

Численное моделирование рентгеновской оптики: методика и программная реализация

© А.А. Чертовских, В. Паульс

Институт физики микроструктур РАН,
603087 Афонино, Нижний Новгород, Нижегородская обл., Россия
e-mail: ac@workflow-mail.ru

Поступило в Редакцию 22 мая 2026 г.

В окончательной редакции 22 мая 2026 г.

Принято к публикации 22 мая 2026 г.

Целью работы является разработка специализированного программного обеспечения моделирования зеркальных рентгенооптических систем. Для моделирования электромагнитных полей используется асимптотический метод лучевого разложения. Ввиду малости длины волны мы ограничиваемся рассмотрением уравнения эйконала и уравнения переноса нулевого порядка, для которых мы строим численные решения через трассировку лучей и лучевых трубок. Моделирование отражения от рентгеновских зеркал производится в локально-плоском приближении как отражение плоской волны от плоской поверхности с многослойным покрытием. В качестве примера проведено численное моделирование отражения излучения экстремального ультрафиолетового диапазона от параболического зеркала и продемонстрировано влияние параметров многослойного покрытия на качество формируемого изображения.

Ключевые слова: трассировка лучей, рентгеновская оптика, многослойные покрытия, полиномы Цернике, волновые aberrации, коэффициенты Френеля.

DOI: 10.61011/JTF.2026.10.63616.175-26

Введение

Значительный прогресс, достигнутый в технологии многослойных рентгеновских структур [1,2], делает возможным создание рентгенооптических систем на разных длинах волн, таких как 13.84 и 3.37 nm [3], для применений в мягкой рентгеновской микроскопии или в литографии на длинах волн экстремального ультрафиолетового диапазона, как на принятой в индустрии в качестве стандарта длине волны 13.5 nm, так и на перспективной длине волны в 11.2 nm [4]. Однако проектирование оптических систем для рентгеновского диапазона длин волн сопряжено с рядом специфических ограничений, не характерных для традиционной оптики. Во-первых, каждое зеркало вносит неизбежные и при этом достаточно значительные потери интенсивности: при последовательном отражении от N зеркал с коэффициентом отражения $\mathcal{R}$ суммарная пропускная способность системы падает как $\mathcal{R}^N$. Поскольку как в мягком рентгеновском, так и в экстремальном ультрафиолетовом диапазонах [1] пиковые коэффициенты отражения не превышают 80 %, очевидно, что число оптических элементов в схеме необходимо ограничивать. Во-вторых, многослойные интерференционные покрытия [5], обеспечивающие высокий коэффициент отражения при нормальном падении, обычно работают в узком угловом диапазоне, определяемом условием конструктивной интерференции Брэгга–Вульфа. В-третьих, требования к качеству оптических поверхностей определяются рабочей длиной волны, поскольку среднеквадратичная ошибка профиля по критерию Марешаля не должна превышать $\lambda/14$,

что для экстремального ультрафиолетового и мягкого рентгеновского диапазонов составляет доли нанометра. Также с уменьшением длин волн рабочего излучения возрастает уровень требований к шероховатости поверхности зеркальной подложки, поскольку полное интегральное рассеяние зависит от соотношения σ/λ , где σ обозначает шероховатость зеркальной поверхности, а также от соотношения ξ/λ корреляционной длины шероховатости ξ к длине волны. Изготовление зеркал, соответствующих указанным требованиям, делает необходимым применение высокоточного метрологического оборудования и специальных методов обработки поверхностей оптических элементов [6]. При этом технологии обработки и измерения зеркальных подложек накладывают значительные ограничения на выбор формы поверхностей используемых оптических элементов, а преодоление подобного рода ограничений требует, как правило, привлечения значительных финансовых и технологических ресурсов, как, например, при изготовлении оптических элементов для проекционной системы высокоапертурного рентгеновского литографа EXE:5x00 [7]. В-четвертых, высокий уровень развития технологии многослойных рентгеновских структур позволяет оптимизировать отражающие покрытия под потребности соответствующей оптической схемы, например, с учетом диапазона углов падения рентгеновского излучения на рабочую поверхность зеркала. Совокупность вышеперечисленных факторов делает численное моделирование рентгенооптических систем с учетом особенностей взаимодействия рентгеновского излучения

с многослойными структурами необходимым этапом их проектирования и оптимизации.

Универсальные коммерческие пакеты для оптического моделирования (например, Zemax) хотя и содержат встроенные средства для расчета отражения от многослойных покрытий, однако ориентированы преимущественно на видимый и инфракрасный диапазоны. Вследствие этого невозможно использование методик, адаптированных к рентгеновскому диапазону, таких как алгоритмы подгонки, описанные в работе [8]. Закрытость исходного кода затрудняет верификацию промежуточных результатов, а лицензионные ограничения препятствуют автоматизации массовых параметрических расчетов.

Среди специализированных открытых программ для рентгеновского диапазона наиболее известен пакет SHADOW3 [9]. В отличие от универсальных программ SHADOW3 ориентирован на расчет характеристик синхротронного излучения и его транспортировки через оптические элементы. Хотя в нем реализованы инструменты оценки коэффициента отражения многослойных структур методом обратной рекурсии Парратта [Parratt1954], в основе самой трассировки лучей в SHADOW3 лежит статистический метод Монте–Карло. При таком подходе трассируется ансамбль из миллионов независимых лучей, а интенсивность оценивается статистически путем вычисления лучевой плотности (построения двумерных гистограмм) в плоскости детектора.

Вместе с тем проектирование изображающих рентгенооптических систем (литографических объективов, микроскопов, телескопов) требует не только оценки энергетических характеристик, но и точного знания формы волнового фронта. Метод Монте–Карло по своей природе ориентирован на расчет распределений интенсивности и не предоставляет прямого доступа к волновому фронту, а значит, и к волновым aberrациям системы. Однако именно контроль aberrаций на субнанометровом уровне является ключевым при проектировании таких систем.

Целью настоящей работы являются, во-первых, разработка метода численного моделирования зеркальных рентгенооптических систем с многослойными покрытиями и, во-вторых, создание специализированного программного комплекса, позволяющего проводить численное моделирование таких схем в рамках единого вычислительного конвейера. В рамках данного программного пакета производятся:

- трассировка лучей при отражении как от поверхностей специфического вида, характерных для рентгеновской оптики, где можно применять оптимизированные методы расчета траекторий, так и от поверхностей произвольной формы, где нужно использовать более общий подход;
- расчет изменения амплитуды поля вдоль луча вследствие расходимости лучевой трубки;
- учет зависимости комплексного коэффициента отражения многослойного покрытия от локального угла

падения, рассчитываемого методом рекурсии Парратта в локально-плоском приближении;

- оценка aberrаций волнового фронта и их разложение по выбранным ортогональным базисам.

Решение вышеперечисленных задач позволяет проводить оптимизацию рентгенооптических схем с учетом характеристик многослойных покрытий, что существенно для проектирования систем рентгеновской литографии, микроскопии и астрономических телескопов нового поколения.

В разд. 1 мы предложим и подробно опишем подход к расчету рентгенооптических схем, основанный на методе лучевого разложения и являющийся естественным обобщением трассировки лучей в рамках геометрической оптики. В отличие от статистической трассировки он оперирует не изолированными лучами, а бесконечно узкими лучевыми трубками, каждая из которых несет информацию о локальной кривизне волнового фронта. Благодаря этому волновой фронт и соответственно его aberrации вычисляются детерминированно вдоль каждой траектории, а отражение от многослойных покрытий учитывается как для фазы, так и для амплитуды. Там же мы обоснуем корректность использования метода лучевого разложения для описания отражения излучения от многослойных рентгеновских покрытий. В разд. 2 рассмотрен вопрос задания начальных условий для расчета оптических схем и показано, что использование точечных источников сферических волновых фронтов согласуется с методом лучевого разложения. Далее в разд. 3 мы опишем алгоритм трассировки лучей и лучевых трубок, а в разд. 4 рассмотрим вопрос интерполяции решений на промежуточных плоскостях и плоскости изображений. Наконец, в разд. 5 продемонстрируем несколько примеров использования разработанного нами программного пакета, уделяя особое внимание аспектам, связанным со спецификой рентгенооптических систем.

1. Моделирование рентгенооптических схем методом лучевого разложения

Метод трассировки лучей в рамках геометрической оптики очень популярен и реализован во многих программах пакетах как проприетарных коммерческих, так и находящихся в свободном доступе. Однако при попытке использования геометрической оптики для описания отражения от многослойной структуры мы сталкиваемся со сложностями в определении отраженного луча, поскольку неясно даже, от какой поверхности должно происходить отражение. Можно попытаться решить данную проблему, задавая так называемую „эффективную“ глубину отражения. Однако эта глубина не может быть определена однозначно, см. [11], так что этот метод нельзя считать самосогласованным. С принципиальной точки зрения некорректно использовать методы геометрической оптики для описания процесса отражения от многослойной структуры, поскольку в нем

определяющую роль играет интерференция падающих и отраженных волн, что можно адекватно описать только в формализме волновой оптики.

Таким образом, для корректного решения поставленной задачи нам необходимо выбрать формализм, позволяющий правильно учитывать волновые эффекты. Например, он должен позволять нам описывать простейший случай — плоскую волну. В то же время геометрическая оптика должна содержаться в искомом методе как предельный случай, сохраняя присущие ей простоту и эффективность расчета волновых фронтов. Учитывая, что длины волн рабочего излучения много меньше размеров оптических элементов, естественно обратиться к коротковолновым асимптотическим методам, а именно методу лучевого разложения.

Сначала мы рассмотрим лучевое разложение. Для наших целей будет достаточно ограничиться уравнениями эйконала и переноса в нулевом порядке. Далее будет построено решение уравнения переноса нулевого порядка и описаны вытекающие из него условия применимости. После этого мы покажем, каким образом граничные условия для эйконального анзаца позволяют корректно учесть отражение от многослойной структуры, и обоснуем, почему для этого достаточно приближения плоской волны.

