ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Теория возмущения поверхности в задаче упругого рассеяния света на микрочастицах

А.Р. Бекиров,[1,*] А.Ф. Успенский,[1] Б.С. Лукьянчук,[1] А.А. Федянин[1]

[1] *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2*

(Поступила в редакцию 07.01.2025; после доработки 10.02.2025; подписана в печать 18.02.2025)

Методом теории возмущений решена задача рассеяния света частицами произвольной осесимметричной формы. Представленный подход позволяет рассматривать значительные деформации за счет разбиения общей деформации на более малые. Обсуждается вопрос сходимости, границы и условия применимости, приводится сравнение с альтернативным методом расчета.

PACS: 42.25.Bs УДК: 535.4
Ключевые слова: теория Ми, метод Т-матрицы, рассеяние света, теория возмущений.

DOI: 10.55959/MSU0579-9392.80.2530402

ВВЕДЕНИЕ

Задача упругого рассеяния света на частицах имеет широкий спектр приложений в науке и технике. Для ее решения существует множество подходов и приближений. Если размеры частиц значительно превышают длину волны, используются законы геометрической оптики [1]. В противном случае необходимо решать уравнения Максвелла, то есть применять законы волновой оптики. В литературе представлен ряд методов для решения этой задачи, выбор которых определяется условиями и требуемой точностью. Среди аналитических методов можно выделить метод согласования точек (Point Matching Method) [2], метод Т-матрицы или расширенных граничных условий (EBCM — extended boundary condition method) [3, 4] и метод разделения переменных (который в случае шара сводится к теории Ми) [5]. К численным методам относятся метод моментов [6], метод конечных разностей во временной области [7], метод объемных интегральных уравнений [8] и метод конечных элементов [9].

Аналитические методы обеспечивают высокую точность и требуют меньших вычислительных затрат, однако их применение, как правило, ограничено простыми геометриями, такими как, например, шары и эллипсоиды.

В работе [10] представлен метод расчета рассеяния света частицей сложной формы на основе теории возмущений поверхности относительно сферической. Однако этот метод существенно ограничен величиной возмущения поверхности, что неоднократно подчеркивалось в литературе [11, 12]. Для преодоления этого ограничения можно разложить начальную деформацию на множество малых возмущений. Тем не менее в этом случае требуется модификация теории для произвольной начальной поверхности, а не только сферической. Впервые такой подход был применен в работе [13] для случая рассеяния плоской волны. В данной работе рассматривается рассеяние для произвольной формы волны.

Содержание данной работы организовано следующим образом. В разделах 1–3 представлены основные формулы и принципы метода; обсуждаются ограничения и условия применимости. В разделе 4 обсуждается сравнение с методом EBCM [3]; указываются задачи, для которых мы рекомендуем использовать наш метод.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть временная зависимость электромагнитного поля имеет вид $\exp(-i\omega t)$, где ω — угловая частота света, тогда пространственная зависимость поля удовлетворяет векторному уравнению Гельмгольца:

$$\Delta\mathbf{E} + n_{\text{glob}}^2 k^2 \mathbf{E} = 0, \tag{1}$$

которое необходимо решить в двух областях — внутри частицы (показатель преломления $n_{\text{glob}} = n_{\text{refr}}$) и снаружи (будем считать показатель преломления окружающей среды равным $n_{\text{glob}} = 1$), $k = \omega/c$, c — скорость света. В нашей задаче удобно рассматривать сферическую систему координат, в которой фундаментальными решениями (1) являются векторные сферические гармоники:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\pm mn} &= z_n(\rho)\mathbf{m}_{\pm mn}, \\ \mathbf{N}_{\pm mn} &= \tfrac{z_n(\rho)}{\rho}\mathbf{p}_{\pm mn} + \tfrac{[\rho z_n(\rho)]'}{\rho}\mathbf{n}_{\pm mn}, \end{aligned} \tag{2}$$

* E-mail: bekirovar@my.msu.ru

где

$$\begin{aligned}
\mathbf{m}_{\pm mn} &= \mp\pi_{mn}\begin{bmatrix}\sin m\varphi\\ \cos m\varphi\end{bmatrix}\mathbf{e}_\theta - \tau_{mn}\begin{bmatrix}\cos m\varphi\\ \sin m\varphi\end{bmatrix}\mathbf{e}_\varphi,\\
\mathbf{n}_{\pm mn} &= \tau_{mn}\begin{bmatrix}\cos m\varphi\\ \sin m\varphi\end{bmatrix}\mathbf{e}_\theta \mp \pi_{mn}\begin{bmatrix}\sin m\varphi\\ \cos m\varphi\end{bmatrix}\mathbf{e}_\varphi,\\
\mathbf{p}_{\pm mn} &= n(n+1)P_n^m(\cos\theta)\begin{bmatrix}\cos m\varphi\\ \sin m\varphi\end{bmatrix}\mathbf{e}_r.
\end{aligned} \tag{3}$$

Здесь $\pi_{mn} = \frac{m}{\sin\theta}P_n^m(\cos\theta)$, $\tau_{mn} = \frac{d}{d\theta}P_n^m(\cos\theta)$, а $P_n^m(\cos\theta)$ — присоединенные полиномы Лежандра, (r,θ,ϕ) — сферические координаты, ($\mathbf{e}_r$, $\mathbf{e}_\theta$, $\mathbf{e}_\varphi$) — соответствующие орты, $z_n(\rho)$ — сферические функции Бесселя, $\rho = kr$ — безразмерный радиус (внутри частицы он домножается на показатель преломления n_{refr}).

