Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 493, 2020 г.

В. Г. Фарафонов, В. И. Устимов, А. Е. Фарафонова, В. Б. Ильин

О T-МАТРИЦЕ В ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ СФЕРОИДАЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ СО СФЕРИЧЕСКИМ ЯДРОМ

**90-летию выдающегося ученого
в области дифракции и распространения волн
проф. Василия Михайловича Бабича**

Введение

Рассеяние света малыми несферическими слоистыми частицами представляет большой практический интерес [1], в частности, в нанооптике [2]. Если длина волны излучения много меньше размера частицы, то для описания светорассеяния целесообразно использовать приближение Релея. Фундаментом этого приближения является решение соответствующей электростатической задачи, в частности, определение поляризуемости частицы. Полный анализ задачи электростатики предполагает построение и исследование T-матрицы. Она связывает коэффициенты разложений внешнего и "рассеянного" полей по выбранному базису.

В данной работе решается электростатическая задача для сфероида со сферическим ядром, в том числе строится T-матрица. Отличительной чертой предлагаемого подхода является представление потенциалов полей в виде разложений по сфероидальным и сферическим гармоникам в окрестностях поверхностей частицы и ядра соответственно, что позволяет максимально учесть геометрию задачи. Сшивка полей внутри оболочки осуществляется с помощью известных соотношений между сфероидальными и сферическими гармониками. Затем

Ключевые слова: сфероидальные и сферические гармоники, уравнение Лапласа, сфероид со сферическим ядром, электростатика, T-матрица, приближение Релея.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение FSRF-2020-0004), а также грантов РФФИ (No. 18-52-52006) и РНФ (No. 20-72-10052).

рассматриваются свойства T-матрицы, а именно, ее симметричность и зависимость от размера слоистой частицы. Анализируется связь между T-матрицами, построенными в сферическом и сфероидальном базисах. Численный анализ поляризуемости и T-матриц для двухслойных частиц от близких по форме к шарам до сильно вытянутых подтверждает выводы об эффективности предложенного решения в отличии от методов, использующих единый сферический базис.

1. Постановка задачи

При решении электростатической задачи целесообразно использовать скалярные потенциалы Φ, которые связаны с напряженностью электрического поля следующим образим: $\vec{E} = -\nabla\Phi$ [1,3]. Для двухслойной частицы введем два индекса – Φ_i^j, где верхний $j = 1, 2, 3$ указывает на потенциал поля вне частицы, внутри оболочки и ядра соответственно. Нижний индекс принимает значение $i = 1$ для регулярной части, не имеющей особенностей в начале координат, и значение $i = 2$ для иррегулярной части, которая убывает к нулю на бесконечности и имеет особенность в начале координат.

Потенциал поля вне частицы представим в виде $\Phi^1 = \Phi_1^1 + \Phi_2^1$, где первое слагаемое Φ_1^1 описывает известное внешнее поле, а второе Φ_1^2 – "рассеянное" поле, возникшее из-за наличия частицы. Дипольная составляющая последнего определяет поляризуемость частицы и, следовательно, все характеристики рассеяния в релеевском приближении. Потенциал поля внутри оболочки содержит оба слагаемые, а именно $\Phi^2 = \Phi_1^2 + \Phi_2^2$. Из физических соображений поле внутри ядра не имеет особенностей в начале координат, поэтому соответствующий потенциал описывается только первым слагаемым – $\Phi^3 = \Phi_1^3$.