1.1. Лучевое разложение

Метод лучевого разложения [12–14] предполагает поиск решения уравнений Максвелла в виде эйконального анзаца:

$$\mathbf{E}(r) = \mathbf{A}(r) e^{ik_0\psi(r)}, \quad (1)$$

где $\mathbf{A}(r)$ — медленно меняющаяся амплитуда, $\psi(r)$ — эйконал (оптическая длина пути), $k_0 = \omega/c$.

Рассмотрим монохроматическое поле с временной зависимостью $e^{-i\omega t}$ в однородной среде с комплексным показателем преломления $n = n' + i n''$. Уравнения Максвелла сводятся к уравнению Гельмгольца и условию поперечности:

$$\Delta \mathbf{E} + k_0^2 n^2 \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 0. \quad (2)$$

Подставляя анзац (1) в (2) и группируя слагаемые по степеням $1/(ik_0)$, получаем соотношение

$$\begin{aligned} ((\nabla\psi)^2 - n^2)\mathbf{A} + \frac{1}{ik_0}((\Delta\psi)\mathbf{A} + 2(\nabla\psi \cdot \nabla)\mathbf{A}) \\ + \frac{1}{(ik_0)^2}\Delta\mathbf{A} = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Заметим, что представление (1) заменяет одну неизвестную функцию E двумя — $\mathbf{A}$ и ψ , в силу чего мы можем потребовать выполнения уравнения эйконала

$$(\nabla\psi)^2 = n^2. \quad (4)$$

В дальнейших рассуждениях мы рассматриваем случай однородной среды с показателем преломления $n = \text{const}$.

Уравнение эйконала (4) решается методом характеристик: лучи представляют собой нормали к волновым фронтам $\psi = \text{const}$. Параметризуя их длиной дуги s , получаем

$$\frac{d\mathbf{r}}{ds} = \frac{\nabla\psi}{n} \equiv \mathbf{p}, \quad (5)$$

где $\mathbf{p}$ — вектор направления луча, удовлетворяющий условию $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = 1$. Так как $\nabla n = 0$ в однородной среде, дифференцирование уравнения (4) показывает, что $d\mathbf{p}/ds = 0$: направление луча постоянно, а траектория прямолинейна

$$\mathbf{r}(s) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}s.$$

Оператор $d/ds = (\nabla\psi \cdot \nabla)/n$, фигурирующий в уравнении переноса (6), означает взятие производной вдоль этой прямолинейной траектории. Таким образом, с учетом сказанного, уравнение (3) принимает вид

$$2n \frac{d\mathbf{A}}{ds} + (\Delta\psi)\mathbf{A} = -\frac{1}{ik_0}\Delta\mathbf{A}. \quad (6)$$

Поскольку нас интересует решение задачи в коротковолновом пределе ($k_0 \rightarrow \infty$), логично использовать величину $1/k_0$ в качестве малого параметра. Соответственно амплитуда ищется в виде асимптотического ряда $\mathbf{A} = \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{A}_m/(ik_0)^m$, подстановка которого в уравнение (6) дает бесконечную иерархию уравнений, упорядоченных по степеням $1/k_0$. В нулевом приближении ($m = 0$) из-за общего множителя $1/k_0$ справа, правая часть тождественно обращается в нуль, и мы приходим к уравнению переноса

$$2n \frac{d\mathbf{A}_0}{ds} + (\Delta\psi)\mathbf{A}_0 = 0. \quad (7)$$

Таким образом, подстановка в виде эйконального анзаца (1) приводит к двум соотношениям: уравнение эйконала определяет геометрию лучей, а уравнение переноса (7) — изменение амплитуды вдоль каждого из них. Именно наличие уравнения переноса отличает метод лучевого разложения от классической лучевой трассировки, в которой отслеживаются изолированные лучи без учета амплитуды: здесь отслеживаются бесконечно узкие лучевые трубки, каждая из которых несет полную локальную информацию о поле — фазу, амплитуду и геометрию волнового фронта.

1.2. Изменение амплитуды вдоль луча и кривизна волнового фронта

Для решения уравнения переноса (7) необходимо знать эволюцию $\Delta\psi$ вдоль луча. Введем матрицу Гессе эйконала $U_{ij} = \partial^2\psi/\partial x_i \partial x_j$. Дифференцирование уравнения эйконала приводит к матричному уравнению Риккати:

$$n \frac{dU}{ds} + U^2 = 0. \quad (8)$$

Одно собственное значение матрицы U тождественно равно нулю. Его собственный вектор $\nabla\psi$ задает направление луча. Два оставшихся собственных значения κ_1

и κ_2 пропорциональны главным кривизнам волнового фронта. Уравнение (8) имеет точное решение:

$$U(s) = U(0)(I + s U(0)/n)^{-1},$$

из которого непосредственно следует, что

$$\Delta\psi(s) = \text{Tr } U = \frac{\kappa_1(0)}{1 + s\kappa_1(0)/n} + \frac{\kappa_2(0)}{1 + s\kappa_2(0)/n}. \quad (9)$$

Здесь $\text{Tr } U$ обозначает след матрицы U . Подставляя (9) в уравнение переноса (7) и интегрируя, находим закон изменения амплитуды вдоль луча:

$$\mathbf{A}_0(s) = \frac{\mathbf{A}_0(0)}{\sqrt{(1 + s\kappa_1(0)/n)(1 + s\kappa_2(0)/n)}}. \quad (10)$$

Направление вектора $\mathbf{A}_0$ при этом не меняется — изменяется только его модуль, определяемый расходимостью лучевой трубки. Стоит отметить, что в точках, где один из сомножителей $(1 + s\kappa_k/n)$ обращается в нуль (каустика), подкоренное выражение меняет знак; при переходе через каустическую амплитуда приобретает дополнительный фазовый множитель $e^{-i\pi/2}$ (см. ниже).

На практике для решения уравнения переноса нулевого порядка вместо формулы (10) проще применять другое соотношение, которое можно получить, рассматривая вместо одного луча целое семейство лучей в его окрестности. Обозначим двумя параметрами (α, β) метку, однозначно выделяющую луч из семейства (конкретный выбор параметризации зависит от задачи и будет обсужден в разд. 2. Тогда положение произвольной точки пространства, принадлежащей лучевой трубке, задается тремя параметрами:

$$\mathbf{r}(\alpha, \beta, s) = \mathbf{r}_0(\alpha, \beta) + \mathbf{p}(\alpha, \beta) s. \quad (11)$$

Дифференцируя (11), получаем матрицу Якоби отображения $(\alpha, \beta, s) \mapsto \mathbf{r}$:

$$J(s) = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial (\alpha, \beta, s)} = \begin{bmatrix} \partial_\alpha \mathbf{r}_0 + s \partial_\alpha \mathbf{p} & \partial_\beta \mathbf{r}_0 + s \partial_\beta \mathbf{p} & \mathbf{p} \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Столбцы этой матрицы 3×3 суть касательные векторы к лучевой трубке по каждому из трех параметров. В вакууме ($n = 1$, вектор $\mathbf{p}$ вещественный) определитель $\det J(s)$ равен ориентированному объему параллелепипеда, натянутого на эти векторы, а $|\det J(s)|$ — площади поперечного сечения лучевой трубки.

Покажем, что якобиан J непосредственно связан с уравнением переноса (7). Матрица Гессе эйконала U (см. (8)) по определению есть якобиан поля направлений $n\mathbf{p}(\mathbf{r})$ по пространственным координатам. По правилу дифференцирования сложной функции

$$U = n \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{r}} = n \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial (\alpha, \beta, s)} \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial (\alpha, \beta, s)} \right)^{-1} = n \frac{dJ}{ds} J^{-1}, \quad (13)$$

где мы воспользовались тем, что $\partial_\alpha \mathbf{p} = \frac{d}{ds}(\partial_\alpha \mathbf{r})$, $\partial_\beta \mathbf{p} = \frac{d}{ds}(\partial_\beta \mathbf{r})$ и $\partial_s \mathbf{p} = 0$. Эквивалентно, $dJ/ds = \frac{1}{n} U J$. Применяя формулу Якоби для производной определителя:

$$\frac{d}{ds} \det J = \det J \cdot \text{Tr} \left(J^{-1} \frac{dJ}{ds} \right) = \frac{\Delta\psi}{n} \det J. \quad (14)$$

С другой стороны, уравнение переноса (7) можно записать как $\frac{d}{ds} \mathbf{A}_0 = -\frac{\Delta\psi}{2n} \mathbf{A}_0$. Из (14) следует $\frac{d}{ds} \sqrt{\det J} = \frac{\Delta\psi}{2n} \sqrt{\det J}$, и по правилу дифференцирования произведения:

$$\frac{d}{ds} (\mathbf{A}_0 \sqrt{\det J}) = \left(-\frac{\Delta\psi}{2n} + \frac{\Delta\psi}{2n} \right) \mathbf{A}_0 \sqrt{\det J} = 0.$$

Следовательно, вдоль луча сохраняется векторный инвариант:

$$\mathbf{A}_0(s) \sqrt{\det J(s)} = \text{const}. \quad (15)$$

Соотношение (15) справедливо при $\det J \neq 0$. В точках, где $\det J = 0$ (каустиках), геометрикооптическое приближение разрушается и требуется переходная асимптотика [13,14]. Сшивая с ней показывает, что при прохождении через простую каустическую амплитуда приобретает уже упомянутый выше дополнительный фазовый множитель $e^{-i\pi/2}$, определяемый через индекс Маслова (см. [15]), который необходимо учитывать при пересчете $\mathbf{A}_0$ из одной бескаустической области в другую. Таким образом, знание якобиана $J(s)$ позволяет восстановить амплитуду поля в любой точке вдоль луча, не прибегая к явному интегрированию уравнения переноса.

