06

# Генерация второй гармоники в поверхностном слое диэлектрической сфероидальной частицы. I. Аналитическое решение

© В.Н. Капшай, А.А. Шамына[¶], А.И. Толкачёв[¶¶]

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины,
246019 Гомель, Республика Беларусь

e-mail: kapshai@rambler.ru, [¶] anton.shamyna@gmail.com, [¶¶] anton.talkachov@gmail.com

Поступила в редакцию 05.02.2022 г.
В окончательной редакции 18.04.2022 г.
Принята к публикации 02.05.2022 г.

Решена задача о генерации второй гармоники плоской эллиптически поляризованной электромагнитной волной в тонком оптически нелинейном поверхностном слое диэлектрической частицы, имеющей форму эллипсоида вращения. Для аналитического описания использовано обобщенное приближение Рэлея–Ганса–Дебая с учетом различия в показателях преломления среды, соответствующих частотам возбуждающего и генерируемого излучения. Получены предельные формы функций, с использованием которых выражена напряженность электрического поля генерируемого излучения. Найден порядок зависимости указанных функций от линейных размеров, когда длины полуосей частицы малы по сравнению с длиной волны возбуждающего излучения и их отношение остается постоянным. Выявлено, что плотность мощности генерируемого излучения в этом случае определяется в большей степени киральными компонентами тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости и пропорциональна четвертой степени длины полуоси частицы, если форма сфероидальной частицы существенно отличается от сферической. Решение данной задачи, полученное другими авторами, дополнено для возможности применения к описанию генерации в поверхностном слое диэлектрической частицы не только в форме вытянутого, но и в форме сплюснутого сфероида. Предложены исправления неточностей и опечаток, допущенных в аналогичных работах других авторов. Найдена связь формул, использованных в указанных работах с учетом исправлений, и формул, использованных в настоящей работе.

**Ключевые слова:** генерация второй гармоники, диэлектрическая сфероидальная частица, обобщенная модель Рэлея–Ганса–Дебая, приближение малых частиц, киральная компонента.

DOI: 10.21883/OS.2022.07.52725.3228-22

## Введение

Генерация второй гармоники зарекомендовала себя как незаменимый инструмент при исследованиях микро- и наноразмерных объектов, в том числе в медицине и биологии. С ее помощью появляется возможность не только визуализировать живые клетки, ткани, коллагеновые волокна [1], но и изучать свойства поверхностей диэлектрических частиц [2], а также адсорбированных на них молекул [3].

В соответствии с результатами ранее произведенных исследований на нелинейный отклик металлических и диэлектрических частиц напрямую влияет их размер и форма [4]. Наиболее часто в научной литературе рассматривается генерация второй гармоники именно в частицах сферической (как наиболее простой и симметричной) формы [2–5]. Гораздо реже встречаются работы, посвященные генерации в частицах, имеющих одну ось симметрии: сфероидальной [6] и цилиндрической форм [7–10]. Это объясняется повышенными требованиями к используемому математическому аппарату и производительности вычислительных средств. Осесимметричные частицы находят применение при создании метаматериалов, в которых возможно усиление нелинейного сигнала [11] и управление интенсивностью электромагнитных волн, проходящих через границы раздела сред [12].

Частицы в форме эллипсоида вращения (сфероида) являются обобщением сферических частиц. Под действием внешних сил сферические частицы могут деформироваться и приобретать сфероидальную форму. Более того, формирование диэлектрических частиц идеальной сферической формы практически невозможно из-за наличия неровностей на поверхности таких частиц. Эта проблема особенно актуальна при формировании частиц предельно малых размеров (диаметром 100 nm и меньше), когда возникающие отклонения сравнимы с линейными размерами частиц [13]. Насколько нам известно, на данный момент не существует достаточно полной аналитической модели нелинейной генерации в поверхностном слое сфероидальных диэлектрических частиц.

Целью настоящей работы является аналитическое описание и выявление закономерностей генерации второй гармоники в поверхностном слое диэлектрических частиц, имеющих форму эллипсоида вращения, с использованием обобщенной модели Рэлея–Ганса–Дебая [4], хорошо зарекомендовавшей себя при описании нелинейной генерации в сферических диэлектрических частицах.

В первой части настоящей работы:

– приведены формулы, характеризующие пространственное распределение генерируемого излучения,

– произведен анализ предельных форм использованных математических функций при малых размерах сфероидальной частицы,

– найдена связь полученных выражений с формулами в задаче о генерации второй гармоники в поверхностном слое сферической частицы,

– произведено сравнение с результатами, полученными другими авторами.

Во второй части:

– с помощью трехмерных диаграмм направленности проиллюстрировано пространственное распределение генерируемого излучения при ключевых значениях параметров задачи,

– указаны математические свойства используемых функций, характеризующие симметрию диаграмм направленности,

– охарактеризовано влияние отдельных параметров на форму диаграммы направленности,

– предложены методы использования условий отсутствия генерации и условий генерации линейно поляризованного излучения для избирательного определения независимых компонент тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости.

## Постановка задачи

Пусть генерация второй гармоники происходит в тонком оптически нелинейном слое, равномерно распределенном по поверхности диэлектрической частицы, имеющей форму эллипсоида вращения. Обозначим символом $a_z$ длину полуоси эллипсоида вдоль оси его симметрии, а символом $a_x$ — длину полуоси, перпендикулярной оси симметрии. Для отношения указанных величин введем обозначение $\rho = a_z/a_x$. Если $\rho > 1$, то частица имеет форму вытянутого эллипсоида вращения, который можно получить из сферической формы посредством растяжения вдоль предполагаемой оси симметрии. Если $\rho < 1$, то частица имеет форму сжатого эллипсоида вращения, полученную из сферической формы посредством сжатия вдоль выбранной оси симметрии. Если же $\rho = 1$, то форма частицы сферическая. Толщину оптически нелинейного слоя $d_0$ выберем таким образом, чтобы выполнялись условия $d_0 \ll a_x$, $d_0 \ll a_z$.

По аналогии с рассуждениями, описанными в статьях [5,8], зададим вектор напряженности электрического поля падающей плоской электромагнитной волны в точке, характеризуемой радиусом-вектором $\mathbf{x}$, следующим выражением:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = E_0 \mathbf{e}^{(\omega)} \exp(i\mathbf{k}^{(\omega)}\mathbf{x}), \tag{1}$$

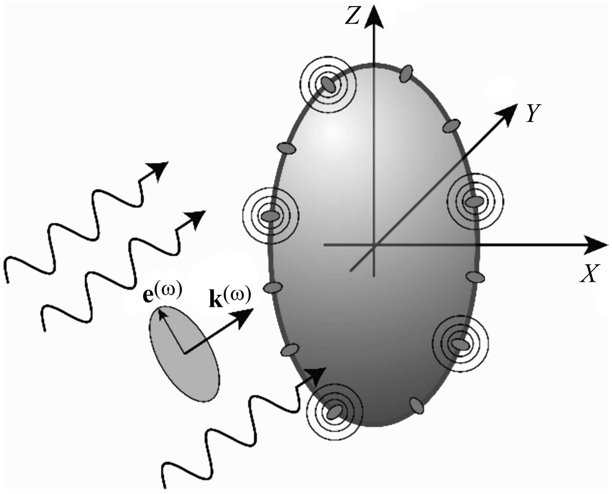


Схема задачи о генерации второй гармоники в поверхностном слое сфероидальной частицы.

где $E_0$ и $\mathbf{e}^{(\omega)}$ — комплексная амплитуда и единичный вектор поляризации соответственно, волновой вектор обозначен символом $\mathbf{k}^{(\omega)}$. Здесь и далее подразумевается временная часть $\exp(-i\omega t)$, где $\omega$ — циклическая частота возбуждающего излучения, а символ $i$, не входящий в состав индексов, означает мнимую единицу. Схема задачи изображена на рисунке.

При использовании модели на основе обобщенного приближения Рэлея–Ганса–Дебая рассеянные электромагнитные волны не учитываются в расчетах. Подобную модель можно использовать, если показатели преломления диэлектрика внутри и вне частицы достаточно близки по значению [5]:

$$\left| \frac{n_p}{n_m} - 1 \right| \ll 1, \; 4\pi \frac{R}{\lambda} \left| \frac{n_p}{n_m} - 1 \right| \ll 1, \tag{2}$$

где $n_p$ и $n_m$ — показатели преломления сред частицы и окружающей ее среды соответственно, $R$ — характерный размер частицы (например, длина большой полуоси), $\lambda$ — длина волны возбуждающего излучения в вакууме.

Тогда для элементарного участка поверхностного слоя, в соответствии с дипольной моделью, компоненты вектора $\mathbf{P}^{(2)}$ — нелинейной части вектора поляризации, ответственной за нелинейную генерацию второго порядка, могут быть найдены с использованием правила суммирования по повторяющимся индексам по формуле

$$P_i^{(2)} = \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k, \tag{3}$$

где $E_j, E_k$ — $j$-я и $k$-я компоненты вектора напряженности электрического поля возбуждающего излучения соответственно. Тензор $\chi_{ijk}^{(2)}$ для явления генерации второй гармоники содержит только четыре независимые компоненты ($\chi_{1-3}^{(2)}$ — некиральные, $\chi_4^{(2)}$ — киральная) и в компонентной форме может быть записан в виде выражения

$$\chi^{(2)}_{ijk} = \chi^{(2)}_1 n_i n_j n_k + \chi^{(2)}_2 n_i \delta_{jk} + \chi^{(2)}_3 (n_j \delta_{ki} + n_k \delta_{ij}) + \chi^{(2)}_4 n_m (n_k \varepsilon_{ijm} - n_j \varepsilon_{imk}). \quad (4)$$

Здесь $n_i, n_j, n_k, n_m$ — компоненты единичного вектора нормали к элементарному участку поверхности, $\delta_{jk}$, $\delta_{ki}$, $\delta_{ij}$ — дельта-символы Кронекера, $\varepsilon_{ijm}$, $\varepsilon_{imk}$ — символы Леви–Чивита. Нижние индексы в формуле (4) могут принимать значения $x, y, z$, соответствующие осям правой ортонормированной системы координат. В настоящей работе рассматривается только случай действительных значений компонент $\chi^{(2)}_{1-4}$.

