03

Расчет оптических свойств двухслойных сфероидов с несофокусными границами оболочки

© В.Г. Фарафонов¹, В.Б. Ильин^{1,2,3,¶}, С.И. Лазневой², Д.Г. Туричина³

 ¹ Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, Россия
 ² Санкт-Петербургский государственный университет,

Санкт-Петербург, Россия

³ Главная (Пулковская) астрономическая обсерватория РАН,

Санкт-Петербург, Россия

¶e-mail: v.b.ilin@spbu.ru

Поступила в редакцию 14.05.2024 г. В окончательной редакции 26.06.2024 г. Принята к публикации 26.06.2024 г.

> Получено точное решение проблемы рассеяния света сфероидальной частицей с несофокусными границами слоев. Приведен алгоритм решения, который включил основные достижения теории, полученные в последние годы. Используя недавно созданные van Buren процедуры вычисления сфероидальных функций, написана программа, реализующая предложенный алгоритм в случае двухслойных сфероидов. Исследована сходимость и точность решения для сфероидальных частиц с ядрами четырех видов: софокусных оболочке, подобных ей, наиболее шарообразных и наиболее вытянутых/сплюснутых при заданных форме частицы и отношении объемов ядра и оболочки. Рассмотрены данные расчетов сечений двухслойных сфероидов указанных видов при больших значениях дифракционного параметра (до $x_a = 2\pi a/\lambda = 120$). Проведено сравнение подобных численных результатов для слоистых сфероидов с предсказаниями приближенной теории аномальной дифракции. Приведены также результаты вычислений элементов матрицы рассеяния, показывающие, что обычно рассматриваемые слоистые сфероиды с софокусными границами слоев хорошо описывают оптические свойства лишь частиц с близкими по форме ядром и оболочкой.

> Ключевые слова: рассеяние света, *Т*-матрица, сфероидальные слоистые рассеиватели, оптические свойства рассеивателей.

DOI: 10.61011/OS.2024.06.58639.6665-24

Введение

Рассеяние света слоистыми сфероидальными частицами представляет большой интерес для исследования многих практических вопросов, связанных с неоднородностью как отдельных рассеивателей, так и элементов дискретных сред [1–4]. До сих пор рассматривались, как правило, слоистые сфероиды с софокусными границами слоев, т.е. с границами, являющимися координатными поверхностями в единой сфероидальной системе координат. Отказ от этого ограничения является принципиальным моментом, позволяющим рассматривать частицы существенно различной структуры — от сфероидальных частиц с сильно вытянутыми/сплюснутыми ядрами до частиц с почти сферическими ядрами.

Проблема рассеяния света слоистыми осесимметричными частицами, в частности сфероидами, имеет достаточно широкий набор сравнительно простых и часто очень полезных приближенных решений [5,6]. Более точно проблема может быть решена разнообразными численными методами [7]. Эти методы имеют свои достоинства и недостатки — обычно более универсальные решения являются существенно более затратными. В частности, численные методы, основанные на разложении полей по базисным функциям, дают сравнительно более точные и быстрые решения, применимые обычно в более широкой области значений параметров задачи, но, разумеется, только для ограниченного класса рассеивающих частиц [8,9]. В таких методах важным моментом является выбор подходящего базиса.

В общем случае для частиц произвольной формы применяется сферический базис, т.е. поля записываются в виде разложений по волновым сферическим функциям, используемым в теории Ми для шаров. Затем, применяя метод расширенных граничных условий (extended boundary condition method, EBCM), система интегральных уравнений сводится к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений (БСЛАУ) для неизвестных коэффициентов разложения рассеянного поля. За относительную простоту используемых сферических функций приходится расплачиваться сравнительно узкой областью применимости подхода, а именно форма частиц должна не очень сильно отклоняться от сферической [10]. Например, для слоистых сфероидов отношение полуосей оболочек, следующих за произвольным ядром, ограничено – $a_i/b_i < \sqrt{2} + 1$ [11], хотя для однородных сфероидов (и соответственно ядер многослойных сфероидов) метод ЕВСМ со сферическим базисом применим при любом отношении полуосей частицы a/b [12]. Эти результаты, полученные аналитически, были подтверждены результатами специальных вычислений, выполненных для малых частиц в приближении Релея [11,12]. В случае рассеяния света данные выводы также полностью согласуются с результатами численных расчетов [10,14].

Более полный учет геометрии задачи предполагает использование соответствующих сфероидальных базисов, т.е. для разложения полей следует применять сфероидальные волновые функции. До последнего времени в основном рассматривалось рассеяние света софокусными слоистыми сфероидами [15-18]. Различия в этих работах состоят либо в выборе векторных волновых сфероидальных гармоник (скалярных потенциалов), либо в выборе метода решения (по существу, в способе перехода от одного слоя к другому). Отметим, что для слоистых софокусных сфероидов использованные метод ЕВСМ и метод разделения переменных (separation of variables method, SVM) с теоретической точки зрения являются эквивалентными [19], так как задача решается в едином сфероидальном базисе, но с точки зрения численной реализации эти методы имеют некоторые различия. В целом, результаты численного моделирования показали, что наиболее эффективным для таких сфероидов является алгоритм, предложенный в работе [18]. Он одинаково пригоден как для частиц, близких по форме к шарам, так и для иглообразных и дискообразных сфероидов, при этом нет принципиального ограничения на количество слоев.

Для несофокусных сфероидов адекватный учет геометрии задачи предполагает использование в каждом слое разных разложений полей из-за различия сфероидальных систем, связанных с границами слоя. Далее нужно удовлетворять граничным условиям либо в дифференциальной, либо в интегральной форме в рамках методов SVM или EBCM соответственно с последующей сшивкой разных разложений одних и тех же полей. До численной реализации подобное решение задачи было доведено только в работе [20]. В ней было проведено обобщение решения Ми для многослойного шара на несофокусные слоистые сфероиды, но при этом использовались стандартные векторные волновые сфероидальные гармоники. Полученная БСЛАУ для определения неизвестных коэффициентов разложений рассеянного поля представляется довольно громоздкой, тем не менее были получены некоторые численные результаты для двухслойных несофокусных сфероидов.

Идея нового подхода к точному решению проблемы рассеяния света слоистым сфероидом с несофокусными границами слоев при использовании сфероидальных базисов была высказана и разработана в [21]. Однако из-за ошибки в уравнениях никаких расчетов в [21] представлено не было, и даже было неясно, работает ли и насколько хорошо такой подход. В настоящей работе, кроме получения правильных уравнений, алгоритм



Рис. 1. Разрез двухслойной сфероидальной частицы с принятыми обозначениями.

изменен в свете последних улучшений подобных подходов: использована новая нормировка сфероидальных функций, исключена из рассмотрения сложная ТЕ-мода, сделан переход к *T*-матрице и т.д. [22]. Также приведены результаты первых численных расчетов, которые позволяют понять сходимость и точность подхода, возможности его применения к частицам с дифракционными параметрами практически из области геометрической оптики, а также показывают некоторые выявленные особенности рассеяния света несофокусными двухслойными сфероидами.

1. Основные соотношения

1.1. Постановка задачи

Рассмотрим двухслойную частицу, у которой внешняя (S_1) и внутренняя (S_2) границы оболочки являются концентрическими соосными (с единой осью симметрии) сфероидами с полуосями a_1, b_1 и a_2, b_2 соответственно (рис. 1). Поверхности S_i могут быть сплюснутыми (параметр $f_i = -1$) и вытянутыми ($f_i = 1$), где номер поверхности i = 1, 2. Важный частный случай — софокусные границы оболочки, когда тип сфероидальных поверхностей одинаков и равны межфокусные расстояния $d_i = 2\sqrt{a_i^2 + b_i^2}$ (i = 1, 2).

Пусть плоская волна падает на частицу под углом α к ее оси симметрии. Диэлектрическая проницаемость и магнитная восприимчивость сред вне частицы, в ее

оболочке и ядре однородны и равны $\varepsilon_0, \mu_0, \varepsilon_1, \mu_1$ и ε_2, μ_2 . Волновое число в этих средах — $k_j = \tilde{k}_0 \tilde{m}_j$, где $\tilde{k}_0 = 2\pi/\lambda$ — волновое число в вакууме, $\tilde{m}_j = \sqrt{\varepsilon_j \mu_j}$ — показатель преломления, номер слоя j = 0, 1, 2.

Системы координат связаны с частицей следующим образом. Декартовы координаты (x, y, z) выбраны так, что ось z совпадает с осью симметрии частицы, а ось x лежит в плоскости, включающей ось симметрии и волновой вектор **k**. Сферические координаты (r, θ, φ) привязаны к декартовым как обычно (см. ниже соотношения (1)–(3)). Для поверхности частицы S_1 и границы ядра S_2 стандартным образом введены свои сфероидальные координаты (ξ_i, η_i, φ) , где i = 1, 2, так что $x = r \sin \theta \cos \varphi$

$$= d_i / 2 \, (\xi_i^2 - f_i)^{1/2} \, (1 - \eta_i^2)^{1/2} \, \cos \varphi, \qquad (1)$$
$$y = r \sin \theta \, \sin \varphi$$

$$-d/2(\epsilon^2 - \epsilon)^{1/2}(1 - m^2)^{1/2}$$

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

$$z = r \cos \theta = d_i / 2 \,\xi_i \,\eta_i \tag{3}$$

и S_i является координатной поверхностью (с уравнением $\xi_i = \xi_{i,0} = \text{const}$ в связанной с ней системе). В частном случае двухслойных софокусных сфероидов достаточно одной сфероидальной системы, поскольку $d_1 = d_2$.