Пусть начальная формы частицы σ_0 описывается уравнением $r = r_0 f_0(\theta)$. Для того, чтобы строить теорию возмущения к данной поверхности, необходимо знать решение для произвольного поля на исходной поверхности σ_0. Причем, как станет ясно из дальнейшего изложения, необходимо знать решение при условии независимости полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$, в то время как для обычной задачи рассеяния полагается, что эти поля взаимосвязаны посредством уравнений Максвелла.

Рассмотрим рассеяние поля $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ на частице с показателем преломления n_{refr} и магнитной проницаемостью μ, с формой поверхности σ_1, определяемой следующим уравнением:

$$r = r_0\left(f_0(\theta) + \varepsilon f_1(\theta)\right). \tag{4}$$

Ввиду полноты системы функций (2) произвольное поле $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ может быть разложено в виде ряда по $\mathbf{M}_{\pm mn}$ и $\mathbf{N}_{\pm mn}$ [14]. В силу аксиальной симметрии частицы (4) достаточно рассмотреть только ТМ-моду, так что

$$\mathbf{E}^{\text{inc}} = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{n}\left(e_{+mn}\mathbf{N}_{+mn}^{(1)} + f_{-mn}\mathbf{M}_{-mn}^{(1)}\right), \tag{5}$$

где верхний индекс (1) означает выбор сферической функции Бесселя первого рода $z_n(\rho) = j_n(\rho)$. Решение для ТЕ-моды можно получить из решения для ТМ-моды [15]. Рассеянное поле $\mathbf{E}^{\text{sca}}$ и поле внутри $\mathbf{E}^{\text{int}}$ представимы в виде рядов:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}^{\text{sca}} &= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{n}\left(a_{+mn}\mathbf{N}_{+mn}^{(3)} + b_{-mn}\mathbf{M}_{-mn}^{(3)}\right),\\
\mathbf{E}^{\text{int}} &= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{n}\left(d_{+mn}\mathbf{N}_{+mn}^{(1)} + c_{-mn}\mathbf{M}_{-mn}^{(1)}\right),
\end{aligned} \tag{6}$$

где верхний индекс (3) означает выбор сферической функции Ханкеля первого рода $z_n(\rho) = h_n^{(1)}(\rho)$.

Неизвестные коэффициенты (a,b,c,d) в уравнении (6) находятся из граничных условий на поверхности частицы σ_1, требующих непрерывности тангенциальной составляющей электрического и магнитного поля:

$$\begin{aligned}
(f_0+\varepsilon f_1)\,\mathbf{E}_\tau^{\text{out}} + (f_{0\theta}+\varepsilon f_{1\theta})\,E_r^{\text{out}}\mathbf{e}_\theta &= (f_0+\varepsilon f_1)\,\mathbf{E}_\tau^{\text{int}} + (f_{0\theta}+\varepsilon f_{1\theta})\,E_r^{\text{int}}\mathbf{e}_\theta,\\
(f_0+\varepsilon f_1)\,\mathbf{H}_\tau^{\text{out}} + (f_{0\theta}+\varepsilon f_{1\theta})\,H_r^{\text{out}}\mathbf{e}_\theta &= (f_0+\varepsilon f_1)\,\mathbf{H}_\tau^{\text{int}} + (f_{0\theta}+\varepsilon f_{1\theta})\,H_r^{\text{int}}\mathbf{e}_\theta,
\end{aligned} \tag{7}$$

где $f_{i\theta} \equiv \frac{\partial f_i}{\partial\theta}$ и $\mathbf{E}_\tau \equiv E_\varphi\mathbf{e}_\varphi + E_\theta\mathbf{e}_\theta$, $\mathbf{E}^{\text{out}} = \mathbf{E}^{\text{inc}} + \mathbf{E}^{\text{sca}}$, аналогично для $\mathbf{H}$. Подставляя (6) в (7), получим:

$$\begin{aligned}
&\sum_{mn}\Big[\left(b_{-mn}\beta_n^0 - \kappa c_{-mn}\alpha_n^0\right)\mathbf{m}_{-mn} + \left(a_{+mn}\beta_n^1 - \kappa d_{+mn}\alpha_n^1\right)\mathbf{n}_{+mn} +\\
&\qquad + \mathbf{e}_\theta\rho_0 f_{0\theta}\left(a_{+mn}\eta_n^0 - \kappa d_{+mn}\sigma_n^0\right)p_{+mn}\Big]\Big|_{r\in\sigma_1} =\\
&\qquad = -\rho_0\left(f_0+\varepsilon f_1\right)\mathbf{E}_\tau^{\text{inc}} - \rho_0\left(f_{0\theta}+\varepsilon f_{1\theta}\right)\mathbf{e}_\theta E_r^{\text{inc}}\Big|_{r\in\sigma_1},\\
&\sum_{mn}\Big[\chi_1\left(a_{+mn}\beta_n^0 - \chi_2\kappa c_{+mn}\alpha_n^0\right)\mathbf{m}_{+mn} + \left(\chi_1 b_{-mn}\beta_n^1 - \chi_2\kappa c_{-mn}\alpha_n^1\right)\mathbf{n}_{-mn} +\\
&\qquad + \mathbf{e}_\theta\rho_0 f_{0\theta}\left(\chi_1 b_{-mn}\eta_n^0 - \chi_2\kappa c_{-mn}\sigma_n^0\right)p_{-mn}\Big]\Big|_{r\in\sigma_1} =\\
&\qquad = -\rho_0\left(f_0+\varepsilon f_1\right)\mathbf{H}_\tau^{\text{inc}} - \rho_0\left(f_{0\theta}+\varepsilon f_{1\theta}\right)\mathbf{e}_\theta H_r^{\text{inc}}\Big|_{r\in\sigma_1},
\end{aligned} \tag{8}$$