Требуется получить и проанализировать формулы, характеризующие пространственное распределение и мощность излучения удвоенной частоты в дальней зоне, генерируемого в поверхностном оптически нелинейном слое сфероидальной диэлектрической частицы плоской эллиптически поляризованной электромагнитной волной.

## Напряженность электрического поля второй гармоники

Компоненты вектора напряженности электрического поля второй гармоники в дальней зоне можно найти, пользуясь выражением

$$E^{(2\omega)}_i(\mathbf{x}) = \mu_{2\omega} \frac{(2\omega)^2}{c^2} \frac{\exp(ik_{2\omega} r)}{r} d_0 (\delta_{im} - e_{r,i} e_{r,m}) e^{(\omega)}_j e^{(\omega)}_k \times \int\limits_S \exp(i\mathbf{x}'\mathbf{q}(\mathbf{x})) \chi^{(2)}_{mjk}(\mathbf{x}') dS_{\mathbf{x}'}. \quad (5)$$

Формула (5), полученная в работах [4,5,8] с использованием метода функции Грина, применима для вычисления напряженности электрического поля излучения, генерируемого в поверхностном слое диэлектрической частицы любой формы. Интегрирование при этом должно производиться по всей площади $S$ поверхности частицы, покрытой оптически нелинейным слоем. Обозначения в выражении (5) следующие: $\mu_{2\omega}$ — магнитная проницаемость окружающей среды, $k_{2\omega}$ — модуль волнового вектора $\mathbf{k}^{(2\omega)}$ генерируемой волны, $r = |\mathbf{x}|$ — расстояние от геометрического центра диэлектрической частицы до точки наблюдения, $e_{r,i}$, $e_{r,m}$ — компоненты единичного вектора $\mathbf{e}_r$, направленного от центра частицы к точке наблюдения, $\mathbf{x}'$ — вектор, направленный от центра частицы к элементу ее поверхности, $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ — вектор рассеяния, определяемый по формуле

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = 2\mathbf{k}^{(\omega)} - \mathbf{k}^{(2\omega)}(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{k}^{(2\omega)} = \mathbf{k}^{(2\omega)}(\mathbf{x}) = k_{2\omega} \frac{\mathbf{x}}{r}. \quad (6)$$

При подстановке (4) в выражение (5) возникает необходимость в вычислении следующих интегралов по поверхности эллипсоида вращения:

$$I(n_i|\mathbf{x}) = \frac{1}{a_x^2} \int\limits_S \exp(i\mathbf{x}'\mathbf{q}(\mathbf{x})) n_i(\mathbf{x}') dS_{\mathbf{x}'},$$

$$I(n_i n_j|\mathbf{x}) = \frac{1}{a_x^2} \int\limits_S \exp(i\mathbf{x}'\mathbf{q}(\mathbf{x})) n_i(\mathbf{x}') n_j(\mathbf{x}') dS_{\mathbf{x}'},$$

$$I(n_i n_j n_k|\mathbf{x}) = \frac{1}{a_x^2} \int\limits_S \exp(i\mathbf{x}'\mathbf{q}(\mathbf{x})) n_i(\mathbf{x}') n_j(\mathbf{x}') n_k(\mathbf{x}') dS_{\mathbf{x}'}. \quad (7)$$

Важным свойством интегралов (7) является перестановочная симметрия:

$$I(n_i n_j|\mathbf{x}) = I(n_j n_i|\mathbf{x}), \quad (8)$$

$$I(n_i n_j n_k|\mathbf{x}) = I(n_i n_k n_j|\mathbf{x}), \;\; I(n_i n_j n_k|\mathbf{x}) = I(n_j n_i n_k|\mathbf{x}). \quad (9)$$

Тогда выражение для компонент вектора напряженности электрического поля можно записать в виде

$$E^{(2\omega)}_i(\mathbf{x}) = \mu_{2\omega} \frac{(2\omega)^2}{c^2} \frac{\exp(ik_{2\omega} r)}{r} \times d_0 a_x^2 (\delta_{im} - e_{r,i} e_{r,m}) e^{(\omega)}_j e^{(\omega)}_k X^{(2\omega)}_{mjk}(\mathbf{x}), \quad (10)$$

где $X^{(2\omega)}_{mjk}$ — тензор эффективной нелинейной диэлектрической восприимчивости [5], выраженный через интегралы (7) следующим образом:

$$X^{(2\omega)}_{mjk}(\mathbf{x}) = \chi^{(2)}_1 I(n_m n_j n_k|\mathbf{x}) + \chi^{(2)}_2 I(n_m|\mathbf{x}) \delta_{jk} + \chi^{(2)}_3 \big(I(n_j|\mathbf{x}) \delta_{km} + I(n_k|\mathbf{x}) \delta_{mj}\big) + \chi^{(2)}_4 \big(I(n_p n_k|\mathbf{x}) \epsilon_{mjp} - I(n_p n_j|\mathbf{x}) \epsilon_{mpk}\big). \quad (11)$$

Наибольшую сложность при вычислении напряженности электрического поля генерируемого излучения представляет именно определение явного вида интегралов, указанных в формулах (7).

## Явный вид вспомогательных интегралов

Введем декартову систему координат $(x, y, z)$, центр которой расположен в геометрическом центре диэлектрической частицы, а ось $Oz$ направлена вдоль ее оси симметрии (рисунок). Тогда уравнение, описывающее поверхность эллипсоидальной частицы с полуосями $a_x, a_x, a_z$, математически можно задать в виде

$$\frac{x^2}{a_x^2} + \frac{y^2}{a_x^2} + \frac{z^2}{a_z^2} = 1. \quad (12)$$

Для вычисления интегралов (7) удобно перейти к параметрической форме уравнения указанной поверхности:

$$\mathbf{x}' = a_x \sin\theta' \cos\varphi' \mathbf{e}_x + a_x \sin\theta' \sin\varphi' \mathbf{e}_y + a_z \cos\theta' \mathbf{e}_z, \quad (13)$$

где $\mathbf{x}'$ — радиус-вектор элемента поверхности эллипсоида вращения, $\theta', \varphi'$ — его угловые координаты, $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ — базисные векторы декартовой системы координат.

Пользуясь выражением (13), найдем зависимость единичного вектора нормали к поверхности частицы от угловых координат $\theta', \varphi'$:

$$\mathbf{n} = \frac{\left[\frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \theta'} \times \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \varphi'}\right]}{\left|\frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \theta'} \times \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \varphi'}\right|}$$
$$= \frac{a_z \sin\theta' \cos\varphi' \mathbf{e}_x + a_z \sin\theta' \sin\varphi' \mathbf{e}_y + a_x \cos\theta' \mathbf{e}_z}{\sqrt{a_z^2 \sin^2\theta' + a_x^2 \cos^2\theta'}}$$
$$= \frac{\rho \sin\theta' \cos\varphi' \mathbf{e}_x + \rho \sin\theta' \sin\varphi' \mathbf{e}_y + \cos\theta' \mathbf{e}_z}{\sqrt{\rho^2 \sin^2\theta' + \cos^2\theta'}}. \tag{14}$$

Площадь элементарного участка поверхности в интегралах (7) также вычисляется на основании выражения для радиус-вектора (13):

$$dS_{\mathbf{x}'} = |d\mathbf{S}_{\mathbf{x}'}| = \left|\frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \theta'} \times \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \varphi'}\right| d\theta' d\varphi'$$
$$= a_x \sin\theta \sqrt{a_z^2 \sin^2\theta' + a_x^2 \cos^2\theta'}\, d\theta' d\varphi'. \tag{15}$$

Компоненты вектора рассеяния $\mathbf{q}$ определим следующим выражением:

$$\mathbf{q} = q_x \mathbf{e}_x + q_y \mathbf{e}_y + q_z \mathbf{e}_z. \tag{16}$$

Подставляя (13)–(16) в (7), получаем более подробную запись вспомогательных интегралов, зависящих от $\mathbf{x}$:

$$I(n_i|\mathbf{x}) = \frac{1}{a_x^2} \int\limits_S \exp(i\mathbf{x}'\mathbf{q}(\mathbf{x})) n_i(\mathbf{x}') dS_{\mathbf{x}'}$$
$$= \frac{1}{a_x^2} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \int\limits_0^{\pi} \exp(iq_x a_x \sin\theta' \cos\varphi' + iq_y a_x \sin\theta' \sin\varphi'$$
$$+ iq_z a_z \cos\theta')$$
$$\times n_i(\theta', \varphi') a_x \sin\theta' \sqrt{a_z^2 \sin^2\theta' + a_x^2 \cos^2\theta'}\, d\theta' d\varphi'$$
$$= \int\limits_0^{\pi} \exp(iq_z a_z \cos\theta') \sqrt{\rho^2 \sin^2\theta' + \cos^2\theta'} \sin\theta'$$
$$\times \int\limits_{-\pi}^{\pi} \exp(iq_x a_x \sin\theta' \cos\varphi' + iq_y a_x \sin\theta' \sin\varphi')$$
$$\times n_i(\theta', \varphi') d\varphi' d\theta', \tag{17}$$

$$I(n_i n_j|\mathbf{x}) = \int\limits_0^{\pi} \exp(iq_z a_z \cos\theta') \sqrt{\rho^2 \sin^2\theta' + \cos^2\theta'} \sin\theta'$$
$$\times \int\limits_{-\pi}^{\pi} \exp(iq_x a_x \sin\theta' \cos\varphi' + iq_y a_x \sin\theta' \sin\varphi')$$
$$\times n_i(\theta', \varphi') n_j(\theta', \varphi') d\varphi' d\theta', \tag{18}$$

$$I(n_i n_j n_k|\mathbf{x}) =$$
$$= \int\limits_0^{\pi} \exp(iq_z a_z \cos\theta') \sqrt{\rho^2 \sin^2\theta' + \cos^2\theta'} \sin\theta'$$
$$\times \int\limits_{-\pi}^{\pi} \exp(iq_x a_x \sin\theta' \cos\varphi' + iq_y a_x \sin\theta' \sin\varphi')$$
$$\times n_i(\theta', \varphi') n_j(\theta', \varphi') n_k(\theta', \varphi') d\varphi' d\theta'. \tag{19}$$

