09

Использование компьютерной алгебры для решения задачи трассировки лучей

© В. Паульс, А.А. Чертовских

Институт физики микроструктур РАН,
603087 д. Афонино, Кстовский р-н, Нижегородская обл., Россия
e-mail: walter.pauls@gmail.com

Поступило в Редакцию 28 мая 2025 г.
В окончательной редакции 28 мая 2025 г.
Принято к публикации 28 мая 2025 г.

Для рентгенооптических схем с зеркалами описываемыми поверхностями второго порядка трассировка лучей может быть проведена явным образом. Рассмотрена схема Шварцшильда двух типов — схема с неконцентрическими сферическими зеркалами и схема, в которой первое зеркало является эллипсоидом вращения. Полученные точные решения проанализированы с помощью систем символьной алгебры, что позволило в некоторых случаях вычислить аберрации высоких порядков, например, все аберрации пятого порядка. Для схемы Шварцшильда со сферическими зеркалами показано, что приближенные решения хорошо сходятся к точным. Для схемы с одним эллиптическим зеркалом вычислены аберрации третьего порядка и рассмотрены условия апланатичности.

Ключевые слова: рентгеновская оптика, схема Шварцшильда, эллиптическое зеркало, трассировка, аберрации, символьная алгебра.

DOI: 10.61011/JTF.2025.10.61340.113-25

Введение

В связи со значительным прогрессом в технологии нанесения многослойных зеркальных покрытий (см., например, таблицы с рекордными коэффициентами отражения в [1,2]) оптические схемы с отражающей рентгеновской оптикой получают все большее распространение, начиная с рентгеновской микроскопии и литографии и заканчивая рентгеновской астрономией. Оптические схемы рентгеновского диапазона имеют свои особенности. Даже для рекордных коэффициентов отражения многослойных зеркал в рентгеновском диапазоне длин волн, таких, как, например, 72 % на длине волны $\lambda = 11.2\,\mathrm{nm}$ интенсивность рабочего излучения быстро (экспоненциально) падает с увеличением количества зеркал. Таким образом, количество используемых зеркал жестко ограничено. Еще одной особенностью рентгеновской оптики является высокий уровень требований к допустимым отклонениям поверхности зеркала от заданного профиля вследствие малой рабочей длины волны, например, по критерию Марешаля меньше, чем $\lambda/14$. Изготовление и метрология зеркал с большими отклонениями от сферической формы на таком уровне требует колоссальных затрат и сопряжено с большими трудностями [3]. Наконец, следует отметить, что многослойные зеркала для оптики нормального падения не допускают большого разброса углов падения в силу необходимости выполнения условия Брэгга-Вульфа.

Таким образом, в отличие от оптических схем для длин волн вплоть до глубокого ультрафиолета, зеркальные рентгенооптические схемы в большинстве случаев имеют относительно простую геометрию. Как пример, можно привести двухзеркальную шварцшильдовскую схему, которая в самом простом своем варианте использует два сферических зеркала. В такой ситуации с теоретической точки зрения вполне уместно задаться вопросом, какие свойства простых зеркальных систем могут быть описаны явным образом без использования численного моделирования. Аналитические расчеты свойств схемы Шварцшильда были произведены в работах [4–7] для концентрических и неконцентрических конфигураций. В этих работах была вычислена сферическая аберрация третьего и пятого порядков, а также получены аберрации Зейделя третьего порядка в апланатических точках. В работе [7] предложено в качестве критерия использовать наименьший диаметр пятна рассеяния точки, находящейся на оптической оси.

Целью настоящей работы является выработка систематического подхода к рассмотрению в рамках геометрической оптики простых зеркальных схем, основывающегося на следующих наблюдениях:

- при трассировке луча точка его пересечения с поверхностью с заданной квадрикой может быть найдена в явном виде;
- трассировка проводится с помощью рекурсивного определения отображений, описывающих оптическую конфигурацию луча от поверхности к поверхности;
- использование компьютерной алгебры позволяет нам работать с достаточно громоздкими выражениями, которые мы не смогли бы обработать вручную.

Таким образом, для небольшого количества зеркал — одного или двух — можно получать явные выражения для оптической конфигурации лучей, отображаемых от

плоскости предмета к плоскости изображения. Такого рода выражения можно далее использовать для оценки точности численных методов трассировки, рассмотрения зависимости аберраций Зейделя от параметров оптической схемы, предварительной оптимизации оптических схем и так далее.

В разд. 1 мы дадим подробное описание методики, используемой нами для аналитической трассировки лучей. В разд. 2 мы рассмотрим хорошо известную двухзеркальную схему Шварцшильда со сферическими зеркалами, вычислим аберрации высоких порядков, включая пятый, и рассмотрим вопрос сходимости параксиального разложения к точному решению. В разд. 3 мы рассмотрим схему Шварцшильда, в которой первое зеркало представляет собой эллипсоид вращения, и попытаемся оценить, насколько связанное с этим увеличение числа степеней свободы для задания оптической конфигурации позволяет улучшить качество оптического отображения.

1. Описание метода аналитической трассировки

Как известно, задача трассировки лучей через оптическую систему в рамках геометрической оптики сводится к последовательному вычислению условия пересечения лучом оптической поверхности и определению направления отраженного или преломленного луча. Для удобства, мы будем рассматривать оптическую конфигурацию лучей с использованием гамильтонова формализма (см. §18 книги [8]). Неявно мы всегда предполагаем, что коэффициент преломления среды равен единице. Пусть плоскость предмета параллельна плоскости xy и пересекает ось z в точке z_{Obj}. Предположим, что искомый луч исходит из точки $\mathbf{r}^{(0)} = (x, y, z_{Obj})$, по направлению, заданному вектором единичной длины (направляющим вектором) $\hat{\mathbf{d}}^{(0)} = (p, q, \sqrt{1-p^2-q^2})$ (в сферических координатах направление луча также можно записать как $\hat{\mathbf{d}}^{(0)} = (\sin\alpha\cos\beta, \sin\alpha\sin\beta, \cos\alpha)$). Заметим, что конфигурация луча полностью определяется вектором $\omega = (x, y, p, q)$. Сам луч вплоть до точки пересечения со следующей оптической поверхностью описывается выражением $\mathbf{r}^{(0)} + t\hat{\mathbf{d}}^{(0)}$.