Как обычно, будем рассматривать гармонические поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$, где ω – частота, \mathbf{r} – радиус-вектор [1]. Будем делить все поля на две части, например

$$\mathbf{E}^{(j)} = \mathbf{E}_{\mathbf{A}}^{(j)} + \mathbf{E}_{\mathbf{B}}^{(j)},\tag{4}$$

где поле $\mathbf{E}_{A}^{(j)}$ регулярно в начале координат, а $\mathbf{E}_{B}^{(j)}$ удовлетворяет условию излучения на бесконечности, j = 0, 1, 2. Тогда неизвестное поле рассеянного излучения есть $\mathbf{E}^{sca} = \mathbf{E}_{B}^{(0)}$, а падающая волна $\mathbf{E}^{in} = \mathbf{E}_{A}^{(0)}$. Поле в ядре частицы, очевидно, регулярно, $\mathbf{E}_{B}^{(2)} = 0$. Как известно, достаточно рассмотреть два случая падающей плоской волны, когда электрический вектор перпендикулярен (transverse electric или TE-мода) и параллелен (transverse magnetic или TM-мода) плоскости, включающей волновой вектор **k** и ось симметрии частицы *z* [23].

1.2. Метод решения

Ниже будем в основном следовать работе [21], отмечая наиболее важные различия с ней. В частности, в [21] дополнительно выделялась осесимметричная часть полей, что имеет ряд достоинств [24]. Однако, следуя [25], мы этого делать не будем для более удобного перехода к стандартной *T*-матрице.

Поле рассеянного излучения (и, следовательно, все оптические характеристики сфероида) можно найти разными способами, включая несколько точных методов, основанных на разложении полей по сфероидальному базису. Мы используем метод EBCM [2]. Другим способом мог бы быть метод SVM [2], но для слоистых рассеивателей предпочтительнее EBCM, поскольку в сравнении с SVM он более удобным образом учитывает граничные условия и дает систему уравнений для нахождения рассеянного поля [21].

В методе EBCM уравнения Максвелла и граничные условия сводятся к следующим уравнениям на каждой границе сред $(S_i, i = 1, 2)$ [9]:

$$\nabla \times \int_{S_i} \mathbf{n}_i \times \mathbf{E}^{(i)}(\mathbf{r}') G^{(i-1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds'$$

$$- \frac{1}{i\tilde{k}_0 \varepsilon_{i-1}} \nabla \times \nabla \times \int_{S_i} \mathbf{n}_i \times \mathbf{H}^{(i)}(\mathbf{r}') G^{(i-1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds'$$

$$= \begin{cases} -\mathbf{E}_{\mathbf{A}}^{(i-1)}(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in D_i, \\ \mathbf{E}_{\mathbf{B}}^{(i-1)}(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \bar{D}_i, \end{cases}$$
(5)

 D_i \bar{D}_i где область внутри S_i , замыкание D_i (включает границу области), $G^{(i)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \exp(ik_i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)/(4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ функция Уравнения (5) получены при Грина. помощи Стреттона-Чу. Например, интегральных тождеств при индексе *i* = 1 данные тождества записываются для полей падающего и рассеянного излучения $\mathbf{E}_{\rm A}^{(0)}$ и $\mathbf{E}_{\rm B}^{(0)}$, поэтому используется функция Грина, равная $G^{(0)}$ с диэлектрической проницаемостью среды вне частицы ε₀. Складывая данные соотношения и учитывая граничные условия на поверхности частицы, например $\mathbf{n}_0 \times (\mathbf{E}_A^{(0)} + \mathbf{E}_B^{(0)}) = \mathbf{n}_0 \times \mathbf{E}^{(1)}$, получаются приведенные уравнения. Если i = 2, то аналогично нужно рассмотреть интегральные соотношения для ядра.

Все поля и функции Грина раскладываются в ряды по некоторому базису, и после подстановки разложений в уравнения (5) и стандартных преобразований получается БСЛАУ относительно коэффициентов разложения рассеянного (и, если необходимо, внутреннего) поля [9]. Решение системы позволяет рассчитать любые оптические характеристики сфероида.

Будем использовать специфический сфероидальный базис, являющийся предпочтительным для сфероидальных частиц [24]. Для неосесимметричных частей полей в [21] в каждой области частицы по сути применялись разложения вида (например, для ТМ-моды)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} \left(a_{\nu} \, \mathbf{N}_{\nu}^{\mathbf{z}}(\mathbf{r}) + b_{\nu} \, \mathbf{N}_{\nu}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \right). \tag{6}$$

Здесь использованы решения векторного уравнения Гельмгольца

$$\mathbf{N}_{\nu}^{\mathbf{s}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{k} \nabla \times \nabla \times (\psi_{\nu}(\mathbf{r}) \, \mathbf{s}), \tag{7}$$

где s — координатный орт i_z и радиус-вектор r для N_{ν}^z и N_{ν}^r соответственно, k – волновое число. Решение

скалярного уравнения Гельмгольца в сфероидальных координатах выбрано нами в виде [26]

$$\bar{\psi}_{\nu}^{(q)}(\xi,\eta,\varphi,c) = R_{mn}^{(q)}(c,\xi) \,\bar{S}_{mn}(c,\eta) \,F_{\sigma,m}(\varphi). \tag{8}$$

При этом $v = \{\sigma, m, n\},$ где m = 0, 1, ...,n=m,m+1,...,а $\sigma=e$ и о, когда $F_{\sigma,m}(arphi)= ilde{c}_m\cos marphi$ и $\tilde{c}_m \sin m \varphi$ соответственно, $\tilde{c}_m = \sqrt{(2 - \delta_{m,0})/2\pi}$, где $\delta_{m,0}$ – дельта-символ Кронекера. $R^{(q)}_{mn}(c,\xi)$ – сфероидальные радиальные функции q-го рода (q = 1, 3). Параметр *c* равен kd/2 и -ikd/2 для вытянутых и сплюснутых сфероидальных координат соответственно, *d* – межфокусное расстояние, k – волновое число в среде. Обозначение $ar{\psi}^{(q)}_{
u}$ (с чертой сверху) здесь и ниже указывает на использование нормированных угловых функций $\bar{S}_{mn}(c,\eta) = S_{mn}(c,\eta)/N_{mn}(c),$ где $S_{mn}(c,\eta)$ сфероидальные угловые функции, $N_{mn}(c)$ нормирующий множитель. Данные функции могут быть определены либо по Фламмеру $S_{mn}^{\rm F}(c,\eta)$ [27], либо по Майкснеру–Шэфке $S_{mn}^{MS}(c, \eta)$ [28], при этом для нормированных функций имеем

$$\int_{-1}^{1} |\bar{S}_{mn}^{\rm F}(c,\eta)|^2 \, d\eta = \int_{-1}^{1} |\bar{S}_{mn}^{\rm MS}(c,\eta)|^2 \, d\eta = 1, \qquad (9)$$

т.е. $\bar{S}_{mn}^{\text{F}}(c, \eta) = \bar{S}_{mn}^{\text{MS}}(c, \eta)$. Учитывая, что нормирующие множители при первом определении равны $N_{mn}(c)$, а при втором – $N_{mn}(0)$, непосредственно для самих функций получаем

$$S_{mn}^{\rm F}(c,\eta)/N_{mn}(c) = S_{mn}^{\rm MS}(c,\eta)/N_{mn}(0).$$
 (10)

Обычно для теоретического и численного анализа сфероидальных угловых функций используется их разложение по присоединенным функциям Лежандра:

$$\frac{S_{mn}^{\rm F}(c,\eta)}{S_{mn}^{\rm MS}(c,\eta)} = \sum_{r=0,1}^{\infty} \frac{d_r^{mn}(c)}{d_r(c|mn)} P_{m+r}^m(\eta).$$
(11)

Принимая во внимание соотношение (10), из уравнения (11) находим

$$\bar{d}_r^{mn}(c) = d_r^{mn}(c)/N_{mn}(c) = d_r(c|mn)/N_{mn}(0) = \bar{d}_r(c|mn).$$
(12)

Данный результат является очень важным для численных расчетов в рассматриваемой задаче рассеяния. В использованных ранее алгоритмах ее решения возникающие интегралы от произведений сфероидальных угловых функций и их производных представлялись в виде рядов, включающих коэффициенты $d_r^{mn}(c)$. Формулы (12) позволяют решать задачу, применяя более выгодное с вычислительной точки зрения представление угловых сфероидальных функций $S_{mn}^{\rm MS}(c, \eta)$, когда значения функции умеренные [29]. Добавим, что в отличие от [21] мы используем нормированные угловые функции, поскольку



Рис. 2. Обозначение параметра *с* и векторов коэффициентов разложения в разных областях двухслойной частицы.

это дает дополнительные преимущества — удается избежать нежелательного большого различия коэффициентов разложения угловых сфероидальных функций по сферическим [30].

Представление полей (6) эквивалентно разложению скалярных потенциалов U, V, если ввести их соответствующим образом, а именно:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{i\varepsilon\tilde{k}_0}\nabla\times\nabla\times\left(U\,\mathbf{i}_z + V\,\mathbf{r}\right),$$
$$\mathbf{H} = \nabla\times\left(U\,\mathbf{i}_z + V\,\mathbf{r}\right). \tag{13}$$

При разложении потенциалов U, V мы учитываем, что с каждой границей сред S_i (i = 1, 2) связана своя сфероидальная система (ξ_i, η_i, φ) , а параметр c, входящий в базисные функции (8), зависит от параметров среды. На рис. 2 показаны обозначения параметра c, при которых аббревиатуры ехt и int соответствуют внешней и внутренней областям координатной поверхности S_i (i = 1, 2).

