03

Приближение Релея для многослойных несофокусных сфероидов

© В.Г. Фарафонов[1], В.И. Устимов[1], В.Б. Ильин[1,2,3]

[1] Государственный университет аэрокосмического приборостроения,
190000 Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский государственный университет,
199034 Санкт-Петербург, Россия
[3] Главная (Пулковская) астрономическая обсерватория РАН,
196140 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: far@aanet.ru

Поступила в редакцию 09.01.2019 г.
В окончательной редакции 09.01.2019 г.
Принята к публикации 11.01.2019 г.

Рассмотрено рассеяние света слоистыми сфероидами, малыми по сравнению с длиной волны падающего излучения. Получены простые приближенные формулы для поляризуемости подобных частиц с несофокусными сфероидальными поверхностями слоев как результат редукции бесконечных матриц в строгом решении задачи до размеров 2×2 и 4×4. В первом случае приближенное выражение для поляризуемости формально совпадает с известным для сфероидов с софокусными поверхностями слоев и соответственно представляет собой точный результат для таких частиц. Второй случай — по сути учет в первом приближении эффекта несофокусности поверхностей ядра и слоев частицы. Результаты численных расчетов, проведенных для двух- и трехслойных частиц как с использованием обоих приближенных выражений, так и формул строгого решения задачи, показали, что в широкой области значений параметров более простое (2×2) приближение имеет относительную погрешность менее 1%, а погрешность другого (4×4) приближения составляет менее 0.1%. Сделан вывод, что найденные приближенные формулы достаточно точны и универсальны для эффективного использования при расчетах оптических свойств малых многослойных сфероидальных частиц.

DOI: 10.21883/OS.2019.04.47515.1-19

Введение

Рассеяние света несферическими неоднородными частицами, малыми по сравнению с длиной волны падающего излучения, представляет большой интерес во многих областях науки: от биофизики и экологии до астрофизики [1–3]. В качестве модели таких частиц часто выбираются многослойные эллипсоиды, а если речь идет об осесимметичных частицах, то модельными являются многослойные вытянутые или сплюснутые сфероиды. Приближение Релея, применимое при условии, что длина волны излучения λ много больше размера частицы l с учетом ее показателя преломления m $(\lambda \gg |m-1|\ l)$, широко используется в нанооптике [4]. В рамках этого подхода внешнее поле $\mathbf{E}_0$ предполагается постоянным, и сначала определяются поле внутри частицы и „рассеянное“ поле в результате решения электростатической задачи. С физической точки зрения релеевское приближение является дипольным, при этом рассеянное малой частицей поле трактуется как поле индуцированного диполя, момент $\mathbf{p}_0$ которого определяется поляризуемостью частицы α [1]

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}_0. \tag{1}$$

В общем случае поляризуемость является тензором, который в случае осесимметричных частиц становится диагональным для трех взаимно перпендикулярных направлений напряженности электрического поля и включает $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$. Если ось z совпадает с осью вращения, то $\alpha_x = \alpha_y$.

Сечения поглощения и рассеяния определяются через волновое число в среде вне частицы k и поляризуемость частицы, а именно [1]:

$$C^{\rm abs} = 4\pi k \,\mathrm{Im}\, (l^2 \alpha_x + m^2 \alpha_y + n^2 \alpha_z), \tag{2}$$

$$C^{\rm sca} = \frac{8}{3} \pi k^4 |\alpha|^2, \tag{3}$$

где $|\alpha|^2 = l^2 |\alpha_x|^2 + m^2 |\alpha_y|^2 + n^2 |\alpha_z|^2$, а l, m, n — направляющие косинусы вектора $\mathbf{E}_0$ относительно трех главных осей тензора поляризуемости частицы.

Ранее поляризуемость двухслойного сфероида, малого по сравнению с длиной волны, можно было найти, используя сравнительно простую формулу, только при условии софокусности сфероидальных поверхностей ядра и оболочки [1]. Однако данное требование очень сильно ограничивает возможную структуру двухслойного сфероида, так как при этом форма частицы однозначно определяет форму ядра при заданной объемной доле последнего. Позднее было найдено обобщение этой формулы для многослойного сфероида с софокусными поверхностями слоев [5,6]. Лишь недавно удалось построить строгое решение электростатической задачи для сфероида с несофокусными слоями, используя разные сфероидальные базисы для представления полей вне и внутри слоев [7].