При проведении трассировки от оптической поверхности i к оптической поверхности $i+1$ нам необходимо: а) вычислить точку пересечения $\mathbf{r}^{(i+1)}$ луча $\mathbf{r}^{(i)} + t\hat{\mathbf{d}}^{(i)}$ со следующей оптической поверхностью, б) при отражении луча от зеркала вычислить направление отраженного луча $\hat{\mathbf{d}}^{(i+1)}$. Допустим, что уравнение оптической поверхности задается неявным образом как $F(\mathbf{r}) = 0$, где $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Тогда точка пересечения луча и поверхности находится с помощью решения t^* (не обязательно единственного) уравнения

$$F(\mathbf{r}^{(i)} + t^*\hat{\mathbf{d}}^{(i)}) = 0, \tag{1}$$

как $\mathbf{r}^{(i+1)} = \mathbf{r}^{(i)} + t^*\hat{\mathbf{d}}^{(i)}$. Для нахождения направления отраженного луча с помощью соотношения

$$\hat{\mathbf{d}}^{(i+1)} = \hat{\mathbf{d}}^{(i)} - 2\langle\hat{\mathbf{d}}^{(i)}, \hat{\mathbf{n}}^{(i+1)}\rangle\,\hat{\mathbf{n}}^{(i+1)} \tag{2}$$

нам нужно знать нормальное направление $\hat{\mathbf{n}}^{(i+1)}$ к зеркалу в точке $\mathbf{r}^{(i+1)}$, которое вычисляется как градиент функции $F(x, y, z)$. Отметим, что как направления луча $\hat{\mathbf{d}}^{(i)}$, так и нормальные направления $\hat{\mathbf{n}}^{(i)}$ являются единичными векторами.

В некоторых случаях уравнение (1), определяющее точку пересечения, может быть решено в явном виде. А именно, явные решения возможны, по крайней мере теоретически, в случае, если функция $F(x, y, z)$ является полиномом не выше четвертой степени. Так как явные выражения для решений уравнений четвертой степени чрезвычайно громоздки, мы на данный момент ограничились рассмотрением следующих поверхностей вращения вокруг оси z не выше второго порядка:

- сферическая поверхность

$$F(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - R^2,$$

- эллипсоид вращения

$$F(x, y, z) = \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} - 1,$$

- двуполостной гиперболоид вращения

$$F(x, y, z) = \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} - \frac{z^2}{b^2} + 1,$$

- сферический параболоид

$$F(x, y, z) = \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} - 2z.$$

Заметим, что вышеприведенные способы записи оптических поверхностей можно при желании приводить к более удобному виду при помощи сдвигов системы координат. Еще одним соображением в пользу ограничения порядка оптической поверхности является снижение неопределенности, вызваной, в случае поверхности высокого порядка, необходимостью выбора одного из нескольких решений уравнения (1).

Обычно трассировка лучей производится от плоскости предмета к плоскости изображения, которую мы также предполагаем параллельной плоскости xy и пересекающей ось z в точке z_{Img}. При этом вычисление точек пересечения с зеркалами и направлений отраженного луча происходит рекурсивно. Предполагая, что оптическая поверхность с индексом i последняя, от которой отражается луч перед тем как пересечь плоскость изображения, мы получим следующее выражение для точки $\mathbf{r}^{(Img)}$, в которой луч пересекает плоскость изображения:

$$\mathbf{r}^{(Img)} = \mathbf{r}^{(i)} + \frac{z_{Img} - r_z^{(i)}}{\hat{d}_z^{(i)}}\,\hat{\mathbf{d}}^{(i)}.$$

Здесь, $r_z^{(i)}$ и $\hat{d}_z^{(i)}$ обозначают проекции векторов $\mathbf{r}^{(i)}$ и $\hat{\mathbf{d}}^{(i)}$ на ось z. Уточним, что направление $\hat{\mathbf{d}}^{(Img)}$ луча, пересекающего плоскость изображения, совпадает с направлением $\hat{\mathbf{d}}^{(i)}$ луча, отраженного от последней оптической поверхности. Так как в плоскости изображения оптическая конфигурация луча описывается координатами точки пересечения луча и плоскости (X, Y), а также проекциями направления луча (P, Q) на оси x и y, мы получаем описание оптического отображения $\Omega(x, y, p, q) : \mathbb{R}^4 \longrightarrow \mathbb{R}^4$ как состоящего из четырех функций $X(x, y, p, q)$, $Y(x, y, p, q)$, $P(x, y, p, q)$, $Q(x, y, p, q)$. Для осесимметричных систем отображение $\Omega(x, y, p, q)$ является инвариантным по отношению к вращениям вокруг оси z. Кроме того, поскольку рассматриваемая система гамильтонова, имеет место сохранение фазового объема. Оба этих требования налагают значительные ограничения на возможные оптические отображения. Отметим, что при расчете линзовых систем все замечания, касающиеся вычисления точек пересечения трассируемого луча с оптическими поверхностями при помощи уравнения (1), остаются в силе, а закон отражения (2) нужно заменить на закон Снеллиуса. Выражения, полученные для линзовых систем, при этом выходят более громоздкими в силу большей алгебраической сложности формулы Снеллиуса и наличия двух оптических поверхностей в одной линзе.