1.3. Граничные условия для лучевого разложения

Рассмотрим вопрос совместимости лучевого разложения с условиями непрерывности полей на границе раздела двух сред. В общем случае по обе стороны границы могут существовать волны, распространяющиеся в противоположных направлениях. Такая ситуация возникает, в частности, в многослойных покрытиях: волна, прошедшая в слой через верхнюю границу, порождает отраженную волну на нижней границе того же слоя, и эта возвращенная волна приходит обратно к верхней границе. Таким образом, в общем случае на границе раздела необходимо рассматривать четыре волны. Обозначим их эйконалы: над границей — ψ_{in} (падающая) и ψ_{ref} (отраженная), под границей — ψ_{tr} (прошедшая вглубь) и ψ_{ret} (возвращенная от нижележащих границ). Предположим, что каждая из четырех волн представима в виде эйконального анзаца (1).

На границе раздела для монохроматических полей достаточно потребовать непрерывности тангенциальных компонент $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$. Магнитное поле в ведущем приближении эйконального разложения находится подстановкой анзаца (1) в уравнение Максвелла $\text{rot } \mathbf{E} = ik_0 \mu \mathbf{H}$; сохраняя ведущий порядок по k_0 (полагая $\mu = 1$ для рентгеновского диапазона), получаем $\mathbf{H} = n(\mathbf{p} \times \mathbf{A}) e^{ik_0 \psi}$. Тогда

для любой точки $\mathbf{r}_s$ на границе раздела требование непрерывности тангенциальных компонент $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ принимает вид

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}_{\text{in}} e^{ik_0\psi_{\text{in}}} + \mathbf{A}_{\text{ref}} e^{ik_0\psi_{\text{ref}}}]_{\tau} &= [\mathbf{A}_{\text{tr}} e^{ik_0\psi_{\text{tr}}} + \mathbf{A}_{\text{ret}} e^{ik_0\psi_{\text{ret}}}]_{\tau}, \\ [n_1(\mathbf{p}_{\text{in}} \times \mathbf{A}_{\text{in}}) e^{ik_0\psi_{\text{in}}} + n_1(\mathbf{p}_{\text{ref}} \times \mathbf{A}_{\text{ref}}) e^{ik_0\psi_{\text{ref}}}]_{\tau} &= \\ &= [n_2(\mathbf{p}_{\text{tr}} \times \mathbf{A}_{\text{tr}}) e^{ik_0\psi_{\text{tr}}} + n_2(\mathbf{p}_{\text{ret}} \times \mathbf{A}_{\text{ret}}) e^{ik_0\psi_{\text{ret}}}]_{\tau}. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь индекс τ обозначает проекцию вектора на касательную плоскость к поверхности, а n_1, n_2 — показатели преломления сред по обе стороны границы.

Покажем, что совместимость граничных условий (16) с эйконоальным анзацем требует равенства эйконоалов всех четырех волн на границе раздела. По построению эйконоального анзаца (1) вся быстрая пространственная зависимость поля сосредоточена в экспоненциальном множителе $e^{ik_0\psi}$, тогда как амплитуды $\mathbf{A}$ являются медленно меняющимися функциями координат — именно это предположение позволяет пренебречь правой частью уравнения (6) и получить уравнение переноса нулевого порядка (7). Предположим теперь, что хотя бы один эйконоал из четырех не совпадает на границе раздела. Тогда граничные условия (16) связывают слагаемые с различными быстро осциллирующими экспонентами. Для выполнения такого равенства в каждой точке поверхности амплитуда хотя бы одной из волн должна содержать множитель, компенсирующий разность фаз, т.е. быть пропорциональной $e^{ik_0\psi^*}$, где ψ^* — разность эйконоалов. Вторые производные такой амплитуды пропорциональны k_0^2 , и член $\Delta A/(ik_0)$ в (6) становится величиной порядка k_0 , что делает невозможным усечение до нулевого порядка и разрушает эйконоальный анзац. Следовательно, все четыре эйконоала должны совпадать на поверхности:

$$\psi_{\text{in}}(\mathbf{r}_s) = \psi_{\text{ref}}(\mathbf{r}_s) = \psi_{\text{tr}}(\mathbf{r}_s) = \psi_{\text{ret}}(\mathbf{r}_s). \quad (17)$$

Из этого равенства следует принципиально важный для трассировки вывод: эйконоал отраженной волны на поверхности полностью определяется эйконоалом падающей волны и не зависит от внутренней структуры среды под поверхностью. Поэтому при трассировке лучей в системе с многослойным зеркалом направление отраженного луча задается стандартным законом отражения от верхней границы многослойной структуры, а вся информация о многослойном покрытии учитывается исключительно в комплексном коэффициенте отражения (см. следующий подраздел).

Равенство эйконоалов (17) задает начальную фазу всех четырех лучевых трубок в точке падения. Направления трубок определяются дифференцированием того же равенства вдоль произвольного касательного вектора $\boldsymbol{\tau}$ к границе раздела:

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \psi_{\text{in}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \psi_{\text{ref}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \psi_{\text{tr}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \psi_{\text{ret}}.$$

Подставляя $\nabla \psi = n \mathbf{p}$ (см. (4), (5)), получаем

$$n_1(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p}_{\text{in}}) = n_1(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p}_{\text{ref}}) = n_2(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p}_{\text{tr}}) = n_2(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p}_{\text{ret}}). \quad (18)$$

Поскольку данное равенство выполняется для любого касательного вектора $\boldsymbol{\tau}$, оно означает непрерывность тангенциальной составляющей вектора $n\mathbf{p}$ при переходе через границу раздела. Из этого условия непосредственно следует закон отражения и преломления Снеллиуса. Отметим, что волны в одной среде (ψ_{in} и ψ_{ref} , а также ψ_{tr} и ψ_{ret}) имеют одинаковые тангенциальные составляющие направлений, но противоположные знаки нормальной компоненты p_n , что соответствует распространению в противоположных направлениях относительно границы.

Таким образом, равенство эйконоалов (17) полностью определяет начальную фазу и направления отраженной и прошедшей лучевых трубок. Остается найти их амплитуды. После сокращения совпадающих экспоненциальных множителей в (16) система сводится к линейным уравнениям для амплитуд. Рассмотрим случай, когда среда по другую сторону границы является полубесконечной, т.е. возвращенная волна отсутствует ($\mathbf{A}_{\text{ret}} = 0$). Тогда на границе остаются три волны — падающая, отраженная и прошедшая — и граничные условия приводят к стандартным коэффициентам отражения и прохождения Френеля. Для многослойной структуры, где $\mathbf{A}_{\text{ret}} \neq 0$, амплитудный коэффициент отражения вычисляется рекурсией Парратта, представленной подробнее в следующем подразделе.

Для вывода коэффициентов Френеля введем вектор $\mathbf{q} = n_1 \mathbf{p}_{\text{in}} - (n_1 \mathbf{p}_{\text{in}} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}$ — тангенциальную составляющую вектора $n\mathbf{p}$. Из (18) следует, что $\mathbf{q}$ одинаков для всех трех волн. Обозначим нормальную компоненту единичного направляющего вектора $p_{n,j} = \mathbf{p}_j \cdot \mathbf{n}$ и построим ортогональный базис поляризаций: $\mathbf{s} = \mathbf{q} \times \mathbf{n}$ (s -поляризация, перпендикулярна плоскости падения) и $\mathbf{v}_j = \mathbf{p}_j \times \mathbf{s}$ (p -поляризация, лежит в плоскости падения). Условие поперечности $\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{A}_j = 0$ гарантирует разложение $\mathbf{A}_j = A_{s,j} \mathbf{s} + A_{p,j} \mathbf{v}_j$.

Проецируя граничные условия на $\mathbf{s}$ и $\mathbf{q}$, получаем для каждой поляризации независимый набор из двух уравнений. Их решение дает комплексные коэффициенты отражения и прохождения Френеля.

Для s -поляризации (TE):

$$\begin{aligned} r_s &= \frac{A_{s,\text{ref}}}{A_{s,\text{in}}} = \frac{n_1 p_{n,1} - n_2 p_{n,2}}{n_1 p_{n,1} + n_2 p_{n,2}}, \\ t_s &= \frac{A_{s,\text{tr}}}{A_{s,\text{in}}} = \frac{2 n_1 p_{n,1}}{n_1 p_{n,1} + n_2 p_{n,2}}. \end{aligned} \quad (19)$$

Для p -поляризации (TM):

$$\begin{aligned} r_p &= \frac{A_{p,\text{ref}}}{A_{p,\text{in}}} = \frac{n_2 p_{n,1} - n_1 p_{n,2}}{n_2 p_{n,1} + n_1 p_{n,2}}, \\ t_p &= \frac{A_{p,\text{tr}}}{A_{p,\text{in}}} = \frac{2 n_1 p_{n,1}}{n_2 p_{n,1} + n_1 p_{n,2}}. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь $p_{n,j} = \sqrt{1 - q^2/n_j^2}$, а знак корня выбирается из условия $\text{Im}(n_j p_{n,j}) \geq 0$. Следует отметить, что базисные векторы $\mathbf{v}_j$ различны для каждой волны, поскольку зависят от $\mathbf{p}_j$; в среде с диссипацией все эти векторы, как и $\mathbf{q}$, $\mathbf{s}$, становятся комплекснозначными, однако формулы сохраняют свой вид, поскольку скалярное и векторное произведения определяются покомпонентно и все используемые тождества векторной алгебры при этом остаются справедливыми.

1.4. Локально-плоское приближение

Полученные выше коэффициенты Френеля (19), (20) выведены для плоской границы раздела двух однородных полупространств. Однако для зеркал в рентгеновском диапазоне, как правило, используются многослойные интерференционные покрытия с толщинами отдельных слоев порядка длины волны $d \sim \lambda$, которые оптимизированы по усредненному локальному углу падения излучения и поэтому могут меняться от точки к точке, а поверхности зеркал имеют конечную кривизну, характеризующуюся радиусом R_M . Тем не менее известно, что при соблюдении определенных ограничений задачу описания отражения волны от поверхности можно решать локально, см. [16]. Точнее применение формул для плоского случая требует выполнения двух условий.