Настоящая работа является продолжением статьи [7], в которой поляризуемость сфероида с несофокусными слоями была представлена как главный элемент T_{11} соответствующей T-матрицы, записанной в виде произведения бесконечных матриц. Ниже рассматриваются две приближенные формулы для поляризуемости таких сфероидов, полученные из строго решения в результате редукции бесконечных матриц до размера 2×2 и 4×4. Первая из формул формально совпадает с выражением для поляризуемости сфероидов с софокусными слоями, вторая в первом приближении учитывает эффект несофокусности слоев. В разделе 1 подробно излагается вывод обеих приближенных формул для двухслойных сфероидов. В разделе 2 эти формулы обобщаются на случай многослойных сфероидов. В разделе 3 приводятся и обсуждаются результаты численных расчетов, проведенных для двух- и трехслойных частиц с использованием обоих приближенных выражений и формул строгого решения задачи. В Заключении перечислены основные выводы.

1. Основные соотношения для двухслойных сфероидов

С целью наибольшего учета геометрии задачи для двухслойной частицы с несофокусными сфероидальными поверхностями ядра и частицы ниже будут использоваться две сфероидальные системы координат (ξ_1, η_1, φ) и (ξ_2, η_2, φ). Будем считать, что, как и сама частица, системы имеют общие ось вращения и начало координат (но разные фокусы), что приводит к общему для систем азимутальному углу φ. Связь любой сфероидальной системы координат с декартовой системой (x, y, z), ось z которой совпадает с осью симметрии частицы, можно записать следующим образом [8]:

$$x = \frac{d_i}{2}\left[(\xi_i^2 - f_i)(1-\eta_i^2)\right]^{1/2}\cos\varphi,$$

$$y = \frac{d_i}{2}\left[(\xi_i^2 - f_i)(1-\eta_i^2)\right]^{1/2}\sin\varphi,$$

$$z = \frac{d_i}{2}\,\xi_i\,\eta_i, \tag{4}$$

где d_i — фокусное расстояние. Параметр $f_i = 1$ для вытянутых сфероидальных координат, при этом $\xi_i \in [1, \infty)$, $\eta_i \in [-1, 1]$ и $\varphi \in [0, 2\pi)$, и $f_i = -1$ для сплюснутых сфероидальных координат, при этом $\xi_i \in [0, \infty)$, $\eta_i \in [-1, 1]$ и $\varphi \in [0, 2\pi)$. Координатными поверхностями в сфероидальной системе являются вытянутые или сплюснутые софокусные сфероиды и двуполостные или однополостные гиперболоиды соответственно. Отметим, что вытянутые сфероидальные координаты возникают при вращении вокруг большой оси софокусных эллипсов и гипербол, а сплюснутые – при вращении вокруг малой оси этих фигур.

Уравнение поверхности частицы S_1 в первой сфероидальной системе имеет вид

$$\xi_1 = \xi_1^0. \tag{5}$$

Уравнение поверхности ядра частицы S_2 во второй сфероидальной системе имеет вид

$$\xi_2 = \xi_2^0. \tag{6}$$

Поляризуемость частицы вычисляется по формуле [7]

$$\alpha = -\frac{4\pi}{3}\,T_{11}, \tag{7}$$

где T_{11} — первый (главный) элемент T-матрицы,

$$T = A_2 \cdot (A_1)^{-1}, \tag{8}$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{31}^{(1)} & A_{33}^{(1)} \\ A_{11}^{(1)} & A_{13}^{(1)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Delta^{(1)\,T}(d_2, d_1) & 0 \\ 0 & \Delta^{(3)\,T}(d_2, d_1) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{31}^{(2)} \\ A_{11}^{(2)} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} A_{31}^{(1)}\Delta^{(1)\,T}(d_2, d_1)A_{31}^{(2)} + A_{33}^{(1)}\Delta^{(3)\,T}(d_2, d_1)A_{11}^{(2)} \\ A_{11}^{(1)}\Delta^{(1)\,T}(d_2, d_1)A_{31}^{(2)} + A_{13}^{(1)}\Delta^{(3)\,T}(d_2, d_1)A_{11}^{(2)} \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Матрицы $A_{ik}^{(j)}$ являются диагональными, а их элементы для вытянутых сфероидов определяются следующим образом:

$$(A_{31}^{(j)})_{nn} = 1 + (\varepsilon_j - 1)\frac{(n-m)!}{(n+m)!}\left(\frac{d_j}{2}\right)^{l-n} \times ((\xi_j^0)^2 - 1)P_n^{m\,\prime}(\xi_j^0)Q_n^m(\xi_j^0),$$

$$(A_{33}^{(j)})_{nn} = -(\varepsilon_j - 1)\left(\frac{(n-m)!}{(n+m)!}\right)^2\left(\frac{d_j}{2}\right)^{-(2n+1)} \times ((\xi_j^0)^2 - 1)Q_n^{m\,\prime}(\xi_j^0)Q_n^m(\xi_j^0),$$