Несмотря на кажущуюся элементарность вышеописанного подхода, после одного-двух шагов явные выражения для оптической конфигурации трассируемого луча становятся настолько громоздкими, что их уже почти невозможно обрабатывать вручную. Для работы с такими выражениями можно использовать системы компьютерной алгебры, такие как Mathematica [9] (использованная при подготовке настоящей работы), Maple, а также недавно разработанный програмный пакет Symbolica. В следующих разделах мы рассмотрим несколько примеров такого использования. В заключительном разделе мы подведем итоги и предложим обощение использованного в настоящей работе метода для зеркал общего вида.

2. Схема Шварцшильда со сферическими зеркалами

Схема Шварцшильда (рис. 1) с двумя сферическими зеркалами — одна из самых хорошо изученных зеркальных оптических схем в рентгеновской оптике.

В нашей схеме мы предполагаем, что первое вогнутое зеркало центрировано у начала координат. Для упрощения вычислений мы следуем работе [7] и предполагаем, что радиус второго выпуклого зеркала равен единице, в то время как радиус первого вогнутого задан как свободный параметр R. Поскольку рассматриваемая схема не обязательно концентрическая, центр второго зеркала лежит на оси z в точке $z = m$. Заметим, что с помощью компьютерной алгебры можно дать явное выражение для оптического отображения. Ввиду громоздкости, выражения для $\mathbf{r}_x^{(Img)}$, $\mathbf{r}_y^{(Img)}$, $\mathbf{r}_z^{(Img)}$ и $\hat{\mathbf{d}}_x^{(Img)}$, $\hat{\mathbf{d}}_y^{(Img)}$, $\hat{\mathbf{d}}_z^{(Img)}$ были сохранены как текстовые ASCI файлы формата *.m* (пакетный файл в Mathematica) размерами 50 и 83 KB. На данный момент кажется, что такие явные выражения можно использовать разве что для проверки точности вычислений численных моделей оптических схем. Тем не менее для дизайна оптических схем проекционных объективов рентгеновских литографов были предложены подходы [10,11], в которых схемы со сферическими зеркалами используются для примерной оценки пространства оптических и конструктивных параметров. Выступая в качестве начальных условий для дальнейшей оптимизации с использованием асферических поправок, они позволяют определять, в силу малости поправок, такие параметры, как размеры зеркал и их положения. Можно надеятся, что использование точных решений позволит лучше оценивать качество оптического отображения для таких начальных конфигураций.

Чтобы получить более детальную информацию, мы прибегнем к разложению оптического отображения $\omega(x, y, p, q)$ в ряд Тейлора по переменным (x, y, p, q):

$$\Omega(x, y, p, q) = \sum_{n_x=0}^{\infty}\sum_{n_y=0}^{\infty}\sum_{n_p=0}^{\infty}\sum_{n_q=0}^{\infty}\Omega(n_x, n_y, n_p, n_q)x^{n_x}y^{n_y}p^{n_p}q^{n_q}, \tag{4}$$

где

$$\Omega(n_x, n_y, n_p, n_q) = \frac{1}{n_x!n_y!n_p!n_q!}\frac{\partial^{n_x}}{\partial x^{n_x}}\frac{\partial^{n_y}}{\partial y^{n_y}}\frac{\partial^{n_p}}{\partial p^{n_p}}\frac{\partial^{n_q}}{\partial q^{n_q}} \times\Omega(x, y, p, q)|_{(x,y,p,q)=0}.$$

Так как из-за осевой симметрии все члены с четными степенями равны нулю, мы сначала вычислим члены первого порядка. При этом положение параксиального фокуса по z можно найти, приравнивая, например, производную от $X(x, y, p, q)$ по p к нулю и получая следующее выражение:

$$z_{parax} = \frac{2mR + 2m^2R - 4mz_{Obj} - 4m^2z_{Obj} + Rz_{Obj} + 2mRz_{Obj}}{R + 2mR - 2z_{Obj} - 4mz_{Obj} + 2Rz_{Obj}}. \tag{5}$$

Тогда матрица производных первого порядка в точке $(x, y, p, q) = 0$ будет иметь следующий вид

$$\begin{pmatrix} \partial_x X & \partial_y X & \partial_p X & \partial_q X \\ \partial_x Y & \partial_y Y & \partial_p Y & \partial_q Y \\ \partial_x P & \partial_y P & \partial_p P & \partial_q P \\ \partial_x Q & \partial_y Q & \partial_p Q & \partial_q Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mathfrak{a}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\mathfrak{a}} & 0 & 0 \\ \mathfrak{b} & 0 & \mathfrak{a} & 0 \\ 0 & \mathfrak{b} & 0 & \mathfrak{a} \end{pmatrix} + \Delta z \begin{pmatrix} \mathfrak{b} & 0 & \mathfrak{a} & 0 \\ 0 & \mathfrak{b} & 0 & \mathfrak{a} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

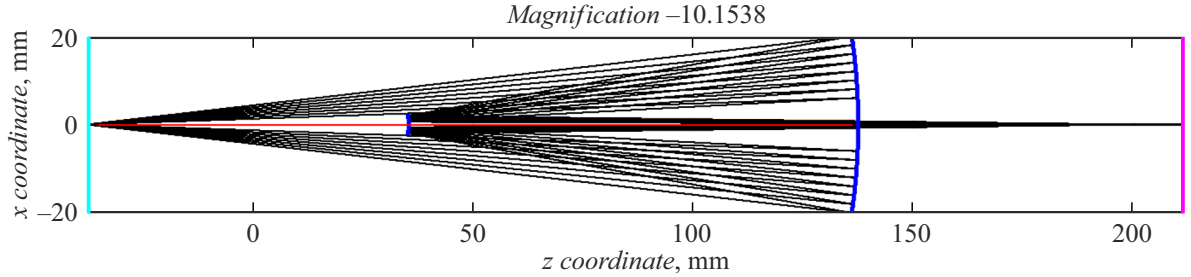

Рис. 1. Схема Шварцшильда с двумя сферическими зеркалами. Радиус первого вогнутого зеркала $R_1 = 137.5$ mm, радиус второго выпуклого зеркала $R_2 = 24$ mm. Расстояние между центром первого и второго зеркал $m = 11.5$ mm. Плоскость предмета $z_{Obj} = -37.5$ mm обозначена голубым цветом, плоскость изображения $z_{Obj} \approx 211.8077$ mm — пурпурным.