С учетом введенных обозначений разложения потенциалов *U*, *V* можно записать следующим образом: для падающего излучения

для рассеянного излучения

для излучения внутри оболочки (в системе координат, связанной с S_1)

$$\frac{U_{\rm A}^{(1)}}{V_{\rm A}^{(1)}} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} \frac{a_{\rm A,mn}^{(1),\rm int}}{b_{\rm A,mn}^{(1),\rm int}} R_{mn}^{(1)}(c_1^{\rm int},\xi_1) \bar{S}_{mn}(c_1^{\rm int},\eta_1) F_{\sigma,m}(\varphi),$$
(16)

для излучения внутри оболочки (в системе координат, связанной с S_2)

$$\frac{U_{\rm A}^{(1)}}{V_{\rm A}^{(1)}} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} \frac{a_{{\rm A},mn}^{(1),\text{ext}}}{b_{{\rm A},mn}^{(1),\text{ext}}} R_{mn}^{(1)}(c_2^{\text{ext}},\xi_2) \bar{S}_{mn}(c_2^{\text{ext}},\eta_2) F_{\sigma,m}(\varphi),$$
(18)

$$\frac{U_{\rm B}^{(1)}}{V_{\rm B}^{(1)}} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} \frac{a_{{\rm B},mn}^{(1),{\rm ext}}}{b_{{\rm B},mn}^{(1),{\rm ext}}} R_{mn}^{(3)}(c_2^{{\rm ext}},\xi_2) \bar{S}_{mn}(c_2^{{\rm ext}},\eta_2) F_{\sigma,m}(\varphi);$$

(19)

для излучения внутри ядра

$$\begin{array}{l}
U_{\rm A}^{(2)} \\
V_{\rm A}^{(2)} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} \begin{array}{c} a_{{\rm A},mn}^{(2),\rm int} \\
b_{{\rm A},mn}^{(2),\rm int} \end{array} R_{mn}^{(1)}(c_2^{\rm int},\xi_2) \, \bar{S}_{mn}(c_2^{\rm int},\eta_2) \, F_{\sigma,m}(\varphi).
\end{array}$$
(20)

Для рассматриваемого нами случая плоской волны, падающей под углом α к оси *z*, коэффициенты разложения (14) известны. В частности, для ТМ-моды они равны

$$a_{A,mn}^{(0),\text{ext}} = -\frac{4i^n}{k_0} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \frac{\bar{S}_{mn}(c_1^{\text{ext}}, \cos \alpha)}{\sin \alpha}, \qquad b_{A,mn}^{(0),\text{ext}} = 0, \quad (21)$$

где, например, для вытянутой частицы $c_1^{\text{ext}} = k_0 d_1/2$. В отличие от [21] мы будем рассматривать только ТМмоду, поскольку, как показано в [31], решение задачи для более сложной ТЕ-моды легко следует из решения для ТМ-моды.

1.3. Определение коэффициентов разложения полей

Подстановка разложений потенциалов и функции Грина с учетом (13) в уравнения (5) для каждой границы (*i* = 1, 2) дает после стандартных преобразований систему линейных уравнений для каждого азимутального числа *m* [21]:

$$\begin{pmatrix} -A_{31,m}^{(i)} & -A_{33,m}^{(i)} \\ A_{11,m}^{(i)} & A_{13,m}^{(i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{A,m}^{(i),\text{int}} \\ \mathbf{Z}_{B,m}^{(i),\text{int}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{A,m}^{(i-1),\text{ext}} \\ \mathbf{Z}_{B,m}^{(i-1),\text{ext}} \end{pmatrix},$$
(22)

где введены векторы коэффициентов разложений, которые равны (i = 1, 2; X = A, B)

$$\mathbf{Z}_{X,m}^{(i),\text{int}} = \left(\mathbf{x}_{X,m}^{(i),\text{int}}, \mathbf{y}_{X,m}^{(i),\text{int}}\right)^{T},$$
$$\mathbf{Z}_{X,m}^{(i-1),\text{ext}} = \left(\mathbf{x}_{X,m}^{(i-1),\text{ext}}, \mathbf{y}_{X,m}^{(i-1),\text{ext}}\right)^{T}$$
(23)

со следующими компонентами:

$$\begin{aligned} x_{\mathrm{X},mn}^{(i),\mathrm{int}} &= k_0 \, a_{\mathrm{X},mn}^{(i),\mathrm{int}} R_{mn}^{(q)}(c_i^{\mathrm{int}},\,\xi_{i,0}), \\ x_{\mathrm{X},mn}^{(i-1),\mathrm{ext}} &= k_0 \, a_{\mathrm{X},mn}^{(i-1),\mathrm{ext}} R_{mn}^{(q)}(c_i^{\mathrm{ext}},\,\xi_{i,0}), \end{aligned}$$
(24)

$$y_{X,mn}^{(i),\text{int}} = k_0 \frac{d_i}{2} b_{X,mn}^{(i),\text{int}} R_{mn}^{(q)}(c_i^{\text{int}}, \xi_{i,0}),$$

$$y_{X,mn}^{(i-1),\text{ext}} = k_0 \frac{d_i}{2} b_{X,mn}^{(i-1),\text{ext}} R_{mn}^{(q)}(c_i^{\text{ext}}, \xi_{i,0}).$$
(25)

Отметим, что параметры c_i^{int} , c_i^{ext} соответствуют рис. 2. Поскольку векторы $\mathbf{Z}_{\mathbf{X},m}^{(j),\mathrm{Y}}$ в формулах (22), (23) состоят из двух частей, то и матрицы $A_{ik,m}^{(i)}$ имеют блочную структуру:

$$\mathbf{A}_{lk,m}^{(i)} = \begin{pmatrix} \alpha_{lk,m,1}^{(i)} & \beta_{lk,m,1}^{(i)} \\ \alpha_{lk,m,2}^{(i)} & \beta_{lk,m,2}^{(i)} \end{pmatrix},$$
(26)

где элементы блоков $\alpha_{lk,m,s}^{(i)}, \beta_{ik,m,s}^{(i)}$ (s=1,2) являются комбинациями сфероидальных радиальных функций и интегралов от сфероидальных угловых функций и их производных. В частности, для ТМ-моды блоки в первом столбце $A_{31}^{(i)}$ определяются следующим образом (i = 1, 2):

$$\alpha_{31,m,1}^{(i)} = W_{i-1}^{(m)} \tilde{\alpha}_{31,m,1}^{(i)} = W_{i-1}^{(m)} \left\{ R_{3,i-1}^{(m)} \Delta_{i-1,i}^{(m)} - \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_i} \Delta_{i-1,i}^{(m)} \tilde{R}_{1,i}^{(m)} + \left(\frac{\mu_i}{\mu_{i-1}} - 1 \right) \xi_{i,0} \right. \\
\times \left[\xi_{i,0} R_{3,i-1}^{(m)} Q_{i-1,i}^{(m)} - Q_{i-1,i}^{(m)} \left(I - 2 \xi_{i,0}^2 Q_{i,i}^{(m)} \right) \right] \\
+ \left(- \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_i} - 1 \right) \xi_{i,0}^2 Q_{i-1,i}^{(m)} \tilde{R}_{1,i}^{(m)} \\
- \left(\frac{\mu_i}{\mu_{i-1}} - \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_i} \right) \frac{f_i - \xi_{i,0}}{(\xi_{i,0}^2 - f_i)} Q_{i-1,i}^{(m)} E_{i,i}^{(m)} \right\},$$
(27)

$$\begin{aligned} \beta_{31,m,1}^{(i)} &= W_{i-1}^{(m)} \tilde{\beta}_{31,m,1}^{(i)} W_{i-1}^{(m)} \left\{ \left(\frac{\mu_i}{\mu_{i-1}} - 1 \right) f_i \, \xi_{i,0} \right. \\ &\times \left[R_{3,i-1}^{(m)} \, \mathcal{Q}_{i-1,i}^{(m)} + 2 \, \xi_{i,0} \, \mathcal{Q}_{i-1,i}^{(m)} \, \mathcal{Q}_{i,i}^{(m)} \right] \Gamma_{i,i}^{(m)} \\ &+ \left(\frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_i} - 1 \right) f_i \, \xi_{i,0} \, \mathcal{Q}_{i-1,i}^{(m)} \, \Gamma_{i,i}^{(m)} \, \tilde{R}_{1,i}^{(m)} - \left(\frac{\mu_i}{\mu_{i-1}} - \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_i} \right) \\ &\times \frac{f_i}{\xi_{i,0}^2 - f_i} \left[\left(\xi_{i,0}^2 \, \mathcal{Q}_{i-1,i}^{(m)} - \Delta_{i-1,i}^{(m)} \right) K_{i,i}^{(m)} + \Gamma_{i-1,i}^{(m)} \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$(28)$$

где матрицы R, W и Q определены ниже соотношениями (36)–(40), а матрица *I* является единичной. Матрицы

$$\Delta_{i-1,i}^{(m)} = \left\{ \delta_{nl}^{(m)}(c_i^{\text{ext}}, c_i^{\text{int}}) \right\}_{n,l=m}^{\infty},$$

$$\Gamma_{i-1,i}^{(m)} = \left\{ \gamma_{nl}^{(m)}(c_i^{\text{ext}}, c_i^{\text{int}}) \right\}_{n,l=m}^{\infty},$$

$$\Gamma_{i,i}^{(m)} = \left\{ \gamma_{nl}^{(m)}(c_i^{\text{int}}, c_i^{\text{int}}) \right\}_{n,l=m}^{\infty},$$

$$K_{i,i}^{(m)} = \left\{ \kappa_{nl}^{(m)}(c_i^{\text{int}}, c_i^{\text{int}}) \right\}_{n,l=m}^{\infty},$$

$$E_{i,i}^{(m)} = \left\{ \varepsilon_{nl}^{(m)}(c_i^{\text{int}}, c_i^{\text{int}}) \right\}_{n,l=m}^{\infty},$$
(30)

Оптика и спектроскопия, 2024, том 132, вып. 6

625

включают следующие интегралы от нормированных сфероидальных угловых функций и их производных для аргументов $c_1 = c_i^{\text{ext}}$ или c_i^{int} и $c_2 = c_i^{\text{int}}$:

$$\delta_{nl}^{(m)}(c_1, c_2) = \int_{-1}^{1} \bar{S}_{mn}(c_1, \eta_i) \,\bar{S}_{ml}(c_2, \eta_i) \,d\eta_i, \qquad (31)$$

$$\gamma_{nl}^{(m)}(c_1, c_2) = \int_{-1}^{1} \bar{S}_{mn}(c_1, \eta_i) \,\bar{S}_{ml}(c_2, \eta_i) \,\eta_i \,d\eta_i, \quad (32)$$

$$\kappa_{nl}^{(m)}(c_1, c_2) = \int_{-1}^{1} \bar{S}'_{mn}(c_1, \eta_i) \,\bar{S}_{ml}(c_2, \eta_i) \,(1 - \eta_i^2) \,d\eta_i,$$
(33)

$$\varepsilon_{nl}^{(m)}(c_1, c_2) = \int_{-1}^{1} \bar{S}'_{mn}(c_1, \eta_i) \,\bar{S}_{ml}(c_2, \eta_i) \,(1 - \eta_i^2) \,\eta_i \,d\eta_i.$$
(34)

Заметим, что $\bar{S}_{mn}(c,\eta)$, $\eta \bar{S}'_{mn}(c,\eta)$ являются четными и нечетными функциями η , когда n-m четно и нечетно соответственно. Поэтому для любых c_1, c_2 интегралы $\delta_{nl}^{(m)}(c_1, c_2)$ и $\varepsilon_{nl}^{(m)}(c_1, c_2)$ равны нулю, когда n-l нечетно, а интегралы $\gamma_{nl}^{(m)}(c_1, c_2)$ и $\kappa_{nl}^{(m)}(c_1, c_2)$ равны нулю, когда n-l четно.