$$(A_{11}^{(j)})_{nn} = -(\varepsilon_j - 1)\left(\frac{d_j}{2}\right)^{(2n+1)} \times ((\xi_j^0)^2 - 1)P_n^{m\,\prime}(\xi_j^0)P_n^m(\xi_j^0),$$

$$(A_{13}^{(j)})_{nn} = 1 + (\varepsilon_j - 1)\frac{(n-m)!}{(n+m)!}((\xi_j^0)^2 - 1)Q_n^{m\,\prime}(\xi_j^0)P_n^m(\xi_j^0),$$

$$j = 1, 2, \tag{10}$$

где $P_n^m(\xi_j^0)$, $Q_n^m(\xi_j^0)$ – присоединенные функции Лежандра 1-го и 2-го рода с целыми неотрицательными индексами n и m, ε_j – относительная диэлектрическая проницаемость среды в $(j+1)$-й оболочке по сравнению со средой в j-й оболочке.

Если учитывать только первые 4 слагаемые, то для матриц сшивания получим [7]

$$\Delta^{(1)\,T}(d_2, d_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\sqrt{21}}{8}(d_1^2 - d_2^2) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{45}}{8}(d_1^2 - d_2^2) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{11}$$

$$\Delta^{(3)\,T}(d_2, d_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{21}}{8}(d_1^2 - d_2^2) & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{45}}{8}(d_1^2 - d_2^2) & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{12}$$

В случае сплюснутых сфероидов в формулах (10)–(12) нужно сделать стандартную замену $\xi \to i\,\xi$, $d \to -i\,d$. Из приведенных соотношений видно, что для оболочек с несофокусными границами элементы матриц сшивания размера 4×4 зависят только от разности квадратов фокусных расстояний, в то время как соответствующие матрицы размера 2×2 являются диагональными. Данный факт означает, что в последнем случае формула для поляризуемости двухслойного несофокусного сфероида формально совпадает с известной формулой для софокусной частицы [1].

С учетом соотношений (9)–(12) матрицы A_1 и A_2 можно записать в виде

$$A_1 = \begin{pmatrix} (A_1)_{11} & 0 & (A_1)_{13} & 0 \\ 0 & (A_1)_{22} & 0 & (A_1)_{24} \\ (A_1)_{31} & 0 & (A_1)_{33} & 0 \\ 0 & (A_1)_{42} & 0 & (A_1)_{44} \end{pmatrix}, \tag{13}$$

где

$$\begin{aligned} (A_1)_{nn} &= (A_{31}^{(1)})_{nn}(A_{31}^{(2)})_{nn} + (A_{33}^{(1)})_{nn}(A_{11}^{(2)})_{nn}, \\ (A_1)_{13} &= (A_{31}^{(1)})_{11}\Delta_{13}^{(1)\,T}(A_{31}^{(2)})_{33}, \\ (A_1)_{24} &= (A_{31}^{(1)})_{22}\Delta_{24}^{(1)\,T}(A_{31}^{(2)})_{44}, \\ (A_1)_{31} &= (A_{33}^{(1)})_{33}\Delta_{31}^{(3)\,T}(A_{11}^{(2)})_{11}, \\ (A_1)_{42} &= (A_{33}^{(1)})_{44}\Delta_{42}^{(3)\,T}(A_{11}^{(2)})_{22}, \end{aligned} \tag{14}$$

и

$$A_2 = \begin{pmatrix} (A_2)_{11} & 0 & (A_2)_{13} & 0 \\ 0 & (A_2)_{22} & 0 & (A_2)_{24} \\ (A_2)_{31} & 0 & (A_2)_{33} & 0 \\ 0 & (A_2)_{42} & 0 & (A_2)_{44} \end{pmatrix}, \tag{15}$$

где

$$\begin{aligned} (A_2)_{nn} &= (A_{11}^{(1)})_{nn}(A_{31}^{(2)})_{nn} + (A_{13}^{(1)})_{nn}(A_{11}^{(2)})_{nn}, \\ (A_2)_{13} &= (A_{11}^{(1)})_{11}\Delta_{13}^{(1)\,T}(A_{31}^{(2)})_{33}, \\ (A_2)_{24} &= (A_{11}^{(1)})_{22}\Delta_{24}^{(1)\,T}(A_{31}^{(2)})_{44}, \\ (A_2)_{31} &= (A_{13}^{(1)})_{33}\Delta_{31}^{(3)\,T}(A_{11}^{(2)})_{11}, \\ (A_2)_{42} &= (A_{13}^{(1)})_{44}\Delta_{42}^{(3)\,T}(A_{11}^{(2)})_{22}. \end{aligned} \tag{16}$$