1. Поле локально является плоской волной. Разложим эйконал вблизи точки падения $\mathbf{r}_0$:

$$k_0\psi(\mathbf{r}_0 + \delta\mathbf{r}) \approx k_0\psi(\mathbf{r}_0) + \mathbf{k}_{loc} \cdot \delta\mathbf{r} + \frac{1}{2} k_0 (\delta\mathbf{r}^T U \delta\mathbf{r}),$$

где $\mathbf{k}_{loc} = k_0 \nabla \psi(\mathbf{r}_0)$ — локальный волновой вектор, U — матрица Гессе эйконала (см. (8)) с элементами порядка $1/R_W$ (R_W — радиус кривизны волнового фронта). Квадратичная поправка к фазе на масштабе полной толщины покрытия $D = Nd$ составляет $\sim k_0 D^2/R_W$, а относительное изменение амплитуды — $\sim D/R_W$. Поскольку зеркала сами являются фокусирующими элементами оптической схемы, они всегда расположены вдали от фокуса, и R_W на их поверхности имеет макроскопический масштаб. Даже для покрытия из 100 слоев с $d \sim \lambda$ полная толщина $D \sim 100\lambda$ на много порядков меньше R_W , и обе поправки пренебрежимо малы: в пределах покрытия поле представляет собой плоскую волну с постоянными волновым вектором и амплитудой.

2. Границы слоев локально параллельны. Слои многослойного покрытия повторяют кривизну подложки, а также имеют локально изменяющуюся толщину для обеспечения оптимального коэффициента отражения при заданном оптической схемой усредненном угле падения волны. Мы будем считать, что толщины слоев многослойного покрытия изменяются на масштабах сопоставимых с радиусом зеркала R_M .

Характерный масштаб взаимодействия такой волны с многослойной структурой задается параметром $a\lambda$, где a некоторый коэффициент порядка единицы. На

этом масштабе отклонение кривой поверхности от касательной плоскости составляет $\delta z \sim a^2 \lambda^2 / (2R_M)$. Для того чтобы это отклонение локально не влияло на интерференцию падающего и отраженного излучения в многослойной структуре, необходимо, чтобы $\delta z \ll \lambda$, т.е. $a^2 \lambda \ll R_M$. Для типичных рентгеновских зеркал это условие выполняется с большим запасом.

Таким образом, при выполнении обоих условий кривую поверхность зеркала можно заменить касательной плоскостью, а слои покрытия можно считать параллельными, так что задача описания отражения волны от многослойной структуры сводится к одномерной: отражению плоской волны от системы параллельных плоских слоев. Поле в j -м слое представляет собой суперпозицию двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях вдоль нормали к слоям:

$$\mathbf{E}_j = \mathbf{E}_j^+ e^{ik_0 n_j p_{n,j} z} + \mathbf{E}_j^- e^{-ik_0 n_j p_{n,j} z},$$

где z — координата вдоль нормали, а нормальная компонента направляющего вектора $p_{n,j} = \sqrt{1 - q^2/n_j^2}$ определяется тангенциальной составляющей q (общей для всех слоев в силу (17)) и показателем преломления n_j .

Коэффициенты Френеля $r_{j,j+1}$ на границе слоев j и $j+1$ определяются формулами (19) и (20), в которых индексы 1 и 2 заменяются на j и $j+1$ соответственно. Амплитудный коэффициент отражения от всей многослойной структуры вычисляется из этих локальных коэффициентов методом обратной рекурсии Парратта [10] (от подложки к поверхности):

$$\hat{r}_j = \frac{r_{j,j+1} + \hat{r}_{j+1} e^{2ik_0 n_{j+1} p_{n,j+1} d_{j+1}}}{1 + r_{j,j+1} \hat{r}_{j+1} e^{2ik_0 n_{j+1} p_{n,j+1} d_{j+1}}}, \quad (21)$$

где $\hat{r}_j$ — коэффициент отражения от структуры, лежащей ниже границы j , d_{j+1} — толщина $(j+1)$ -го слоя, а экспонента описывает фазовый набег и затухание при двукратном проходе слоя.

В заключение следует отметить, что все изложенное выше не относится к случаю скользких углов падения, когда оптические пути в слоях становятся значительно большими, чем длина волны, и могут возникать эффекты волновода или шепчущей галереи.

2. Задание начальных условий для трассировки

В предыдущих разделах описано, как лучевое разложение определяет структуру поля через эйконал и амплитуду, а граничные условия фиксируют параметры отраженных и прошедших лучевых трубок. Однако для запуска трассировки необходимо задать начальные параметры каждой лучевой трубки: координаты начальной точки, направление, амплитуду и фазу электромагнитного поля. Эти параметры определяются распределением

поля на исходной плоскости (плоскости предмета), которое, в свою очередь, задается конфигурацией источника.

Существенно, что начальные условия должны быть заданы таким образом, чтобы результирующее семейство лучей обладало ортогональными волновыми фронтами — иными словами, образовывало нормальную конгруэнцию. Это требование не является тривиальным: как показано в [17], в трехмерном пространстве существуют семейства лучей, удовлетворяющих лучевому уравнению, для которых не существует ортогональных поверхностей (волновых фронтов). Для таких ненормальных конгруэнций невозможно определить функцию эйконала ψ , и эйкональный анзац (1) теряет смысл. Поэтому корректное задание начальных условий должно гарантировать, что порождаемая конгруэнция лучей остается нормальной, т.е. допускает глобальный эйконал.

Задача построения волнового фронта в геометрической оптике хорошо известна и требует привлечения математического аппарата симплектической геометрии, а точнее, рассмотрения так называемых лагранжевых многообразий, см. [15]. В нашей работе мы используем менее абстрактный и более наглядный конструктивный подход: начальные условия извлекаются непосредственно из представления поля в виде дифракционного интеграла, каждое слагаемое которого уже имеет эйкональную форму — расходящуюся сферическую волну. Другими словами, начальные условия задаются как совокупность точечных источников.

Рассмотрим поле, излучаемое плоской апертурой S в вакууме. Точное выражение для поля в произвольной точке $\mathbf{r}$ дается формулой Смайта [18]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 2 \int_S (\mathbf{n} \times \mathbf{E}) \times \nabla' G dS', \quad (22)$$

где $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{ik_0 R}}{4\pi R}$ — функция Грина, $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, $\mathbf{n}$ — единичная нормаль к апертуре, а ∇' — градиент по координатам источника $\mathbf{r}'$.

Градиент функции Грина имеет вид

$$\nabla' G = ik_0 \left(\frac{1}{ik_0 R} - 1 \right) \frac{e^{ik_0 R}}{4\pi R} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{R}.$$

В геометрикооптическом пределе (нулевое приближение по $1/(ik_0)$, см. разд. 1) слагаемое $1/(ik_0 R)$ мало по сравнению с единицей и отбрасывается

$$\nabla' G \approx -ik_0 \frac{e^{ik_0 R}}{4\pi R} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{R}. \quad (23)$$

После такого упрощения подынтегральное выражение в (22) принимает вид расходящейся сферической волны от каждого элемента апертуры. Это означает, что в коротковолновом пределе апертуру можно рассматривать как набор точечных источников сферических волн — именно такая картина соответствует лучевому формализму. Каждая сферическая волна по определению порождает нормальную конгруэнцию лучей с эйконалом $\psi = R$, что обеспечивает самосогласованность описания.

Для перехода к дискретной модели разобьем апертуру на N ячеек. Подставляя (23) в (22), получаем сумму Римана:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx \frac{-ik_0}{2\pi} \sum_{j=1}^N \left[(\mathbf{n} \times \mathbf{E}_j) \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'_j}{R_j} \right] \frac{e^{ik_0 R_j}}{R_j} \Delta S_j,$$

где $\mathbf{r}'_j$, $\mathbf{E}_j$, $R_j = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'_j|$ и ΔS_j — координаты, поле, расстояние до точки наблюдения и площадь j -й ячейки соответственно. Каждое слагаемое этой суммы описывает сферическую волну от точечного источника с известными амплитудой и фазой.

Главное достоинство такого представления состоит в его универсальности: произвольное электромагнитное поле на плоскости предмета разлагается на набор сферических волн, от каждого источника которых запускается пучок лучей, прослеживаемый через всю оптическую схему методами, описанными в разд. 3, 4. Поле на выходе системы получается когерентным суммированием вкладов всех источников.

3. Трассировка лучей и лучевых трубок

Метод трассировки лучей от поверхности к поверхности через оптическую систему хорошо известен: при встрече с оптической поверхностью с единичной нормалью $\mathbf{n}$ в точке падения (способ ее вычисления описан ниже в разд. 3.1) луч отражается (здесь мы рассмотрим только отражающую оптику). Из граничного условия (18) и уравнения эйконала (4) следует векторный закон отражения

$$\mathbf{p}_{\text{out}} = \mathbf{p}_{\text{in}} - 2(\mathbf{p}_{\text{in}} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}, \quad (24)$$

где $\mathbf{p}_{\text{in}}$ и $\mathbf{p}_{\text{out}}$ — направления падающего и отраженного лучей, а единичная нормаль к поверхности в точке пересечения вычисляется как

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla F(\mathbf{r}(s^*))}{\|\nabla F(\mathbf{r}(s^*))\|}. \quad (25)$$

После отражения (24) новый луч имеет начальную точку $\mathbf{r}_0^{\text{new}} = \mathbf{r}(s^*)$ и направление $\mathbf{p}^{\text{new}} = \mathbf{p}_{\text{out}}$, после чего процедура трассировки повторяется для следующей поверхности.

