G., Matt G., Molendi S., Santangelo A., “Hard X-ray radiation in the Coma cluster spectrum”, Ap. J., **513**, L21 (1999)
- [Giacconi et al. 1962] Giacconi R., Gursky H., Paolini F., Rossi B., “Evidence for X-rays from Sources Outside the Solar System”, Phys. Rev. Lett., **9**, 439 (1962)
- [Giacconi et al. 1979] Giacconi R. et al., “The *Einstein* (*HEAO-2*) X-ray Observatory”, Ap. J., **230**, 540 (1979)
- [Giacconi, Rossi 1960] Giacconi R., Rossi B., “A 'Telescope' for Soft X-ray Astronomy”, J. Geophys. Res., **65**, 773 (1960)
- [Williams, Hecking 2002] Williams T., Hecking L., sito web di gnuplot: <http://www.gnuplot.info>
- [Gorenstein 1993] Gorenstein P., SPIE Proc. **1736**, 201 (1993)
- [Gressler, Harvey 1994] Gressler W. J. , Harvey J. E., “Conical Foil Telescope Performance Predictions for Space Astronomy Applications”, SPIE Proc. **2011**, 182, (1994)

- [Hahn 1994] Hahn B., “Fortran 90 for Scientists and Engineers”, versione online in “Microsoft Developer Studio/Fortran Powerstation 4.0” (1994)
- [Harrison et al. 1999] Harrison F., Cook W., Christensen F., Citterio O., Craig W., Gehrels N., Gorenstein P., Grindlay J., Hailey C., Kroeger R., Kuneida H., Pareschi G., Parsons A., Petre R., Romaine S., Ramsey B., Tueller J., Ulmer M., Weisskopf M., Windt D. “Technology development for the Constellation-X hard X-ray telescope” SPIE Proc. **3765**, 104 (1999)
- [Harvey et Al. 2001] Harvey E., Krywonos A., Thompson P. L., Saha T. T., “Grazing-incidence hyperboloid-hyperboloid designs for wide-field x-ray imaging applications”, Appl. Opt. **40**, 136 (2001)
- [Hayter, Mook 1989] Hayter J. B., Mook H. A., “Discrete thin-film multilayer design for x-ray and neutron supermirrors”, J. Appl. Crystalogr. **22**, 35-41 (1989)
- [Heavens, Liddell 1966] Heavens O., Liddell H., “Staggered broad-band reflecting multilayers”, Appl. Opt. **5**, 376 (1966)
- [Hecht 1998] Hecht E., “Optics”, Addison-Wesley (1998)
- [Hoghoj et al. 1997] Hoghoj, Ziegler, Susini, Freund, Joensen, Gorenstein, “Focusing of hard x rays with a W/Si supermirror “ Wood. Nuc. instr. and Met. in Ph. Res. (1997)
- [Inoue 2002] Inoue H., “XEUS observations of hard X-ray sources”, Proceedings of the Workshop: “XEUS - studying the evolution of the hot universe” (2002)
- [Ivan et al. 2000] Ivan A., Bruni R., Byun K., Gorenstein P., Romaine S., “Hard X-ray multilayers: a study of different material systems”, SPIE Proc. **4145**, 72 (2000)
- [Joensen et al. 1992] Joensen K., Christensen F. et al., “Medium sized grazing incidence high-energy x-ray telescopes employing continuously graded multilayers”, SPIE Proc. **1736**, 239-248 (1992)
- [Joensen et al. 1995] Joensen K., Voutov P., Szentgyorgyi A., Roll J., Gorenstein P., Hoghoj P., Christensen F., “Design of grazing incidence multilayer supermirrors for hard x-ray reflectors”, Appl. Opt. **34**, 34, 7935 (1995)
- [Kirkpatrick, Baez 1948] Kirkpatrick P., Baez A., “Formation of Optical Images by X-Rays”, J. Opt. Soc. **38**, 766 (1948)
- [Kirkpatrick et al. 1983] Kirkpatrick S., Gelatt C., Vecchi M., “Optimization by simulated annealing”, Science, v. 220, 4598, 671 (1983)
- [Loxley et al. 1995] Loxley N., Tanner D., Bowen D., “A novel beam-conditioning monochromator for high-resolution X-ray diffraction”, J. Appl. Crytt. **28**, 314 (1995)
- [Lunt et al. 2001] Lunt S., Turley S., Allred D., “Design of bifunctional XUV multilayer mirrors using a genetic algorithm”, J. X-ray Sc. Tech. **9**, 11 (2001)