Интегралы (31)–(34) представляются в виде рядов, например

$$\delta_{nl}^{(m)}(c_1, c_2) = \sum_{k=0,1}^{\infty} \bar{d}_k(c_1|mn) \bar{d}_k(c_2|ml) \\ \times \frac{2}{2k+2m+1} \frac{(k+2m)!}{k!}, \qquad (35)$$

где штрих у знака суммы означает, что суммирование производится только по четным значениям k, если (n-m) четно, и наоборот (то же для (n-l)), что связано с упомянутыми свойствами четности сфероидальных угловых функций.

Сфероидальные радиальные функции постоянны в поверхностных ($\xi_i = \xi_{i,0}$) интегралах, которыми изначально являются элементы матриц $A_{lk}^{(i)}$, и поэтому эти функции присутствуют выше только в следующих диагональных матрицах:

$$R_{q,i-1}^{(m)} = \left\{ \frac{R_{ml}^{(q)\prime}(c_i^{\text{ext}}, \xi_{j,0})}{R_{ml}^{(q)}(c_i^{\text{ext}}, \xi_{j,0})} \,\delta_{nl} \right\}_{n,l=m}^{\infty},$$
$$\tilde{R}_{q,i}^{(m)} = \left\{ \frac{R_{ml}^{(q)\prime}(c_i^{\text{int}}, \xi_{i,0})}{R_{ml}^{(q)}(c_i^{\text{int}}, \xi_{i,0})} \,\delta_{nl} \right\}_{n,l=m}^{\infty},$$
(36)

$$\hat{R}_{q,i}^{(m)}(c,\xi) = \left\{ R_{ml}^{(q)}(c,\xi) \,\delta_{nl} \right\}_{n,l=m}^{\infty},\tag{37}$$

$$W_{i-1}^{(m)} = -\left[R_{3,i-1}^{(m)} - R_{1,i-1}^{(m)}\right]^{-1} \\ = \left\{ic_i^{\text{ext}}(\xi_{j,0}^2 - f_j)R_{ml}^{(1)}(c_i^{\text{ext}}, \xi_{i,0}) R_{ml}^{(3)}(c_i^{\text{ext}}, \xi_{i,0}) \delta_{nl}\right\},$$
(38)

где $R_{ml}^{(q)\prime}(c,\xi)$ – производная сфероидальной радиальной функции *q*-го рода.

Остальные матрицы в соотношениях (27), (28) равны

$$Q_{i-1,i}^{(m)} = Q^{(m)}(c_i^{\text{ext}}, c_i^{\text{int}})$$

= $\Delta_{i-1,i}^{(m)} Q^{(m)}(c_i^{\text{int}}, c_i^{\text{int}}) = \Delta_{i-1,i}^{(m)} Q_{i,i}^{(m)},$ (39)

$$Q_{i,i}^{(m)} = \left[\xi_{i,0}^2 I - f_i \left(\Gamma_{i,i}^{(m)}\right)^2\right]^{-1}.$$
 (40)

Таким образом, получаются два матричных уравнения:

$$\begin{pmatrix} -A_{31,m}^{(1)} & -A_{33,m}^{(1)} \\ A_{11,m}^{(1)} & A_{13,m}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{A,m}^{(1),\text{int}} \\ \mathbf{Z}_{B,m}^{(1),\text{int}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{A,m}^{(0),\text{ext}} \\ \mathbf{Z}_{B,m}^{(0),\text{ext}} \end{pmatrix}$$
(41)

И

$$\begin{pmatrix} -A_{31,m}^{(2)} & -A_{33,m}^{(2)} \\ A_{11,m}^{(2)} & A_{13,m}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{A,m}^{(2),\text{int}} \\ \mathbf{Z}_{B,m}^{(2),\text{int}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{A,m}^{(1),\text{ext}} \\ \mathbf{Z}_{B,m}^{(1),\text{ext}} \end{pmatrix}.$$
(42)

Видно, что не хватает уравнения, которое связывало бы векторы ($\mathbf{Z}_{A,m}^{(1),\text{int}}, \mathbf{Z}_{B,m}^{(1),\text{int}}$)^{*T*} и ($\mathbf{Z}_{A,m}^{(1),\text{ext}}, \mathbf{Z}_{B,m}^{(1),\text{ext}}$)^{*T*}, т.е. коэффициенты разложений потенциалов $U^{(1)}$ и $V^{(1)}$ в оболочке в системах координат, связанных с S_1 и S_2 .

Такая связь была найдена в работе [32]. В наших обозначениях она имеет вид (X = A, B)

$$\mathbf{a}_{X,m}^{(1),\text{int}} = \Pi_m^{(1)} \, \mathbf{a}_{X,m}^{(1),\text{ext}}, \quad \mathbf{b}_{X,m}^{(1),\text{int}} = \Pi_m^{(1)} \, \mathbf{b}_{X,m}^{(1),\text{ext}}, \tag{43}$$

где элементы матрицы $\Pi_m^{(1)} = \{\pi_{nl,m}^{(1)}\}$ имеют вид

$$\pi_{nl,m}^{(1)} = i^{n-l} \,\delta_{nl}^{(m)}(c_1^{\text{int}}, \, c_1^{\text{ext}}) = \sum_{s=m}^{\infty} i^{n-l} \,\bar{d}_{s-m}^{mn}(c_1^{\text{ext}}) \,\bar{d}_{s-m}^{ml}(c_1^{\text{int}}) \, N_{ms}^2(0).$$
(44)

Отсюда, учитывая замену переменных (24), (25), получаем

$$x_{\mathbf{X},mn}^{(1),\text{int}} = \left(\hat{R}_{q,1}(c_1^{\text{int}}, \xi_{1,0})\right) \Pi_m^{(1)} \left(\hat{R}_{q,1}(c_2^{\text{ext}}, \xi_{2,0})\right)^{-1} x_{\mathbf{X},mn}^{(1),\text{ext}}$$

$$= \mathbf{R}^{(1)} \mathbf{x}^{(1),\text{ext}} \tag{45}$$

$$= P_{q,m}^{(1)} x_{X,mn}^{(1)} , \qquad (45)$$
$$y_{X,mn}^{(1),\text{int}} = \left(\hat{R}_{q,1}(c_1^{\text{int}}, \xi_{1,0})\right) \Pi_m^{(1)} \left(\hat{R}_{q,1}(c_2^{\text{ext}}, \xi_{2,0})\right)^{-1} \frac{d_1}{d_2} y_{X,mn}^{(1),\text{ext}}$$

$$= P_{q,m}^{(1)} \frac{d_1}{d_2} y_{\mathbf{X},mn}^{(1),\text{ext}}.$$
(46)

Итак,

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{\mathrm{X},m}^{(1),\mathrm{int}} &= \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{\mathrm{X},m}^{(1),\mathrm{int}} \\ \mathbf{y}_{\mathrm{X},m}^{(1),\mathrm{int}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} P_{q,m}^{(1)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & P_{q,m}^{(1)} \frac{d_1}{d_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{\mathrm{X},m}^{(1),\mathrm{ext}} \\ \mathbf{y}_{\mathrm{X},m}^{(1),\mathrm{ext}} \end{pmatrix} = \mathbf{Z}_{\mathrm{X},m}^{(1),\mathrm{ext}}. \end{aligned}$$

$$(47)$$

Окончательно получаем матрицу, соединяющую векторы $\mathbf{Z}_{X,m}^{(1),\text{ext}}$ и $\mathbf{Z}_{X,m}^{(0),\text{ext}}$ в соотношении, аналогичном формуле (41),

$$\begin{pmatrix} -\tilde{A}_{31,m}^{(1)} & -\tilde{A}_{33,m}^{(1)} \\ \tilde{A}_{11,m}^{(1)} & \tilde{A}_{13,m}^{(1)} \end{pmatrix}.$$
 (48)

Блоки этой матрицы определяются соотношениями

$$\tilde{\alpha}_{ik,m,1}^{(1)} = \alpha_{ik,m,1}^{(1)} P_{q,m}^{(1)}, \quad \tilde{\beta}_{ik,m,1}^{(1)} = \beta_{ik,m,1}^{(1)} P_{q,m}^{(1)} \frac{d_1}{d_2}, \quad (49)$$

$$\tilde{\alpha}_{ik,m,2}^{(1)} = \alpha_{ik,m,2}^{(1)} P_{q,m}^{(1)}, \quad \tilde{\beta}_{ik,m,2}^{(1)} = \beta_{ik,m,2}^{(1)} P_{q,m}^{(1)} \frac{d_1}{d_2}.$$
 (50)

Объединяя все полученные уравнения, имеем

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{A,m}^{(0),\text{ext}} \\ \mathbf{Z}_{B,m}^{(0),\text{ext}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\tilde{A}_{31,m}^{(1)} & -\tilde{A}_{33,m}^{(1)} \\ \tilde{A}_{11,m}^{(1)} & \tilde{A}_{13,m}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -A_{31,m}^{(2)} \\ A_{11,m}^{(2)} \end{pmatrix} \mathbf{Z}_{A,m}^{(2),\text{int}},$$
(51)

где блоки матриц $A_{ik,m}^{(2)}$ не следует умножать на $P_{q,m}$, т.е. они вычисляются по формулам (27), (28).

