УДК 535.32

**В.Г. Фарафонов, В.И. Устимов,**
**А.Р. Тулегенов, М.С. Прокопьева, Н.А. Вешев**
(Санкт-Петербург, Россия)

# ПРИМЕНЕНИЕ КВАЗИСТАТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В СФЕРОИДАЛЬНОЙ МОДЕЛИ

*Предложенная сфероидальная модель совместно с квазистатическим приближением позволяет выполнять быстрые расчеты с приемлемой точностью для несфероидальных частиц. Модель замещения выбирается из требования равенства объема, а также отношений максимальных поперечных и продольных размеров. Расчеты были выполнены для цилиндров, параллелепипедов и конусов и сравнены со строгими методами, в частности DDA, который применяется для частиц произвольной формы. Оценена область применимости метода.*

**Ключевые слова:** рассеяние света, методы приближения, сфероидальная модель.

*The proposed spheroidal model with quasistatic approximation provides a simple way of calculations with acceptable accuracy for non-spheroidal targets. Replacement approximation is selected with the requirement of equality of the volume and the ratio of the maximum size. Sample calculations were made for cylinders, parallelepipeds and cones, the results were compared with hard methods, in particular with DDA, commonly used for particles of arbitrary shape. The range of acceptability of the method was evaluated.*

**Keywords:** light scattering, approximation methods, spheroidal model.

## Введение

Решение проблемы рассеяния света малыми частицами играет важную роль для различных областей науки, включая нанооптику [1–3]. Метод квазистатического приближения (QSA), разработанный для вытянутых и сплюснутых сфероидов [4], является обобщением приближения Релея-Ганса и приближения Релея [5; 6]. Диапазон применимости лежит в районе области применимости приближений Релея-Ганса и Релея. Однако расчеты, сделанные для гомогенных сфероидов и эллипсоидов в [7] и для многослойных частиц в [6], показали, что область применимости QSA значительно шире, чем изначальные приближения. Было найдено, что QSA предпочтительней приближения Релея-Ганса, т. к. учитывает поляризуемость частицы и поэтому предоставляет более точные результаты в статических границах и более точен по сравнению с приближением Релея, т. к. последний не учитывает фазовые изменения передающего излучения. Таким образом, QSA подходит для оптически гладких частиц, которые существенно отличаются от сферы. Необходимо также отметить, что в случае строгого вытянутого и сплюснутого сфероидов QSA предоставляют основное условие асимптотического уравнения рассеяния поля являющимся отношением меньшей оси к максимальной $b/a$ [8; 9]. В этой части QSA скомбинирован со сфероидальной моделью, недавно рекомендованной для асимметричных рассеивателей [10; 11]. Для этой модели рассеиватель заменяется сфероидом с близкими оптическими свойствами.

## Основные уравнения

Для данных осесимметричных рассеивателей определим сфероид приближения и затем сконструируем QSA для него. В [10; 11] было найдено, что приближение является подходящим в случае, когда рассматриваемый рассеиватель и сфероид имеют одинаковые соотношения сторон и объемы:

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{part}}, \frac{a_{\text{eff}}}{b_{\text{eff}}} = \frac{a_{\text{part}}}{b_{\text{part}}}, \tag{1}$$

где $V_{\text{part}}$, $a_{\text{part}}$, $b_{\text{part}}$ – объем, продольный и поперечный размеры рассеивателя, $V_{\text{eff}}$, $a_{\text{eff}}$, $b_{\text{eff}}$ объем и полуоси заменяемого сфероида. Например, для конечного цилиндра длины $L$ и диаметра $D$ мы получаем:

$$a_{\text{eff}} = \sqrt[3]{\frac{3}{16}}D, b_{\text{eff}} = \sqrt[3]{\frac{1}{16}}H. \tag{2}$$

Для конуса с высотой $H$ и радиусом $R$ приближение не выглядит простым из-за меньшей симметрии. Однако было найдено, что хорошее приближение может быть представлено сфероидом с параметрами:

$$a_{\text{eff}} = \sqrt[3]{\frac{1}{2}}R, b_{\text{eff}} = \sqrt[3]{\frac{1}{16}}H. \tag{3}$$

Для Чебышевских частиц и сплюснутых псевдосфероидов, нахождение приближающего сфероида более сложная задача, поскольку подобные частицы недостаточно объемны для некоторых значений параметров [10].