3.1. Нахождение пересечения с поверхностью

Пусть оптическая поверхность задана неявным уравнением $F(\mathbf{r}) = 0$. Точка пересечения с лучом определяется из условия:

$$F(\mathbf{r}_0 + \mathbf{p} s^*) = 0. \quad (26)$$

Как уже было отмечено во введении, специфика рентгенооптических схем накладывает существенные ограничения на возможные формы зеркал, вследствие чего

наряду с общими методами решения уравнения (26) иногда целесообразно рассматривать методы, приспособленные к типам зеркал, часто используемым в рентгеновской оптике. Здесь мы упомянем два таких метода. Во-первых, для осесимметричных поверхностей можно использовать разложения s^* в степенные ряды от начальных пространственных и импульсных координат. Оказывается, что можно вычислять такие разложения до высоких порядков, а иногда даже получать для них явные выражения (подробности будут изложены в отдельной публикации). Во-вторых, можно использовать тот факт, что для зеркал, поверхность которых описывается как коническое сечение, точка пересечения находится явным образом и рассматривать зеркала, поверхность которых отклоняется от поверхностей второго порядка, с помощью методов теории возмущений.

Для поверхностей произвольной формы, не допускающих аналитического решения, применяется интервальный метод Ньютона [19]. Физически осмысленным является решение $s^* > 0$, соответствующее распространению луча вперед. В случае нескольких корней выбирается наименьший положительный.

На практике можно применять подходящие комбинации вышеупомянутых методов. Например, с помощью первого или второго метода можно задать начальную точку для алгоритма Ньютона, что позволяет увеличивать скорость сходимости итераций. Как показывают вычисления, для асферических осесимметричных зеркал при использовании достаточно высокого порядка разложения в ряд, первый метод и метод Ньютона обладают сравнимой точностью.

3.2. Параметризация поверхности и репараметризация лучей

Помимо неявного задания $F(\mathbf{r}) = 0$, используемого для нахождения точки пересечения, оптические поверхности допускают явное двухпараметрическое представление $\mathbf{R}(\alpha_1, \beta_1)$. Например, поверхность можно представить в виде стрелки прогиба $z = f(x, y)$ в системе координат, привязанной к зеркалу, где координаты (x, y) служат параметрами поверхности.

Поскольку отраженный луч полностью определяется точкой поверхности, в которой происходит отражение, семейство отраженных лучей естественно параметризуется координатами поверхности (α_1, β_1) : начальная точка отраженного луча совпадает с $\mathbf{R}(\alpha_1, \beta_1)$, а его направление и все производные, необходимые для вычисления якобиана лучевой трубки, выражаются через (α_1, β_1) .

Однако семейство падающих лучей параметризовано своими собственными параметрами (α_0, β_0) , заданными еще до поверхности (см. разд. 2). Для пересчета из старой параметризации в новую воспользуемся тем, что в точке падения луч (α_0, β_0) достигает поверхности.

Подставляя $s = s^*$ в (11), запишем условие пересечения:

$$\mathbf{R}(\alpha_1, \beta_1) = \mathbf{r}_0(\alpha_0, \beta_0) + \mathbf{p}(\alpha_0, \beta_0) s^*. \quad (27)$$

Это соотношение неявно связывает параметры поверхности (α_1, β_1) с параметрами падающего луча (α_0, β_0) и длиной пути s^* . Дифференцируя (27) по α_1 , получаем

$$\begin{aligned} \partial_{\alpha_1} \mathbf{R} = & (\partial_{\alpha_0} \mathbf{r}_0 + s^* \partial_{\alpha_0} \mathbf{p}) \frac{\partial \alpha_0}{\partial \alpha_1} \\ & + (\partial_{\beta_0} \mathbf{r}_0 + s^* \partial_{\beta_0} \mathbf{p}) \frac{\partial \beta_0}{\partial \alpha_1} + \mathbf{p} \frac{\partial s^*}{\partial \alpha_1}. \end{aligned}$$

Правая часть в точности есть произведение якобиана лучевой трубки (12), вычисленного при $s = s^*$, на вектор неизвестных. Записывая аналогичное соотношение для $\partial_{\beta_1} \mathbf{R}$, получаем систему

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \partial \alpha_0 / \partial \alpha_1 \\ \partial \beta_0 / \partial \alpha_1 \\ \partial s^* / \partial \alpha_1 \end{pmatrix} &= J(s^*)^{-1} \partial_{\alpha_1} \mathbf{R}, \\ \begin{pmatrix} \partial \alpha_0 / \partial \beta_1 \\ \partial \beta_0 / \partial \beta_1 \\ \partial s^* / \partial \beta_1 \end{pmatrix} &= J(s^*)^{-1} \partial_{\beta_1} \mathbf{R}. \end{aligned} \quad (28)$$

Зная $\partial \alpha_0 / \partial \alpha_1$, $\partial \beta_0 / \partial \alpha_1$ (и аналогичные производные по β_1), мы пересчитываем производные направления падающего луча из старой параметризации в новую:

$$\begin{aligned} \partial_{\alpha_1} \mathbf{p} &= \partial_{\alpha_0} \mathbf{p} \frac{\partial \alpha_0}{\partial \alpha_1} + \partial_{\beta_0} \mathbf{p} \frac{\partial \beta_0}{\partial \alpha_1}, \\ \partial_{\beta_1} \mathbf{p} &= \partial_{\alpha_0} \mathbf{p} \frac{\partial \alpha_0}{\partial \beta_1} + \partial_{\beta_0} \mathbf{p} \frac{\partial \beta_0}{\partial \beta_1}. \end{aligned} \quad (29)$$

Наконец, дифференцируя закон отражения (24) по α_1 (и аналогично по β_1), находим производные направления отраженного луча:

$$\begin{aligned} \partial_{\alpha_1} \mathbf{p}_{\text{out}} = & \partial_{\alpha_1} \mathbf{p}_{\text{in}} - 2[(\partial_{\alpha_1} \mathbf{p}_{\text{in}} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \\ & + (\mathbf{p}_{\text{in}} \cdot \partial_{\alpha_1} \mathbf{n}) \mathbf{n} + (\mathbf{p}_{\text{in}} \cdot \mathbf{n}) \partial_{\alpha_1} \mathbf{n}], \end{aligned} \quad (30)$$

где $\partial_{\alpha_1} \mathbf{p}_{\text{in}}$ определяется из (29), а $\partial_{\alpha_1} \mathbf{n}$ — из геометрии поверхности (25). Соотношения (28)–(30) полностью определяют якобиан отраженной лучевой трубки в параметризации поверхности (α_1, β_1) .

4. Восстановление поля на новой плоскости

Поскольку начальные условия для трассировки задаются как дискретный набор сферических волновых фронтов, то на любой плоскости наблюдения, помещенной в оптическую схему, будет формироваться массив лучей, пересекающих эту плоскость. Каждому i -му лучу соответствует значение комплексной амплитуды $\mathbf{A}_i$ и эйконала ψ_i . Однако точки пересечения лучей и плоскости

наблюдения $\mathbf{r}_i$ в общем случае распределены неравномерно. Например, вблизи каустик лучи сгущаются, тогда как в других областях они могут быть разрежены.

Между тем для таких задач как вычисление дифракционного интеграла по площади зрачка разложение волнового фронта по полиномам Цернике, построение функции рассеяния точки, нам, как правило, требуется знать значения поля на равномерной сетке. Предположим, что в плоскости наблюдения выполняются условия применимости эйконального анзаца $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{ik_0\psi(\mathbf{r})}$, т. е. она расположена вдали от фокуса и каустик. В таком случае для восстановления электромагнитного поля не требуется вычислять дифракционные интегралы, и нам достаточно произвести интерполяцию данных, т. е. вычислять значения $\mathbf{A}_i$ и ψ_i на узлах некоторой регулярной сетки (x_m, y_n) исходя из значений, заданных на нерегулярном наборе точек.

Прямая интерполяция комплексных компонент поля $\mathbf{E}$ часто приводит к существенным вычислительным ошибкам. Это связано с высокой пространственной частотой осцилляций множителя $e^{ik_0\psi}$, что особенно критично в коротковолновом рентгеновском диапазоне. Гораздо более высокую точность обеспечивает раздельная интерполяция медленно меняющихся величин — вектора комплексной амплитуды $\mathbf{A}$ и эйконала ψ .

Проинтерполировав эти гладкие функции на узлы регулярной сетки (x_m, y_n) по отдельности, можно собрать итоговое высокочастотное поле по исходной формуле:

$$\mathbf{E}(x_m, y_n) = \mathbf{A}_{\text{int}}(x_m, y_n) e^{ik_0\psi_{\text{int}}(x_m, y_n)},$$

где индекс int обозначает интерполированные значения амплитуды и эйконала в узле сетки.

Опишем конкретный метод интерполяции, который позволяет восстановить поле на регулярной сетке с учетом кривизны волнового фронта. Разложим эйконал вблизи i -й точки пересечения $\mathbf{r}_i$ в ряд Тейлора до второго порядка. Используя уравнение (5) и определение матрицы Гессе эйконала U (см. (8), (13)), мы получаем

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_i + \delta\mathbf{r}) \approx & \psi(\mathbf{r}_i) + n(\mathbf{p}_i \cdot \delta\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2}(\delta\mathbf{r}^T U_i \delta\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (31)$$

где $\mathbf{p}_i$ — направление i -го луча, а матрица U_i вычисляется по формуле (13).

Подставляя (31) в эйкональный анзац, мы можем оценить поле в произвольной точке $\mathbf{r}_i + \delta\mathbf{r}$, лежащей на плоскости наблюдения:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}_i + \delta\mathbf{r}) \approx & \mathbf{A}_i \exp\left(i k_0 [\psi_i + n(\mathbf{p}_i \cdot \delta\mathbf{r}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2}(\delta\mathbf{r}^T U_i \delta\mathbf{r})]\right), \end{aligned}$$

где $\psi_i = \psi(\mathbf{r}_i)$ — эйконал в точке пересечения луча и плоскости, а $\mathbf{A}_i = \mathbf{A}_0(\mathbf{r}_i)$ — амплитуда, вычисленная через инвариант (15).