В работе [21] решение задачи было верным до соотношения (46) и соответственно последующих. Ошибка была вызвана неправильной заменой переменных в соотношениях (25) при переходе от $b_{X,mn}^{(j),int}$ к $y_{X,mn}^{(j),int}$ для j = i и i - 1 (был пропущен множитель $d_i/2$). Однако данное выше решение отличается от приведенного в статье [21] многими важными улучшениями: а) здесь мы использовали нормированные угловые сфероидальные функции, что имеет ряд преимуществ при вычислениях; б) предполагая использование подпрограмм van Buren для вычисления сфероидальных функций, определенных согласно Meixner и Schäfke, мы отказались от определения этих функций согласно Flammer как в [21] (для нормированных сфероидальных функций меняются элементы матриц систем); в) в настоящей работе введены более понятные обозначения (особенно параметров (c_i) ; г) сделан переход к *Т*-матрицам, что удобно для некоторых массовых расчетов.

1.4. Т-матрица и сечения

Поскольку уравнения, лежащие в основе задачи, являются линейными, векторы коэффициентов разложения рассеянного и падающего излучения также связаны линейно так называемой *T*-матрицей (transition matrix). Как известно, в случае сфероидов *T*-матрица разбивается на не связанные между собой блоки для разных азимутальных индексов *m*, т.е.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_m^{\text{sca}} \\ \mathbf{b}_m^{\text{sca}} \end{pmatrix} = T_m \begin{pmatrix} \mathbf{a}_m^{\text{in}} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \qquad (52)$$

где для компактности записи введены обозначения $\mathbf{a}_{m}^{\text{sca}} = \mathbf{a}_{\text{B},m}^{(0),\text{ext}}, \mathbf{b}_{m}^{\text{sca}} = \mathbf{b}_{\text{B},m}^{(0),\text{ext}}, \mathbf{a}_{m}^{\text{in}} = \mathbf{a}_{\text{A},m}^{(0),\text{ext}}.$

Введем вспомогательную матрицу T_m , связывающую векторы коэффициентов разложения:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_{\mathrm{B},m}^{(0),\mathrm{ext}} \\ \mathbf{y}_{\mathrm{B},m}^{(0),\mathrm{ext}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{T}_{11,m} & \tilde{T}_{12,m} \\ \tilde{T}_{21,m} & \tilde{T}_{22,m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{\mathrm{A},m}^{(0),\mathrm{ext}} \\ \mathbf{y}_{\mathrm{A},m}^{(0),\mathrm{ext}} \end{pmatrix}, \quad (53)$$

где, согласно соотношению (51),

$$\tilde{T}_{m} = -\left(\tilde{A}_{31,m}^{(1)}A_{31,m}^{(2)} - \tilde{A}_{33,m}^{(1)}A_{11,m}^{(2)}\right)^{-1} \times \left(\tilde{A}_{11,m}^{(1)}A_{31,m}^{(2)} - \tilde{A}_{13,m}^{(1)}A_{11,m}^{(2)}\right).$$
(54)

Учитывая, что $\mathbf{y}_{\mathrm{A},m}^{(0),\mathrm{ext}} = \mathbf{0}$, имеем

$$\mathbf{x}_{\mathrm{B},m}^{(0),\mathrm{ext}} = \tilde{T}_{11,m} \, \mathbf{x}_{\mathrm{A},m}^{(0),\mathrm{ext}}, \quad \mathbf{y}_{\mathrm{B},m}^{(0),\mathrm{ext}} = \tilde{T}_{21,m} \, \mathbf{x}_{\mathrm{A},m}^{(0),\mathrm{ext}}.$$
 (55)

Окончательно для Т-матрицы получаем

$$T_{11,m} = \left(\hat{R}_{3,m}(c_1^{\text{int}}, \xi_{1,0})\right)^{-1} \tilde{T}_{11,m} \left(\hat{R}_{1,m}(c_1^{\text{int}}, \xi_{1,0})\right), \quad (56)$$

$$T_{21,m} = \left(c_1^{\text{int}} \hat{R}_{3,m}(c_1^{\text{int}}, \xi_{1,0})\right)^{-1} \tilde{T}_{21,m} \left(\hat{R}_{1,m}(c_1^{\text{int}}, \xi_{1,0})\right). \quad (57)$$

Блочная матрица $T = \{T_m\}_{m=0}^{\infty}$, полученная выше для сфероидального базиса, переводится в стандартную *T*-матрицу, связывающую коэффициенты разложения полей в определенном сферическом базисе согласно соотношениям, приведенным в [25]. Последняя *T*-матрица широко используется для ансамблей сфероидов, поскольку позволяет провести для них аналитическое усреднение сечений, например при хаотической ориентации частиц.

Для отдельной частицы *Т*-матрица обычно не играет особой роли и нужна для определения коэффициентов разложения неизвестного поля. Часто используемые сечения ослабления и рассеяния вычисляются по формулам

$$C_{\text{ext}} = \frac{4\pi}{k_0^2} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} i^{-(l-1)} \left(k_0 \, a_{ml}^{\text{sca}} \, S_{ml}(\cos \alpha) + i b_{ml}^{\text{sca}} \, \frac{dS_{ml}(\cos \alpha)}{d \cos \alpha} \right) \sin \alpha, \tag{58}$$

$$C_{\text{sca}} = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} i^{(n-l)} \bigg\{ k_0^2 a_{ml}^{\text{sca}} (a_{mn}^{\text{sca}})^* \omega_{ln}^{(m)} + ik_0 \bigg[b_{ml}^{\text{sca}} (a_{mn}^{\text{sca}})^* \kappa_{ln}^{(m)} - a_{ml}^{\text{sca}} (b_{mn}^{\text{sca}})^* \kappa_{nl}^{(m)} \bigg] + b_{ml}^{\text{sca}} (b_{mn}^{\text{sca}})^* \tau_{ln}^{(m)} \bigg\},$$
(59)

где звездочка означает комплексное сопряжение, $a_{ml}^{\rm sca}$ и $b_{ml}^{\rm sca}$ – компоненты векторов $\mathbf{a}_m^{\rm sca}$ и $\mathbf{b}_m^{\rm sca}$ соответственно, α – угол между волновым вектором и осью симметрии сфероида. Интеграл $\kappa_{ln}^{(m)}$ был определен выше, а остальные интегралы равны

$$\omega_{nl}^{(m)}(c_1, c_2) = \int_{-1}^{1} \bar{S}_{mn}(c_1, \eta_i) \,\bar{S}_{ml}(c_2, \eta_i) \,(1 - \eta_i^2) \,d\eta_i,$$
(60)

$$\tau_{nl}^{(m)}(c_1, c_2) = \int_{-1}^{1} \left[\bar{S}'_{mn}(c_1, \eta_i) \, \bar{S}'_{ml}(c_2, \eta_i) \, (1 - \eta_i^2) \right. \\ \left. + \frac{m}{(1 - \eta_i^2)} \bar{S}_{mn}(c_1, \eta_i) \, \bar{S}_{ml}(c_2, \eta_i) \right] d\eta_i$$
(61)

и также представляются в виде рядов [16].

2. Анализ результатов численных расчетов

Подход, изложенный в разд. 1, был реализован в виде компьютерной программы, написанной на языке Fortran 2008. При проведении численных расчетов были использованы подпрограммы для вычисления вытянутых и сплюснутых сфероидальных функций, разработанные в [29] и пригодные в широкой области изменения параметров задачи, в частности для дифракционного параметра $x_a = 2\pi a/\lambda \le 300$, где a – большая полуось сфероида. Для таких больших частиц часто можно использовать приближение геометрической оптики [25]. Для сравнительно небольших двухслойных сфероидов с софокусным ядром, имеющих дифракционный параметр $x_a \le 50$, оптические свойства рассматривались в работе [16].

2.1. Описание структуры частиц

В настоящей работе основное внимание уделяется анализу результатов численных расчетов сечений ослабления, рассеяния и поглощения для двухслойных сфероидальных частиц с разной внутренней структурой. Для того чтобы иметь возможность сравнения оптических свойств таких частиц, будут рассматриваться рассеиватели с одинаковыми внешними поверхностями, т.е. при фиксированных полуосях a_1 и b_1 . Кроме того, будем считать фиксированным отношение объемов всей частицы и ядра, например, $V_1/V_2 = 2$ (другими словами, объемы оболочки и ядра будут равны). В этом случае естественно использовать одинаковую нормировку сечений:

$$\bar{C} = C/\pi r_{\rm V}^2,\tag{62}$$

где C_{ext} и C_{sca} вычисляются по формулам (58), (59), а сечение поглощения равно разности $C_{\text{abs}} = C_{\text{ext}} - C_{\text{sca}}$. Радиус эквиобъемного шара r_{V} зависит от формы частицы: $r_{\text{V}} = (a \ b^2)^{1/3}$ и $r_{\text{V}} = (a^2 \ b)^{1/3}$ для вытянутого и сплюснутого сфероидов соответственно.

Ниже рассматривается четыре вида двухслойных рассеивателей, у которых ядра являются: софокусными, подобными, шарообразными и наиболее вытянутыми или сплюснутыми. В последних трех случаях фокусы внутренних сфероидов не совпадают с фокусами внешней сфероидальной оболочки. Отметим, что далее для удобства используются безразмерные линейные параметры частиц: $x_a = k_0 a$ и $x_b = k_0 b$, а также $x_V = k_0 r_V$. Если рассматривается двухслойный софокусный сфероид, то по известной координате поверхности частицы $\xi_{1,0}$ и отношению объемов ядра и частицы $k_V = V_2/V_1$ можно найти координату поверхности ядра, численно решая алгебраическое уравнение третьего порядка [16]. Для вытянутых сфероидов в соответствии с теоремой Банаха сходящуюся последовательность получим, используя обычный итерационный метод:

$$(\xi_{2,0})_{n+1} = \left[(\xi_{2,0})_n + k_V \left(\xi_{1,0}^3 - \xi_{1,0} \right) \right]^{1/3},$$
 (63)

где n = 0, 1, 2, ... и $(\xi_{2,0})_0 = \xi_{1,0}$.