Применим универсальный подход для различных приближений – $\vec{E}^{(1)}$ или приближено для каждой формы с физической точки зрения, либо получается из решения более простой задачи рассеяния. Это поле позволяет рассчитать поле рассеивания $\vec{E}^{(1)}$ с помощью стандартного выражения объемного интеграла [12]:

$$\vec{E}^{(1)}(\vec{r}) = \int_V (k_2^2 - k_1^2)\vec{E}^{(2)}(\vec{r}')\hat{G}(\vec{r},\vec{r}')dV', \tag{4}$$

где $k_1$ и $k_2$ волновые числа внутри и снаружи рассеивателя, соответственно, и магнитной восприимчивостью $\mu = 1$ и точкой наблюдения $M(r)$ лежит вне частицы с поверхностью *S*. Диадическая функция Грина получается из функции Грина для скалярного уравнения Гельмгольца $\tilde{G}$ в следующем виде: $\tilde{G}(\vec{r},\vec{r}') = (I + k_1^{-2}\text{graddiv})\tilde{G}(\vec{r},\vec{r}')$, где *I* единичная матрица. В дальнем поле ($r \to \infty$) упрощенная функция Грина и уравнение выглядит как:

$$\vec{E}^{(1)}(\vec{r}) = (k_2^2 - k_1^2)\frac{\exp(ik_0 r)}{4\pi r}(I - \vec{i}_r\vec{i}_r^{\,T}) \times \tag{5}$$

$$\times \int_V \exp[-ik_1(\vec{i}_r \vec{r}')]\vec{E}^{(2)}(\vec{r}')dV',$$

где $\vec{i}_r = \vec{r}/r$ и $\vec{i}_r^{\,T}$ векторы, продуктом которых предоставляет матрицу 3 ранга.

В QSA приближение Релея-Ганса расширяется за счет использования поляризуемости, и внутренние поля равны:

$$\vec{E}^{(2)} = K_1(\vec{E}^{(0)},\vec{i}_X)\vec{i}_X + K_2(\vec{E}^{(0)},\vec{i}_Y)\vec{i}_Y + K_3(\vec{E}^{(0)},\vec{i}_Z)\vec{i}_Z, \tag{6}$$

где $\vec{E}^{(0)}$ – падающая волна $(\vec{i}_X,\vec{i}_Y,\vec{i}_Z)$, единичный вектор в Декартовой системе координат (*X*, *Y*, *Z*), эти оси относятся к основным осям приближающего сфероида. Коэффициенты $K_j$ связаны с геометрическими параметрами $L_j$, используемыми в приближении Релея [1]:

$$K_j = \frac{1}{1 + L_j(\varepsilon - 1)},\ j = 1,2,3, \tag{7}$$

где $\varepsilon = \varepsilon_2/\varepsilon_1$ – относительная диэлектрическая проницаемость.

Таким образом, рассеянное поле в удаленной зоне равно:

$$\vec{E}^{(1)} = (k_2^2 - k_1^2)\frac{\exp(ik_1 r)}{4\pi r}V(I - \vec{i}_r\vec{i}_r^{\,T})\vec{E}^{(2)}G, \tag{8}$$

где

$$G(\vartheta,\phi) = \frac{1}{V}\int_V \exp[ik_1(\vec{i}_{k_1} - \vec{i}_r,\vec{r}')]dV', \tag{9}$$

и $\vec{i}_{k_1} = \vec{k}_1/k_1$, $(r,\vartheta,\varphi)$ отражают направление падающего излучения (здесь и далее ось *z*).