где коэффициенты $\mathfrak{a}$ и $\mathfrak{b}$ заданы как

$$\mathfrak{a} = \frac{R + 2mR - 2z_{Obj} - 4mz_{Obj} + 2Rz_{Obj}}{R},$$

$$\mathfrak{b} = \frac{2 + 4m - 2R}{R}.$$

Переменная Δz обозначает расстояние от параксиального фокуса до плоскости изображения $\Delta z = z - z_{parax}$. Отметим, что приведенные выше формулы легко получить с помощью матричной оптики [12], тогда как для вычисления аберраций более высокого порядка становится необходимым использование компьютерной алгебры.

Для схемы Шварцшильда со сферическими зеркалами вычисление производных с помощью пакета Mathematica на компьютере с процессором Intel Core i5-1235U и оперативной памятью 16 GB занимает несколько минут, в то время как для вычисления всех производных пятого порядка нужно уже несколько часов. По этой причине мы пока вычислили более высокие производные, вплоть до одинадцатого порядка, только для сферической аберрации и дисторсии, поскольку сложность вычислений очень быстро растет с увеличением порядка производных. При этом для отдельных аберраций одинадцатого порядка вычисление занимает несколько часов.

Так как схема Шварцшильда осесимметрична и инвариантна по отношению к отражениям, все допустимые производные третьего порядка описываются двенадцатью вещественными параметрами. Кроме того, отображение $\Omega(x, y, p, q)$ должно сохранять фазовый объем, что сокращает количество свободных параметров до шести. Пять из них определяют компоненты $X(x, y, p, q)$ и $Y(x, y, p, q)$ и соответствуют аберрациям Зейделя. Поскольку выражения общего вида для неконцентрической схемы Шварцшильда оказываются слишком громоздкими, ограничимся тем, что приведем здесь выражения для сферической аберрации

$$A = -\frac{(R-1)z_{Obj}^2}{R^2 f(R, z_{Obj})} \times \left(R^2(z_{Obj}+1)^2 - R(2+3z_{Obj})z_{Obj} + z_{Obj}^2\right),$$

комы

$$B = \frac{3(R-1)z_{Obj}}{R^2 f(R, z_{Obj})} \times \left(R^2(z_{Obj}+1)^2 - R(2+3z_{Obj})z_{Obj} + z_{Obj}^2\right),$$

кривизны поля C

$$C = -\frac{R-1}{R^2 f(R, z_{Obj})}\left(R^2(1 + 4z_{Obj} + 2z_{Obj}^2) - 2R(2+3z_{Obj})z_{Obj} + 2z_{Obj}^2\right),$$

астигматизма D

$$D = -\frac{R-1}{R^2 f(R, z_{Obj})} \times \left(R^2(z_{Obj}+1)^2 - R(2+3z_{Obj})z_{Obj} + z_{Obj}^2\right),$$

и дисторсии E

$$E = -\frac{R-1}{R^2 f(R, z_{Obj})} \times \left(R(2+3z_{Obj}) - R^2(z_{Obj}+2) - z_{Obj}\right),$$

в плоскости параксиального фокуса для концентрической схемы $m = 0$. В вышеприведенных выражениях $f(R, z_{Obj}) = (R - 2z_{Obj} + 2Rz_{Obj})$. Из выражения для сферической аберрации можно получить хорошо известные условия для точек апланатичности, которые в общем случае также оказываются очень громоздкими и поэтому не приводятся здесь. Заметим, что из вышеприведенных соотношений следует, что для концентрической схемы Шварцшильда в точках апланатичности

$$z_{Ob}^{(+)} = -\frac{R}{R + \sqrt{R} - 1},$$

$$z_{Ob}^{(-)} = -\frac{R}{R - \sqrt{R} - 1},$$

одновременно равны нулю сферическая аберрация, кома и астигматизм, а для кривизны поля и дисторсии мы получаем выражения

$$C^{(+)} = -\frac{(R-1)(R + \sqrt{R} - 1)}{R(R - \sqrt{R} - 1)},$$

$$C^{(-)} = -\frac{(R-1)(R-\sqrt{R}-1)}{R(R+\sqrt{R}-1)},$$

и

$$D^{(+)} = -\frac{(R-1)(R+\sqrt{R}-1)^2}{R^2(R-\sqrt{R}-1)},$$

$$D^{(-)} = -\frac{(R-1)(R-\sqrt{R}-1)^2}{R^2(R+\sqrt{R}-1)}.$$

Для справки мы также приведем выражения для сферической аберрации пятого порядка

$$A^{(+)} = \frac{3(R-1)^3R^2}{4(R-\sqrt{R}-1)(R+\sqrt{R}-1)^5},$$

$$A^{(-)} = \frac{3(R-1)^3R^2}{4(R-\sqrt{R}-1)^5(R+\sqrt{R}-1)}.$$

Для того, чтобы оценить степень применимости степенных разложений при рассмотрении оптических схем, мы сравнили численные результаты, полученные с помощью трассировки, использующей явные выражения для оптического отображения, с приближенными вычислениями, включающими в себя аберрации порядка выше третьего. В свою очередь, результаты трассировки с помощью явных выражений были проверены с помощью программы Zemax. На рис. 2 представлены результаты сравнения проведенного для сферической аберрации и дисторсии.