В рассматриваемом случае матрицу A_1 можно обратить аналитически:

$$(A_1)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{(A_1)_{33}}{\Delta_{13}} & 0 & -\frac{(A_1)_{13}}{\Delta_{13}} & 0 \\ 0 & \frac{(A_1)_{44}}{\Delta_{24}} & 0 & -\frac{(A_1)_{24}}{\Delta_{24}} \\ -\frac{(A_1)_{31}}{\Delta_{13}} & 0 & -\frac{(A_1)_{11}}{\Delta_{13}} & 0 \\ 0 & -\frac{(A_1)_{42}}{\Delta_{24}} & 0 & \frac{(A_1)_{22}}{\Delta_{24}} \end{pmatrix}, \tag{17}$$

где определители Δ_{13} и Δ_{24} вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta_{13} &= (A_1)_{11}(A_1)_{33} - (A_1)_{13}(A_1)_{31}, \\ \Delta_{24} &= (A_1)_{22}(A_1)_{44} - (A_1)_{24}(A_1)_{42}. \end{aligned} \tag{18}$$

На следующем шаге по формуле (8) можно найти T-матрицу

$$T = A_2(A_1)^{-1} = \begin{pmatrix} T_{11} & 0 & T_{13} & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 & T_{24} \\ T_{31} & 0 & T_{33} & 0 \\ 0 & T_{42} & 0 & T_{44} \end{pmatrix}, \tag{19}$$

при этом одним из ее свойств является симметричность. Непосредственные аналитические вычисления позволяют получить следующий результат:

$$\begin{aligned} T_{31} &= \frac{(A_2)_{31}(A_1)_{33} - (A_2)_{33}(A_1)_{31}}{\Delta_{13}} \\ &= \frac{(A_2)_{13}(A_1)_{11} - (A_2)_{11}(A_1)_{13}}{\Delta_{13}} = T_{13}, \end{aligned} \tag{20}$$

что подтверждает правильность полученных формул.

Окончательный результат для поляризуемости двухслойного несофокусного сфероида в приближении 4×4 можно записать следующим образом:

$$\alpha = -\frac{4\pi}{3}\,T_{11} = -\frac{4\pi}{3}\,\frac{(A_2)_{11}(A_1)_{33} - (A_2)_{13}(A_1)_{31}}{\Delta_{13}}. \tag{21}$$

Данная формула справедлива как для вытянутых, так и для сплюснутых сфероидов. При вертикальной ориентации внешнего поля (поле параллельно оси симметрии частицы) в формулах (10) азимутальный индекс $m = 0$, а при горизонтальной ориентации — $m = 1$.

2. Основные соотношения для многослойных сфероидов

Пусть многослойная сфероидальная частица имеет J слоев. Построение T-матрицы для этого случая осуществляется аналогично вышеприведенному алгоритму для двухслойного сфероида. Используя те же обозначения, для многослойной частицы получим соотношение (8), в котором для матриц A_1 и A_2 следует использовать следующее обобщение формулы (9):

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{31}^{(1)} & A_{33}^{(1)} \\ A_{11}^{(1)} & A_{13}^{(1)} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Delta^{(1)T}(d_2, d_1) & 0 \\ 0 & \Delta^{(3)T}(d_2, d_1) \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} A_{31}^{(J-1)} & A_{33}^{(J-1)} \\ A_{11}^{(J-1)} & A_{13}^{(J-1)} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Delta^{(1)T}(d_J, d_{J-1}) & 0 \\ 0 & \Delta^{(3)T}(d_J, d_{J-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{31}^{(J)} \\ A_{11}^{(J)} \end{pmatrix}. \quad (22)$$

В общем случае (при учете достаточно большого числа слагаемых в разложениях полей) формулы для матриц сшивания $\Delta^{(1)T}$ и $\Delta^{(3)T}$ приведены в работе [7]. В приближении 4×4 следует использовать формулы (11)–(12).

В частном случае сфероида с софокусными слоями или в приближении 2×2 для несофокусных сфероидов матрицы сшивания становятся единичными, поэтому в формуле (22) остаются только диагональные матрицы $A_{ik}^{(j)}$. Более того, задача имеет решение в явном виде, поскольку в рамках приближения Релея требуется только один элемент T_{11}. Таким образом для вычисления поляризуемости частицы необходимы лишь первые элементы соответствующих матриц $\left(A_{ik}^{(j)}\right)_{11}$. Например, поляризуемость трехслойных частиц представляется в виде

$$\alpha = -\frac{4\pi}{3} \frac{(A_{11}^{(1)})_{11}\left((A_{31}^{(2)})_{11}(A_{31}^{(3)})_{11}+(A_{33}^{(2)})_{11}(A_{11}^{(3)})_{11}\right) + (A_{13}^{(1)})_{11}\left((A_{11}^{(2)})_{11}(A_{31}^{(3)})_{11}+(A_{13}^{(2)})_{11}(A_{11}^{(3)})_{11}\right)}{(A_{31}^{(1)})_{11}\left((A_{31}^{(2)})_{11}(A_{31}^{(3)})_{11}+(A_{33}^{(2)})_{11}(A_{11}^{(3)})_{11}\right) + (A_{33}^{(1)})_{11}\left((A_{11}^{(2)})_{11}(A_{31}^{(3)})_{11}+(A_{13}^{(2)})_{11}(A_{11}^{(3)})_{11}\right)}. \quad (23)$$