Область применимости разложения (31) ограничена расстоянием ρ , на котором квадратичная поправка к фазе достигает порядка π :

$$k_0 \cdot \frac{1}{2} \|U_i\| \rho^2 \sim \pi \quad \Rightarrow \quad \rho \sim \sqrt{\frac{\lambda}{\|U_i\|}}. \quad (32)$$

Для расстояний больших ρ необходимо учитывать высшие порядки разложения, и оценка вклада i -го луча в значение поля становится некорректной. Величина ρ играет роль локального радиуса интерполяции — чем сильнее кривизна волнового фронта (больше $\|U_i\|$), тем уже область, в которой можно использовать оценку поля от этого луча.

Таким образом, каждый луч и лучевая трубка содержат в себе информацию о поле в масштабах радиуса ρ вокруг точки его пересечения с плоскостью наблюдения. Значение ρ зависит от кривизны волнового фронта и в ряде случаев может оказаться очень большим — например, для лучей вблизи оптической оси хорошо скорректированной системы, где $\|U_i\| \rightarrow 0$. Если в такой ситуации использовать ρ непосредственно как радиус области, в которой значение поля в точке пересечения используется для интерполяции, то отдельный луч, попавший на один край изображения, начнет вносить вклад в значения интерполируемого поля в узлах сетки на противоположном краю. Кроме того, при большом ρ число узлов сетки в области интерполяции каждого луча растет пропорционально площади, и общая вычислительная сложность интерполяции для N лучей на сетке из M узлов может достигать $O(NM)$.

Для оптимизации нашего алгоритма мы фиксируем локальную область интерполяции каждого луча: i -й луч вносит вклад только в ближайший к нему узел сетки (x_{m^*}, y_{n^*}) и в восемь его соседей, образующих квадрат 3×3 . Такой подход гарантирует, что обработка каждого луча требует $O(1)$ операций, а полная сложность составляет $O(N)$, независимо от размера сетки и величины ρ .

Вклад i -го луча в каждый из этих девяти узлов взвешивается с помощью ядра Вендланда — радиальной функции с компактным носителем и непрерывными производными вплоть до второго порядка. Поскольку ядро является полиномом, оно вычисляется существенно быстрее, чем, например, гауссово:

$$w(r, R) = \begin{cases} (1-q)^4(4q+1), & q < 1, \\ 0, & q \geq 1, \end{cases} \quad q = \frac{r}{R}, \quad (33)$$

где $r = |\delta\mathbf{r}|$ — расстояние от точки пересечения лучом плоскости до узла сетки, а $R = \rho_i$ — радиус интерполяции, определяемый кривизной волнового фронта (32). Если ρ_i оказывается меньше шага сетки h , вес ядра становится равным нулю на всех соседних узлах. Это означает, что плотность лучей недостаточна для корректной интерполяции в данной области. Альтернативный подход состоит в ограничении радиуса области интерполяции снизу: $R = \max(\rho_i, h)$, что гарантирует ненулевые веса

на ближайших узлах. При этом, однако, разложение эйконала в ряд Тейлора используется за пределами его строгой области применимости.

Обозначим $\delta \mathbf{r}_{i,mn} = \mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_i$ — вектор от точки пересечения i -го луча до узла сетки $\mathbf{r}_{mn} = (x_m, y_n)$. Тогда оценка поля в данном узле записывается как взвешенное среднее:

$$\mathbf{E}_{mn} = \frac{\sum_i w_i \mathbf{A}_i \exp(ik_0 \psi_i^{(2)}(\mathbf{r}_{mn}))}{\sum_i w_i},$$

где суммирование ведется по всем лучам, для которых узел (m, n) входит в квадрат 3×3 , $w_i = w(|\delta \mathbf{r}_{i,mn}|, R_i)$ — вес (33), а $\psi_i^{(2)}(\mathbf{r}_{mn})$ обозначает квадратичное приближение эйконала (31) в точке $\mathbf{r}_{mn}$. На практике интерполяция выполняется так, что для каждого луча определяется ближайший узел сетки и вычисляются интерполяционные веса. Такой однопроходный алгоритм не требует хранения всего массива точек пересечений лучей с плоскостью в памяти.

Описанные в данном разделе методы реконструкции поля применимы в областях пространства, где сохраняется однолучевое приближение геометрической оптики. Если же плоскость наблюдения располагается вблизи каустик или фокусов (где эйкональный анзац разрушается из-за многократного пересечения лучевых трубок), необходимо переходить к использованию интеграла дифракции по площади выходного зрачка, эффективный численный расчет которого подробно описан в работе [20].

5. Численный эксперимент

Для проверки разработанного пакета была выбрана оптическая схема объектива Шварцшильда — двухзеркальная осесимметричная система, широко применяемая в рентгеновской оптике. В расчетах мы взяли зеркала со сферическими поверхностями, что позволило сравнить результаты трассировки лучей не только с коммерческим пакетом Zemax, используемым как эталон, но и аналитическим решением, известным для данной конфигурации. Вычисления показали совпадение результатов трассировки нашего пакета, Zemax и аналитического решения. Также мы показали соответствие между нашими численными результатами и результатами, полученными в Zemax, для оптических путей лучей и аберраций волнового фронта.

5.1. Влияние параметров многослойного покрытия

Для демонстрации возможностей разработанного ПО выполнен расчет изображения точечного источника, формируемого параболическим зеркалом с однородным многослойным покрытием (рис. 1).

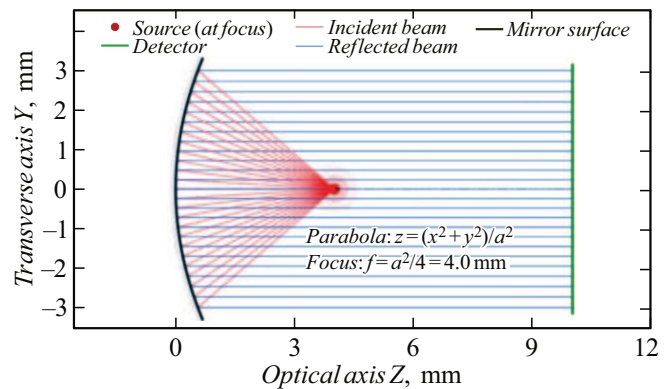


Рис. 1. Оптическая схема эксперимента: фокусировка параболическим зеркалом с многослойным покрытием.

Покрытие представляет собой периодическую структуру из чередующихся слоев двух материалов; период и соотношение толщин слоев подбираются таким образом, чтобы обеспечить максимальный коэффициент отражения в заданном угловом диапазоне.

Рассмотрены два варианта настройки покрытия:

- покрытие, оптимизированное на угловой диапазон $0^\circ - 5^\circ$ (близкий к нормальному падению);
- покрытие, оптимизированное на угловой диапазон $13^\circ - 18^\circ$.

Для каждого варианта выполнена трассировка пучка лучей от точечного источника через параболическое зеркало до плоскости изображения. При вычислении, как правило, использовалось 4 миллиона лучей. Для каждого луча вычислен комплексный коэффициент отражения $\hat{r}(\theta_i)$ по формуле (21), где угол падения θ_i определяется локальной геометрией зеркала в точке пересечения. Амплитуда поля в плоскости изображения рассчитана с учетом как геометрикооптического закона изменения амплитуды (10), так и коэффициента отражения покрытия.

Результаты показывают существенное влияние углового диапазона настройки многослойного покрытия на структуру и качество формируемого изображения (рис. 2, 3). При настройке на малые углы ($0^\circ - 5^\circ$) покрытие эффективно отражает лучи вблизи оси зеркала, однако периферийные лучи, падающие под большими углами, испытывают значительное ослабление. При настройке на диапазон $13^\circ - 18^\circ$ ситуация обратная: центральная часть апертуры вносит малый вклад, а основная доля отраженной энергии приходится на периферию. Это приводит к качественно различным распределениям интенсивности в плоскости изображения и различному характеру аберраций.

Кроме того, видно, что полученное распределение интенсивности не является осесимметричным из-за наличия выделенного направления в начальном условии (вектор $\mathbf{E}$ направлен вдоль оси Y). При вращении этого вектора вокруг оптической оси Z распределение