Из сравнения с точным решением видно, что с повышением порядка приближения расхождение между точным и приближенным решением уменьшается. Например, для сферической аберрации, представленной на рис. 2 слева совпадение между точным решением и приближенным кажется достаточно хорошим вплоть до апертуры порядка $0.4-0.5$ для пятого и седьмого порядков. Мы предполагаем, что при систематическом увеличении порядка приближения будут сходиться к точному решению, поскольку на рис. 3 видно, что разница между точным и приближенным решением очевидным образом уменьшается, по мере того, как порядок приближения увеличивается с третьего по одиннадцатый. Хотя порядок вычисленных аберраций и слишком мал для того, чтобы делать выводы о скорости сходимости и поведении соответствующего степенного ряда Тейлора (как показывает опыт анализа степенных рядов в статистической физике, для этого требуется порядка ста коэффициентов), тем не менее кажется, что, по крайней мере в изученной нами конфигурации, этот ряд ведет себя достаточно хорошо.

Подводя итоги рассмотрения схемы Шварцшильда со сферическими зеркалами, можно сказать, что методы компьютерной алгебры позволяют провести исчерпывающий анализ этой схемы благодаря ее простоте. В то же время пространство возможных параметров слишком ограничено для осуществления полноценного дизайна. Фактически неконцентрическая схема со сферическими зеркалами и фиксированным увеличением допускает всего один свободный параметр — расстояние между центрами зеркал. Еще одну степень свободы для дизайна схемы можно ввести, используя для первого вогнутого зеркала вместо сферы эллипсоид вращения, что и будет сделано в разд. 3.

3. Схема Шварцшильда с одним сферическим зеркалом и одним зеркалом эллипсоидом вращения

Поскольку трассировка лучей в явном виде возможно также, например для эллипсоидов вращения, мы рассмотрели двухзеркальную схемы Шварцшильда, в которой первое вогнутое зеркало является эллипсоидом вращения с параметрами a и b. Несмотря на казалось бы небольшое изменение оптической схемы, сложность задачи (в смысле объема вычислений) вырастает больше чем на порядок. Так, размер текстовых ASCI файлов с точными выражениями для $\mathbf{r}_x^{(Img)}$, $\mathbf{r}_y^{(Img)}$, $\mathbf{r}_z^{(Img)}$ и $\hat{\mathbf{d}}_x^{(Img)}$, $\hat{\mathbf{d}}_y^{(Img)}$, $\hat{\mathbf{d}}_z^{(Img)}$ теперь составляет 1091 и 657 KB.

В силу возросшей сложности выражений на данный момент мы ограничились вычислением величин первого порядка, таких как параксиальный фокус

$$z_{parax} = \frac{h(a,b,m,z_{Obj})}{g(a,b,m,z_{Obj})}$$

и матрица первых производных, а также аберраций третьего порядка, расчет которых занял несколько часов. Матрица первых производных имеет такой же вид, как в формуле (6), с той лишь разницей, что коэффицинты $\mathfrak{a}$ и $\mathfrak{b}$ в этот раз заданы как

$$\mathfrak{a} = \frac{a^2}{g(a,b,m,z_{Obj})},$$

$$\mathfrak{b} = 2 + \frac{2b(2m-2b+1)}{a^2}.$$

В вышеприведенных формулах $g(a,b,m,z_{Obj})$ и $h(a,b,m,z_{Obj})$ — многочлены по переменным a, b, m, z_{Obj}, определенные как

$$g(a,b,m,z_{Obj}) = 2b(-1+2b-2m)(b-z_{Obj}) + a^2(1-4b+2m+2z_{Obj}),$$

и

$$h(a,b,m,z_{Obj}) = 2b(b+2bm-2m(1+m))(b-z_{Obj}) + a^2(2m^2-2b(1+2m)+z_{Obj} + 2m(1+z_{Obj})).$$

Явные выражения для аберраций третьего порядка настолько громоздки, что мы не сочли возможным привести их здесь. Тем не менее, результаты вычислений для схемы Шварцшильда со сферическими зеркалами и

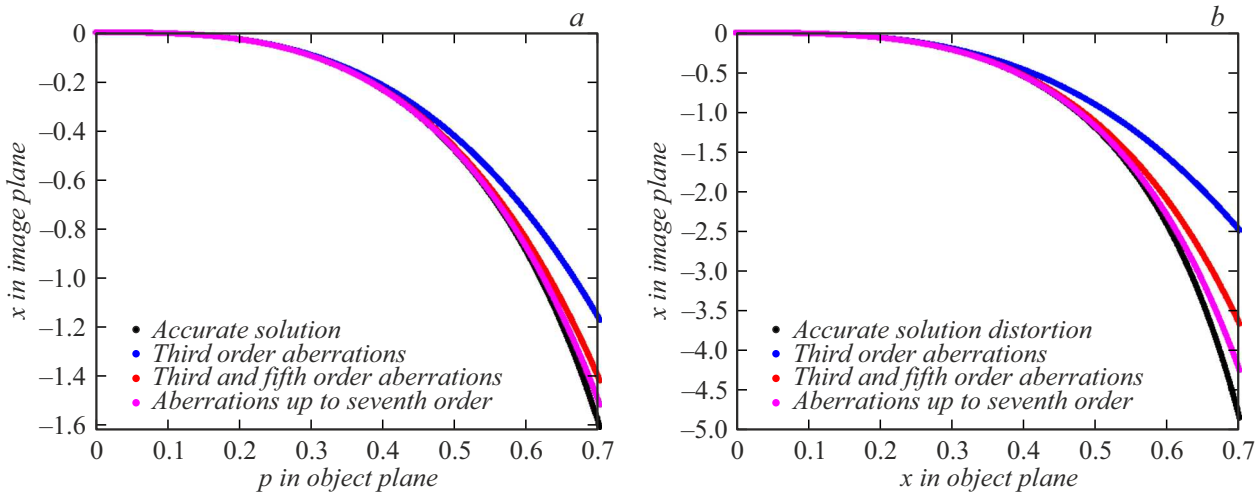

Рис. 2. Сравнение результатов точной трассировки с приближениями третьего, пятого и седьмого порядка для схемы Шварцшильда с такими же параметрами как и на рис. 1. Для наглядности координаты нормированы по отношению к радиусу второго зеркала. Слева представлено сравнение для лучей, исходящих из точки, расположеной на оси z с направлениями лежащими в плоскости xz, т. е. с начальной конфигурацией $(0, 0, p, 0)$. Справа представлено сравнение для лучей, направленных параллельно оси z, из точки, лежащей на оси x, т. е. с начальной конфигурацией $(x, 0, 0, 0)$. Для облегчения сравнения из точного решения вычтена часть, соответствующая линейному увеличению, так, чтобы быда видна только нелинейная дисторсия