Наиболее простая формула имеет место для двухслойных сфероидов в приближении 2×2:

$$\alpha = -\frac{4\pi}{3} \frac{(A_{11}^{(1)})_{11}(A_{31}^{(2)})_{11} + (A_{13}^{(1)})_{11}(A_{11}^{(2)})_{11}}{(A_{31}^{(1)})_{11}(A_{31}^{(2)})_{11} + (A_{33}^{(1)})_{11}(A_{11}^{(2)})_{11}}. \quad (24)$$

Учитывая формулу для поляризуемости однородного сфероида

$$\alpha = -\frac{4\pi}{3} \frac{(A_{11}^{(1)})_{11}}{(A_{31}^{(1)})_{11}}, \quad (25)$$

из уравнений (23)–(24) нетрудно найти рекуррентное соотношение

$$\alpha^{J+1} = \frac{4\pi}{3} \frac{(A_{11}^{(1)})_{11} + (A_{13}^{(1)})_{11}\ \alpha^J}{(A_{31}^{(1)})_{11} + (A_{33}^{(1)})_{11}\ \alpha^J}. \quad (26)$$

Здесь α^{J+1}, α^J — поляризуемости в „конфокальном“ приближении, т.е. в приближении 2×2, сфероидов с $J+1$ и J слоями соответственно, элементы $(A_{ik}^{(1)})_{11}$ вычисляются для добавленного внешнего слоя.

Если ввести обозначение

$$L_z^j = ((\xi_j)^2 - 1)(P_1(\xi_j))'Q_1(\xi_j) = ((\xi_j)^2 - 1)\left(\frac{\xi_j}{2} \ln \frac{\xi_j + 1}{\xi_j - 1} - 1\right), \quad (27)$$

то для случая вертикальной ориентации внешнего поля и вытянутого сфероида элементы матриц представляются следующим образом:

$$(A_{31}^{(j)})_{11} = 1 + (\varepsilon_j - 1)L_z^j,$$

$$(A_{33}^{(j)})_{11} = (\varepsilon_j - 1)\frac{L_z^j(L_z^j - 1)}{\tilde{V}_j},$$

$$(A_{11}^{(j)})_{11} = -(\varepsilon_j - 1)a_j\ (b_j)^2 = -(\varepsilon_j - 1)\frac{3}{4\pi}\ V_j = -(\varepsilon_j - 1)\tilde{V}_j,$$

$$(A_{13}^{(j)})_{11} = 1 - (\varepsilon_j - 1)(L_z^j - 1). \quad (28)$$

Аналогичные результаты можно написать для горизонтальной ориентации внешнего поля и сплюснутого сфероида.

3. Обсуждение результатов численных расчетов

Численные расчеты проводились для двух- и трехслойных сфероидальных частиц с подобными границами ядра и оболочек. В этом случае отношения больших полуосей a_j сфероидов к малым b_j являются постоянными величинами:

$$\frac{a_1}{b_1} = \frac{a_2}{b_2} = \frac{a_3}{b_3}. \quad (29)$$

Для указанных слоистых частиц можно ввести коэффициенты подобия:

$$k_1 = \frac{a_2}{a_1} = \frac{b_2}{b_1} = \frac{d_2}{d_1} \quad (30)$$

и

$$k_2 = \frac{a_3}{a_1} = \frac{b_3}{b_1} = \frac{d_3}{d_1}. \quad (31)$$

Для двухслойных частиц отношение объемов ядра и всей частицы определяется кубом коэффициента подобия:

$$\frac{V_2}{V_1} = k_1^3. \quad (32)$$

Таблица 1. Поляризуемости подобных двухслойных вытянутых сфероидов для различных значений полуосей оболочек a_1, $a_2 = k_1 a_1$; m_1 и m_2 — показатели преломления внешней оболочки сфероида и ядра соответственно.