Для эллипсоидальной частицы функция $G(u)$ упрощается:

$$G(\vartheta,\phi) = G(u) = \frac{3}{u^2}(\sin u - u\cos u), \tag{10}$$

где

$$u = 2k_1\sin\frac{\vartheta}{2}\sqrt{a^2(\vec{i}_X,\vec{i}_b)^2 + b^2(\vec{i}_Y,\vec{i}_b)^2 + c^2(\vec{i}_Z,\vec{i}_b)^2}, \tag{11}$$

где $a$, $b$, $c$ – полуоси, $(\vec{i}_X, \vec{i}_b)$, $(\vec{i}_Y, \vec{i}_b)$, $(\vec{i}_Z, \vec{i}_b)$ – косинусы трех углов, сформированные осями и биссектрисой угла, дополняющего угол рассеивания.
Рассеяние поперечного сечения получается интегрированием интенсивности поля рассеяния над удаленной сферой:

$$C_{\text{sca}} = \int_{\Omega}\int \left|\vec{E}^{(1)}\right|^2 d\omega \,. \tag{12}$$

В выражении (13) аргумент $G(u)$ определяется выражением (11).

Для падающей плоской волны TE-режиме мы получаем:

$$Q_{\text{sca,TE}} = \frac{C_{\text{sca,TE}}}{\pi r_{\text{V}}^2} = \frac{x_{\text{V}}^4}{9\pi}\left|\frac{(z-1)}{1+(z-1)L_1}\right|^2 \times \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}(\cos^2\varphi + \cos^2\theta\sin^2\varphi)\times \tag{13}$$
$$\times G^2(u)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi.$$

Для вытянутого приближающего сфероида, имеем:

$$u = (a/b)^{\frac{2}{3}} x_{\text{V}}[(\cos\theta - \cos\alpha)^2 + (b/a)^2(\sin^2\theta + \sin^2\alpha - 2\sin\theta\sin\alpha\cos\varphi)]^{1/2}\,. \tag{14}$$

Размер частиц различной формы связан с их параметром дифракции:

$$x_{\text{V}} = k_1 r_{\text{V}} = \frac{2\pi r_{\text{V}}}{\lambda}, \tag{15}$$

где $r_{\text{V}}$ – радиус сферы, объем которой равен объему рассеивателя, например $4\pi/3r_{\text{V}}^3 = V_{\text{part}}$, $\lambda$ – длина волны.

Для TM режима эффективность рассеивания рассчитывается похожим способом:

$$\begin{aligned} Q_{\text{sca,TM}} &= \frac{C_{\text{sca,TM}}}{\pi r_{\text{V}}^2} = \\ &= \frac{x_{\text{V}}^4}{9\pi}\{\left|\frac{(\varepsilon-1)}{1+(\varepsilon-1)L_1}\right|^2 \cos^2\alpha \times \\ &\times\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}(\sin^2\varphi + \cos^2\theta\cos^2\varphi)G^2(u)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi + \\ &+2\operatorname{Re}\left(\frac{(\varepsilon-1)}{1+(\varepsilon-1)L_1}\times\frac{(\varepsilon-1)}{1+(\varepsilon-1)L_3}\right)\sin\alpha\cos\alpha\times \\ &\times\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}G^2(u)\cos\theta\sin^2\theta\cos\varphi\, d\theta\, d\varphi + \sin^2\alpha\times \\ &\times\left|\frac{(\varepsilon-1)}{1+(\varepsilon-1)L_3}\right|^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}G^2(u)\sin^3\theta\, d\theta\, d\varphi\} \end{aligned} \tag{16}$$

Для сплюснутого приближающего сфероида необходимо поменять $a$ и $b$ местами. Необходимо отметить, что для приближения Релея $u = 0$ и $G(u) = 0$ и, как результат выражение (13) совпадает со стандартным выражением, используемым в приближении Релея [1].