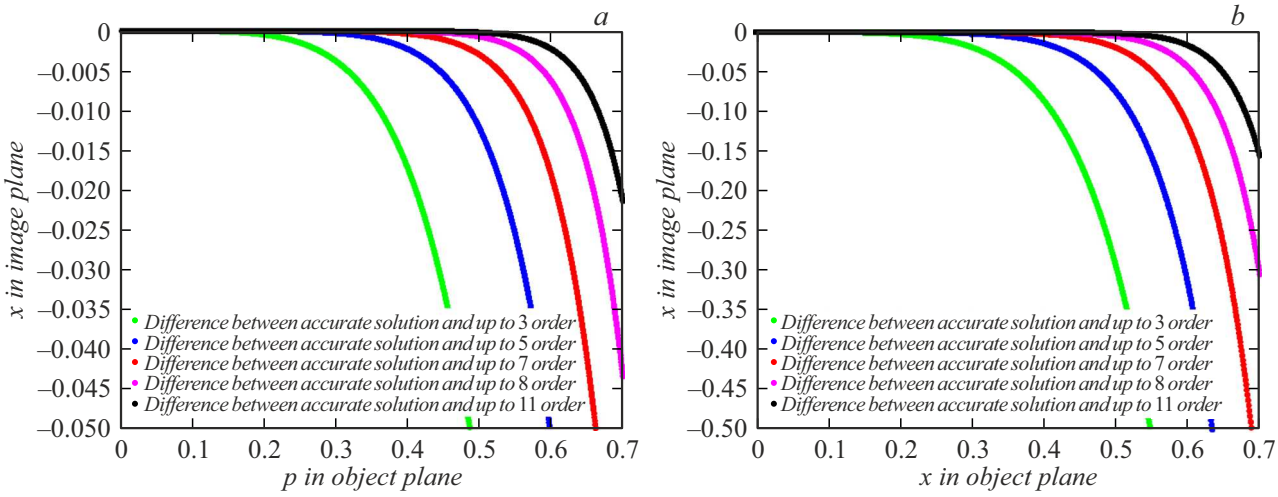

Рис. 3. Численное расхождение между результатами точной трассировки и приближениями, вплоть до третьего, пятого, седьмого, девятого и одиннадцатого порядков, для схемы Шварцшильда с такими же параметрами, как и на рис. 1. В отличие от рис. 2, представлена разность точного и приближенного решений. Для наглядности координаты нормированы по отношению к радиусу второго зеркала. Слева представлены результаты для лучей, исходящих из точки, расположеной на оси z с направлениями, лежащими в плоскости xz, т. е. с начальной конфигурацией $(0, 0, p, 0)$. Справа представлены результаты для лучей, направленных параллельно оси z, из точки, лежащей на оси x, т. е. с начальной конфигурацией $(x, 0, 0, 0)$.

схемы с одним эллиптическим зеркалом были сгруппированы в виде пакета на языке Mathematica и находятся в открытом доступе на веб сервисе gitflic.

Если рассматривать оптические схемы с фиксированным увеличением M, дополнительно накладывая условие апланатичности, то пространство решений будет двухмерным, в отличие от схемы Шварцшильда с концентрическими сферическими зеркалами. Для примера мы провели оценку схемы с десятикратным увеличением, варьируя параметры a и m. При этом m изменялось от -1 до 1, в то время как параметр a изменялся от $R^* - 1$ до $R^* + 1$, где

$$R^* = \frac{3 + 2M + 3M^2 - (M-1)\sqrt{5 + 6M + 5M^2}}{2(1 + 2M + M^2)}$$

— радиус, соответствующий десятикратному увеличению в концентрической схеме Шварцшильда со сферическими зеркалами. На рис. 4 показано изменение положе-

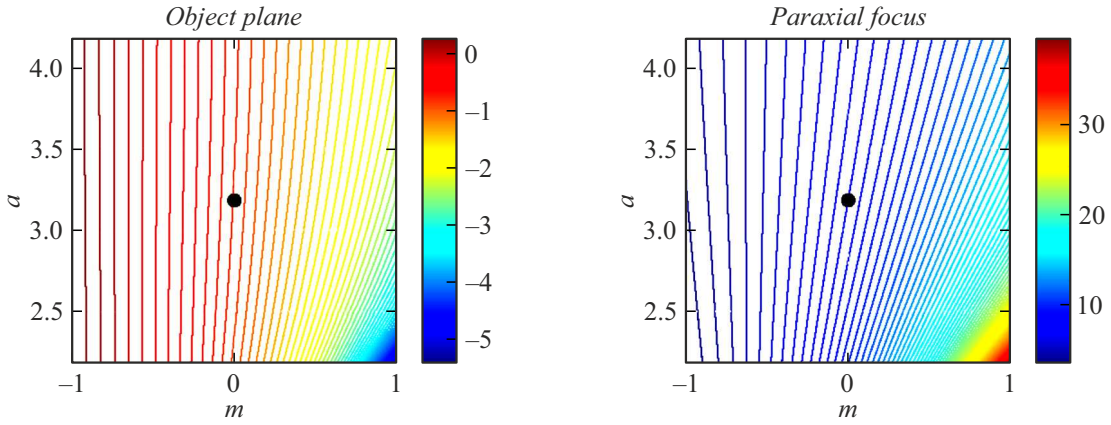

Рис. 4. Зависимость положения предметной плоскости z_{Obj} и плоскости параксиального фокуса от параметров a и m с соблюдением условия апланатичности. Черной точкой обозначена точка апланатичности для концентрической схемы Шварцшильда со сферическими зеркалами.