k_1	$\frac{V_2}{V_1}$	SVM2, EBCM2					SVM1		EBCM1	
		2x2	4x4	8x8	16x16	24x24	16x16	24x24	16x16	24x24
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.9 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7$										
0.9	0.729	3.51513	3.51510	3.51510	3.51510	3.51510	3.51510	3.51510	3.51510	3.51510
0.7	0.343	2.69737	2.69731	2.69731	2.69731	2.69731	2.69731	2.69731	2.69731	2.69731
0.5	0.125	2.21601	2.21600	2.21600	2.21600	2.21600	2.21600	2.21600	2.21600	2.21600
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.5 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7$										
0.9	0.729	1.27028	1.26987	1.26985	1.26985	1.26985	1.26979	1.26984	1.25683	1.26540
0.7	0.343	0.94557	0.94488	0.94487	0.94487	0.94487	0.94480	0.94487	0.82358	0.95951
0.5	0.125	0.75605	0.75584	0.75582	0.75582	0.75582	0.75577	0.75582	0.75108	0.70968
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.2 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7$										
0.9	0.729	0.23980	0.23966	0.23963	0.23963	0.23963	-	-	-	-
0.7	0.343	0.17233	0.17209	0.17208	0.17208	0.17208	-	-	-	-
0.5	0.125	0.13367	0.13360	0.13358	0.13358	0.13358	-	-	-	-

Таблица 2. То же, что и в таблице 1, но для сплюснутых сфероидов.

k_1	$\frac{V_2}{V_1}$	SVM2, EBCM2					SVM1		EBCM1	
		2x2	4x4	8x8	16x16	24x24	16x16	24x24	16x16	24x24
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.9 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7$										
0.9	0.729	3.67791	3.67787	3.67787	3.67787	3.67787	3.67787	3.67787	3.67787	3.67787
0.7	0.343	2.85303	2.85297	2.85297	2.85297	2.85297	2.85297	2.85297	2.85297	2.85297
0.5	0.125	2.36709	2.36707	2.36707	2.36707	2.36707	2.36707	2.36707	2.36707	2.36707
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.5 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7$										
0.9	0.729	1.74395	1.74332	1.74328	1.74328	1.74328	-	-	-	-
0.7	0.343	1.38954	1.38847	1.38846	1.38846	1.38846	-	-	-	-
0.5	0.125	1.18157	1.18126	1.18123	1.18123	1.18123	-	-	-	-
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.2 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7$										
0.9	0.729	0.58257	0.58208	0.58195	0.58195	0.58195	-	-	-	-
0.7	0.343	0.47718	0.47637	0.47633	0.47633	0.47633	-	-	-	-
0.5	0.125	0.41625	0.41601	0.41593	0.41592	0.41592	-	-	-	-

Для трехслойных сфероидов отношения объемов ядра и внутренней оболочки к объему всей частицы вычисляются по формулам

$$\frac{V_2}{V_1} = k_1^3 - k_2^3,$$

$$\frac{V_3}{V_1} = k_2^3. \tag{33}$$

Большие и малые полуоси для вытянутых сфероидов связаны с фокусным расстоянием следующим образом:

$$a_j = \frac{d_j}{2}\xi_j^0, \qquad b_j = \frac{d_j}{2}\sqrt{(\xi_j^0)^2 - 1}. \tag{34}$$

Для сплюснутых сфероидов имеем

$$a_j = \frac{d_j}{2}\sqrt{(\xi_j^0)^2 + 1}, \qquad b_j = \frac{d_j}{2}\xi_j^0. \tag{35}$$

Таблица 3. Поляризуемости подобных трехслойных вытянутых сфероидов для различных значений полуосей оболочек $a_1, a_2 = k_1 a_1, a_3 = k_2 a_1$; m_1, m_2, m_3 — показатели преломления оболочек сфероида и ядра соответственно.

k_1	k_2	SVM2, EBCM2					SVM1		EBCM1	
		2x2	4x4	8x8	16x16	24x24	16x16	24x24	16x16	24x24
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.9 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7 \quad m_3 = 2.42$										
0.9	9/12	4.73904	4.73871	4.73871	4.73871	4.73871	4.73871	4.73871	4.73871	4.73871
0.7	7/12	3.31701	3.31673	3.31673	3.31673	3.31673	3.31673	3.31673	3.31673	3.31673
0.5	5/12	2.45168	2.45160	2.45160	2.45160	2.45160	2.45160	2.45160	2.45160	2.45160
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.5 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7 \quad m_3 = 2.42$										
0.9	9/12	1.86694	1.86202	1.86195	1.86195	1.86195	1.86182	1.86194	-	-
0.7	7/12	1.24435	1.24027	1.24020	1.24020	1.24020	1.24010	1.24020	-	-
0.5	5/12	0.86894	0.86781	0.86771	0.86771	0.86771	0.86765	0.85514	-	-
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.2 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7 \quad m_3 = 2.42$										
0.9	9/12	0.39745	0.39499	0.39488	0.39487	0.39487	-	-	-	-
0.7	7/12	0.24872	0.24688	0.24675	0.24674	0.24674	-	-	-	-
0.5	5/12	0.16199	0.16150	0.16132	0.16132	0.16132	-	-	-	-