где $\rho_0 = kr_0$, $\kappa = 1/n_{\text{refr}}$, $\chi_1 = -i$, $\chi_2 = -i\frac{n_{\text{refr}}}{\mu}$. Обозначения для α, β, σ и η такие же, как в работах [10, 13], также см. в Приложении.

2. ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ

Будем искать решение системы (8) в виде ряда по параметру малости ε:

$$(a,b,c,d)_{mn} = \sum_{p=0}^{\infty} (a,b,c,d)^p_{mn} \varepsilon^p. \tag{9}$$

Для построения теории возмущений уравнения (8) следует разложить в ряд по ε с учетом (9). Уравнения для нахождения неизвестных получаются путем приравнивания множителей при степенях ε^p.

Следует сделать некоторые ключевые замечания. В работе [10] все слагаемые, связанные с падающем полем, также раскладываются в ряд по ε. Однако это не является необходимым, так как эти величины известны и могут быть рассчитаны как независимые от ε. Такой подход позволяет не только упростить формулы, но и построить решение в более общем виде.

Более подробные выкладки представлены в Приложении, из них следует, что разложение (8) можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
&\sum_{mn}\Big[\left(b^l_{-mn}\beta^0_n - \kappa c^l_{-mn}\alpha^0_n\right)\mathbf{m}_{-mn} + \left(a^l_{+mn}\beta^1_n - \kappa d^l_{+mn}\alpha^1_n\right)\mathbf{n}_{+mn} + \\
&\qquad + \mathbf{e}_\theta \rho_0 f_{0\theta}\left(a^l_{+mn}\eta^0_n - \kappa d^l_{+mn}\sigma^0_n\right) p_{+mn}\Big]\Big|_{r\in\sigma_0} = \mathbf{S}_l, \\
&\sum_{mn}\Big[\left(\chi_1 a^l_{+mn}\beta^0_n - \chi_2\kappa d^l_{+mn}\alpha^0_n\right)\mathbf{m}_{+mn} + \left(\chi_1 b^l_{-mn}\beta^1_n - \chi_2\kappa c^l_{-mn}\alpha^1_n\right)\mathbf{n}_{-mn} + \\
&\qquad + \mathbf{e}_\theta \rho_0 f_{0\theta}\left(\chi_1 b^l_{-mn}\eta^0_n - \chi_2\kappa c^l_{-mn}\sigma^0_n\right) p_{-mn}\Big]\Big|_{r\in\sigma_0} = \mathbf{T}_l,
\end{aligned} \tag{10}$$

где $l = 0, 1, 2, 3..$, величины $\mathbf{S}_l$, $\mathbf{T}_l$ рассчитываются следующим образом при $l = 0$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_0 &= -\rho_0\left(f_0 + \varepsilon f_1\right)\mathbf{E}^{\text{inc}}_\tau - \rho_0\left(f_{0\theta} + \varepsilon f_{1\theta}\right)\mathbf{e}_\theta E^{\text{inc}}_r \Big|_{r\in\sigma_1}, \\
\mathbf{T}_0 &= -\rho_0\left(f_0 + \varepsilon f_1\right)\mathbf{H}^{\text{inc}}_\tau - \rho_0\left(f_{0\theta} + \varepsilon f_{1\theta}\right)\mathbf{e}_\theta H^{\text{inc}}_r \Big|_{r\in\sigma_1},
\end{aligned} \tag{11}$$

при $l > 0$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_l = \sum_{q=0}^{l-1}\sum_{mn}\frac{f_1^{l-q}}{(l-q)!}\Big[&\left(\kappa c^q_{-mn}\alpha^{l-q}_n\rho^{l-q}_{20} - b^q_{-mn}\beta^{l-q}_n\rho^{l-q}_0\right)\mathbf{m}_{-mn} + \\
&+ \left(\kappa d^q_{+mn}\alpha^{l-q+1}_n\rho^{l-q}_{20} - a^q_{+mn}\beta^{l-q+1}_n\rho^{l-q}_0\right)\mathbf{n}_{+mn} + \\
&+ \left(d^q_{+mn}\sigma^{l-q}_n\rho^{l-q}_{20} - a^q_{+mn}\eta^{l-q}_n\rho^{l-q}_0\right) f_{0\theta}\rho_0\mathbf{e}_\theta p_{+mn} + \\
&+ \left(\quad d^q_{+mn}\sigma^{l-q-1}_n\rho^{l-q-1}_{20} - \quad a^q_{+mn}\eta^{l-q-1}_n\rho^{l-q-1}_0\right) f_{1\theta}\rho_0\frac{l-q}{f_1}\mathbf{e}_\theta p_{+mn}\Big]\Big|_{r\in\sigma_0}, \\
\mathbf{T}_l = \sum_{q=0}^{l-1}\sum_{mn}\frac{f_1^{l-q}}{(l-q)!}\Big[&\left(\kappa\chi_2 d^q_{+mn}\alpha^{l-q}_n\rho^{l-q}_{20} - \chi_1 a^q_{+mn}\beta^{l-q}_n\rho^{l-q}_0\right)\mathbf{m}_{+mn} + \\
&+ \left(\kappa\chi_2 c^q_{-mn}\alpha^{l-q+1}_n\rho^{l-q}_{20} - \chi_1 b^q_{-mn}\beta^{l-q+1}_n\rho^{l-q}_0\right)\mathbf{n}_{-mn} + \\
&+ \left(\chi_2 c^q_{-mn}\sigma^{l-q}_n\rho^{l-q}_{20} - \chi_1 b^q_{-mn}\eta^{l-q}_n\rho^{l-q}_0\right) f_{0\theta}\rho_0\mathbf{e}_\theta p_{-mn} + \\
&+ \left(\chi_2 c^q_{-mn}\sigma^{l-q-1}_n\rho^{l-q-1}_{20} - \chi_1 b^q_{-mn}\eta^{l-q-1}_n\rho^{l-q-1}_0\right) f_{1\theta}\rho_0\frac{l-q}{f_1}\mathbf{e}_\theta p_{-mn}\Big]\Big|_{r\in\sigma_0},
\end{aligned} \tag{12}$$