ния предметной плоскости и плоскости параксиального фокуса в зависимости от параметров a и m. Параметр b при этом вычисляется из условия апланатичности и фиксированного увеличения.

Для оценки качества оптической схемы мы также вычислили соответствующие изменения аберраций третьего порядка, представленные на рис. 5. Из рисунка видно, что точка апланатичности концентрической схемы является единственной, в которой исчезают коэффициенты сразу трех аберраций третьего порядка — сферической аберрации, комы и астигматизма. Кроме того, видно, что коэффициенты кривизны поля и дисторсии меняются разнонаправлено при изменении параметров a и m, так что не существует очевидной отличной от концентрической конфигурации, при которой оба этих коэффициента были бы оптимальны. Таким образом, для дальнейшей оптимизации схемы Шварцшильда необходимо рассматривать поверхности более высокого порядка, чем второй.

Выводы

В работе мы показали, что простые оптические схемы, использующие зеркала, описываемые поверхностями второго порядка, можно детально анализировать, используя программные пакеты для символьных вычислений. Для схемы Шварцшильда со сферическими зеркалами мы полностью вычислили все аберрации до пятого порядка включительно и частично — некоторые аберрации вплоть до одинадцатого порядка. Мы показали, используя численное моделирование, что приближенные решения хорошо сходятся к точным решениям, что позволяет надеяться расширить область применения параксиальных разложений, при условии, что мы будем в состоянии вычислять более высокие порядки. Необходимо отметить, что использованный нами подход может быть также применен для рассмотрения линзовых оптических схем. При этом, для рассчета хроматических аберраций в методологию вычисления аберраций, основанную на разложениях в ряд Тейлора, должна быть также включена зависимость от длины волны.

Как известно, концентрическая схема Щварцшильда допускает для фиксированного увеличения две апланатические конфигурации, что резко ограничивает количество допустимых конфигураций оптических схем. Число степеней свободы можно увеличить, рассматривая неконцентрические конфигурации и заменяя первое сферическое зеркало эллипсоидом вращения. Для таких систем вычислили аберрации третьего порядка и рассмотрели эффекты вариации расстояния между центрами зеркал и отклонения формы от сферической.

В данном случае оказалось, что увеличение количества степеней свободы не дало особых результатов, поскольку в апланатических точках концентрической схемы Шварцшильда исчезают также кома и астигматизм. Как известно, на практике для улучшения качества изображения в схеме Шварцшильда используют асферические поправки высоких порядков. Поэтому резонно задаться вопросом, можно ли расширить используемый в работе подход на случай зеркал порядка, более высокого чем второй?

Как уже было замечено в разд. 1, трассировку в явном виде, с теоретической точки зрения, можно провести только для поверхностей не выше четвертого порядка. Таким образом, рассмотреный в работе подход не будет работать в общем случае. Помимо этого, подход, основанный на возможности использования явных решений, оказывается в вычислительном смысле весьма расточительным — ведь при анализе, основанном на рассмотрении аберраций, пусть и очень высокого порядка, мы используем лишь малую часть всей имеющейся у нас информации о решениях, а именно, некоторое ограниченное количество производных. Тем не менее, возможен альтернативный подход, который мы здесь представим только в общих чертах и который будет детально рассмотрен в последующей публикации. Он ос-