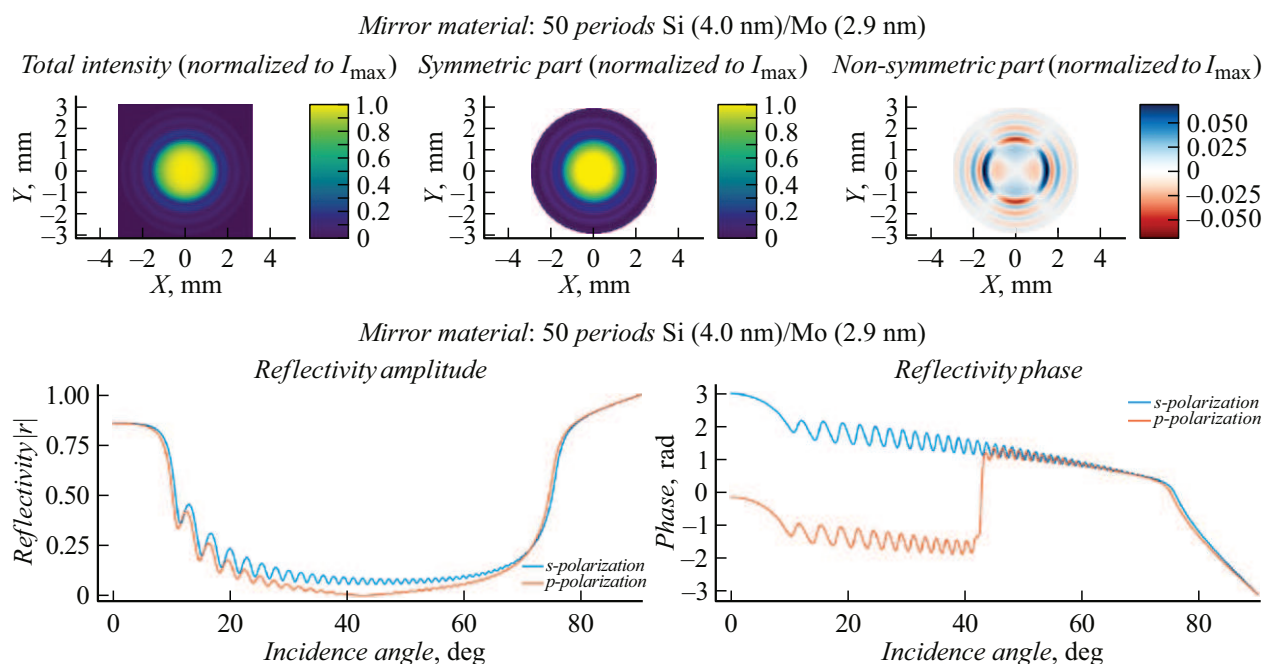


Рис. 2. Распределение интенсивности, амплитуда и фаза коэффициента отражения для зеркала с покрытием, настроенным на углы 0° – 5° . Синим показана s -поляризация, оранжевым — p -поляризация. Интенсивность нормирована на пиковое значение. Для наглядности показаны осесимметричная и неосесимметричная части распределения интенсивности.

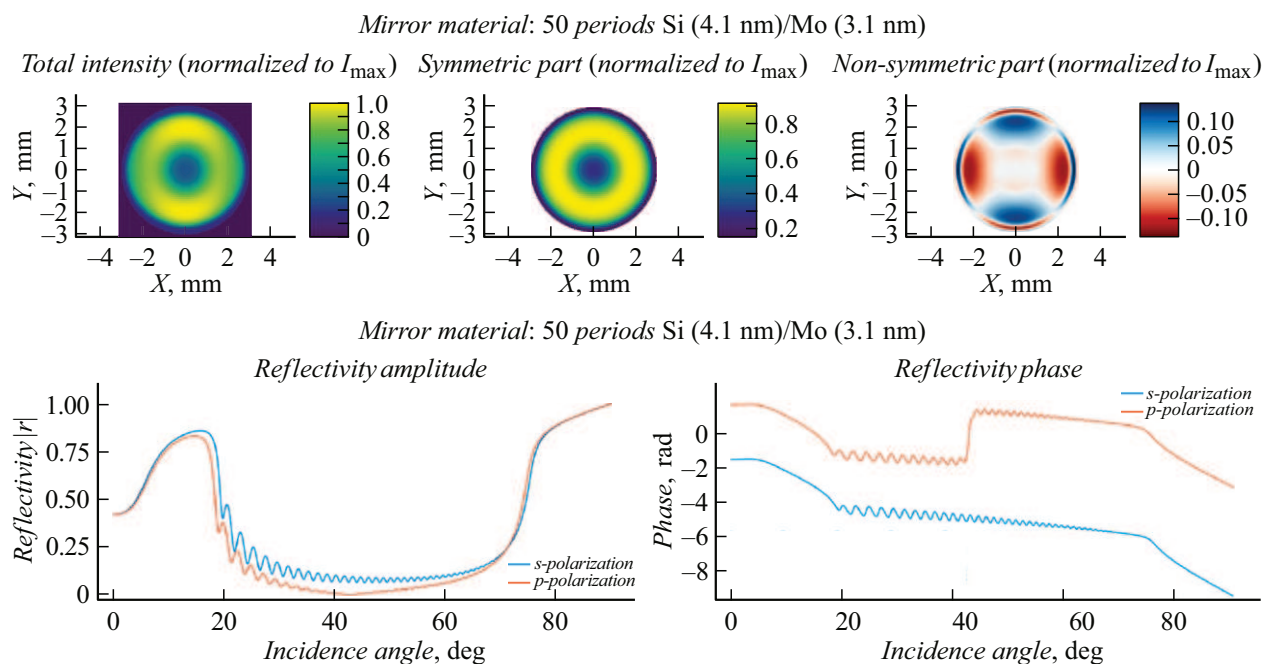


Рис. 3. Распределение интенсивности, амплитуда и фаза коэффициента отражения для зеркала с покрытием, настроенным на углы 13° – 18° . Синим показана s -поляризация, оранжевым — p -поляризация. Интенсивность нормирована на пиковое значение. Для наглядности показаны осесимметричная и неосесимметричная части распределения интенсивности.

интенсивности будет вращаться вместе с ним благодаря осевой симметрии оптической схемы. Для большей наглядности на рис. 2, 3 мы разделили осесимметричные и неосесимметричные части распределений интенсивности.

5.2. Фокусировка при высокой числовой апертуре

На рис. 4 представлено распределение оптического поля при фокусировке линейно поляризованной плоской

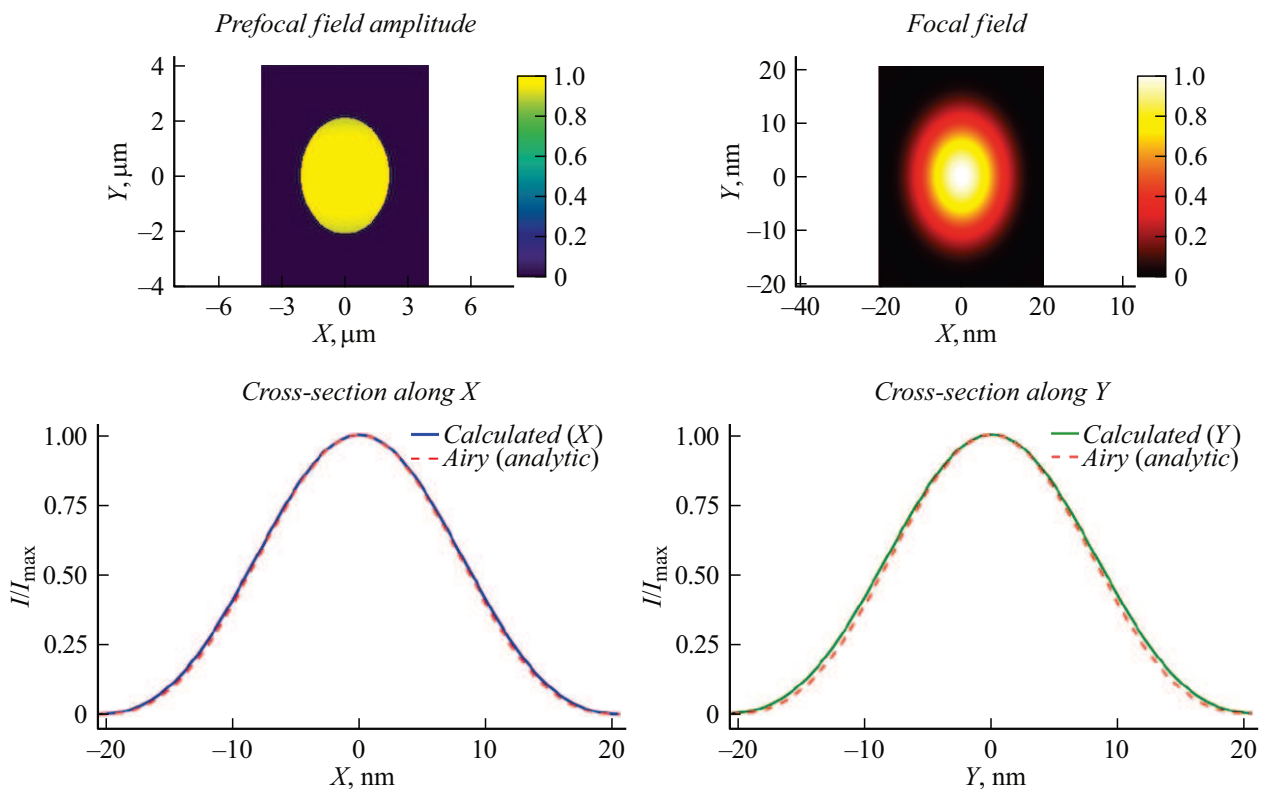


Рис. 4. Сверху слева: амплитуда поля на предфокальной плоскости. Сверху справа: детальная интенсивность в фокусе. Снизу: сечения фокального пятна вдоль ортогональных осей X и Y для апертуры $NA = 0.4$.

волны идеальным параболическим зеркалом с высокой числовой апертурой ($NA = 0.4$, $\lambda = 13.5$ nm). Для сравнения на рис. 5 представлены результаты аналогичного расчета для большей апертуры $NA = 0.8$. В обоих случаях поле в фокусе восстанавливалось методом численного интегрирования.

На графиках сечений (рис. 5, нижний ряд) отчетливо видно расхождение расчетного распределения интенсивности со стандартным аналитическим распределением идеального диска Эйри. Это расхождение не является вычислительной ошибкой, а представляет собой физически корректный результат, обусловленный комплексом явлений, возникающих в оптических системах с высокой числовой апертурой:

1. Нарушение параксиального приближения. Классическая формула диска Эйри выводится в рамках скалярной теории дифракции и справедлива лишь для малых углов. При $NA = 0.8$ лучи сходятся к фокусу под максимальным углом около 53° . В таких условиях скалярная теория теряет применимость и требуется строгий учет векторного характера электромагнитного поля, который естественным образом заложен в алгоритм трассировки.

2. Поляризационные эффекты уширения. В расчете падающая волна имела линейную поляризацию, направленную вдоль оси Y . Согласно строгой векторной теории Ричардса–Вольфа [21], при сильной фокусировке фокальное пятно линейно поляризованного света теряет

круговую симметрию и растягивается вдоль направления поляризации. Именно поэтому наибольшее уширение центрального пика по сравнению с диском Эйри наблюдается на сечении вдоль оси Y .