$\rho_{20} = n_{\text{refr}}\rho_0$. Сравнивая условия (8) и (10), можно заметить, что задача сводится к аналогичной, но на невозмущенной поверхности. Как предполагалось в начале изложения, решение на поверхности σ_0 известно для любого падающего поля. Причем это решение должно быть выражено при условии независимости $\mathbf{S}_l$, $\mathbf{T}_l$, поскольку заранее неизвестна взаимосвязь между $\mathbf{S}_l$ и $\mathbf{T}_l$ в уравнениях (10). Это необходимо в силу нескольких причин: во-первых, эта взаимосвязь зависит от возмущения f_1, во-вторых, она является разной для разных порядков l. Таким образом, хотя все величины для $\mathbf{S}_l$ и $\mathbf{T}_l$ линейно зависят от коэффициентов разложения e_{+nm} и f_{-nm}, для построения решения при про-

извольном возмущении f_1 удобно иметь решение уравнений (10) для начальной поверхности σ_0 при независимых $\mathbf{S}$ и $\mathbf{T}$. Это решение легко получить в случае сферы. В этом случае уравнения (10) запишутся в виде:

$$\begin{aligned}
&\sum_{mn}\left[\left(b_{-mn}\beta_n^0-\kappa c_{-mn}\alpha_n^0\right)\mathbf{m}_{-mn}+\left(a_{+mn}\beta_n^1-\kappa d_{+mn}\alpha_n^1\right)\mathbf{n}_{+mn}\right]\Big|_{r=r_0}=\mathbf{S},\\
&\sum_{mn}\left[\left(\chi_1 a_{+mn}\beta_n^0-\chi_2\kappa d_{+mn}\alpha_n^0\right)\mathbf{m}_{+mn}+\left(\chi_1 b_{-mn}\beta_n^1-\chi_2\kappa c_{-mn}\alpha_n^1\right)\mathbf{n}_{-mn}\right]\Big|_{r=r_0}=\mathbf{T}.
\end{aligned}\tag{13}$$

Учитывая ортогональность и полноту системы функций $\mathbf{m}_{\pm mn}$ и $\mathbf{n}_{\pm mn}$, выражения (13) можно записать в виде системы линейных уравнений:

$$\begin{aligned}
&b_{-mn}\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)-\kappa c_{-mn}n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)=\langle\mathbf{S},\ \mathbf{m}_{-mn}\rangle,\\
&a_{+mn}[\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)]'-\kappa d_{+mn}[n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)]'=\langle\mathbf{S},\ \mathbf{n}_{+mn}\rangle,\\
&\chi_1 a_{+mn}\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)-\chi_2\kappa d_{+mn}n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)=\langle\mathbf{T},\ \mathbf{m}_{+mn}\rangle,\\
&\chi_1 b_{-mn}[\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)]'-\chi_2\kappa c_{-mn}[n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)]'=\langle\mathbf{T},\ \mathbf{n}_{-mn}\rangle,
\end{aligned}\tag{14}$$

где подставлен явный вид для α и β, $\langle\mathbf{S},\ \mathbf{m}_{-mn}\rangle\equiv\frac{1}{\xi_{mn}}\int_0^\pi\int_0^{2\pi}(\mathbf{S}\cdot\mathbf{m}_{-mn})\sin\theta d\theta d\varphi$, $\xi_{mn}=\frac{2n(n+1)(n+m)!}{(2n+1)(n-m)!}(1+\delta_{m0})\pi$. Аналогично для $\langle\mathbf{S},\ \mathbf{n}_{+mn}\rangle$, $\langle\mathbf{T},\ \mathbf{m}_{+mn}\rangle$, $\langle\mathbf{T},\ \mathbf{n}_{-mn}\rangle$. Решением системы (14) является:

$$\begin{aligned}
a_{+mn}&=\frac{[n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)]'\langle\mathbf{T},\ \mathbf{m}_{+mn}\rangle-\chi_2 n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)\langle\mathbf{S},\ \mathbf{n}_{+mn}\rangle}{\chi_1\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)[n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)]'-\chi_2 n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)[\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)]'},\\
b_{-mn}&=\frac{n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)\langle\mathbf{T},\ \mathbf{n}_{-mn}\rangle-\chi_2[n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)]'\langle\mathbf{S},\ \mathbf{m}_{-mn}\rangle}{\chi_1 n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)[\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)]'-\chi_2\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)[n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)]'},\\
c_{-mn}&=\frac{\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)\langle\mathbf{T},\ \mathbf{n}_{-mn}\rangle-\chi_1[\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)]'\langle\mathbf{S},\ \mathbf{m}_{-mn}\rangle}{\kappa\left(\chi_1 n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)[\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)]'-\chi_2\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)[n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)]'\right)},\\
d_{+mn}&=\frac{[\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)]'\langle\mathbf{T},\ \mathbf{m}_{+mn}\rangle-\chi_1\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)\langle\mathbf{S},\ \mathbf{n}_{+mn}\rangle}{\kappa\left(\chi_1\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)[n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)]'-\chi_2 n_{\mathrm{refr}}\rho_0 j_n(n_{\mathrm{refr}}\rho_0)[\rho_0 h_n^{(1)}(\rho_0)]'\right)}.
\end{aligned}\tag{15}$$

Формулы (15) могут быть записаны в матричном виде:

$$\begin{bmatrix}a_{+mn}\\ b_{-mn}\\ c_{-mn}\\ d_{+mn}\end{bmatrix}=\hat{G}_0\begin{bmatrix}\langle\mathbf{S},\ \mathbf{n}_{+mn}\rangle\\ \langle\mathbf{S},\ \mathbf{m}_{-mn}\rangle\\ \langle\mathbf{T},\ \mathbf{n}_{-mn}\rangle\\ \langle\mathbf{T},\ \mathbf{m}_{+mn}\rangle\end{bmatrix},\tag{16}$$

где компоненты матрицы $\hat{G}_0$ определяются из выражений (15). В данной записи индексы m и n принимают все возможные значения. Заметим, что в силу симметрии относительно оси z формула (16) может быть записана для каждой из азимутальных мод m в отдельности. Матрица $\hat{G}_0$ определяет решение при независимых $\mathbf{S}$, $\mathbf{T}$, что и требуется для построения решения в случае возмущения поверхности.

Зная матрицу $\hat{G}$ для начальной поверхности σ_0, методом теории возмущений можно рассчитать подобную матрицу $\hat{G}'$ для возмущенной поверхности σ_1. Для этой цели необходимо определить решение системы (10) для всех порядков l, если в (11) положить $\mathbf{S}_0=\mathbf{m}_{mn}$ или $\mathbf{n}_{mn}$, $\mathbf{T}_0=0$, или в случае $\mathbf{T}_0=\mathbf{m}_{mn}$ или $\mathbf{n}_{mn}$, $\mathbf{S}_0=0$. Просуммировав ряд теории возмущения (9), мы получим коэффициенты $(a,b,c,d)_{mn}$, которые будут соответствующими столбцами в (16) для новой матрицы $\hat{G}'$. Данное решение будет описывать рассеяние поля, для которого правая часть уравнений (8) равна соответствующей гармонике $\mathbf{m}_{\pm mn}$ или $\mathbf{n}_{\pm mn}$.

Последовательное применение теории возмущения описанным выше методом позволяет достичь значительных деформаций относительно изначальной сферической поверхности, невозможных при однократном применении теории возмущений.

3. УСЛОВИЯ ПРИМЕНИМОСТИ

Величина возмущения определяется сходимостью ряда (9), критерием которой является малость возмущения. Однако необходимо уточнить, что именно понимается под «малостью» непрерывной величины. Несложно показать, что простого условия $|\varepsilon f_1(\theta)|<1$ недостаточно для сходимости ряда (9), поскольку также необходимо ограничивать производную $|\varepsilon f'_{1\theta}(\theta)|<1$, см. [11]. Возникает необходимость охарактеризовать малость деформаций универсальным способом. С этой целью мы запишем f_1 в виде тригонометрического ряда:

$$f_1(\theta)=x_0+\sum_{j=1}\left(x_j\cos j\theta+y_j\sin j\theta\right).\tag{17}$$