Bibliografia

- [Mangus, Underwood 1969] Mangus J. D. , Underwood J. H. : Optical Design of Glancing Incidence X-ray Telescope (1969)
- [Mao et al. 1999] Mao P., Harrison F., Windt D., Christensen F., "Optimization of graded multilayer design for astronomical x-ray telescopes", *Appl. Opt.*, **38**, 4766 (1999)
- [Matt et al. 1999] Matt G., Guainazzi M., Maiolino R., Molendi S., Perola G., Antonelli L., Bassani L., Brandt W., Fabian A., Fiore F., Iwasawa K., Malaguti G., Marconi A., Poutanen J., "One more surprise from the Circinus Galaxy: BeppoSAX discovery of a transmission component in hard X-rays", *Astron. Astrophys.*, **341**, L39 (1999)
- [Menou et al. 1999] Menou K., Esin A., Narayan R., Garcia M., Lasota J., McClintock J., "Black Hole and Neutron Star Transients in Quiescence", *Ap. J.*, **520**, 1, 276 (1999)
- [Metcalf, Reid 1990] Metcalf M., Reid J. "Fortran 90 explained" (Oxford University Press, Oxford, UK, 1990)
- [Metropolis et al. 1953] Metropolis N., Rosenbluth A., Rosenbluth M., Teller A., Teller E., "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines", *J. Chem. Phys.*, **21**, 6, 1087 (1953)
- [Mezei 1976] Mezei F., *Comm. Phys.* "Novel polarized neutron devices: supermirror and spin component amplifier", **1**, 81 (1976)
- [Mezei, Dagleish 1977] Mezei F., Dagleish P., "Corrigendum and first experimental evidence on neutron supermirrors", *Comm. Phys* **2**, 41 (1977)
- [Mezei 1992] Mezei F., "Polarizing supermirror devices: some new developments" *SPIE Proc.*, **1738**, 107 (1992)
- [Michette, Buckley 1993] Michette A. G. , Buckley C. J. "X-rays Science and Technology", Institute of Physics Publishing, London, UK (1993)
- [MSDS User's Guide] "Microsoft Developers Studio User's guide" (versione online in "Microsoft Developer Studio/Fortran Powerstation 4.0 References Books", 1994)
- [NASA Publ. 1999] NASA Publ., "Science with the Constellation-X Observatory", **NP-19998-067-GSFC** (1999), sito web: <http://constellation.gsfc.nasa.gov/>
- [Nelder, Mead 1965] Nelder J., Mead R., *Computer Journal*, vol. 7, **308** (1965)
- [Okajima et al. 2002] Okajima T., Ogasaka Y., Tamura K., Furuzawa A., Tawara Y., Yamashita K., Kunieda H., "Supermirror design for the XEUS X-ray telescope" (2002)
- [Pareschi et al. 2002] Pareschi G., Citterio O., Ghigo M., Mazzoleni F., Gorenstein P., Romaine S., Parodi G., "Replication by Ni electroforming approach to produce the Con-X/HXT hard X-ray mirrors" *SPIE Proc.* **4851** (2002)

- [Parker et al. 1998] Parker A., McKenzie, Large M. , “Multilayer reflectors in animals using green and gold beetles as contrasting examples”, *J. exp. Bio.* **201**, 1307 (1998)
- [Parrat 1954] Parratt L. G., *Phys. Rev.* **95**, 35A (1954)
- [Peatross, Stokes 2002] Peatross J., Stokes H., “Physics of light and optics”, Brigham Young University, versione rivista online <http://optics.byu.edu> (2002)
- [Petre, Salermitos 1985] Petre R. , Salermitos P. J. : *Appl. Opt.*, **12**, 24 (1985)
- [Press et al. 1996] Press W., Teukolsky S., Vetterling W., Flannery B., “Numerical Recipes in Fortran 77. The art of scientific computing” vol.1, Cambridge University Press, Cambridge, NY (1996)
- [Fortran Powerstation Programmer’s Guide] “Programmers guide”, versione online in “Microsoft Developer Studio/Fortran Powerstation 4.0 References Books” (1994)
- [Protopopov, Kalnov 1998] Protopopov V. V., Kalnov V. A., “X-ray multilayer mirror with an extended angular range”, *Opt. Comm.*, **158**, 127 (1998)
- [Protopopov et al. 1999] Protopopov V., Tikhonravov A., Voronov A., Trubetskov M., DeBell G., “Optimal design of graded x-ray multilayer mirrors in the angular and spectral domains”, *SPIE Proc.*, **3766**, 320 (1999)
- [Protopopov 2000] Protopopov V., “X-ray deflector: theory, design and applications”, *SPIE Proc.*, **4145**, 266 (2000)
- [Ramsey et al. 1999] Ramsey B., Engelhaupt D., Speegle C., O’Dell S., Austin R., Kolodziejczak J., Weisskopf M. “The HERO Program, high-energy replicated optics for a hard-x-ray balloon payload”, *SPIE Proc.* **3765**, 816 (1999)
- [Ramsey et al. 2001] Ramsey B., Alexander C., Apple J., Benson C., Dietz K., Elsner R., Engelhaupt K., Ghosh K., Kolodziejczak J., O’Dell S., Speegle C., Swartz D., Weisskopf M. “HERO: program status and first images from a balloon-borne focusing hard-x-ray telescope”, **4496**, 140 (2001)
- [Rancourt 1996] Rancourt J. “Optical thin films user handbook”, SPIE press. Bellingham, Wash. (1996)
- [Revillard 1994] Revillard J., “Determination of X-Ray multilayer structures using a simulated annealing algorithm”, rapporto su stage presso ESRF (1994)
- [Röntgen 1896] Röntgen: “Über eine neue Art von Strahlen”, traduzione inglese in *Nature*, **53**, 274, (1896)
- [Rossi 1971] Rossi B., “*Ottica*”, Tamburini editore, Milano (1971)
- [Shafer 1994] Shafer D., “Global Optimization in Optical Design”, *Comp. Phys.* v.8, n.2 (1994)