Поглощение сечения получается интегралом полем внутри рассеивателя над его объемом:

$$C_{\text{abs}} = k_1 \int_V \operatorname{Im}(\varepsilon - 1) |\vec{E}^{(2)}(\vec{r})|^2 \, dV \cdot \tag{17}$$

Поскольку модули электрического поля в приближения Релея и QSA аналогичны для обоих приближений, то мы получаем одинаковые результаты.

Должно быть указано, что в случае TE режима эффективность рассеяния зависит от расположения частицы (здесь угла падения) только через аргумент $u$ функции $G(u)$ [13; 14]. Для небольших частиц в приближении Релея подобная зависимость исчезает.

Когда падающая плоская волна распространяется вдоль оси симметрии частицы ($\alpha = 0$), TE и TM режимы не разделяются, интеграл над азимутальным углом может быть найден, и мы получаем:

$$Q_{\text{sca,TE}} = \frac{x_V^4}{9\pi} \left| \frac{(\varepsilon - 1)}{1 + (\varepsilon - 1)L_1} \right|^2 \times \int_0^{\pi} (1 + \cos^2\theta) G^2(u) \sin\theta d\theta, \tag{18}$$

где

$$u = (a/b)^{2/3} x_V \sqrt{(\cos\theta - 1)^2 + (b/a)^2 \sin^2\theta}, \tag{19}$$

где плоская волна распространяется перпендикулярно оси симметрии ($\alpha = 90^0$), мы имеем

$$Q_{\text{sca,TM}} = \frac{x_V^4}{9\pi} \left| \frac{(\varepsilon - 1)}{1 + (\varepsilon - 1)L_1} \right|^2 \times \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} G^2(u) \sin^3\theta d\theta d\varphi, \tag{20}$$

где

$$u = (a/b)^{\frac{2}{3}} x_V [\cos^2\theta + (a/b)^2 (\sin^2\theta + 1 - 2\sin\theta\cos\varphi)]^{1/2}. \tag{21}$$

Для сильно вытянутых частиц ($b/a$) << 1 геометрические факторы могут быть легко получены ($L_1 = L_2 = ½$, $L_3 = 0$) и аргумент $u \approx x_a |\cos\alpha - \cos\theta|$. Тогда для TM и TE режимов мы получаем $u \approx x_a |1 - \cos\theta|$ и $u \approx x_a |\cos\theta|$ соответственно. Здесь был представлен новый параметр дифракции, относящийся к большему измерению частицы $x_a = k_1 a = 2\pi a / \lambda$.

Для сильно приплюснутых частиц ($b/a$) << 1 геометрические факторы будут равны $L_1 = L_2 = 0$, $L_3 = 1$ и $u \approx x_a \sqrt{\sin^2\theta + 1 - 2\sin\theta\cos\varphi}$. В меридиональной плоскости ($\varphi = \pi$ и $\varphi = \pi$) для параллельно или перпендикулярно ориентированной частицы мы просто имеем $u \approx x_a \sin\theta$ и $u \approx x_a |1 - \sin\theta|$ соответственно. Подчеркнем, что для строго вытянутых и сплюснутых частиц аргумент $u$ одинаков для прямого и поперечного направлений.

## Численные результаты

Были осуществлены численные расчеты с использованием различных приближений и строгого DDA, который позволяет моделировать рассеяния света частицами произвольной формы (см. [2; 13] для описания теоретических и практических аспектов DDA). В основном были рассмотрены эффективности $Q_{sca}$ и $Q_{abc}$ для круговых цилиндров. Для сфероидов, был использован SVM со сферическим базисом, что позволяет рассчитывать поля рассеяния с высокой точностью в широком диапазоне значений параметров (см. [2; 8] для описания версии SVM). Необходимо отметить, что рассеяние конечными цилиндрами было рассмотрено в приближении Релея в [14]. Поэтому в этой работе уделяется внимание QSA.

Некоторые результаты расчетов для цилиндров с $L/D$ = 2 и 10, $m$ = 1.3, $\alpha = 90^0$ и приближающего сфероида представлены в Таблице 1 и 2, где в колонках SVM и QSA показаны результаты для сфероидов с $a/b = L/D$ с помощью SVM из [8] и QSA соответственно, колонка DDA представляет данные для цилиндров с использованием DDA кода из [13].