Вычисление интегралов (17)–(19) аналитически возможно с использованием бесконечных рядов, что ранее было частично сделано авторами работы [6]. При этом все комбинации значений компонент (при $i, j, k$, равных $x, y, z$) необходимо рассматривать отдельно. Преобразования, необходимые для получения явного вида указанных интегралов, имеют достаточно громоздкий вид, поэтому приведем результат сразу. Для этого введем функцию $M_{2\underset{\cdot}{s},\underset{\cdot}{c},\underset{\cdot}{q}}(z_1, z_2, \rho)$ с помощью следующего выражения:

$$M_{2\underset{\cdot}{s},\underset{\cdot}{c},\underset{\cdot}{q}}(z_1, z_2, \rho) = \frac{4\pi i^{2\{\underset{\cdot}{q}/2\}-\underset{\cdot}{c}}}{\rho^{2\underset{\cdot}{s}+\underset{\cdot}{c}+\underset{\cdot}{q}-1}} \sum_{\underset{\cdot}{g}=0}^{\infty} \sum_{\underset{\cdot}{n}=0}^{\infty} \sum_{\underset{\cdot}{m}=0}^{\underset{\cdot}{s}}$$
$$\times \sum_{\underset{\cdot}{k}=0}^{\underset{\cdot}{s}-\underset{\cdot}{m}} \sum_{\underset{\cdot}{l}=0}^{2\underset{\cdot}{m}+\underset{\cdot}{c}} (-1)^{\underset{\cdot}{k}+\underset{\cdot}{l}+\underset{\cdot}{g}} \left(2(\underset{\cdot}{q}/2 + \{\underset{\cdot}{q}/2\} + \underset{\cdot}{n} + \underset{\cdot}{g} + \underset{\cdot}{k}) - 1\right)!!$$
$$\times \binom{-(\underset{\cdot}{c}+\underset{\cdot}{q}-1)/2 - \underset{\cdot}{s}}{\underset{\cdot}{n}} \binom{\underset{\cdot}{s}}{\underset{\cdot}{m}, \underset{\cdot}{k}, \underset{\cdot}{s}-\underset{\cdot}{m}-\underset{\cdot}{k}}$$
$$\times \binom{2\underset{\cdot}{m}+\underset{\cdot}{c}}{\underset{\cdot}{l}} \left(\frac{1}{\rho^2} - 1\right)^{\underset{\cdot}{n}} (\underset{\cdot}{q}/2 + \{\underset{\cdot}{q}/2\} + \underset{\cdot}{n} + \underset{\cdot}{g} + \underset{\cdot}{k})_{\underset{\cdot}{l}}$$
$$\times \frac{j^{(2\underset{\cdot}{m}+\underset{\cdot}{c}-\underset{\cdot}{l})}_{\underset{\cdot}{q}/2+\{\underset{\cdot}{q}/2\}+\underset{\cdot}{n}+\underset{\cdot}{g}+\underset{\cdot}{k}}(z_1)}{z_1^{\underset{\cdot}{q}/2+\{\underset{\cdot}{q}/2\}+\underset{\cdot}{n}+\underset{\cdot}{g}+\underset{\cdot}{k}+\underset{\cdot}{l}}} \frac{z_2^{2\underset{\cdot}{g}+2\{\underset{\cdot}{q}/2\}}}{(2\underset{\cdot}{g}+2\{\underset{\cdot}{q}/2\})!}. \tag{20}$$

Обозначения в формуле (20) следующие:

– все символы с точкой внизу ($\underset{\cdot}{s}$, $\underset{\cdot}{c}$, $\underset{\cdot}{q}$, $\underset{\cdot}{g}$, $\underset{\cdot}{n}$, $\underset{\cdot}{m}$, $\underset{\cdot}{k}$, $\underset{\cdot}{l}$, $\underset{\cdot}{d}$) являются вспомогательными неотрицательными целыми индексами;

– $\{z\}$ означает дробную часть числа $z$;

– $(\underset{\cdot}{n})_{\underset{\cdot}{l}} = \frac{\Gamma(\underset{\cdot}{n}+\underset{\cdot}{l})}{\Gamma(\underset{\cdot}{n})}$ — символ Похгаммера, выраженный через гамма-функцию;

– $\binom{s}{m} = \frac{s!}{s!(s-m)!}$ и $\binom{s}{m,k,s-m-k} = \frac{s!}{m!k!(s-m-k)!}$ — биномиальный и мультиномиальный коэффициенты соответственно;

– $j_n^{(d)}(z) = \frac{\partial^d j_n(z)}{\partial z^d}$ — производная $d$-го порядка от сферической функции Бесселя порядка $n$.

Бесконечный ряд по $n$ в (20) сходится только при $\rho^2 > 1/2$. Доказательство этого факта приведено в Приложении А. Аналогичным образом доказывается, что бесконечный ряд в (20) при суммировании по индексам $n$ и $g$ сходится при любых значениях $z_1$ и $z_2$.

В случае, когда ряд в формуле (20) расходится, необходимо использовать другую форму функции $M_{2s,c,q}(z_1, z_2, \rho)$:

$$M_{2s,c,q}(z_1, z_2, \rho) = 4\pi i^{2\{q/2\}-c} \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{s}\sum_{k=0}^{s-m}\sum_{l=0}^{2m+c}$$

$$\times \sum_{d=0}^{n} (-1)^{k+l+g+d} \big(2(q/2 + \{q/2\} + d + g + k) - 1\big)!!$$

$$\times \binom{-(c+q-1)/2 - s}{-(c+q-1)/2 - s - n,\, n-d,\, d}$$

$$\times \binom{s}{m,k,s-m-k} \binom{2m+c}{l}$$

$$\times (\rho^2 - 1)^n (q/2 + \{q/2\} + d + g + k)_l$$

$$\times \frac{j^{(2m+c-l)}_{q/2+\{q/2\}+d+g+k}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+d+g+k+l}} \, \frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g + 2\{q/2\})!}, \tag{21}$$

где используются обозначения, аналогичные обозначениям для формулы (20). Индекс $d$ также принимает целые неотрицательные значения, как и остальные индексы. Область сходимости бесконечного ряда при суммировании по $n$ в (21) ограничена условием $0 < \rho^2 < 2$. Доказательство аналогично приведенному в Приложении А.

Таким образом, при $\rho^2 \geq 2$ для функции $M_{2s,c,q}(z_1, z_2, \rho)$ необходимо использовать форму записи (20), при $0 < \rho^2 \leq 1/2$ — только форму (21), а при выполнении условия $1/2 < \rho^2 < 2$, $\rho \neq 1$ — любую из формул (20) или (21). Когда $\rho = 1$, в формулах (20) и (21) возникает неопределенность $0^0$, поэтому использовать их невозможно. В этом случае частица имеет форму шара, следовательно, необходимо использовать формулы, полученные в работе [5], где описана генерация второй гармоники в поверхностном слое сферической частицы. При использовании любой из формул (20), (21) наблюдается закономерность: чем меньше значение $|\rho^2 - 1|$, тем меньше слагаемых в бесконечных суммах по $n$ и $g$ необходимо для достижения требуемой точности значения функции $M_{2s,c,q}(z_1, z_2, \rho)$. Анализируя формулы (20), (21), можно заметить, что в зависимости от значений индексов функция $M_{2s,c,q}(z_1, z_2, \rho)$ принимает действительные ($c + q$ — четное) или чисто мнимые ($c + q$ — нечетное) значения.

С использованием функции $M_{2s,c,q}(z_1, z_2, \rho)$ выражения для интегралов (17)–(19) принимают следующий вид:

$$I((n_z)^m|\mathbf{x}) = M_{0,0,m}\big(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\, \rho\big), \ \ m = 1, 2, 3, \tag{22}$$

$$I((n_z)^m n_i|\mathbf{x}) = \rho M_{0,1,m}\big(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\, \rho\big)\nu_i, \ m=0, 1, 2, \tag{23}$$

$$I((n_z)^m n_i n_j|\mathbf{x}) = \rho^2\Big(M_{0,2,m}\big(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\, \rho\big)$$
$$- M_{2,0,m}\big(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\, \rho\big)\Big)\nu_i\nu_j$$
$$+ \rho^2 M_{2,0,m}\big(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\, \rho\big)\delta_{ij}, \ \ m = 0, 1, \tag{24}$$

$$I(n_i n_j n_k|\mathbf{x}) = \rho^3\Big(M_{0,3,0}\big(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\, \rho\big)$$
$$- 3M_{2,1,0}\big(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\, \rho\big)\Big)\nu_i\nu_j\nu_k$$
$$+ \rho^3 M_{2,1,0}\big(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\, \rho\big)\big(\nu_i\delta_{jk} + \nu_j\delta_{ki} + \nu_k\delta_{ij}\big). \tag{25}$$

Здесь возможные значения для $m$ указаны в соответствующих формулах, индексы $i, j, k$ могут принимать значения $x$ или $y$, величина $q_\perp$ — модуль составляющей вектора рассеяния $\mathbf{q}$, перпендикулярной оси симметрии частицы, $q_z$ — проекция вектора рассеяния $\mathbf{q}$ на ось $Oz$ декартовой системы координат, $\nu_i, \nu_j, \nu_k$ — компоненты единичного вектора $\boldsymbol{\nu}$, направленного вдоль вектора $\mathbf{q}_\perp$:

$$q_z = \mathbf{q}\mathbf{e}_z, \ \ \mathbf{q}_\perp = \mathbf{q} - q_z\mathbf{e}_z, \ \ q_\perp = |\mathbf{q}_\perp|, \ \ \boldsymbol{\nu} = \mathbf{q}_\perp/q_\perp. \tag{26}$$

Формулы (22)–(25) проверены численным интегрированием при случайных значениях параметров для всех возможных комбинаций индексов $i, j, k$.