Bibliografia

- [Schoen 2002] Schoen F., “Metodi di Ottimizzazione Globale”, versione online <http://globopt.dsi.unifi.it> (2002)
- [Shelten, Mika 1979] Shelten J., Mika K., “Calculated reflectivity of supermirrors” Nucl. Instr. Methods **160**, 287-294 (1979)
- [Serlemitsos, Soong 1995] Serlemitsos P. , Soong Y., “Foil x-ray mirrors”, Exp. Astr. (1995)
- [Serlermitsos 1997] Serlermitsos P., “The multilayer option for conical foil X-ray mirrors” SPIE Proc. **3113**, 244 (1997)
- [Spiller 1994] Spiller E., “Soft X-Rays Optics”, SPIE press, Bellingham, Wash. (1994)
- [Tamura et al. 2003] Tamura K., Yamashita K., Tawara Y., Ogasaka Y., Satake H., Nomoto K. Okajima T. SPIE Proc. **4851**, in press (2003)
- [Tananbaum et al. 1999] Tananbaum H., White N., Bookbinder A., Marshall F., Cordova F. “Constellation X-ray mission: implementation concept and science overview”, SPIE Proc. **3765**, 62 (1999)
- [Trinchieri et al. 1999] Trinchieri G., Israel G., Chiappetti L., Belloni T., Stella L., Primi F., Fabbiano P., Pietsch W., “Broad band X-ray spectra of M31 sources with BeppoSAX”, A&A, **348**, 43 (1999)
- [Underwood, Barbee 1981] Underwood J. H., Barbee T. W. Appl. Opt. **20**, 17, 3027 (1981)
- [Van Speybroeck, Chase 1972] Van Speybroeck L. P. , Chase R. C.: Appl. Opt., **12**, 24 (1972)
- [Vinogradov, Zeldovich 1977] Vinogradov A., Zeldovich B., “X-ray and far UV multilayer mirrors: principles and possibilities”, Appl. Opt., **16**, 89 (1977)
- [Vink et al. 2001] Vink J., Laming J., Kaastra J., Bleeker J., Bloemen H., Oberlack U., “Detection of the 67.9 keV and 78.4 keV lines associated with the radio-active decay of ^{44}Ti in Cassiopeia A”, Ap. J. **560**, L79 (2001)
- [Werner 1977] Werner W. “Imaging properties of Wolter type I x-ray telescopes” (1977)
- [Windt et al. 2000] Windt D. L., Christensen F., Craig W., Hailey C., Harrison F., Jimenez-Garate M., Kalyanaraman R., Mao P. SPIE Proc. **4012**, 442 (2000)
- [Windt 1998] Windt D., “IMD - Software for modelling the optical properties of multilayer films”, Comp. Phys., **12**, 360, <http://cletus.phys.columbia.edu/windt/idl/> (1998)
- [Wolter 1952a] Wolter H.: Ann. der. Phys. NY, **10**, 94 (1952)

[Wolter 1952b] Wolter H.: Ann. der. Phys. NY, **10**, 286 (1952)

[Zachariasen 1994] Zachariasen W., "Theory of X-Ray Diffraction in Crystals", Dover Publications, Inc. New York, NY (1994)

[Zeyher 1994] Zeyher A., "Optical packages look for global minima", Comp. Phys., v.8, n. 2, 137 (1994)