Заключение

В работе показано, что для численного моделирования рентгенооптических схем можно использовать хорошо известный коротковолновый асимптотический метод лучевого разложения, решая уравнение эйконала и уравнение переноса нулевого порядка. Оба уравнения решаются с помощью трассировки лучей и лучевых трубок, при этом процесс отражения излучения от многослойного покрытия на зеркальной подложке описывается в локально-плоском приближении, когда плоская волна отражается от плоской поверхности, с помощью обратной рекурсии Парратта.

Основным результатом работы является создание инструмента, объединяющего геометрическую трассировку лучей через произвольные поверхности с расчетом отражения от многослойных покрытий в локально-плоском приближении. В отличие от универсальных коммерческих пакетов разработанный программный пакет на языке Julia позволяет гибко исследовать волновые эффекты в рентгеновской оптике без ограничений на использование закрытых проприетарных инструментов.

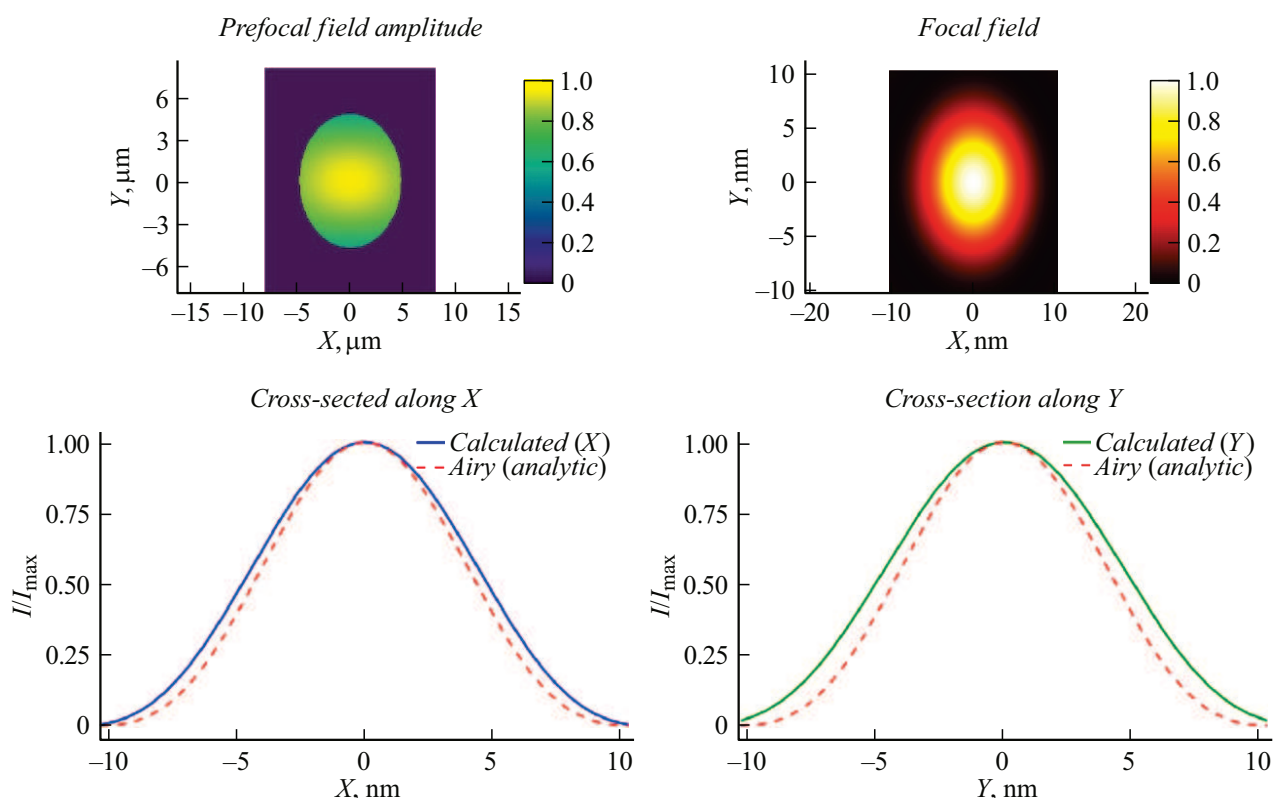


Рис. 5. Аналогичное распределение и сечения фокального пятна вдоль ортогональных осей X и Y в сравнении с аналитическим распределением диска Эйри для высокой апертуры $\text{NA} = 0.8$.

Проверка на схеме Шварцшильда показала корректность реализованных алгоритмов трассировки и расчета aberrаций.

Численный эксперимент с параболическим зеркалом выявил существенную зависимость структуры изображения от углового диапазона настройки покрытия: при настройке на малые углы (0° – 5°) эффективно работает приосевая область зеркала, тогда как при настройке на 13° – 18° основной вклад вносит периферия апертуры. Это приводит к качественно различным распределениям интенсивности и различному балансу aberrаций, что необходимо учитывать при проектировании рентгенооптических систем.

В ходе дальнейшей работы планируется:

- добавить поддержку градиентных (с переменной толщиной слоев) многослойных зеркал;
- дополнить метод вычисления коэффициентов отражения поправкой на шероховатость подложки и поверхности с помощью методов, использованных в работе [8];
- устранить проблемы, связанные с каустиками при трассировке через зеркала произвольной формы (см. [22]);
- реализовать расчет функции рассеяния точки с учетом числовой апертуры объектива, в том числе во внеосевых точках поля;

- добавить функционал оптимизации формы зеркальной поверхности для улучшения изображающих свойств конструируемых оптических систем.

Благодарности

Авторы выражают свою признательность рецензентам за полезные замечания.

Финансирование работы

Алгоритмы разработаны в рамках гос. задания № FFUF-2024-0022, численные расчеты проводились при поддержке гранта РФФИ № 21-72-30029-П.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] В.Н. Полковников, Н.И. Чхало. Тез. докл. XXIX симпозиума „Нанопфизика и наноэлектроника“ (Н.Новгород, 2025), с. 533.
- [2] В.Н. Полковников, К.В. Дуров, Р.М. Смертин, Р.А. Шапошников, Н.И. Чхало. Тез. докл. XXX симпозиума „Нанопфизика и наноэлектроника“ (Н.Новгород, 2026), с. 571.

- [3] И.В. Малышев, Д.Г. Реунов, А.К. Чернышев, М.Н. Торопов, А.Е. Пестов, Р.М. Смертин, В.Н. Полковников, Н.И. Чхало, С.А. Голышев, С.В. Лаврушкина, Е.П. Казаков. *Тез. докл. XXX симпозиума „Нанопфизика и наноплектроника“* (Н.Новгород, 2026), с. 547.
- [4] Н.И. Чхало. *Микроэлектроника*, **53** (5), 375 (2024). DOI: 10.31857/S0544126924050038
- [5] В.Н. Полковников, Н.Н. Салащенко, М.В. Свечников, Н.И. Чхало. *УФН*, **190**, 92 (2020). DOI: 10.3367/UFNr.2019.05.038623
- [6] М.С. Михайленко, В. Паульс, Н.И. Чхало, А.Е. Пестов, М.Н. Торопов, И.Д. Оськин, А.К. Чернышев. *Микроэлектроника*, **55** (4), (2026).
- [7] D. Golde, B. Butscher, P. Gräupner, P. Kürz, D. Jürgens, O. Conradi, J. van Schoot, J. Stoeldraijer. *Proc. SPIE* 12051, 1205102 (2022). DOI: 10.1117/12.2614778
- [8] M. Svechnikov. *J. Appl. Crystallogr.*, **57** (3), 848 (2024). DOI: 10.1107/S1600576724002231
- [9] M. Sanchez del Rio, N. Canestrari, F. Jiang, F. Cerrina. *Proc. SPIE* 8141, 814115 (2011). DOI: 10.1117/12.893911
- [10] L.G. Parratt. *Phys. Rev.*, **95** (2), 359 (1954). DOI: 10.1103/PhysRev.95.359
- [11] M.F. Bal. *Next-Generation Extreme Ultraviolet Lithographic Projection Systems. Ph. D. thesis* (TU Delft, Delft, 2003)
- [12] М. Борн, Э. Вольф. *Основы оптики*. 2-е изд. (Наука, М., 1973)
- [13] Ю.А. Кравцов, Ю.И. Орлов. *Геометрическая оптика неоднородных сред* (Наука, М., 1980)
- [14] В.М. Бабич, В.С. Булдырев. *Асимптотические методы в задачах диффракции коротких волн. Метод эталонных задач* (Наука, М., 1972)
- [15] В.И. Арнольд. *Математические методы классической механики* (Эдиториал УРСС, М., 2000)
- [16] В.А. Фок. *Проблемы диффракции и распространения электромагнитных волн* („Советское радио“, Москва, 1970)
- [17] A. Díaz-Cano, F. González-Gascón, L.L. Sánchez-Soto. *Symmetry*, **14**, 478 (2022). DOI: 10.3390/sym14030478
- [18] A. Drezet, J.C. Woehl, S. Huant. *J. Math. Phys.*, **47**, 072901 (2006). DOI: 10.1063/1.2197689
- [19] С.П. Шарый. *Конечномерный интервальный анализ* (Изд-во „XYZ“, Новосибирск, 2026)
- [20] Y. Hu, Z. Wang, X. Wang, S. Ji, C. Zhang, J. Li, W. Zhu, D. Wu, J. Chu. *Light: Science & Applications*, **9**, 119 (2020). DOI: 10.1038/s41377-020-00362-z
- [21] B. Richards, E. Wolf. *Proc. R. Soc. Lond. A*, **253** (1274), 358 (1959). DOI: 10.1098/rspa.1959.0200
- [22] E.R. Tracy, A.J. Brizard, A.S. Richardson, A.N. Kaufman. *Ray Tracing and Beyond: Phase Space Methods in Plasma Wave Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 2014)