Благодаря представлению формул (22)–(25) в компактной форме удалось избежать покомпонентной записи каждого из интегралов (17)–(19) при различных значениях индексов $i, j, k$. Однако для удобства последующего сравнения с решением аналогичной задачи, описанным в работе [6], в Приложении Б приведены значения интегралов $I$ при всех возможных значениях индексов $i, j, k, m$.

Заметим, что интегралы $I(n_i|\mathbf{x})$ и $I(n_i n_j n_k|\mathbf{x})$ принимают действительные значения, а интегралы $I(n_i n_j|\mathbf{x})$ — чисто мнимые. Это объясняется особенностями функций $M_{2s,c,q}(z_1, z_2, \rho)$: функции $M_{0,0,1}$, $M_{0,1,0}$, используемые при записи интегралов $I(n_i|\mathbf{x})$, и функции $M_{0,0,3}$, $M_{0,2,1}$, $M_{2,0,1}$, $M_{2,1,0}$, $M_{0,3,0}$, используемые при записи интегралов $I(n_i n_j n_k|\mathbf{x})$, принимают мнимые значения, а функции $M_{0,1,1}$, $M_{0,0,2}$, $M_{2,0,0}$, $M_{0,2,0}$, входящие в состав выражений для $I(n_i n_j|\mathbf{x})$, принимают действительные значения.

## Предельные формы функций *M*

***Предельные формы функций*** $M$ ***при*** $\rho \to 1$

Функция $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1, z_2, \rho)$ при предельных значениях отдельных параметров принимает более простой вид и может быть связана с уже известными функциями, используемыми при решении задач о нелинейной генерации.

Если $\rho \to 1$, то формулы (20) и (21) принимают вид

$$\lim_{\rho\to1} M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1, z_2, \rho) = 4\pi i^{2\{\underset{.}{q}/2\}-\underset{.}{c}} \sum_{\underset{.}{g}=0}^{\infty}\sum_{\underset{.}{m}=0}^{\underset{.}{s}}\sum_{\underset{.}{k}=0}^{\underset{.}{s}-\underset{.}{m}}\sum_{\underset{.}{l}=0}^{2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}}$$

$$\times (-1)^{\underset{.}{k}+\underset{.}{l}+\underset{.}{g}}\big(2(\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{g}+\underset{.}{k})-1\big)!!$$

$$\times \binom{\underset{.}{s}}{\underset{.}{m},\underset{.}{k},\underset{.}{s}-\underset{.}{m}-\underset{.}{k}}\binom{2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}}{\underset{.}{l}}$$

$$\times (\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{g}+\underset{.}{k})_{\underset{.}{l}}$$

$$\times \frac{j^{(2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}-\underset{.}{l})}_{\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{g}+\underset{.}{k}}(z_1)}{z_1^{\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{g}+\underset{.}{k}+\underset{.}{l}}} \frac{z_2^{2\underset{.}{g}+2\{\underset{.}{q}/2\}}}{(2\underset{.}{g}+2\{\underset{.}{q}/2\})!}. \tag{27}$$

Здесь удалось избежать суммирования по индексу $\underset{.}{n}$, потому что все слагаемые при $\underset{.}{n} > 0$ обращаются в ноль.

При отдельных значениях индексов $s, c, q$ предел $\lim_{\rho\to1} M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1, z_2, \rho)$ в (27) после упрощения принимает следующие формы (здесь $Z = \sqrt{z_1^2 + z_2^2}$):

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,0,1}(z_1, z_2, \rho) = 4\pi i\,\frac{z_2}{Z}\,j_1(Z), \tag{28}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,0,2}(z_1, z_2, \rho)$$
$$= 4\pi\left[\frac{1}{3}(j_0(Z) + j_2(Z)) - \left(\frac{z_2}{Z}\right)^2 j_2(Z)\right], \tag{29}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,0,3}(z_1, z_2, \rho)$$
$$= 4\pi i\left[\frac{3}{5}(j_1(Z) + j_3(Z))\frac{z_2}{Z} - j_3(Z)\left(\frac{z_2}{Z}\right)^3\right], \tag{30}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,1,0}(z_1, z_2, \rho) = 4\pi i\,\frac{z_1}{Z}\,j_1(Z), \tag{31}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,1,1}(z_1, z_2, \rho) = -4\pi\,\frac{z_1 z_2}{Z^2}\,j_2(Z), \tag{32}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,1,2}(z_1, z_2, \rho)$$
$$= 4\pi i\,\frac{z_1}{Z}\left[\frac{1}{5}(j_1(Z) + j_3(Z)) - j_3(Z)\left(\frac{z_2}{Z}\right)^2\right], \tag{33}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{2,0,0}(z_1, z_2, \rho) = 4\pi\,\frac{1}{3}\big(j_0(Z) + j_2(Z)\big), \tag{34}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{2,0,1}(z_1, z_2, \rho) = 4\pi i\,\frac{1}{5}\,\frac{z_2}{Z}\big(j_1(Z) + j_3(Z)\big), \tag{35}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,2,0}(z_1, z_2, \rho)$$
$$= 4\pi\left(\frac{1}{3}\big(j_0(Z) + j_2(Z)\big) - j_2(Z)\left(\frac{z_1}{Z}\right)^2\right), \tag{36}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,2,1}(z_1, z_2, \rho)$$
$$= 4\pi i\,\frac{z_2}{Z}\left(\frac{1}{5}\big(j_1(Z) + j_3(Z)\big) - j_3(Z)\left(\frac{z_1}{Z}\right)^2\right), \tag{37}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{2,1,0}(z_1, z_2, \rho) = 4\pi i\,\frac{1}{5}\,\big(j_1(Z) + j_3(Z)\big)\frac{z_1}{Z}, \tag{38}$$

$$\lim_{\rho\to1} M_{0,3,0}(z_1, z_2, \rho)$$
$$= 4\pi i\,\frac{z_1}{Z}\left(\frac{3}{5}\big(j_1(Z) + j_3(Z)\big) - j_3(Z)\left(\frac{z_1}{Z}\right)^2\right). \tag{39}$$

В формулах (28)–(39) рассмотрены только те значения индексов, которые встречаются при записи формул для интегралов (22)–(25).

Подставляя (28)–(39) в формулы (22)–(25), а результат в формулу (11), получим выражение для тензора эффективной восприимчивости $X_{ijk}^{(2\omega)}$, которое совпадает с аналогичной величиной в работе [5] для генерации второй гармоники в поверхностном слое сферической частицы, что согласуется с принципом соответствия.

***Предельные формы функции*** $M$ ***при*** $z_2 \to 0$

Проанализируем значение функции $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1, z_2, \rho)$ при малых значениях $z_1$ и $z_2$. Условие $z_2 \to 0$ в рассматриваемой задаче соответствует случаю, когда $q_z(\mathbf{x})a_z \to 0$. Он имеет место, когда длина полуоси $a_z$ пренебрежимо мала по сравнению с длиной волны возбуждающего излучения или излучение генерируется в направлениях, где проекция вектора рассеяния $q_z(\mathbf{x})$ близка к нулю. Условие $z_1 \to 0$ может выполняться, если $q_\perp(\mathbf{x})a_x \to 0$. В этом случае длина полуоси $a_x$ мала по сравнению с длиной волны падающей электромагнитной волны или генерация происходит в направлениях, где модуль проекции вектора рассеяния на плоскость, перпендикулярную оси симметрии частицы, стремится к нулю.

При $z_2 \to 0$ в сумме по индексу $\underset{.}{g}$ все слагаемые, содержащие множитель $z_2^{2\underset{.}{g}+2\{q/2\}}$ при $\underset{.}{g} > 0$, пренебрежимо малы по сравнению со слагаемыми при $\underset{.}{g} = 0$, следовательно, функция $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1, z_2, \rho)$ может быть записана в виде

$$M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)=\frac{4\pi i^{2\{\underset{.}{q}/2\}-\underset{.}{c}}}{\rho^{2\underset{.}{s}+\underset{.}{c}+\underset{.}{q}-1}}\sum_{\underset{.}{n}=0}^{\infty}\sum_{\underset{.}{m}=0}^{\underset{.}{s}}$$

$$\times\sum_{\underset{.}{k}=0}^{\underset{.}{s}-\underset{.}{m}}\sum_{\underset{.}{l}=0}^{2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}}(-1)^{\underset{.}{k}+\underset{.}{l}}\big(2(\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{n}+\underset{.}{k})-1\big)!!$$

$$\times\binom{-(\underset{.}{c}+\underset{.}{q}-1)/2-\underset{.}{s}}{\underset{.}{n}}\binom{\underset{.}{s}}{\underset{.}{m},\underset{.}{k},\underset{.}{s}-\underset{.}{m}-\underset{.}{k}}$$

$$\times\binom{2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}}{\underset{.}{l}}\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right)^{\underset{.}{n}}(\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{n}+\underset{.}{k})_{\underset{.}{l}}$$

$$\times\frac{j^{(2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}-\underset{.}{l})}_{\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{n}+\underset{.}{k}}(z_1)}{z_1^{\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{n}+\underset{.}{k}+\underset{.}{l}}}\,\frac{z_2^{2\{\underset{.}{q}/2\}}}{(2\{\underset{.}{q}/2\})!}. \quad (40)$$

Выражение (40) получено из формулы (20), поэтому применимо только при $\rho^2>1/2$. Рассуждая аналогично на основе формулы (21), получаем, что при $\rho^2<2$ функция $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ может быть записана как

$$M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)=4\pi i^{2\{\underset{.}{q}/2\}-\underset{.}{c}}\sum_{\underset{.}{n}=0}^{\infty}\sum_{\underset{.}{m}=0}^{\underset{.}{s}}\sum_{\underset{.}{k}=0}^{\underset{.}{s}-\underset{.}{m}}\sum_{\underset{.}{l}=0}^{2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}}$$

$$\times\sum_{\underset{.}{d}=0}^{\underset{.}{n}}(-1)^{\underset{.}{k}+\underset{.}{l}+\underset{.}{d}}\big(2(\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{d}+\underset{.}{k})-1\big)!!$$

$$\times\binom{-(\underset{.}{c}+\underset{.}{q}-1)/2-\underset{.}{s}}{-(\underset{.}{c}+\underset{.}{q}-1)/2-\underset{.}{s}-\underset{.}{n},\underset{.}{n}-\underset{.}{d},\underset{.}{d}}$$

$$\times\binom{\underset{.}{s}}{\underset{.}{m},\underset{.}{k},\underset{.}{s}-\underset{.}{m}-\underset{.}{k}}\binom{2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}}{\underset{.}{l}}$$

$$\times(\rho^2-1)^{\underset{.}{n}}(\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{d}+\underset{.}{k})_{\underset{.}{l}}$$

$$\times\frac{j^{(2\underset{.}{m}+\underset{.}{c}-\underset{.}{l})}_{\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{d}+\underset{.}{k}}(z_1)}{z_1^{\underset{.}{q}/2+\{\underset{.}{q}/2\}+\underset{.}{d}+\underset{.}{k}+\underset{.}{l}}}\,\frac{z_2^{2\{\underset{.}{q}/2\}}}{(2\{\underset{.}{q}/2\})!}. \quad (41)$$

Из формул (40) и (41) следует, что $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)\propto z_2^{2\{\underset{.}{q}/2\}}$. Это означает, что при четных значениях $\underset{.}{q}$ функция $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ не зависит от $z_2$, а при нечетных — $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)\propto z_2$.