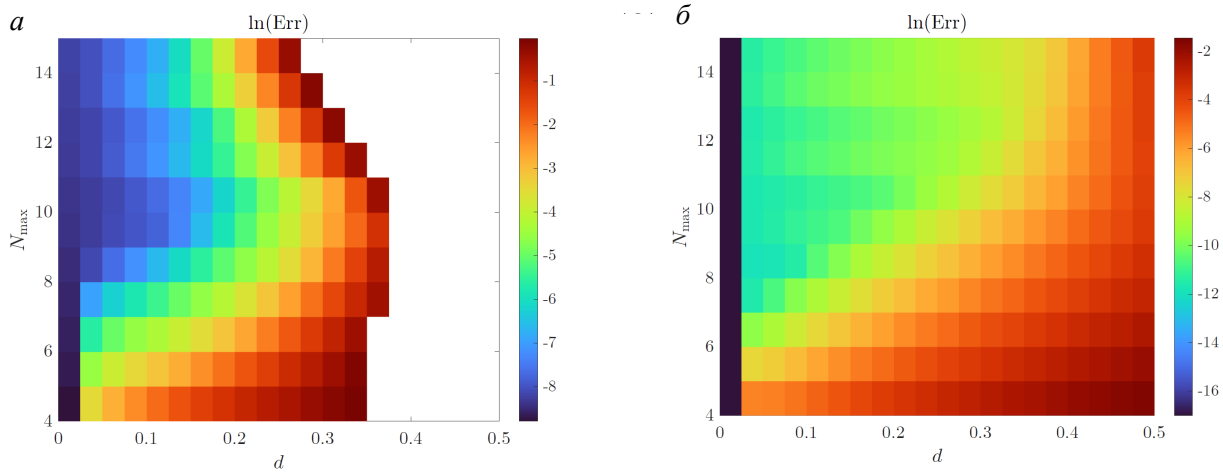

Рисунок. Сравнение точности и устойчивости расчетов методами ЕВСМ (*а*) и теории возмущений (*б*) в зависимости от величины возмущения d и максимального числа мод N_{max}. Отсутствие части данных в (*а*) означает расходимость метода при Err > 1

Малость возмущения удобно определять величиной

$$\|f_1\| = |x_0| + \sum_{j=1} j\big(|x_j| + |y_j|\big). \tag{18}$$

В этом случае малость величины $\varepsilon\|f_1\| < 1$ гарантирует оба условия: $|\varepsilon f_1(\theta)|$, $|\varepsilon f'_{1\theta}(\theta)| < 1$. Существенное влияние на сходимость результата оказывает также выбор промежуточных деформаций между начальной и конечной формами. Очевидно, что такой переход можно осуществить множеством способов. Наши расчеты показывают, что выбор пути промежуточных деформаций влияет на сходимость результата даже при одинаковых ограничениях на величину возмущения (18).

С физической точки зрения причиной ограничения величины деформации являются собственные моды частицы. Это утверждение легко пояснить в случае деформации на постоянную величину сферической поверхности. В этом случае выражения (15) должны переходить сами в себя, но для другого радиуса частицы. Таким образом, ряд (9) представляет собой ряд Тейлора относительно параметра ρ_0. Радиус сходимости определяется нулями в значении знаменателей в (15), соответствующие значения параметра размера лежат в комплексной плоскости [11] и ограничивают радиус сходимости ряда (9), несмотря на то, что выражения (15) не имеют особенностей на действительной оси. В более общем случае нахождение собственных мод представляет собой отдельную трудоемкую задачу [11, 12]. Таким образом, оптимальным путем деформаций будет тот, который находится на максимальном удалении от собственных мод. Этим и объясняется зависимость результата от выбора пути деформаций.

Другим фактором, ограничивающим работу представленного метода, является неизбежное накопление численной ошибки в расчете. Любой численный расчет ведется для ограниченного числа мод $\mathbf{m}_{mn}$ и $\mathbf{n}_{mn}$ в разложениях (5) и (6). Обозначим это число как $N_{\max}$. При построении ряда в теории возмущений в случае непостоянного возмущения функции $\mathbf{S}$, $\mathbf{T}$ могут содержать большее число мод, чем участвует в расчете, вследствие чего моды с индексом $n > N_{\max}$ не учитываются в решении, что и приводит к накоплению ошибки.

4. АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ В БЛИЖНЕМ ПОЛЕ, СРАВНЕНИЕ С МЕТОДОМ T-МАТРИЦЫ

В литературе имеется ряд методов, позволяющих решать задачи рассеяния света на структурах различной формы [16]. Среди прочих наиболее близким по содержанию является метод расширенных граничных условий (ЕВСМ) [17, 18]. В данной секции мы приведем сравнение предложенного нами метода и ЕВСМ. С этой целью мы провели расчеты для чебышевской частицы, описываемой уравнением

$$kr = 3(1 + d\cos\varphi), \tag{19}$$

где параметр d характеризует искривление частицы. На рисунке приведена оценка точности решения двух методов в зависимости от d. В качестве оценки точности мы проверяли граничные условия и рассчитывали ошибку:

$$\mathrm{Err} = \frac{\iint\big|[\mathbf{n}, (\mathbf{H}^2 - \mathbf{H}^1)]\big| d\Omega}{\iint\big|[\mathbf{n}, \mathbf{H}^{\mathrm{inc}}]\big| d\Omega} + \frac{\iint\big|[\mathbf{n}, (\mathbf{E}^2 - \mathbf{E}^1)]\big| d\Omega}{\iint\big|[\mathbf{n}, \mathbf{E}^{\mathrm{inc}}]\big| d\Omega}.$$

Отметим, что представленная оценка характеризует точность решения в ближнем поле, которая в случае ЕВСМ меньше, чем в дальнем. При $d > 0.35$ ЕВСМ демонстрирует явную расходимость, что связанно с численной нестабильностью метода [18]. Наш метод показывает немного большую устойчивость и работает вплоть до

$d < 0.5$, но, что более важно, он обладает устойчивостью при увеличении максимального числа мод в разложениях.