Из приведенных формул (34)–(35) можно найти связь между радиальными координатами и отношениями полуосей:

а) вытянутый сфероид

$$\xi_j^0 = 1/\sqrt{1-(b_j/a_j)^2}; \qquad (36)$$

а) сплюснутый сфероид

$$\xi_j^0 = (b_j/a_j)/\sqrt{1-(b_j/a_j)^2}. \qquad (37)$$

Нетрудно заметить, что для слоистых сфероидов с подобными границами оболочек радиальные координаты ξ_j^0, определяющие соответствующие уравнения границ (5), (6), одинаковы в соответствующих системах. Следовательно, будут одинаковы и геометрические факторы (27).

В табл. 1–4 приведены значения поляризуемостей двух- и трехслойных сфероидов с подобными границами слоев, вычисленные с использованием разных подходов. Применялся метод разделения переменных с подходящими сфероидальными базисами (SVM2), развитый в [7]. Этот подход эквивалентен методу расширенных граничных условий EBCM2, рассмотренному также в [7]. Кроме того, поляризуемости вычислялись методами SVM1 [9] и EBCM1 [10], в рамках которых поля представляются в виде разложений по единому сферическому базису. В таблицах указано количество учитываемых слагаемых и размерность матриц, при этом 2×2 соответствует конфокальному приближению (23), (24), а 4×4 — обобщению конфокального приближения (см. формулы (11), (21)).

Как известно, применение единого сферического базиса для слоистых сфероидальных частиц имеет ограничения [10,11]. В рассматриваемом случае отношение полуосей должно удовлетворять неравенству $a_j/b_j < \sqrt{2}+1 \approx 2.41$. Из табл. 1 и 3 видно, что для вытянутых двух- и трехслойных сфероидов SVM1 работает при $a_j/b_j = 2$, в то время как EBCM1 в этом случае дает большие ошибки для трехслойных частиц. Если форма слоистых частиц близка к сферической, то оба метода SVM1 и EBCM1 имеют очень маленькие погрешности как для вытянутых, так и для сплюснутых частиц (см. табл. 1–4). Неприменимость данных методов для сплюснутых сфероидов с отношениями полуосей $a_j/b_j = 2$ требует более тщательного анализа.

Исследование области применимости методов SVM2 и EBCM2, использующих подходящие сфероидальные базисы, показало, что они дают надежные результаты в широкой области значений параметров сфероидальных частиц. В наших расчетах отношение полуосей вытянутых и сплюснутых слоистых сфероидов менялось от $a_j/b_j = 1.(1)$ до $a_j/b_j = 5$, при этом относительная доля объема ядра для двухслойных частиц принимала значения от $V_2/V_1 = 0.729$ до $V_2/V_1 = 0.125$. При переходе к трехслойным сфероидам объем ядра двухслойного сфероида разбивался в отношении $0.7 : 1.0$, т.е. объемы внутренней оболочки и ядра в этом случае были сопоставимы. Показатели преломления веществ оболочки и ядра двухслойного сфероида были равны $m_1 = \sqrt{\varepsilon_1} = 1.3$ и $m_2 = 1.7$ соответственно, а для трехслойной сфероидальной частицы — $m_1 = 1.3$, $m_2 = 1.7$ и $m_3 = 2.42$.

Таблица 4. То же, что и в таблице 3, но для сплюснутых сфероидов.

k_1	k_2	SVM2, EBCM2					SVM1		EBCM1	
		2x2	4x4	8x8	16x16	24x24	16x16	24x24	16x16	24x24
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.9 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7 \quad m_3 = 2.42$										
0.9	9/12	4.82442	4.82410	4.82410	4.82410	4.82410	4.82410	4.82410	4.82410	4.82410
0.7	7/12	3.43345	3.43317	3.43317	3.43317	3.43317	3.43317	3.43317	3.43317	3.43317
0.5	5/12	2.58783	2.58775	2.58775	2.58775	2.58775	2.58775	2.58775	2.58775	2.58775
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.5 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7 \quad m_3 = 2.42$										
0.9	9/12	2.15238	2.14781	2.14774	2.14774	2.14774	-	-	-	-
0.7	7/12	1.59429	1.59031	1.59025	1.59025	1.59025	-	-	-	-
0.5	5/12	1.25899	1.25788	1.25778	1.25778	1.25778	-	-	-	-
$a_1 = 1.0 \quad b_1 = 0.2 \quad m_1 = 1.3 \quad m_2 = 1.7 \quad m_3 = 2.42$										
0.9	9/12	0.68159	0.67872	0.67851	0.67850	0.67850	-	-	-	-
0.7	7/12	0.52554	0.52304	0.52286	0.52285	0.52285	-	-	-	-
0.5	5/12	0.43425	0.43356	0.43330	0.43329	0.43329	-	-	-	-