Для сплюснутых сфероидов следует использовать метод Ньютона (т.е. метод касательных):

$$(\xi_{2,0})_{n+1} = \frac{2\left(\xi_{2,0}^3\right)_n + k_{\rm V}\left(\xi_{1,0}^3 + \xi_{1,0}\right)}{3\left(\xi_{2,0}^2\right)_n + 1},\tag{64}$$

где n = 0, 1, 2, ... и $(\xi_{2,0})_0 = 0$. При фиксированном ядре и отношении объемов можно найти координату поверхности частицы по формулам (63), (64) после замены $\xi_{2,0}$ на $\xi_{1,0}$, а $\xi_{1,0}$ на $\xi_{2,0}$ и k_V на k_V^{-1} .

Для сфероидов с подобными границами слоев связь между полуосями ядра и частицы можно записать следующим образом: $k_0 a_2 = k_0 a_1 \sqrt[3]{k_V}$, $k_0 b_2 = k_0 b_1 \sqrt[3]{k_V}$ как для вытянутых, так и для сплюснутых сфероидов.

Для сплюснутых частиц ядро по форме максимально близкое к шару получится, если малая полуось ядра будет близка к малой полуоси оболочки, например $k_0 b_2 = 0.99 k_0 b_1$. Большая полуось определяется из условия фиксированного объема $k_0 a_2 = k_V k_0 a_1 (k_0 b_1)^2 / (k_0 b_2)^2$. Для сплюснутых частиц для шарообразного ядра аналогично получим $k_0 b_2 = 0.99 k_0 b_1$ и $k_0 a_2 = k_V [(k_0 b_1 (k_0 a_1)^2 / k_0 b_2)^{1/2}$.

Для частиц четвертого вида наиболее вытянутое ядро определяем по формулам $k_0 a_2 = 0.99 k_0 a_1$ и $k_0 b_2 = k_V [k_0 a_1 (k_0 b_1)^2 / k_0 a_2]^{1/2}$. Для сплюснутых частиц аналогично получим для наиболее сплюснутого ядра $k_0 a_2 = 0.99 k_0 a_1$ и $k_0 b_2 = k_V k_0 b_1 (k_0 a_1)^2 / (k_0 a_2)^2$.

В табл. 1 и 2 приведены параметры рассматриваемых вытянутых и сплюснутых частиц, имеющих одинаковый максимальный линейный дифракционный параметр $x_{a_1} = k_0 a_1 = 40$, а также одинаковое отношение полуосей внешней поверхности $a_1/b_1 = 2$.

Заметим, что центральные сечения данных вытянутых и сплюснутых рассеивателей совпадают. Отличие состоит в том, что в первом случае для получения всей частицы сечения следует вращать вокруг большой оси, а во втором – вокруг малой оси внешнего эллипса.

2.2. Проверка достоверности численных расчетов

В рамках выбранного метода решения электромагнитные поля представляются в виде бесконечных рядов по выбранным сфероидальным базисам, которые в максимальной степени соответствуют геометрии задачи

Таблица 1. Параметры сфероидальных ядер двухслойных вытянутых сфероидальных частиц с фиксированной внешней поверхностью $(a_1/b_1 = 2, x_{a_1} = k_0a_1 = 40, x_{V_1} = 2^{1/3}k_0b_1 = 25.1984)$ и фиксированным объёмом ядра

Форма ядра	$x_{a_2} = k_0 a_2$	$x_{b_2} = k_0 b_2$	a_2/b_2	$x_{r_2} = k_0 r_{V2}$	$x_{d_2} = k_0 d_2 / 2$
Наиболее вытянутая	39.6	14.2134	2.7861	20	36.9613
Софокусная	37.5890	14.5920	2.5760	20	34.6410
Подобная	31.7480	15.8740	2	20	27.4946
Шарообразная	20.4061	19.8	1.0306	20	4.9365

Таблица 2. То же, что в табл. 1, но для сплюснутых сфероидов при $x_{V_1} = a_1/2^{1/3} = 31.7480$

Форма ядра	$x_{a_2} = k_0 a_2$	$x_{b_2} = k_0 b_2$	a_2/b_2	$x_{r_2} = k_0 r_{V_2}$	$x_{d_2} = k_0 d_2 / 2$
Наиболее сплюснутая	39.6	10.2030	3.8812	25.1984	38.2630
Софокусная	36.6373	11.9200	3.0734	25.1984	34.6440
Подобная	31.7480	15.8740	2	25.1984	27.4946
Шарообразная	28.4267	19.8	1.4357	25.1984	20.3970



Рис. 3. Сходимость безразмерного сечения ослабления для разных видов двухслойных сплюснутых (a) и вытянутых (b) сфероидальных частиц (табл. 1, 2) с ростом числа учитываемых членов разложения полей *N*. Излучение падает параллельно оси симметрии частицы $(\alpha = 0)$, показатели преломления ее оболочки $m_1 = 1.3$ и ядра $m_2 = 1.5$, параметр $x_{a_1} = 40$.

(в отличие от сферического базиса). В силу этого достоверность полученных численных результатов зависит от количества учитываемых слагаемых в этих рядах. Как было показано ранее [16], именно наибольший размер частицы совместно с показателем преломления (в данном случае для оболочки и ядра непоглощающей частицы он равен $m_1 = 1.3$ и $m_2 = 1.5$ соответственно) определяет достаточное количество учитываемых слагаемых N_{max} по индексу *n* для расчета сечений с высокой

точностью. Этот результат был получен для сравнительно небольших частиц с дифракционным параметром $x_{V_1} \leq 50$. Здесь рассматриваются достаточно большие частицы, при этом приведенное выше утверждение остается справедливым с учетом формулы $N_{\text{max}} = m_2 x_{a_1} + 4$. Для приведенных выше восьми частиц (табл. 1, 2), имеющих существенно разную по форме внутреннюю структуру, количество учитываемых слагаемых должно равняться $N_{\text{max}} = 64$. Число слагаемых M_{max} по индексу

Таблица 3. Нормированные сечения ослабления (ext), рассеяния (sca) и поглощения (abs) для двухслойных вытянутых сфероидальных частиц для ТМ- и ТЕ-мод при разном числе учитываемых членов разложения полей N $(a_1/b_1 = 2, \alpha = 0, x_{V_1} = 25.198421, x_{V_2} = 20, m_1 = 1.3, m_2 = 1.5)$

Ν	$ar{C}^{ ext{TM}}$			$ar{C}^{ ext{TE}}$				
	ext	sca	abs	ext	sca	abs		
$a_2/b_2 = 2.7861$								
40	1.71E+00	5.13E+01	-4.96E+01	7.66E+00	1.21E+04	-1.21E+04		
60	1.87E+00	1.87E+00	-4.24E-08	1.87E+00	1.87E+00	6.03E-08		
80	1.87E+00	1.87E+00	-8.62E-11	1.87E+00	1.87E+00	-8.62E-11		
96	1.87E+00	1.87E+00	-8.36E-11	1.87E+00	1.87E+00	-8.36E-11		
$a_2/b_2 = 2.5760$								
40	1.83E+00	2.61E+00	-7.77E-01	1.28E+00	7.36E+01	-7.23E+01		
60	1.93E+00	1.93E+00	-8.62E-11	1.93E+00	1.93E+00	6.51E-08		
80	1.93E+00	1.93E+00	-8.62E-11	1.93E+00	1.93E+00	-8.62E-11		
96	1.93E+00	1.93E+00	-8.62E-11	1.93E+00	1.93E+00	-8.62E-11		
$a_2/b_2 = 2$								
40	1.62E+00	1.70E+00	-7.46E-02	7.76E+00	5.07E+02	-5.00E+02		
60	1.63E+00	1.63E+00	-7.34E-11	1.63E+00	1.63E+00	1.76E-08		
80	1.63E+00	1.63E+00	-7.30E-11	1.63E+00	1.63E+00	-7.30E-11		
96	1.63E+00	1.63E+00	-7.30E-11	1.63E+00	1.63E+00	-7.30E-11		
$a_2/b_2 = 1.0306$								
40	1.41E+00	9.43E+00	-8.02E+00	-1.31E+00	2.27E+03	-2.27E+03		
60	1.44E+00	1.44E+00	-7.73E-06	1.44E+00	1.44E+00	-7.72E-06		
80	1.44E+00	1.44E+00	-4.59E-11	1.44E+00	1.44E+00	-4.59E-11		
96	1.44E+00	1.44E+00	-1.36E-10	1.44E+00	1.44E+00	-1.36E-10		

m обычно составляет примерно $N_{\rm max}/2$ и определяется рассмотрением сходимости результатов с увеличением числа слагаемых по m [33].

Ha рис. З показана относительная погрешвычисления нормированных ность сечений $\delta_N = |\bar{C}(N_{\max}) - \bar{C}(N)| / \bar{C}(N_{\max})$ для рассмотренных выше видов частиц в зависимости от числа слагаемых N (для надежности результатов было выбрано $N_{\text{max}} = 96$). В этом случае относительная погрешность расчета сечений меняется от $10^{-9} - 10^{-10}$ для сплюснутых и вытянутых сфероидальных частиц с софокусным или подобным ядром до $10^{-6} - 10^{-8}$ для частиц с шарообразным или сильно вытянутым (сплюснутым) ядром. Графики на рисунках обрываются в случае, когда следующая точка будет соответствовать машинному нулю. Отметим, что скорость сходимости сравнительно слабо зависит от формы ядра (вытянутое или сплюснутое, софокусное или подобное), если оно не слишком сильно по форме отличается от оболочки. Наихудшая сходимость наблюдается в экстремальных случаях (шарообразное, максимально вытянутое или максимально сплюснутое), когда поверхность ядра очень сильно приближается к поверхности оболочки. Наиболее ярко этот эффект имеет место для сильно сплюснутого ядра, поскольку здесь он носит ,,двумерный" характер в отличии от вытянутых частиц, для которых близость наблюдается в одном направлении.

В табл. З приведены значения нормированных сечений для четырех видов рассматриваемых вытянутых частиц (для сплюснутых частиц ситуация сходная). В силу закона сохранения энергии для непоглощающих частиц справедливо равенство $\bar{C}_{\rm ext}$ и $\bar{C}_{\rm sca}$, при этом сечение поглощения $\bar{C}_{\rm abs} = \bar{C}_{\rm ext} - \bar{C}_{\rm sca} = 0$, что стандартно служит в качестве оценки абсолютной погрешности вычислений сечений. Отметим, что в табл. З максимальное количество слагаемых было увеличено до $N_{\rm max} = 96$ с целью уменьшения ошибки до 10^{-9} для любых частиц.