***Предельные формы функции*** $M$ ***при*** $z_1\to 0$

Проанализируем зависимость функции $M$ от $z_1$. Для этого понадобится разложение в ряд соответствующего множителя, содержащего сферическую функцию Бесселя [14] и зависящего от $z_1$:

$$\frac{j_n^{(d)}(z_1)}{z_1^m}=z_1^{-m}\frac{\partial^d}{\partial z^d}\left(\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-1)^p z_1^{n+2p}}{2^p p!(2n+2p+1)!!}\right)$$

$$=\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-1)^p(n-d+2p+1)_d}{2^p p!(2n+2p+1)!!}z_1^{n-d-m+2p}. \quad (42)$$

Подставляя формулу (42) в (20) и упрощая полученное выражение с учетом $z_1\to 0$, получим, что $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)\propto z_1^{2\{\underset{.}{c}/2\}}$. Подробные преобразования не приведены в работе ввиду их большого объема. Получаем, что при четных значениях $\underset{.}{c}$ функция $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ не зависит от переменной $z_1$, а при нечетных значениях $\underset{.}{c}$ функция $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ пропорциональна $z_1$.

Несложно убедиться в указанных закономерностях, рассматривая упрощенный вид функций $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ при фиксированных значениях параметров $\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}$, записанных в Приложении B, или при $\rho\to 1$ (формулы (28)–(39)), а также посредством численных расчетов при произвольных значениях аргументов функции $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$.

***Предельные формы функции*** $M$ ***при*** $z_1\to 0$ ***и*** $z_2\to 0$

В случае, когда одновременно $z_1$ и $z_2$ принимают малые значения, верна формула

$$M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)\propto z_1^{2\{\underset{.}{c}/2\}}z_2^{2\{\underset{.}{q}/2\}},\ \ z_1\to 0,\ \ z_2\to 0. \quad (43)$$

Кроме функций $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ следует также рассмотреть линейные комбинации этих функций, которые встречаются в записи интегралов (22)–(25):

$$M_{0,2,0}(z_1,z_2,\rho)-M_{2,0,0}(z_1,z_2,\rho), \quad (44)$$

$$M_{0,2,1}(z_1,z_2,\rho)-M_{2,0,1}(z_1,z_2,\rho). \quad (45)$$

Подставляя явный вид функций $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ в последние две формулы, можно убедиться, что при $z_1\to 0$, $z_2\to 0$ выражения (44) и (45) прямо пропорциональны $(z_1)^2$ и $(z_1)^2 z_2$ соответственно. Это связано со взаимным сокращением в формуле (44) слагаемых, содержащих множитель $z_1$, а в формуле (45) — слагаемых, содержащих $z_1 z_2$.

## Предельные формы интегралов $I$

Рассмотрим зависимость интегралов (22)–(25) от линейных размеров эллипсоидальной частицы и компонент вектора рассеяния $\mathbf{q}$ при $|q_z(\mathbf{x})a_z|\ll 1$ и $q_\perp(\mathbf{x})a_x\ll 1$. Пользуясь (43), получаем

$$I((n_z)^m|\mathbf{x})\propto(q_z(\mathbf{x})a_z)^{2\{m/2\}},\ \ m=1,2,3, \quad (46)$$

$$I((n_z)^m n_i|\mathbf{x})\propto(q_\perp(\mathbf{x})a_x)(q_z(\mathbf{x})a_z)^{2\{m/2\}},\ \ m=0,1,2, \quad (47)$$

$$I((n_z)^m n_i n_j|\mathbf{x})\propto(q_z(\mathbf{x})a_z)^{2\{m/2\}},\ \ m=0,1, \quad (48)$$

$$I(n_i n_j n_k|\mathbf{x})\propto(q_\perp(\mathbf{x})a_x). \quad (49)$$

Индексы $i,j,k$ могут принимать значения $x$ или $y$. Исключения составляют только значения интегралов $I(n_x n_y|\mathbf{x})$ и $I(n_z n_x n_y|\mathbf{x})$. Они содержат выражения (44) и (45) соответственно. Следовательно, для указанных интегралов верны формулы

$$I(n_x n_y|\mathbf{x})\propto(q_\perp(\mathbf{x})a_x)^2, \quad (50)$$

$$I(n_z n_x n_y|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x)^2(q_z(\mathbf{x})a_z). \quad (51)$$

В Приложении Г приведены формулы, характеризующие зависимость интегралов $I(n_i|\mathbf{x})$, $I(n_i n_j|\mathbf{x})$, $I(n_i n_j n_k|\mathbf{x})$ от $q_\perp(\mathbf{x})a_x$ и $q_z(\mathbf{x})a_z$ при $|q_z(\mathbf{x})a_z| \ll 1$ и $q_\perp(\mathbf{x})a_x \ll 1$ при всех возможных комбинациях индексов $i$, $j$, $k$. Заметим, что обнаруженные закономерности верны не только при малом размере частицы ($a_z/\lambda \ll 1$, $a_x/\lambda \ll 1$), но характерны также и для направлений, в которых отдельные компоненты вектора рассеяния близки к нулю ($q_\perp \to 0$, $q_z \to 0$) даже при относительно больших линейных размерах сфероидальной частицы. Указанные формы зависимости интегралов $I$ от линейных размеров частицы согласуются с видом функций, приведенных в табл. 5 работы [6].

Используя зависимости (46)–(51), можно охарактеризовать зависимость тензора эффективной восприимчивости $X_{ijk}^{(2\omega)}$ от линейных размеров диэлектрической частицы, когда они имеют малое значение ($k_\omega a_x \ll 1$). Выражения для некиральных компонент, в состав которых входят коэффициенты $\chi_{1-3}^{(2)}$, содержат также интегралы $I(n_i|\mathbf{x})$ и $I(n_i n_j n_k|\mathbf{x})$. Указанные интегралы в свою очередь при фиксированном значении $\rho$ пропорциональны $a_x$. В дальней зоне, где генерируемое излучение описывается уравнениями для плоских волн, модуль вектора Умова–Пойнтинга генерируемой волны можно вычислить по формуле

$$S_r^{(2\omega)} \approx |\mathbf{S}^{(2\omega)}(\mathbf{x})| = \frac{c}{8\pi}\frac{n_{2\omega}}{\mu_{2\omega}}|\mathbf{E}^{(2\omega)}(\mathbf{x})|^2. \quad (52)$$

Следовательно, при малых линейных размерах сфероидальной частицы плотность мощности генерируемого излучения для некирального слоя ($\chi_{1-3}^{(2)} \neq 0$, $\chi_4^{(2)} = 0$) прямо пропорциональна $a_x^6$. Подобный характер зависимости для некиральных компонент ранее был обнаружен при решении задач о генерации второй гармоники [5] и генерации суммарной частоты [15] в сферическом слое.

В выражениях для киральных компонент, включающих $\chi_4^{(2)}$, содержатся также интегралы $I(n_i n_j|\mathbf{x})$, которые не зависят от $a_x$. Следовательно, для кирального слоя ($\chi_4^{(2)} \neq 0$, $\chi_{1-3}^{(2)} = 0$) модуль вектора Умова–Пойнтинга прямо пропорционален $a_x^4$. Аналогичный порядок зависимости выявлен и при рассмотрении генерации суммарной частоты в поверхностном слое сферической частицы [15].

Стоит отметить, что при генерации второй гармоники в киральном поверхностном слое сферической частицы [5] вектор Умова–Пойнтинга прямо пропорционален $a_x^8$, что серьезно отличается от результата, полученного для сфероидальной формы диэлектрической частицы ($S_r^{(2\omega)} \propto a_x^4$).

Эту особенность можно объяснить следующим образом. В соответствии с формулой (11) при вычислении вклада киральной компоненты $\chi_4^{(2)}$ в генерацию требуется использовать значение интегралов $I(n_m n_k|\mathbf{x})$ и $I(n_m n_j|\mathbf{x})$, которые в свою очередь при $\rho \to 1$ содержат сферические функции Бесселя нулевого и второго порядков. В этом можно убедиться, подставляя значения функций $M_{2s,c,q}(z_1, z_2, \rho)$ из формул (29), (32), (34), (36) настоящей работы в формулы (81)–(86) Приложения Г. Однако при выполнении суммирования по индексам $j$ и $k$, возникающего после подстановки формулы (11) в формулу (5), сокращаются слагаемые, содержащие сферические функции Бесселя нулевого порядка. Доминирующими становятся слагаемые, пропорциональные сферическим функциям Бесселя второго порядка, которые при малом размере частицы пропорциональны $a_x^2$. Сокращение сферических функций Бесселя нулевого порядка происходит только при генерации второй гармоники в сферическом слое и не происходит при генерации суммарной частоты в сферическом слое [15] или при генерации второй гармоники в сфероидальном слое.