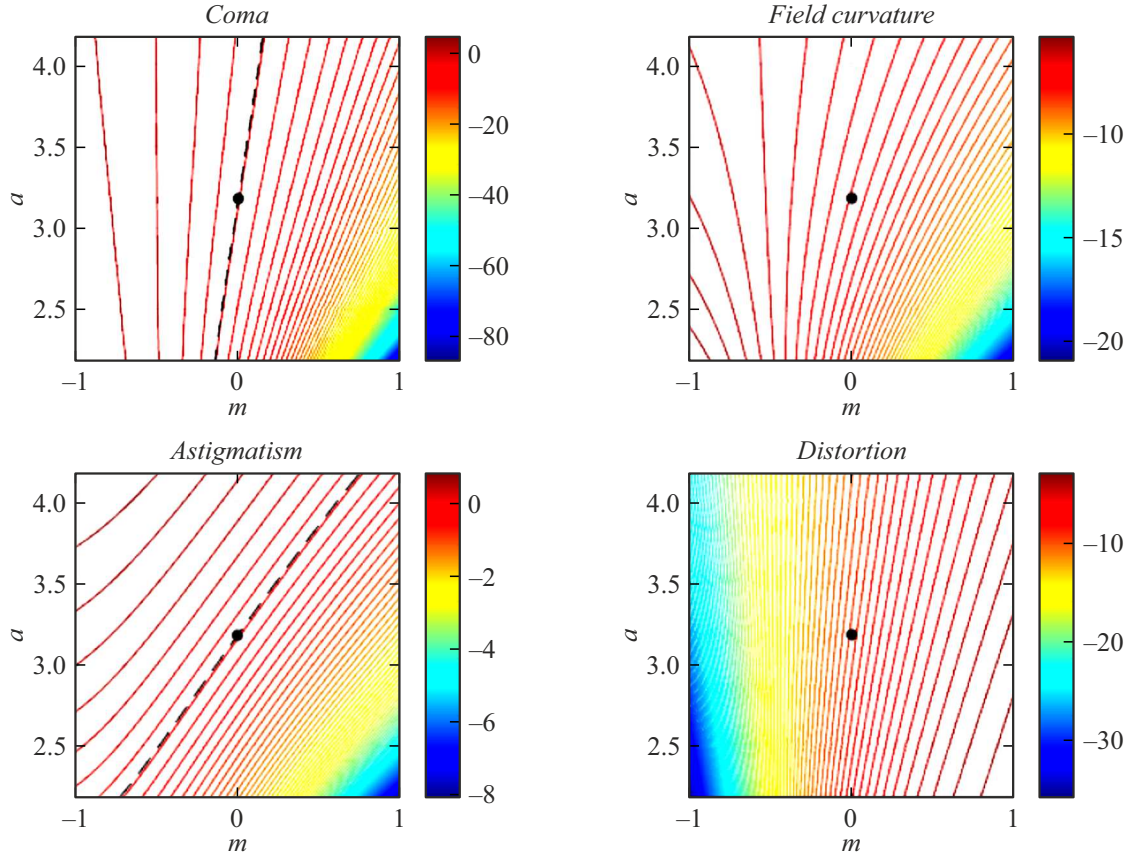

Рис. 5. Зависимость комы, кривизны поля, астигматизма и дисторсии от параметров a и m с соблюдением условия апланатичности. Черная точка соответствует точке апланатичности для концентрической схемы Шварцшильда со сферическими зеркалами. Штриховой линией показаны уровни зануления комы и астигматизма.

новывается на двух наблюдениях: во первых, матричную оптику, которая описывает эффекты первого порядка, можно обобщить таким образом, чтобы она включала в себя аберрации произвольного порядка, во вторых, для отдельно взятых зеркал аберрации высоких порядков можно вычислять с помощью вычисления производных неявных функций.

Следует отметить, что в электронной и ионной оптике расширения матричного подхода для расчета аберраций второго порядка предлагались еще в шестидесятых годах прошлого века (см. работы [13,14]), однако, насколько мы знаем, этот подход не был обобщен и систематизирован. В обобщении, которое мы разработали, предлагается описывать оптическое отображение от одной плоскости к другой с помощью так называемого матричного представления группы формальных диффеоморфизмов, в котором композиция отображений представляется с помощью умножения матриц (для одномерного случая такое представление было рассмотрено в работе [15]). Расчет оптических схем в таком случае можно производить, вычисляя аберрации оптического отображения от одной плоскости до другой, где плоскости расположены подходящим образом между зеркалами, и собирая итоговое отображение от предметной плоскости к плоскости изображения как рекурсивно определенную композицию отображений.

В заключение отметим, что представление оптического отображения в виде разложения в ряд типа (4) может быть также использовано для оценки функции рассеяния точки с учетом числовой апертуры объектива, подобно тому, как это было сделано в работе [7], однако в отличие от этой работы, в нашем случае функция рассеяния может быть рассчитана также во внеосевом положении в зависимости от полевой координаты. Этот аспект в особенности важен в связи с тем, что схемы типа Шварцшильда имеют ненулевую обскурацию.

Финансирование работы

Алгоритмы разработаны в рамках гос. задания № FFUF-2024-0022, численные расчеты проводились при поддержке гранта РНФ № 21-72-30029-П. Авторы выражают свою признательность рецензентам за полезные замечания.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] В.Н. Полковников, Н.Н. Салащенко, М.В. Свечников, Н.И. Чхало. УФН, **190**, 92 (2020). DOI: 10.3367/UFNr.2019.05.038623

[2] В.Н. Полковников, Н.И. Чхало. Тез. докл. XXIX симпозиума „Нанофизика и наноэлектроника“ (Н. Новгород, Россия, 2025), с. 533.

[3] P. Graeupner, P. Kuerz. Proc. SPIE, 12051, 1205102 (2022). DOI: 10.1117/12.2614778

[4] D.L. Shealy, D.R. Gabardi, R.B. Hoover, A.B. Walker Jr., J.F. Lindblom, T.W. Barbee Jr. J. Xray Sci. Technol., **1**, 190 (1989). DOI: 10.3233/XST-1989-1207

[5] А.А. Малютин. Квантовая электроника, **24** (1), 93 (1997). DOI: 10.1070/QE1997v027n01ABEH000801 [A.A. Malyutin, Quantum Electron., **27** (1), 90 (1997). DOI: 10.1070/QE1997v027n01ABEH000801]

[6] I.A. Artioukov, K.M. Krymski. Opt. Eng., **39** (8), 2163 (2000). DOI: 10.1117/1.1303727

[7] A. Budano, F. Flora, L. Mezi. Appl. Opt., **45** (18), 4254 (2006). DOI: 10.1364/AO.45.004254

[8] R.K. Luneburg. *Mathematical Theory of Optics* (University of California Press, Berkeley and Los Angeles, 1966)

[9] Wolfram Research, Inc., Mathematica, 14.1, 2024.

[10] F. Liu, Y. Li. Opt. Rev., **20** (2), 120 (2013). DOI: 10.1007/s10043-013-0017-2

[11] F. Liu, Y. Li. Appl. Opt., **52**(29), 7137 (2013). DOI: 10.1364/AO.52.007137

[12] А. Джеррард, Дж.М. Берч. *Введение в матричную оптику* (Мир, М., 1978). [Пер. с англ.: A. Gerrard, J.M. Burch. *Introduction to Matrix Methods in Optics* (A Wiley-Interscience Publication, London NY Sydney Toronto, 1975)]

[13] K.L. Brown, R. Belbeoch, P. Bounin. Rev. Sci. Instrum., **35**, 481 (1964). DOI: 10.1063/1.1718851

[14] I. Takeshita. Z. Naturforschg., **21** (1–2), 9 (1966). DOI: 10.1515/zna-1966-1-204

[15] A. Frabetti, D. Manchon. *IRMA Lect. In Math. And Theor.* Phys., (K. Ebrahimi-Fard et F. Fauvet eds), v. 21, p. 91–148. Europ. Math. Soc. (2015).