Рис. 4. Факторы эффективности ослабления Q_{ext} для разных видов двухслойных вытянутых сфероидальных частиц (табл. 1) в зависимости от линейного дифракционного параметра x_{a_1} при параллельном падении излучения ($\alpha = 0$) и показателях преломления оболочки $m_1 = 1.3$ и ядра $m_2 = 1.5$.

При анализе нетрудно заметить, что хотя скорость сходимости расчетов сечений заметно уменьшается для частиц с экстремальными ядрами, при увеличении числа учитываемых слагаемых до $N_{\rm max} = 96$ относительная погрешность становится весьма небольшой, порядка 10^{-9} . В то же время для частиц с софокусными или подобными ядрами для достижения очень высокой точности порядка 10^{-10} достаточно взять, как и предлагалось ранее, количество слагаемых в полтора раза меньше: $N_{\rm max} = 64$.

При падении плоской электромагнитной волны вдоль оси симметрии двухслойной частицы ($\alpha = 0$) направление вектора напряженности электрического поля не влияет на сечения, т.е. их значения для волн ТМ- и ТЕ-типа должны полностью совпадать: $\bar{C}^{\text{TM}} = \bar{C}^{\text{TE}}$. Поскольку предложенные формулы для расчета оптических свойств частиц сильно отличаются друг от друга для этих двух типов поляризации падающего излучения, то данное равенство является очень хорошей проверкой при проведении численных расчетов. В рассматрива-

емых случаях проверка дает требуемые результаты с высокой точностью, указанной выше.

При наклонном падении плоской волны задача рассеяния решается независимо для каждого азимутального индекса т в силу коммутативности оператора вращения и оператора, соответствующего данной задаче. Затем результаты следует просуммировать по индексу *m*, при этом соответствующий ряд является бесконечным, но при численных расчетах учитывается достаточное, но конечное число слагаемых M_{max} (точно так же, как N_{max} для индекса *n*). В работе [16] был проведен анализ сходимости соответствующих численных результатов, при этом оказалось, что достаточное число слагаемых увеличивается с ростом объема частицы и показателя преломления как оболочки, так и ядра. При одинаковых линейных размерах и отношениях полуосей число M_{max} для вытянутых частиц кратно меньше, чем для сплюснутых, причем множитель близок к отношению а/b. Наши расчеты для частиц значительно больших размеров подтвердили эти выводы.



Рис. 5. То же, что и на рис. 4, но для двухслойных сплюснутых сфероидальных частиц (табл. 2).

2.3. Расчет факторов ослабления и рассеяния

Для анализа эффектов ослабления, рассеяния и поглощения излучения двухслойными сфероидальными частицами в зависимости от их размера вплоть до геометрооптических пределов естественно использовать факторы эффективности

$$Q_{\rm x} = C_{\rm x}/G,\tag{65}$$

где G – геометрическое сечение внешнего сфероида, а х = ext, sca или abs. При падении плоской волны под углом α к оси симметрии частицы $G(\alpha) = \pi b_1 (a_1^2 \sin^2 \alpha + b_1^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}$ и $G(\alpha) = \pi a_1 (a_1^2 \cos^2 \alpha + b_1^2 \sin^2 \alpha)^{1/2}$ для вытянутого и сплюснутого сфероидов соответственно. Заметим, что при параллельном падении в первом случае $G(0) = \pi b_1^2$, а во втором $G(0) = \pi a_1^2$, в то время как при перпендикулярном падении $G(90) = \pi b_1 a_1$ в обоих случаях.

Связь между нормированными сечениями и факторами эффективности определяется только геометрическими параметрами внешней оболочки и углом падения

Оптика и спектроскопия, 2024, том 132, вып. 6

плоской волны а:

$$\bar{C} = \frac{C}{\pi r_{\rm v}^2} = \frac{(\xi_1^2 - f \cos^2 \alpha)^{1/2}}{[\xi_1^4 (\xi_1^2 - f)]^{1/6}} Q, \tag{66}$$

где f = 1 и f = -1 для вытянутого и сплюснутого сфероидов соответственно. Отсюда следует, что при параллельном падении коэффициент перевода равен $(a_1/b_1)^{-2f/3}$, а при перпендикулярном — $(a_1/b_1)^{f/3}$. Из приведенных соображений следует, что для рассматриваемых частиц с фиксированной оболочкой нормированные сечения и эффективные факторы имеют одинаковую зависимость от дифракционного параметра x.

Из рис. 4–7 видно, что общая картина поведения зависимости факторов эффективности Q от линейного дифракционного параметра аналогична той, которая имеет место для однородных частиц. Чередование крупномасштабных максимумов и минимумов является следствием интерференции между падающим и прямо прошедшим излучением. В первом приближении это явление, включая величину экстремумов, можно описать с помощью аномальной дифракции [1]. Положение максимумов определяются фазовым сдвигом центрального



Рис. 6. То же, что и на рис. 4, но при перпендикулярном падении ($\alpha = 90^{\circ}$) для ТМ- и ТЕ-мод.

луча

$$\Phi = 2(l_1 - l_2)|m_1 - 1| + 2l_2|m_2 - 1|, \qquad (67)$$

где $2(l_1 - l_2)$ и $2l_2$ — пути луча (измеренные в безразмерных величинах x) в оболочке и ядре соответственно. Период колебаний можно оценить из соотношения $\Delta \Psi = 2\pi$.

При параллельном падении излучения для двухслойных частиц с максимально вытянутым ядром центральный луч распространяется практически только в ядре, поэтому уравнение для периода осцилляций имеет вид $2T|m_2 - 1| \approx 2\pi$, т.е. в нашем случае $T \approx 2\pi$. При анализе графиков на рис. 4 видно, что за исключением частиц с шарообразным ядром (рис. 4, c) на отрезки [20,80] и [40,120] приходится примерно 8.5 и 11.5 периодов соответственно. Таким образом, теоретическая оценка в первом приближении дает $T \approx 6.3$, а непосредственный численный расчет лишь на 10% больше: $T \approx 7.0$, что можно считать удовлетворительным совпадением. Заметим, что для вытянутых сфероидов при $\alpha = 0$ формула (67) предсказывает для частиц с шарообразным ядром примерно в 1.25 раза более длинный период, чем с случае сильно вытянутого ядра, что в общем и наблюдается на рис. 4.

Для сплюснутых частиц в данном случае следует сделать замену больших полуосей на меньшие, т.е. $l_1 = x_{b_1}$, $l_2 = x_{b_2}$. Поскольку на рис. 5 график строится в зависимости от безразмерного линейного дифракционного параметра x_{a_1} , то период колебаний увеличивается в $a_1/b_1 = 2$ раза. Непосредственный подсчет количества периодов для сплюснутых частиц (рис. 5) на тех же отрезках показывает, что их как раз вдвое меньше, чем для вытянутых частиц.

При перпендикулярном падении ($\alpha = 90$) картина поведения осцилляций переворачивается, так как теперь для вытянутых частиц $l_1 = x_{b_1}$, $l_2 = x_{b_2}$, а для сплюснутых $l_1 = x_{a_1}$, $l_2 = x_{a_2}$. В результате число экстремумов для сплюснутых частиц в 2 раза больше, чем для вытянутых, а количество максимумов и минимумов остается прежним, а именно по 14 тех и других на отрезке [0, 100] (рис. 4 и 6). Более того, даже положения экстремумов на оси абсцисс меняются незначительно. Если падающая плоская волна распространяется под некоторым углом к оси симметрии частицы, то рассматривают волны



Рис. 7. То же, что и на рис. 4, но для факторов эффективности ослабления Q_{ext} и рассеяния Q_{sca} в случае поглощающего ядра с показателем преломления $m_2 = 1.5 + 0.05i$.

ТЕ- и ТМ-типов в зависимости от направления вектора напряженности электрического поля. На рис. 6 соответствующие линии почти сливаются друг с другом, имея наибольшие отличия на отрезке [0, 10]. Этот результат подтверждается более подробными расчетами для небольших частиц [16]. Там же можно найти удобную модель для двухслойного сфероида в виде однородной сфероидальной частицы с эффективным показателем преломления $m_{\rm ef} = [m_1(V_1 - V_2) + m_2V_2]/V_1$, которая неплохо работает на первом этапе, т.е. до первого максимума.

Представляет интерес вопрос о геометрооптическом пределе фактора эффективности ослабления для двухслойных сфероидальных частиц. Из представленных рисунков видно, что в полном соответствии с теорией $Q_{\rm ext} \rightarrow 2$ при $x_{a_1} \rightarrow \infty$ как для диэлектрических частиц, так и для частиц с поглощающим ядром (рис. 7). Если в последнем случае этот вывод очевиден, то для диэлектрических частиц наличие априори известного геометрооптического предела маскируется осцилляциями, при этом наибольшей величины они достигают для вытянутых частиц при параллельном падении излучения. В целом, сходимость минимумов к пределу достаточно отчетливо выражена, а для максимумов эта тенденция хорошо прослеживается с учетом приведенного выше замечания.

Для двухслойных сфероидов с поглощающим ядром поведение фактора эффективности ослабления на первой трети рассматриваемого интервала изменения размера частиц примерно такое же как для аналогичных диэлектрических частиц. Главное отличие заключается в том, что достаточно быстро затухают колебания факторов, а именно уже при $x_{a_1} \ge 50$ они практически отсутствуют (рис. 4). Здесь можно сделать вывод о том, что форма ядра достаточно слабо влияет на факторы эффективности ослабления, рассеяния и поглощения.

2.4. Влияние формы ядра на матрицу рассеяния частиц

В некоторых приложениях теории рассеяния света в дополнение к интегральным оптическим характеристи-



Рис. 8. Элемент матрицы рассеяния F_{11} и отношение F_{21}/F_{11} в зависимости от угла рассеяния θ в плоскостях $\phi = 0$ или 90° для вытянутых двухслойных сфероидов с разной формой ядра: $a_2/b_2 = 1.001$ (красные сплошные линии), 2 (зеленые пунктирные линии), 2.82 (синие штриховые линии). Наклонное падение излучения ($\alpha = 45^{\circ}$), дифракционный параметр частицы $x_{V_1} = 3$, отношение объемов оболочки ($a_1/b_1 = 2$) и ядра равно 2:1 при показателях преломления $m_1 = 1.3$ и $m_2 = 1.5 + 0.01i$ соответственно.