## Сравнение с работами других авторов

Задача о нелинейной генерации в поверхностном слое сфероидальной диэлектрической частицы ранее была рассмотрена авторами статьи [6]. Однако их решение обладает рядом недостатков и неточностей.

1) Полученные ими выражения в виде рядов для описания интегралов, аналогичных записанным в (7), сходятся только при $\rho^2 > 1/2$, а значит, не пригодны для описания генерации в сплюснутых в значительной степени сфероидальных частицах. При этом сами авторы в статье [6] не указывают границы применимости их модели.

2) Значения интегралов были получены в работе [6] в предположении, что вектор рассеяния $\mathbf{q}$ расположен в плоскости $Oxz$. Вследствие этого расчет численных значений компонент вектора напряженности электрического поля генерируемого излучения вне плоскости, содержащей вектор $\mathbf{q}$, невозможен без дополнительных преобразований поворота, что затрудняет процесс анализа пространственного распределения генерируемого излучения.

3) В табл. 3 работы [6] допущено несколько опечаток:

– в выражении для $B_{x'z'}$ должна отсутствовать мнимая единица. Другими словами, выражение для $B_{x'z'}$ должно быть мнимым, как и выражения для $B_{x'x'}$, $B_{y'y'}$, $B_{z'z'}$, записанные в той же таблице; это также подтверждается отмеченной нами особенностью: значения интегралов $I(n_i n_j|\mathbf{x})$, соответствующих функциям $B_{ij}$ являются действительными;

– в выражении для $B_{x'z'}$ переменную $a_{z'}$ необходимо заменить на $q_{z'}$. Это подтверждается тем, что $a_{z'}$ в содержании работы [6] больше нигде не встречается в отличие от $q_{z'}$.

Выражение для $B_{x'z'}$ в работе [6] с учетом предложенных исправлений должно быть

$$B_{x'z'} = -3VDq_{x'}q_{z'}\sum_{n,h}^{\infty}\frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}$$

$$\times\frac{(2n+2h+1)!!}{2h+1}M(n,h)\kappa_{n+h+2}(q_{x'}D). \quad (53)$$

4) При разложении в ряд в формуле (27) работы [6] допущена опечатка: в знаменателе выражения $\cos^{2n}(t)/\rho^2$ переменная $\rho$ должна возводиться в первую степень, а не во вторую, что легко проверяется подстановкой численных значений в формулу. Правильная форма записи указанного выражения приведена ниже:

$$\frac{1}{\gamma(\rho,t)} = \frac{1}{(\cos^2 t + \rho^2\sin^2 t)^{1/2}}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\rho^2-1}{\rho^2}\right)^n\frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}\frac{\cos^{2n}t}{\rho}. \quad (54)$$

5) В формуле (19) работы [6] пропущен множитель 3 в выражении для вектора $\mathbf{C}$. С учетом поправки указанная формула примет вид

$$\mathbf{C} = 3i\mathbf{q}V\frac{j_1[(q_{x'}^2+\rho^2q_{z'}^2)^{1/2}D]}{(q_{x'}^2+\rho^2q_{z'}^2)^{1/2}D}, \quad (55)$$

что подтверждается значениями компонент вектора $\mathbf{C}$, указанными в табл. 3 работы [6], и соответствует результатам, полученным в настоящей статье.

С учетом описанных исправлений связь между функциями в настоящей работе и в статье [6] следующая:

$$C_i = a_x^2 I(n_i), \quad (56)$$

$$B_{ij} = a_x^2 I(n_i n_j), \quad (57)$$

$$A_{ijk} = a_x^2 I(n_i n_j n_k). \quad (58)$$

Здесь слева указаны обозначения, принятые в работе [6], а справа — в настоящей работе для частного случая, когда $q_y = 0$ и $\rho^2 > 1/2$.

Несложно проверить, что значения интегралов $I(n_i)$, $I(n_i n_j)$ и $I(n_i n_j n_k)$ также подчиняются свойствам, указанным в статье [6]:

$$I(n_i n_k n_k) = I(n_i), \quad (59)$$

$$I(n_k n_k) = I(1). \quad (60)$$

Выражение $I(1)$ в работе [6] обозначено $f(\mathbf{q})$ и названо линейным поверхностным форм-фактором.

## Заключение

Решение задачи о генерации второй гармоники в поверхностном слое частицы в форме эллипсоида вращения посредством разложения в ряд и интегрирования — на данный момент единственный существующий способ аналитического описания данного явления. Впервые полученная в работе компактная форма записи результирующих выражений с использованием функции $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ достаточно удобна для последующего анализа свойств пространственного распределения излучения удвоенной частоты и применима при любых соотношениях линейных размеров сфероидальной частицы. Благодаря использованию двух форм функции $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ удалось расширить область применимости полученного авторами работы [6] аналитического решения для описания генерации излучения удвоенной частоты в поверхностном слое частицы в форме эллипсоида вращения. С целью проверки корректности решения установлена связь частных случаев приведенных в настоящей работе функций с функциями, использованными в статье [6] для описания генерации второй гармоники. При этом обнаружено, что общие свойства, характерные для тензорных интегральных величин и впервые встречающиеся в работе [6], также верны и для вспомогательных интегралов $I$, полученных в настоящей работе.

В пределе, когда форма сфероидальной частицы стремится к сферической ($\rho \to 1$), функции, используемые при описании генерации второй гармоники в поверхностном слое сфероидальной частицы, трансформируются в функции, характеризующие пространственное распределение излучения удвоенной частоты, генерируемое в поверхностном слое сферической диэлектрической частицы [5], что не противоречит принципу соответствия.

Явный вид функций $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ при фиксированных значениях индексов $\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}$ (Приложение В) может быть использован для дальнейшего анализа и сокращения времени, необходимого для вычисления компонент вектора напряженности электрического поля второй гармоники. Характер зависимости функций $M_{2\underset{.}{s},\underset{.}{c},\underset{.}{q}}(z_1,z_2,\rho)$ от аргументов $z_1$ и $z_2$ при их малых значениях соответствует указанным в Приложении В формулам и успешно использован при определении поведения вспомогательных интегралов при малых значениях линейных размеров диэлектрической частицы в форме эллипсоида вращения.

Пользуясь приведенными в Приложении Г зависимостями, можно определить доминирующие компоненты вектора напряженности электрического поля удвоенной частоты. В частности, выявлено, что доминирующий вклад в генерацию при малых линейных размерах сфероидальной частицы, когда $\rho$ существенно отличается от 1, вносят именно киральные компоненты, обусловленные коэффициентом $\chi_4^{(2)}$. При этом плотность мощности генерируемого излучения прямо пропорциональна $a_x^4$. При тех же условиях некиральные компоненты, обусловленные коэффициентами $\chi_{1-3}^{(2)}$, ответственны за генерацию излучения, плотность мощности которого пропорциональна $a_x^6$. Аналогичные результаты с преобладающим вкладом киральных компонент в генерацию ранее были получены и при решении задач о генерации второй гармоники [8] и генерации суммарной частоты [16] в поверхностных слоях диэлектрических частиц, имеющих форму цилиндра.

Разработанный подход к описанию генерации второй гармоники в деформированных сферических частицах может найти применение при аналитическом описании генерации суммарной частоты и других нелинейных эффектов в диэлектрических частицах подобной формы. Поиск явного вида интегральных тензорных величин посредством разложения в ряд применим и при решении задач о нелинейной генерации в частицах более сложных форм: произвольного эллипсоида, эллиптического цилиндра, полусферы и их элементов. Использование такого метода приближает возможность разработки системных подходов для высокоточного описания нелинейной генерации в частицах произвольных форм, в том числе генерации более высоких порядков.

### Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант Ф20М–011).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Приложение А. Доказательство сходимости суммы бесконечного ряда

Рассмотрим одно из слагаемых в сумме, записанной в выражении (20). Для этого зафиксируем значения индексов $s$, $c$, $q$, $g$, $m$, $k$, $l$, $d$, (все индексы, кроме $n$,) и переменных $\rho$, $z_1$, $z_2$. Тогда получим следующее выражение:

$$F_n = \frac{(-1)^{k+l+g}\left(q + 2\{q/2\} + 2n + 2g + 2k - 1\right)!!}{(2g + 2\{q/2\})!}$$
$$\times (q/2 + \{q/2\} + n + g + k)_l \binom{-(c+q-1)/2 - s}{n}$$
$$\times \binom{s}{m, k, s, -m-k} \binom{2m+c}{l} \left(\frac{1}{\rho^2} - 1\right)^n$$
$$\times j^{(2m+c-l)}_{q/2+\{q/2\}+n+g+k}(z_1) z_1^{-(n+g+k+l)} z_2^{2g}. \tag{61}$$

С целью выяснения условий сходимости суммы по $n$ при $n \to \infty$ воспользуемся признаком Д'Аламбера. Для этого найдём предел отношения значений выражения (61) при двух последовательных значениях индекса $n$ для $n \to \infty$:

$$\lim_{n\to\infty} (F_{n+1}/F_n). \tag{62}$$

Рассмотрим поочерёдно отношение соответствующих множителей, содержащихся в функциях $F_{n+1}$ и $F_n$.