Таблица 1 – Зависимость Qsca, TM от xV для сфероидов (SVM, QSA) и цилиндров (DDA) для случая $L/D$ = 2, $m$ = 1.3, $\alpha = 90^0$

| $x_V$ | $Q_{sca,\,TM}$ | | |
|---|---|---|---|
| | SVM | QSA | DDA |
| 0.01 | 1.125e-09 | 1.125e-09 | 1.130e-09 |
| 0.02 | 1.800e-08 | 1.800e-08 | 1.808e-08 |
| 0.03 | 9.113e-08 | 9.110e-08 | 9.152e-08 |
| 0.04 | 2.880e-07 | 2.879e-07 | 2.893e-07 |
| 0.05 | 7.032e-07 | 7.026e-07 | 7.062e-07 |
| 0.10 | 1.125e-05 | 1.121e-05 | 1.130e-05 |
| 0.15 | 5.697e-05 | 5.654e-05 | 5.720e-05 |
| 0.20 | 1.801e-04 | 1.777e-04 | 1.808e-04 |
| 0.25 | 4.398e-04 | 4.306e-04 | 4.413e-04 |
| 0.30 | 9.119e-04 | 8.849e-04 | 9.149e-04 |
| 0.35 | 1.689e-03 | 1.622e-03 | 1.694e-03 |
| 0.40 | 2.880e-03 | 2.734e-03 | 2.888e-03 |
| 0.45 | 4.610e-03 | 4.318e-03 | 4.619e-03 |
| 0.50 | 7.016e-03 | 6.481e-03 | 7.026e-03 |
| 1.00 | 1.025e-01 | 8.164e-02 | 1.019e-01 |

Таблица 2 – Расчеты сделаны для параметров аналогичных Таблице 6 за исключением параметра $L/D$ = 10

| $x_V$ | $Q_{sca, TM}$ | | |
|---|---|---|---|
| | SVM | QSA | DDA |
| 0.01 | 1.372e-09 | 1.372e-09 | 1.344e-09 |
| 0.02 | 2.195e-08 | 2.194F-08 | 2.150e-08 |
| 0.03 | 1.111e-07 | 1.110e-07 | 1.088e-07 |
| 0.04 | 3.509e-07 | 3.507e-07 | 3.436e-07 |
| 0.05 | 8.561e-07 | 8.555e-07 | 8.382e-07 |
| 0.10 | 1.363e-05 | 1.359e-05 | 1.333e-05 |
| 0.15 | 6.846e-05 | 6.801e-05 | 6.675e-05 |
| 0.20 | 2.140e-04 | 2.115e-04 | 2.079e-04 |
| 0.25 | 5.149e-04 | 5.060e-04 | 4.980e-04 |
| 0.30 | 1.049e-03 | 1.024e-03 | 1.009e-03 |
| 0.35 | 1.905e-03 | 1.843e-03 | 1.821e-03 |
| 0.40 | 3.175e-03 | 3.045e-03 | 3.014e-03 |
| 0.45 | 4.955e-03 | 4.707e-03 | 4.670e-03 |
| 0.50 | 7.339e-03 | 6.903e-03 | 6.863e-03 |
| 1.00 | 8.074e-02 | 6.902e-02 | 7.128e-02 |

Из таблицы 1 можно подчеркнуть, что для $D/L$ = 2 сфероидальная модель дает результаты с точностью лучше, чем 1%. Расчеты сделаны с помощью точного SVM. Применение QSA приводит к ошибкам менее, чем 1% для параметра дифракции $x_V \leq 0.1$, ниже 3% для $x_V \leq 0.3$ и менее чем 8% для $x_V \leq 1.0$.