Рис. 9. То же, что и на рис. 8, но для вытянутых двухслойных сфероидов с разной формой оболочки: $a_1/b_1 = 4.45$ (красные сплошные линии), 2.5 (зеленые пунктирные линии), 4 (синие штриховые линии). Наклонное падение излучения ($\alpha = 45^{\circ}$), плоскость $\phi = 90^{\circ}$, дифракционный параметр частицы $x_{V_1} = 3$, равные объемы оболочки и ядра ($a_2/b_2 = 2$), показатели преломления в которых равны $m_1 = 1.3$ и $m_2 = 1.5 + 0.01i$ соответственно.

кам рассеивателей (различные сечения и т.п.) важными оказываются дифференциальные (матрица рассеяния и т.д.). Мы рассмотрели изменения элементов матрицы рассеяния для двухслойных сфероидов при вариации формы ядра. Некоторые результаты таких расчетов приведены на рис. 8, который показывает элементы 4×4матрицы рассеяния F_{11} , F_{21} (определенные, следуя [1]) в зависимости от угла θ (угол рассеяния равен $\theta - \alpha$) в плоскостях $\phi = 0$ или 90° для вытянутых сфероидов с дифракционным параметром $x_{V_1} = 3$, отношением полуосей поверхности частицы $a_1/b_1 = 2$ и отношением объемов оболочки и ядра $(V_1 - V_2)/V_2 = 2$ при наклонном падении излучения к оси симметрии частицы ($\alpha = 45^{\circ}$). Показатели преломления ядра ($m_2 = 1.5 + 0.01i$) и оболочки ($m_1 = 1.3$) характерны для загрязненных силикатов и водяного льда в видимой области спектра.

Рисунок 8 показывает, что для сфероидов, размер которых сравним с длиной волны ($r_V \sim \lambda$), форма ядра практически не влияет на индикатрису (элемент F_{11}), но сильно изменяет направление и степень (F_{21}/F_{11}) поляризации излучения, рассеянного под большими углами (плоскость с углом ϕ , равным 0, включает ось симметрии частицы и волновой вектор). При этом частицы с софокусными и подобными ядром и оболочкой имеют достаточно сходную индикатрису (и поляризацию).

Мы также рассмотрели двухслойные сфероидальные частицы, у которых форма и относительный объем ядра не менялся, но варьировалась форма оболочки. Некоторые результаты показаны на рис. 9, на котором представлены данные для двухслойных вытянутых сфероидов с одинаковым объемом ядра и оболочки для плоскости $\phi = 90^{\circ}$ (остальные параметры, как указаны выше). Очевидно, что различия поляризации (F_{21}/F_{11}), наблюдаемые на рисунке для частиц с различной формой оболочки, не существенны, поскольку будут смазаны ожидаемым в практических случаях распределением частиц по ориентациям и размерам. С другой стороны, форма оболочки существенно изменяет долю излучения, рассеянного под большими углами.

Таким образом, несофокусность ядра и оболочки двухслойных сфероидов может создавать существенные эффекты в оптических свойствах подобных рассеивателей. Такие эффекты принципиально игнорируются при использовании модели софокусных сфероидов, широко распространенной, например, в астрономии.

3. Заключение

Задача рассеяния света сфероидальной частицей с несофокусными границами слоев впервые эффективно решена с применением разложения полей по сфероидальным базисам. Приведен алгоритм решения, который включил основные теоретические достижения последних лет: использование новой нормировки сфероидальных функций, исключение из рассмотрения сложной ТЕмоды, переход от сфероидальной *T*-матрицы к обычной, сферической и т.д.

Используя недавно созданные van Buren процедуры вычисления сфероидальных функций, написана программа, реализующая предложенный алгоритм в случае двухслойных сфероидов. Исследована сходимость и точность решения для сфероидальных частиц с ядрами четырех видов: софокусных оболочке, подобных ей, наиболее шарообразных и наиболее вытянутых/сплюснутых при заданных форме частицы и отношении объемов ядра и оболочки.

Рассмотрены данные расчетов сечений двухслойных сфероидов указанных видов при больших значениях

дифракционного параметра (до $x_a = 2\pi a/\lambda = 120$). Проведено сравнение подобных численных результатов для слоистых сфероидов с предсказаниями приближенной теории аномальной дифракции. Приведены также результаты вычислений элементов матрицы рассеяния, показывающие, что обычно рассматриваемые слоистые сфероиды с софокусными границами слоев хорошо описывают оптические свойства лишь частиц с близкими по форме ядром и оболочкой. Отмечено, что новые оптические эффекты могут наблюдаться также для двухслойных сфероидов иного типа, именно у частиц с одинаковой формой ядра, но разной формой оболочки (частицы).

Благодарности

Авторы благодарны A.L. van Buren за созданные программы расчета сфероидальных функций, свободно доступные по сети Интернет.

Финансирование работы

Работа В.Ф. по теоретическому изучению рассеяния света слоистыми сфероидами была поддержана Министерством высшего образования и науки РФ, грант FSRF-2023-0003, работа В.И. и Д.Т. по созданию компьютерных программ для моделирования рассеяния света слоистыми сфероидами и вычислению их оптических свойств – грантом Российского научного фонда 20-72-10052.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] К. Борен, Д. Хаффмен. Поглощение и рассеяние света малыми частицами (Мир, М., 1986).
- [2] M.I. Mishchenko, J.W. Hovenier, L.D. Travis. *Light scattering by nonspherical particles* (Academic Press, San Diego, 2000). DOI: 10.1088/0957-0233/11/12/705
- [3] M.I. Mishchenko, L.D. Travis, A.A. Lacis. *Scattering, absorption and emission of light by small particles* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2002).
- [4] В.В. Климов. Наноплазмоника (Физматлит, М., 2010).
- [5] H.C. van de Hulst. *Light scattering by small particles* (Dover Publ., New York, 1957).
- [6] A.A. Kokhanovsky. *Light scattering media optics: problems and solutions* (Wiley-Praxis, Chichester, 1999).
- [7] F.M. Kahnert. JQSRT, 79–80, 775 (2003).
 DOI: 10.1016/S0022-4073(02)00321-7
- [8] V.G. Farafonov, V.B. Il'in, M.S. Prokopjeva. JQSRT, 79–80, 599 (2003). DOI: 10.1016/S0022-4073(02)00310-2
- [9] V.G. Farafonov, V.B. Il'in. *Light Scattering Reviews* (Springer-Praxis, Berlin, 2006), p. 125. DOI: 10.1007/3-540-37672-0_4
- [10] A.A. Vinokurov, V.G. Farafonov, V.B. Il'in. JQSRT, 110, 1356 (2009). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2009.02.031

- [11] В.Г. Фарафонов, В.И. Устимов, М.В. Соколовская. Опт. и спектр., 120, 124 (2016).
- [12] В.Г. Фарафонов. Опт. и спектр., 117, 949 (2014).
- [13] В.Г. Фарафонов, В.Б. Ильин. Опт. и спектр., 115, 836 (2013).
- [14] В.Г. Фарафонов, А.А. Винокуров. Опт. и спектр., 105, 318 (2008).
- [15] T. Onaka. Ann. Tokyo Astron. Observ., 18, 1 (1980).
- [16] V. Farafonov, N. Voshchinnikov, V. Somsikov. Appl. Opt., 35, 5412 (1996). DOI: 10.1364/AO.35.005412
- [17] I. Gurwich, M. Kleiman, N. Shiloah, B. Oaknin. JQSRT, 79– 80, 649 (2003). DOI: 10.1016/S0022-4073(02)00312-6
- [18] V.G. Farafonov, N.V. Voshchinnikov. Appl. Opt., 51, 1586 (2012). DOI: 10.1364/AO.51.001586
- [19] V.G. Farafonov. J. Math. Sci., 175, 698 (2011).
 DOI: 10.1007/s10958-011-0384-9
- [20] Y. Han, H. Zhang, X. Sun. Appl. Phys., B 84, 485 (2006).
 DOI: 10.1007/s00340-006-2298-7
- [21] В.Г. Фарафонов. Опт. и спектр., 114, 462 (2013).
- [22] В.Г. Фарафонов, В.Б. Ильин, Д.Г. Туричина. Опт. и спектр., 130, 273 (2022).
- [23] M. Kerker. The scattering of light and other electromagnetic radiation (Academic Press, New York, 1969). DOI: 10.1016/C2013-0-06195-6
- [24] N.V. Voshchinnikov, V.G. Farafonov. Astrophys. & Space Sci., 204, 19 (1993). DOI: 10.1007/BF00658095
- [25] V.B. Il'in, D.G. Turichina, V.G. Farafonov et al. JQSRT, **311**, 108759 (2023). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2023.108759
- [26] В.И. Комаров, Л.И. Пономарев, С.Ю. Славянов. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции (Наука, М., 1976).
- [27] C. Flammer. Spheroidal wave functions (Stanford Univ. Press, Stanford, 1957).
- [28] J. Meixner, F.W. Schäfke. Mathieusche Funktionen and Sphäroidfunktionen (Springer, Berlin, 1954).
- [29] A.L. van Buren. arXiv-preprints, math/2009.01618 (2020).DOI: 10.48550/arXiv.2009.01618
- [30] J. Ding, P. Yang. Opt. Express, 31, 40937 (2023).DOI: 10.1364/OE.505416
- [31] В.Г. Фарафонов, В.Б. Ильин, Д.Г. Туричина. Опт. и спектр., 131, 36 (2023). DOI: 10.21883/OS.2023.01.54535.2894-22
- [32] V.G. Farafonov, N.V. Voshchinnikov, E.G. Semenova. J. Math. Sci., 214, 382 (2016). DOI: 10.1007/s10958-016-2784-3
- [33] P.W. Barber, S.C. Hill. Light scattering by particles: computational methods (World Scientific, Singapore, 1990). DOI: 10.1142/0784