Первый множитель

$$\frac{(-1)^{k+l+g}\left(q + 2\{q/2\} + 2(n+1) + 2g + 2k - 1\right)!!}{(2g + 2\{q/2\})!}$$
$$\times \left(\frac{(-1)^{k+l+g}\left(q + 2\{q/2\} + 2n + 2g + 2k - 1\right)!!}{(2g + 2\{q/2\})!}\right)^{-1}$$
$$= q + 2\{q/2\} + 2n + 1 + 2g + 2k. \tag{63}$$

Второй множитель

$$\left(q/2 + \{q/2\} + n + 1 + g + k\right)_l$$
$$\Big/ \left(q/2 + \{q/2\} + n + g + k\right)_l$$
$$= \frac{q/2 + \{q/2\} + n + 1 + g + k}{q/2 + \{q/2\} + n + g + k}. \tag{64}$$

Третий множитель

$$\binom{-(c+q-1)/2 - s}{n+1} \Big/ \binom{-(c+q-1)/2 - s}{n}$$
$$= \frac{\Gamma(-(c+q-1)/2 - s + 1)}{\Gamma(n+2)\Gamma(-(c+q-1)/2 - s - n)}$$
$$\Big/ \frac{\Gamma(-(c+q-1)/2 - s + 1)}{\Gamma(n+1)\Gamma(-(c+q-1)/2 - s - n + 1)}$$
$$= \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2)} \frac{\Gamma(-(c+q-1)/2 - s - n + 1)}{\Gamma(-(c+q-1)/2 - s - n}$$
$$= \frac{-(c+q-1)/2 - s - n}{1+n}. \tag{65}$$

Четвёртый и пятый множители не зависят от $n$, поэтому отношение множителей при двух последовательных значениях $n$ окажется равным единице. Шестой множитель

$$\left(\frac{1}{\rho^2} - 1\right)^{n+1} \Big/ \left(\frac{1}{\rho^2} - 1\right)^n = \frac{1}{\rho^2} - 1. \tag{66}$$

Для вычислений с седьмым множителем нам понадобится предварительно вычислить предел $\lim\limits_{n\to\infty} j^{(d)}_{n+1}(z)/j^{(d)}_n(z)$. Проще всего это сделать с помощью разложения в ряд [14]:

$$j_n(z) = z^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{1}{2}z^2\right)^k}{k!(2n+2k+1)!!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k z^{2k+n}}{2^k k!(2n+2k+1)!!}. \tag{67}$$

Тогда для производной порядка $d$ верно следующее разложение:

$$j^{(d)}_n(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k+n)!(-1)^k z^{2k+n-d}}{(2k+n-d)!2^k k!(2n+2k+1)!!}. \tag{68}$$

Следовательно, отношение соответствующих функций при последовательных значениях порядка можно записать в виде

$$j_{n+1}^{(d)}(z)/j_{n}^{(d)}(z)=\frac{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k+n+1)!(-1)^k z^{2k+n+1-d}}{(2k+n-d+1)!2^k k!(2n+2k+3)!!}}{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k+n)!(-1)^k z^{2k+n-d}}{(2k+n-d)!2^k k!(2n+2k+1)!!}}$$

$$=z\frac{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k+n)!(-1)^k z^{2k}}{(2k+n-d)!2^k k!(2n+2k+1)!!}\frac{(2k+n+1)}{(2k+n-d+1)(2n+2k+3)}}{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k+n)!(-1)^k z^{2k}}{(2k+n-d)!2^k k!(2n+2k+1)!!}}. \quad (69)$$

В пределе при $n\to\infty$ получаем

$$\lim_{n\to\infty}\frac{(2k+n+1)}{(2k+n-d+1)(2n+2k+3)}=\frac{1}{2n}. \quad (70)$$

Тогда, используя (70) в (69), получаем

$$\lim_{n\to\infty} z\frac{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k+n)!(-1)^k z^{2k}}{(2k+n-d)!2^k k!(2n+2k+1)!!}\frac{(2k+n+1)}{(2k+n-d+1)(2n+2k+3)}}{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k+n)!(-1)^k z^{2k}}{(2k+n-d)!2^k k!(2n+2k+1)!!}}$$

$$=\lim_{n\to\infty} z\frac{\frac{1}{2n}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k+n)!(-1)^k z^{2k}}{(2k+n-d)!2^k k!(2n+2k+1)!!}}{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k+n)!(-1)^k z^{2k}}{(2k+n-d)!2^k k!(2n+2k+1)!!}}=\frac{z}{2n}. \quad (71)$$

Отметим, что замена $\frac{(2k+n+1)}{(2k+n-d+1)(2n+2k+3)}$ на $\frac{1}{2n}$ в формуле (71) верна в случае, если $n\gg k$. Однако остальные слагаемые в сумме, для которых порядок величин $n$ и $k$ близок или выполняется условие $k\gg n$, имеют пренебрежимо малую величину по сравнению с точным значением производной соответствующей сферической функции Бесселя.

Тогда предельное значение отношения производных $d$-го порядка сферических функций Бесселя $(n+1)$-го и $n$-го порядков при $n\to\infty$ можно найти из выражения

$$\lim_{n\to\infty}\frac{j_{n+1}^{(d)}(z)}{j_{n}^{(d)}(z)}=\frac{z}{2n}. \quad (72)$$

Пользуясь свойством (72), получаем

$$\lim_{n\to\infty}\frac{j^{(2m+c-l)}_{q/2+\{q/2\}+n+1+g+k}(z_1)}{j^{(2m+c-l)}_{q/2+\{q/2\}+n+g+k}(z_1)}$$

$$=\frac{z_1}{2(q/2+\{q/2\}+n+g+k)}. \quad (73)$$

Для восьмого и девятого множителя получаем отношение

$$\frac{z_1^{-(n+1+g+k+l)}z_2^{2g}}{z_1^{-(n+g+k+l)}z_2^{2g}}=\frac{1}{z_1}. \quad (74)$$

Теперь, пользуясь (63)−(66), (73), (74), найдём предел отношения $F_{n+1}/F_n$:

$$\lim_{n\to\infty}(F_{n+1}/F_n)=\lim_{n\to\infty}(q+2\{q/2\}+2n+2+2g+2k-1)$$

$$\times\frac{q/2+\{q/2\}+n+1+g+k}{q/2+\{q/2\}+n+g+k}\frac{-(c+q-1)/2-s-n}{1+n}$$

$$\times\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right)\frac{z_1}{2(q/2+\{q/2\}+n+g+k)}\frac{1}{z_1}=-\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right). \quad (75)$$

В соответствии с признаком Д'Аламбера ряд будет сходиться только в случае, когда выполняется условие

$$\left|-\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right)\right|<1. \quad (76)$$

Это возможно, если величина $\rho^2$ подчиняется следующему ограничению:

$$\rho^2>1/2. \quad (77)$$

## Приложение Б. Явный вид интегралов $I$

$$I(n_x|\mathbf{x})=\rho M_{0,1,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_x, \quad (78)$$

$$I(n_y|\mathbf{x})=\rho M_{0,1,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_y, \quad (79)$$

$$I(n_z|\mathbf{x})=\rho M_{0,0,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho), \quad (80)$$

$$I(n_xn_x|\mathbf{x})=\rho^2\big(M_{0,2,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_x\nu_x$$

$$+M_{2,0,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)(1-\nu_x\nu_x)\big), \quad (81)$$

$$I(n_xn_y|\mathbf{x})=\rho^2\big(M_{0,2,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)$$

$$-M_{2,0,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\big)\nu_x\nu_y, \quad (82)$$

$$I(n_yn_y|\mathbf{x})=\rho^2\big(M_{0,2,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_y\nu_y$$

$$+M_{2,0,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)(1-\nu_y\nu_y)\big), \quad (83)$$

$$I(n_zn_x|\mathbf{x})=\rho M_{0,1,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_x, \quad (84)$$

$$I(n_zn_y|\mathbf{x})=\rho M_{0,1,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_y, \quad (85)$$

$$I(n_zn_z|\mathbf{x})=M_{0,0,2}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho), \quad (86)$$

$$I(n_xn_xn_x|\mathbf{x})=\rho^3\big(M_{0,3,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_x\nu_x$$

$$+3M_{2,1,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)(1-\nu_x\nu_x)\big)\nu_x, \quad (87)$$

$$I(n_xn_xn_y|\mathbf{x})=\rho^3\big(M_{0,3,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_x\nu_x$$

$$+M_{2,1,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)(1-3\nu_x\nu_x)\big)\nu_y, \quad (88)$$

$$I(n_xn_yn_y|\mathbf{x})=\rho^3\big(M_{0,3,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)\nu_y\nu_y$$

$$+M_{2,1,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x,\, q_z(\mathbf{x})a_z,\rho)(1-3\nu_y\nu_y)\big)\nu_x, \quad (89)$$

$$I(n_y n_y n_y|\mathbf{x}) = \rho^3 \big(M_{0,3,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)\nu_y\nu_y + 3M_{2,1,0}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)(1-\nu_y\nu_y)\big)\nu_y, \quad (90)$$

$$I(n_z n_x n_x|\mathbf{x}) = \rho^2 \big(M_{0,2,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)\nu_x\nu_x + M_{2,0,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)(1-\nu_x\nu_x)\big), \quad (91)$$

$$I(n_z n_x n_y|\mathbf{x}) = \rho^2 \big(M_{0,2,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho) - M_{2,0,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)\big)\nu_x\nu_y\big), \quad (92)$$

$$I(n_z n_y n_y|\mathbf{x}) = \rho^2 \big(M_{0,2,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)\nu_y\nu_y + M_{2,0,1}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)(1-\nu_y\nu_y)\big), \quad (93)$$

$$I(n_z n_z n_x|\mathbf{x}) = \rho M_{0,1,2}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)\nu_x, \quad (94)$$

$$I(n_z n_z n_y|\mathbf{x}) = \rho M_{0,1,2}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho)\nu_y, \quad (95)$$

$$I(n_z n_z n_z|\mathbf{x}) = M_{0,0,3}(q_\perp(\mathbf{x})a_x, q_z(\mathbf{x})a_z, \rho). \quad (96)$$