Для вытянутых частиц с $L/D$ до 10 сфероидальная модель с точным SVM дает хорошие результаты, но использование QSA предпочтительнее для всех обсуждаемых размеров (таблица 2). Необходимо отметить, что частицы могут иметь очень большой размер по сравнению с длиной падающего излучения. Например, для $x_V = 0.3$ параметр линейной дифракции $x_a \approx 1.4$, а для $x_V = 1.0$ – $x_a = 4.65$, для последнего случая предлагаемой модели дает точность лучше, чем 3% даже для таких вытянутых частиц.

**Выводы**

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

1. Сравнение результатов, получаемых различными методами, показывает, что точность сфероидальной модели, основанной на QSA, работает в широком диапазоне значений параметров.

2. QSA дает более аккуратные результаты для более оптически гладких частиц, как и для частиц с большей эксцентричностью.

3. Для небольших частиц область применения QSA шире, чем для стандартных точных методов SVM и EBCM с использованием сферического базиса.

Поскольку для сфероидов SVM со сфероидальным базисом [8] предоставляет очень точные результаты даже для больших частиц, поэтому предложенная модель имеет смысл использовать в области применения QSA. Хотя это приближение действительно для частиц меньше по сравнению с длиной волны падающего излучения, существует несколько случаев, которые более предпочтительны SVM, например: (а) для очень вытянутых и сплюснутых сфероидов, QSA достаточно точен, когда SVM получает ошибки, (б) для экстенсивных вычислений, оптические свойства группы сфероидов, когда высокая точность обычно не нужна. Также важно отметить, что QSA требует расчета только двух интегралов, когда в случае SVM выполнит расчеты сфероидальных функций и решения систем. Это преимущество QSA в частности важным для расчета фазовых функций, когда QSA предоставляет явное решение, получаемое выражениями (8) и (10) для несфероидальных рассеивателей. В отношении существующих строгих методов для несфероидальных частиц и особенно [2], предлагаемая модель предполагает замещение рассеивателя сфероидом и применение QSA, в то время как DDA становится затратным с ростом размера и индекса преломления частицы [13].

**Литература:**


1. Борен, К., Хаффмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. – М. : Мир, 1986. – 660 с.
2. Mishchenko, M.I., Hovenier J.W., Travis L.D. Light Scattering by Nonspherical Particles. – San Diego : Academic Press, 2000. – 690 p.
3. Mishchenko, M.I., Hovenier J.W., Travis L.D. Scattering, Absorption and Emission of Light by Small Particles. – Cambridge : Cambridge University Press, 2002.
4. Климов, В.В. Наноплазмоника. – М. : Физматлит, 2009.
5. Фарафонов, В.Г. // Опт. и спектр. – 1994. – Т. 77. – С. 455.
6. Фарафонов В.Г., Ильин В.И., Прокопьева М.С. // Опт. и спектр. – 2002. – Т. 92. – С. 621.
7. Вощинников, Н.В., Фарафонов В.Г. 2000 / / Опт. и спектр. – 2000. – Т. 88. – С. 78.
8. Voshchinnikov, N.V., Farafonov V.G. // Astrophys. Space Sci. – 1993. – V. 204. – P. 19.

9. Farafonov, V.G. Application of non-orthogonal bases in the theory of light scattering by spheroidal particles. In Kokhanovsky A. (Ed.), Light Scattering Revies 8. – London : Springer-Praxis, 2013. – Pp. 189–266.
10. Фарафонов, В.Г., Ильин В.Б., Устимов В.И., Тулегенов А.Р. // Опт. и спектр. – 2017. – Т. 122. – С. 506.
11. Фарафонов, В.Г., Ильин В.Б., Устимов В.И., Соколовская М.В. // Опт. и спектр. – 2018. – Т. 124.
12. Исимару, А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородной среде. – М. : Мир, 1981. – Т. 1.
13. Yurkin, M.A., Hoekstra A.G. // JQSRT. – 2011. – V. 112. – P. 2234.
14. Sihvola, A., Venermo, J., Yla-Oijala, P. // Microwav. – Tech. Lett. – 2004. – V. 41. – P. 245.