При достаточно больших амплитудах ($d > 0.1$) время расчета меньше для ЕВСМ, чем при использовании метода теории возмущений, поскольку требуется многократное применение теории. Таким образом, наш метод целесообразно применять в случае достаточно сложных геометрий. Другая область применения — это оптимизационные задачи, где необходимо проводить множество расчетов частиц с близкой геометрией и постепенной вариацией формы. В этом случае можно применять теорию возмущений к рассчитанным ранее случаям с близкой геометрией, что не требует многократного применения теории возмущений. В завершение отметим, что другие методы, перечисленные во введении, также могут обладать большей устойчивостью по сравнению с ЕВСМ. По этой причине представленное сравнение не позволяет утверждать, что предложенный нами метод будет иметь преимущество над всеми остальными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен метод, позволяющий рассчитывать рассеяние света на частицах сложной формы в рамках теории возмущения поверхности. Показано, что метод обладает большей численной устойчивостью по сравнению с ЕВСМ. Рассмотрение проводилось для деформаций типа (19), однако наш опыт использования этих методов показывает, что такая тенденция сохраняется и в остальных случаях. Отметим, что существуют случаи, когда представленный метод проигрывает в эффективности, в частности для сильно вытянутых эллиптических частиц. Для этого случая имеетя ряд методов для оптимизации ЕВСМ [19, 20], что обеспечивает большую точность и устойчивость.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ им. М.В. Ломоносова, также работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант №23-1-1-61).

Приложение: Ряды теории возмущения

Подставим разложение (9) в граничные условия (8). Для этого разложим в ряд Тейлора следующие функции:

$$\rho h_n^{(1)}(\rho)\big|_{\sigma_1} = \sum_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p \frac{\beta_n^p}{p!} \rho_0^p f_1^p, \qquad \beta_n^p(\theta) = \frac{d^p}{d\rho^p}\left[\rho h_n^{(1)}(\rho)\right]\Big|_{\rho=\rho_0 f_0(\theta)}, \tag{П.1.1}$$

$$n_{\text{refr}}\rho j_n(n_{\text{refr}}\rho)\big|_{\sigma_1} = \sum_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p \frac{\alpha_n^p}{p!} (n_{\text{refr}}\rho_0)^p f_1^p, \qquad \alpha_n^p(\theta) = \frac{d^p}{d\rho^p}\left[\rho j_n(\rho)\right]\Big|_{\rho=n_{\text{refr}}\rho_0 f_0(\theta)}, \tag{П.1.2}$$

$$\frac{h_n^{(1)}(\rho)}{\rho}\Big|_{\sigma_1} = \sum_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p \frac{\eta_n^p}{p!} \rho_0^p f_1^p, \qquad \eta_n^p(\theta) = \frac{d^p}{d\rho^p}\left[\frac{h_n^{(1)}(\rho)}{\rho}\right]\Bigg|_{\rho=\rho_0 f_0(\theta)}, \tag{П.1.3}$$

$$\frac{j_n(n_{\text{refr}}\rho)}{n_{\text{refr}}\rho}\Big|_{\sigma_1} = \sum_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p \frac{\sigma_n^p}{p!} (n_{\text{refr}}\rho_0)^p f_1^p, \qquad \sigma_n^p(\theta) = \frac{d^p}{d\rho^p}\left[\frac{j_n(\rho)}{\rho}\right]\Bigg|_{\rho=n_{\text{refr}}\rho_0 f_0(\theta)}. \tag{П.1.4}$$

Используя формулу $\left(\sum\limits_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p a^p\right)\left(\sum\limits_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p b^p\right) = \sum\limits_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p \sum\limits_{q=0}^{p} a^q b^{p-q}$, получим:

$$\begin{aligned}
\sum_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p \sum_{mn} \sum_{q=0}^{p} \frac{f_1^{p-q}}{(p-q)!} \Big[&\left(b_{-mn}^q \beta_n^{p-q} \rho_0^{p-q} - \kappa c_{-mn}^q \alpha_n^{p-q} \rho_{20}^{p-q}\right) \mathbf{m}_{-mn} + \\
&+ \left(a_{+mn}^q \beta_n^{p-q+1} \rho_0^{p-q} - \kappa d_{+mn}^q \alpha_n^{p-q+1} \rho_{20}^{p-q}\right) \mathbf{n}_{+mn} + \\
&+ \left(a_{+mn}^q \eta_n^{p-q} \rho_0^{p-q} - d_{+mn}^q \sigma_n^{p-q} \rho_{20}^{p-q}\right) f_{0\theta} \rho_0 \mathbf{e}_\theta p_{+mn} + \\
&+ \left(a_{+mn}^q \eta_n^{p-q-1} \rho_0^{p-q-1} d_{+mn}^q \sigma_n^{p-q-1} \rho_{20}^{p-q-1}\right) f_{1\theta} \rho_0 \frac{p-q}{f_1} \mathbf{e}_\theta p_{+mn} \Big]\Bigg|_{r\in\sigma_0} = \\
&= -\rho_0 \left(f_0 + \varepsilon f_1\right) \mathbf{E}_\tau^{\text{inc}} - \rho_0 \left(f_{0\theta} + \varepsilon f_{1\theta}\right) \mathbf{e}_\theta E_r^{\text{inc}}\Big|_{r\in\sigma_1}.
\end{aligned} \tag{П.2}$$

Теперь, когда мы разложили граничные условия в ряд по степеням параметра малости ε, потребуем выполнения равенства для каждого слагаемого этого ряда отдельно. Для этого рассмотрим некоторый l-ый член ряда $\sum_p$, где $l > 0$. При этом, поскольку падающее поле задано, будет удобно отнести его к величине нулевого порядка малости (см. (11)).