Из табл. 1–4 видно, что метод SVM2, использующий несколько сфероидальных базисов, обладает хорошей сходимостью с увеличением количества N учитываемых слагаемых в разложениях полей, причем сходимость слабо зависит от параметров задачи. Во всех рассмотренных случаях с увеличением N от 16 до 24 значение поляризуемости частицы имеет по меньшей мере 6 правильных цифр. Более того, проведенные расчеты показывают, что нет необходимости учитывать большое число слагаемых в разложениях полей. Так, конфокальное приближение ($N = 2$) имеет относительную погрешность менее $10^{-5} - 10^{-3}$ для двухслойных сфероидов и $10^{-4} - 10^{-2}$ для трехслойных. При обобщении данного приближения ($N = 4$) относительная погрешность уменьшается еще на целый порядок. Анализ результатов численных расчетов для несофокусных сфероидов, не обладающих свойством подобия слоев (29), приводит в тем же выводам, что и для сфероидов с подобными границами слоев. Таким образом, предложенный подход к построению приближения Релея для многослойных несофокусных сфероидов безусловно предпочтительнее подхода, ранее предложенного в работе [12] и основанного на разбиении несофокусных оболочек на большое число тонких слоев, которые далее считались софокусными.

Заключение

1. Показано, что при рассмотрении оптических свойств малых двух- и трехслойных несофокусных сфероидов можно эффективно использовать приближение, в рамках которого поля вне частицы, внутри оболочек и внутри ядра представляются в виде одного слагаемого в сфероидальных базисах, связанных с границами слоев. Для сфероидов с софокусными поверхностями слоев (когда может быть применен единый сфероидальный базис) такой подход дает известное точное решение. Для несофокусных сфероидов данное приближение, названное конфокальным, имеет относительную погрешность менее 1%.

2. В рамках приближения Релея для многослойных несофокусных сфероидальных частиц построено обобщение конфокального приближения, когда поля внутри несофокусных оболочек представляются в виде суммы двух сфероидальных гармоник в сфероидальных системах, в которых поверхности слоев являются координатными. В рамках данного приближения относительная погрешность уменьшается на порядок по сравнению с конфокальным приближением и становится менее 0.1%.

3. Полученные результаты для многослойных несофокусных сфероидов позволяют предположить, что конфокальное приближение будет иметь достаточно малую относительную погрешность и для многослойных несофокусных эллипсоидов.

4. Для волновых задач теоретический подход, связанный с представлением полей внутри несофокусных оболочек в виде разложений по сфероидальным гармоникам в разных системах, где поверхности слоев являются координатными, был предложен в работе [13]. Полученные выше результаты для электростатической задачи указывают на перспективность проведения соответствующих численных расчетов в волновом случае.

Работа была поддержана в 2018–19 гг. грантом ГУАП и грантом РФФИ 18-52-52006.

Список литературы

[1] *Борен К., Хаффмен Д.* Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир, 1986.
[2] *Mishchenko M.I., Hovenier J.W., Travis L.D.* Light Scattering by Nonspherical Particles. San Diego: Academic Press, 2000.
[3] *Mishchenko M.I., Travis L.D., Lacis A.A.* Scattering, Absorption and Emission of Light by Small Particles. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2002.
[4] *Климов В.В.* Наноплазмоника М.: Физматлит, 2009.
[5] *Фарафонов В.Г.* // Опт. и спектр. 2000. Т. 88. С. 441.
[6] *Farafonov V.G., Sokolovskaja M.V.* // J. Math. Sci. 2013. V. 194. P. 104.
[7] *Фарафонов В.Г., Устимов В.И., Ильин В.Б.* // Опт. и спектр. 2018. Т. 125. С. 441.
[8] *Комаров В.И., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю.* Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.
[9] *Фарафонов В.Г., Устимов В.И.* // Опт. и спектр. 2018. Т. 124. С. 255.
[10] *Фарафонов В.Г., Устимов В.И., Соколовская М.В.* // Опт. и спектр. 2016. Т. 120. С. 470.
[11] *Фарафонов В.Г., Ильин В.Б.* // Опт. и спектр. 2013. Т. 115. С. 836.
[12] *Posselt B, Farafonov V.G., Il'in V.B., Prokopjeva M.S.* // Meas. Sci. Technol. 2002. V. 13. P. 256.
[13] *Фарафонов В.Г.* // Опт. и спектр. 2013. Т. 114. С. 462.