## Приложение B. Упрощённые формулы для функций M

При $\rho^2 > 1/2$ справедливы следующие формулы:

$$M_{0,0,q}(z_1, z_2, \rho) = \frac{4\pi i^{2\{q/2\}}}{\rho^{q-1}} \times \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^g \big(2(q/2+\{q/2\}+n+g)-1\big)!! \times \binom{-(q-1)/2}{n}\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right)^n \times \frac{j_{q/2+\{q/2\}+n+g}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+n+g}}\,\frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!}, \quad (97)$$

$$M_{0,1,q}(z_1, z_2, \rho) = \frac{4\pi i^{2\{q/2\}-1}}{\rho^{q}} \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{1}(-1)^{l+g} \times \Big(2(q/2+\{q/2\}+n+g)-1\Big)!!\big(q/2+\{q/2\}+n+g\big)_l \times \binom{-q/2}{n}\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right)^n \frac{j^{(1-l)}_{q/2+\{q/2\}+n+g}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+n+g+l}} \times \frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!} = \frac{4\pi i^{2\{q/2\}-1}}{\rho^{q}} \times \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{g+1}\Big(2(q/2+\{q/2\}+n+g)-1\Big)!! \times \binom{-q/2}{n}\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right)^n \frac{j_{q/2+\{q/2\}+n+g+1}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+n+g}} \times \frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!}, \quad (98)$$

$$M_{0,2,q}(z_1, z_2, \rho) = \frac{4\pi i^{2\{q/2\}-2}}{\rho^{1+q}} \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{2}(-1)^{l+g} \times \big(2(q/2+\{q/2\}+n+g)-1\big)!!\binom{-(1+q)/2}{n} \times \binom{2}{l}\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right)^n (q/2+\{q/2\}+n+g)_l \times \frac{j^{(2-l)}_{q/2+\{q/2\}+n+g}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+n+g+l}}\,\frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!}$$
$$= \frac{4\pi i^{2\{q/2\}-2}}{\rho^{1+q}}\sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^g\big(2(q/2+\{q/2\}+n+g)-1\big)!! \times \binom{-(1+q)/2}{n}\left(\frac{1}{\rho^2}-1\right)^n \times \frac{j_{q/2+\{q/2\}+n+g+2}(z_1) - j_{q/2+\{q/2\}+n+g+1}(z_1)/z_1}{z_1^{q/2+\{q/2\}+n+g}} \times \frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!}. \quad (99)$$

При $0 < \rho^2 < 2$ верны следующие формулы:

$$M_{0,0,q}(z_1, z_2, \rho) = 4\pi i^{2\{q/2\}} \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{d=0}^{n}(-1)^{g+d} \times \big(2(q/2+\{q/2\}+d+g)-1\big)!! \times \binom{-(q-1)/2}{-(q-1)/2-n,\, n-d,\, d}(\rho^2-1)^n \times \frac{j_{q/2+\{q/2\}+d+g}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+d+g}}\,\frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!}, \quad (100)$$

$$
\begin{aligned}
M_{0,1,q}(z_1, z_2, \rho) &= 4\pi i^{2\{q/2\}-1} \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{1}\sum_{d=0}^{n}(-1)^{l+g+d} \\
&\times \big(2(q/2+\{q/2\}+d+g)-1\big)!! \\
&\times \binom{-q/2}{-q/2-n,\, n-d,\, d} (\rho^2-1)^{n} \\
&\times (q/2+\{q/2\}+d+g)_l \\
&\times \frac{j^{(1-l)}_{q/2+\{q/2\}+d+g}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+d+g+l}} \, \frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!}, \\
&= 4\pi i^{2\{q/2\}-1} \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{d=0}^{n}(-1)^{1+g+d} \\
&\times \big(2(q/2+\{q/2\}+d+g)-1\big)!! \\
&\times \binom{-q/2}{-q/2-n,\, n-d,\, d} (\rho^2-1)^{n} \\
&\times \frac{j_{q/2+(q/2)+d+g+1}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+d+g}} \, \frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!},
\end{aligned}
\tag{101}
$$

$$
\begin{aligned}
M_{0,2,q}(z_1, z_2, \rho) &= 4\pi i^{2\{q/2\}-2} \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{2}\sum_{d=0}^{n}(-1)^{l+g+d} \\
&\times \big(2(q/2+\{q/2\}+d+g)-1\big)!! \\
&\times \binom{-(q+1)/2}{-(q+1)/2-n,\, n-d,\, d} \binom{2}{l} (\rho^2-1)^{n} \\
&\times (q/2+\{q/2\}+d+g)_l \\
&\times \frac{j^{(2-l)}_{q/2+\{q/2\}+d+g}(z_1)}{z_1^{q/2+\{q/2\}+d+g+l}} \, \frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!} \\
&= 4\pi i^{2\{q/2\}} \sum_{g=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{d=0}^{n}(-1)^{g+d+1} \\
&\times \big(2(q/2+\{q/2\}+d+g)-1\big)!! \\
&\times \binom{-(q+1)/2}{-(q+1)/2-n,\, n-d,\, d} (\rho^2-1)^{n} \\
&\times \frac{j_{q/2+\{q/2\}+d+g+2}(z_1) - j_{q/2+\{q/2\}+d+g+1}(z_1)/z_1}{z_1^{q/2+\{q/2\}+d+g}} \\
&\times \frac{z_2^{2g+2\{q/2\}}}{(2g+2\{q/2\})!}.
\end{aligned}
\tag{102}
$$

## Приложение Г. Зависимость вспомогательных интегралов от линейных размеров частицы

$$I(n_x|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x), \tag{103}$$
$$I(n_y|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x), \tag{104}$$
$$I(n_z|\mathbf{x}) \propto (q_z(\mathbf{x})a_z), \tag{105}$$
$$I(n_x n_x|\mathbf{x}) \propto 1, \tag{106}$$
$$I(n_x n_y \mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x)^2, \tag{107}$$
$$I(n_y n_y|\mathbf{x}) \propto 1, \tag{108}$$
$$I(n_z n_x|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x)(q_z(\mathbf{x})a_z), \tag{109}$$
$$I(n_z n_y|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x)(q_z(\mathbf{x})a_z), \tag{110}$$
$$I(n_z n_z|\mathbf{x}) \propto 1, \tag{111}$$
$$I(n_x n_x n_x|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x), \tag{112}$$
$$I(n_x n_x n_y|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x), \tag{113}$$
$$I(n_x n_y n_y|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x), \tag{114}$$
$$I(n_y n_y n_y|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x), \tag{115}$$
$$I(n_z n_x n_x|\mathbf{x}) \propto (q_z(\mathbf{x})a_z), \tag{116}$$
$$I(n_z n_x n_y|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x)^2(q_z(\mathbf{x})a_z), \tag{117}$$
$$I(n_z n_y n_y|\mathbf{x}) \propto (q_z(\mathbf{x})a_z), \tag{118}$$
$$I(n_z n_z n_x|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x), \tag{119}$$
$$I(n_z n_z n_y|\mathbf{x}) \propto (q_\perp(\mathbf{x})a_x), \tag{120}$$
$$I(n_z n_z n_z|\mathbf{x}) \propto (q_z(\mathbf{x})a_z). \tag{121}$$

## Список литературы


[1] D.S. James, C.J. Brereton, D.E. Davies, M.G. Jones, P.J. Campagnola. J. Biomed. Opt., **26** (6), 066501 (2021). DOI: 10.1117/1.JBO.26.6.066501

[2] S. Jen, H. Dai, G. Gonella. J. Phys. Chem. C, **114** (10), 4302 (2010). DOI: 10.1021/jp910144c

[3] J.I. Dadap, K.B. Eisenthal. J. Phys. Chem. B, **118** (49), 14366 (2014). DOI: 10.1021/jp507834s

[4] S. Viarbitskaya, V. Kapshai, P. van der Meulen, T. Hansson. Phys. Rev. A, **81** (5), 053850 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevA.81.053850

[5] В.Н. Капшай, А.А. Шамына. Опт. и спектр., **123** (3), 416 (2017). DOI: 10.7868/S003040341709015X [V.N. Kapshai, A.A. Shamyna. Opt. Spectrosc., **123** (3), 440 (2017). DOI: 10.1134/S0030400X17090144].

[6] A.G.F. de Beer, S. Roke, J.I. Dadap. J. Opt. Soc. Am. B, **28** (6), 1374 (2011). DOI: 10.1364/JOSAB.28.001374

[7] J.I. Dadap. Phys. Rev. B, **78** (20), 205322 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevB.78.205322

[8] А.А. Шамына, В.Н. Капшай. Опт. и спектр., **126** (6), 724 (2019). DOI: 10.21883/OS.2022.07.52725.3228-22 [A.A. Shamyna, V.N. Kapshai. Opt. Spectrosc., **126** (6), 645 (2019). DOI: 10.1134/S0030400X19060225].

[9] В.Н. Капшай, А.А. Шамына. Опт. и спектр., **126** (6), 732 (2019). DOI: 10.21883/OS.2022.07.52725.3228-22 [V.N. Kapshai, A.A. Shamyna. Opt. Spectrosc., **126** (6), 653 (2019). DOI: 10.1134/S0030400X19060134].
[10] А.А. Шамына, В.Н. Капшай. Опт. и спектр., **126** (6), 740 (2019). DOI: 10.21883/OS.2022.07.52725.3228-22 [A.A. Shamyna, V.N. Kapshai. Opt. Spectrosc., **126** (6), 661 (2019). DOI: 10.1134/S0030400X19060237].
[11] S. Ding, Z. Luo, Y. Xie, G. Pan, Y. Qiu, K. Chen, L. Zhou, J. Wang, H. Lin, Q. Wang. Nanoscale, **10** (124), 124 (2018). DOI: 10.1039/c7nr06293a
[12] G.M. Mangalgiri, P. Manley, W. Riedel, M. Schmid. Scientific Rep., **7**, 4311 (2017). DOI: 10.1038/s41598-017-03721-w
[13] J.I. Dadap, J. Shan, T. Heinz. J. Opt. Soc. Am. B, **21** (7), 1328 (2004). DOI: 10.1364/JOSAB.21.001328
[14] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. *Высшие трансцендентные функции. Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены* (Наука, Москва, 1966), с. 18.
[15] В.Н. Капшай, А.А. Шамына. Опт. и спектр., **124** (6), 795 (2018). DOI: 10.21883/OS.2022.07.52725.3228-22 [V.N. Kapshai, A.A. Shamyna. Opt. Spectrosc., **124** (6), 826 (2018). DOI: 10.1134/S0030400X18060115].
[16] А.А. Шамына, В.Н. Капшай. Опт. и спектр., **124** (1), 105 (2018). DOI: 10.21883/OS.2022.07.52725.3228-22 [A.A. Shamyna, V.N. Kapshai. Opt. Spectrosc., **124** (1), 103 (2018). DOI: 10.1134/S0030400X18010198].