$$\sum_{mn}\sum_{q=0}^{l}\frac{f_1^{l-q}}{(l-q)!}\Bigg[\left(b^q_{-mn}\beta_n^{l-q}\rho_0^{l-q}-\kappa c^q_{-mn}\alpha_n^{l-q}\rho_{20}^{l-q}\right)\mathbf{m}_{-mn}+$$
$$+\left(a^q_{+mn}\beta_n^{l-q+1}\rho_0^{l-q}-\kappa d^q_{+mn}\alpha_n^{l-q+1}\rho_{20}^{l-q}\right)\mathbf{n}_{+mn}+$$
$$+\left(a^q_{+mn}\eta_n^{l-q}\rho_0^{l-q}-d^q_{+mn}\sigma_n^{l-q}\rho_{20}^{l-q}\right)f_{0\theta}\rho_0\mathbf{e}_\theta p_{+mn}+$$
$$+\left(a^q_{+mn}\eta_n^{l-q-1}\rho_0^{l-q-1}-d^q_{+mn}\sigma_n^{l-q-1}\rho_{20}^{l-q-1}\right)f_{1\theta}\rho_0\frac{l-q}{f_1}\mathbf{e}_\theta p_{+mn}\Bigg]\Bigg|_{r\in\sigma_0}=0. \quad (\text{П}.3)$$

Будем считать, что на данном шаге нам известны все коэффициенты $(l-1)$-го порядка и ниже, поэтому выделим в левой части слагаемое l-го порядка, а оставшееся выражение перенесем в правую часть и обозначим через вектор $\mathbf{S}_l$. Аналогично поступим для второго граничного условия на магнитное поле и получим уравнения (10).

[1] *Кравцов Ю.А., Орлов Ю.И.* Геометрическая оптика неоднородных сред, М., 1980 (*Kravtsov Yu. A., Orlov Yu. I.* Geometrical Optics of Inhomogeneous Media, Springer Berlin, Heidelberg, 1990).
[2] *Morrison J.A., Cross M.J., Chu T.S.* // Bell Syst. Tech. J., **52**, N 4. 599 (1973).
[3] *Waterman P.C.* // Proc. IEEE, **53**, N 6, 805 (1965).
[4] *Mishchenko M.I., Travis L.D., Lacis A.A.* Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles, Cambridge University Press, 1st edition, 2002.
[5] *Farafonov V.G., Il'in V.B., Vinokurov A.A., Barkanov S.V.* // J. Opt. Technol., **78**, N 8. 544 (2011)
[6] *Harrington R.F.* // J. Electromagn. Waves Appl. **1**, N 3. 181 (1987).
[7] *Taflove A.* Computational electrodynamics: the finite difference time–domain method, Artech House, Boston, 1995.
[8] *Lakhtakia A., Mulholland G.W.* // J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **98**, N 6. 699 (1993).
[9] *Volakis J.L., Chatterjee A., Kempel L.C.* // J. Opt. Soc. Am. A. **11**. 1422 (1994).
[10] *Erma V.A.* // Phys. Rev. **179**, N 5. 1238 (1969).
[11] *Gohsrich J., Shah T., Aiello A.* // Phys. Rev. A. **104**, N 2. 023516 (2021).
[12] *Badel M., Wiersig J.* // Phys. Rev. A. **99**, N 6. 063825 (2019).
[13] *Bekirov A.R., Luk'yanchuk B.S., Elyas E.I., Fedyanin A.A.* // Opt. Express. **31**, N 22. 37074 (2023).
[14] *Aydin K., Hizal A.* // J. Math. Anal. Appl. **117**, N 2. 428 (1986).
[15] *Фарафонов В.Г., Ильин В.Б., Туричина Д.Г.* // Оптика и спектроскопия, **131**, № 1. 36 (2023) (*Farafonov V.G., Il'in V.B., Turichina D.G.* // Opt. Spectrosc., **131**, N 1. 36 (2023))
[16] *Wriedt T.* // Part. Part. Syst. Charact. **15**, N 2. 67 (1998).
[17] *Mishchenko M.I.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **242**. 106692 (2020).
[18] *Mishchenko M. I., Travis L. D.* // Opt. Commun. **109**, N 1–2. 16 (1994).
[19] *Iskander M.F., Lakhtakia A.* // Appl. Opt. **23**, N 6. 948 (1984).
[20] *Il'in V.B., Turichina D.G., Farafonov V.G.* et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **311**. 108759 (2023).

Surface Perturbation Theory in the Problem of Light Elastic Scattering on Microparticles

A. R. Bekirov[a], A. F. Uspenskiy, B. S. Luk'yanchuk, A. A. Fedyanin

[1] *Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia*
E-mail: abekirovar@my.msu.ru

Using the method of perturbation theory, the problem of light scattering by particles of arbitrary axisymmetric shape has been solved. The proposed approach makes it possible to consider substantial deformations by decomposing the total deformation into smaller ones. The issues of convergence, applicability limits and conditions are discussed; a comparison with an alternative computational method is presented.

PACS: 42.25.Bs
Keywords: Mie theory, the T-matrix method, light scattering, perturbation theory.
Received 07 January 2025.
English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2025. **80**, No. 3. Pp. 537–544.

Сведения об авторах

1. Бекиров Арлен Ремзиевич — аспирант; e-mail: bekirovar@my.msu.ru.
2. Успенский Арсений Федорович — студент; e-mail: uspenskiyaf@my.msu.ru.
3. Лукьянчук Борис Семенович — доктор физ.-мат. наук, профессор; e-mail: lukyanchukbs@my.msu.ru.
4. Федянин Андрей Анатольевич — доктор физ.-мат. наук, зав кафедрой нанофотоники; e-mail: fedyanin@nanolab.phys.msu.ru.