Потенциалы электростатических полей удовлетворяют уравнению Лапласа

$$\Delta\Phi_i^j = 0 \tag{1}$$

и граничным условиям, состоящим в непрерывности тангенциальных составляющих напряженностей электрических полей и нормальных составляющих векторов электрической индукции $\vec{D} = \varepsilon\vec{E}$ на поверхностях раздела сред [1,3]:

$$\left.\begin{array}{l} \Phi_1^j + \Phi_2^j = \Phi_1^{j+1} + \Phi_2^{j+1}, \\ \\ \frac{\partial(\Phi_1^j + \Phi_1^j)}{\partial n_j} = \varepsilon_{j+1}\frac{\partial(\Phi_1^{j+1} + \Phi_2^{j+1})}{\partial n_j}, \end{array}\right\}_{\vec{r}\in S_j} \tag{2}$$

где $j = 1, 2$. Здесь $\frac{\partial}{\partial n_j}$ – производные вдоль внешних нормалей к поверхностям частицы S_1 и ядра S_2, а ε_{j+1} - относительная диэлектрическая проницаемость $(j+1)$-й среды по сравнению с j-й средой.

Соотношения (1)–(2) можно рассматривать как постановку задачи в дифференциальной форме, например, для применения метода разделения переменных (SVM). Однако возможен другой подход, при котором задача формулируется в виде системы поверхностных интегральных уравнений, которые используются для ее решения методом расширенных граничных условий (EBCM) [4]:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{j+1} - 1)\int\limits_{S_j}\left\{\frac{\partial(\Phi_1^{j+1}(\vec{r}\,') + \Phi_2^{j+1}(\vec{r}\,'))}{\partial n\,'}G(\vec{r}, \vec{r}\,')\right\}\mathrm{d}s' \\ = \left\{\begin{array}{ll} \Phi_1^j(\vec{r}) - \Phi_1^{j+1}(\vec{r}), & \vec{r}\in D_j, \\ -\Phi_2^j(\vec{r}) + \Phi_2^{j+1}(\vec{r}), & \vec{r}\in R^3\setminus\bar{D}_j. \end{array}\right. \end{aligned} \tag{3}$$

Заметим, что функция Грина $G(\vec{r}, \vec{r}\,') = 1/4\pi|\vec{r} - \vec{r}\,'|$ одна для всех сред, где $\vec{r}, \vec{r}'$ – радиус-векторы точек наблюдения и интегрирования.

2.Сфероидальные и сферические гармоники

Введем сфероидальную систему координат (ξ, η, φ), которая связана с декартовой системой (x, y, z), ось z которой совпадает с осью симметрии сфероидальной системы, следующим образом [5]:

$$\begin{aligned} x &= \frac{d}{2}\left[(\xi^2 - f)(1 - \eta^2)\right]^{1/2}\cos\varphi, \\ y &= \frac{d}{2}\left[(\xi^2 - f)(1 - \eta^2)\right]^{1/2}\sin\varphi, \\ z &= \frac{d}{2}\,\xi\,\eta, \end{aligned} \tag{4}$$

где d – фокусное расстояние. Параметр $f=1$ для вытянутых сфероидальных координат, при этом $\xi\in[1,\infty)$, $\eta\in[-1,1]$, $\varphi\in[0,2\pi)$ и $f = -1$ для сплюснутых сфероидальных координат, при этом $\xi\in[0,\infty)$,

$\eta\in[-1,1]$ и $\varphi\in[0,2\pi)$. Обозначим большие и меньшие полуоси сфероида через a и b. Связь фокусного расстояния с полуосями можно записать в виде

$$d^2=4(a^2-b^2). \tag{5}$$

Введем сферическую систему координат (r,θ,φ), которая связана с декартовой системой (x,y,z) стандартным образом:

$$\begin{cases} x=r\ \sin\theta\ \cos\varphi,\\ y=r\ \sin\theta\ \sin\varphi,\\ z=r\ \cos\theta. \end{cases} \tag{6}$$

Уравнение Лапласа (1) допускает разделение переменных как в сферической системе (6), так и в вытянутой или сплюснутой сфероидальных системах (4). Соответствующие решения (гармоники) можно записать следующим образом [3]:

в сферической системе

$$\begin{matrix}\Upsilon^{(1)}_{ml}(\mathbf{r})\\ \Upsilon^{(2)}_{ml}(\mathbf{r})\end{matrix} = \begin{matrix} r^l \\ \frac{1}{2l+1}\ r^{-(l+1)}\end{matrix}\ \upsilon_{ml}(\theta,\varphi),$$

$$\upsilon_{ml}(\theta,\varphi)=\begin{matrix}\upsilon_{mle}(\theta,\varphi)\\ \upsilon_{mlo}(\theta,\varphi)\end{matrix} =\bar{P}^m_l(\cos\theta)\sqrt{\frac{2-\delta^0_m}{2\pi}}\ \begin{matrix}\cos m\varphi,\\ \sin m\varphi,\end{matrix} \tag{7}$$

в вытянутой сфероидальной системе

$$\begin{matrix}\Psi^{(1)}_{ml}(\vec{r})\\ \Psi^{(2)}_{ml}(\vec{r})\end{matrix} = \begin{matrix}\Psi^{(1)}_{ml}(\xi,\eta,\varphi)\\ \Psi^{(2)}_{ml}(\xi,\eta,\varphi)\end{matrix} = \begin{matrix}(\frac{d}{2})^l\ P^m_l(\xi)\\ \frac{(l-m)!}{(l+m)!}\ (\frac{d}{2})^{-(l+1)}Q^m_l(\xi)\end{matrix}\ \ \psi_{ml}(\eta,\varphi),$$

$$\psi_{ml}(\eta,\varphi)=\begin{matrix}\psi_{mle}(\eta,\varphi)\\ \psi_{mlo}(\eta,\varphi)\end{matrix} =\bar{P}^m_l(\eta)\sqrt{\frac{2-\delta^0_m}{2\pi}}\ \begin{matrix}\cos m\varphi,\\ \sin m\varphi,\end{matrix} \tag{8}$$

где $n\geqslant m\geqslant 0$ – неотрицательные целые числа, символ Кронеккера $\delta^0_m=1$ или 0, когда $m=0$ и $m\neq 0$ соответственно, $P^m_l(\eta)$ – присоединенные функции Лежандра 1-го рода, и соответствующие нормированные функции равны

$$\bar{P}^m_l(\eta)=\sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\ P^m_l(\eta)=N^{-1}_{ml}\ P^m_l(\eta). \tag{9}$$

Сфероидальные угловые функции ψ_{ml} образуют полную ортонормированную систему в пространстве $L_2(\Omega)$ с квадратичной метрикой:

$$\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_{-1}^{1} \psi_{mn}(\eta,\varphi)\,\psi_{\mu\nu}(\eta,\varphi)\,\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\varphi = \delta_m^\mu\ \delta_n^\nu\,, \tag{10}$$

т.е. на поверхности любого координатного сфероида Ω. Сферические угловые функции (7) также образуют полную ортонормированную систему в пространстве $L_2(\Omega)$ с квадратичной метрикой (10) на любой координатной сфере при замене $\eta \longrightarrow \cos\theta$.

Для функций, зависящих от угловой координаты η, вторые линейно независимые решения $Q_l^m(\eta)$ не рассматриваются, так как они имеют особенности при $\eta = \pm 1$ и не подходят по физическим соображениям. Для функций, зависящих от радиальных координат, используется следующее определение, отличающееся постоянным множителем от указанного в [3]:

$$P_l^m(\xi) = \left(\xi^2-1\right)^{\frac{m}{2}}\ \frac{d^mP_l(\xi)}{d\xi^m}, \qquad Q_l^m(\xi) = \left(\xi^2-1\right)^{\frac{m}{2}}\ \frac{d^mQ_l(\xi)}{d\xi^m}. \tag{11}$$

Заметим, что функции 2-го рода стремятся к нулю на бесконечности и имеют особенность на фокусном отрезке для вытянутых или фокусном круге для сплюснутых функций.

В сплюснутой сфероидальной системе гармоники записываются аналогичным образом с точностью до замены $\xi \to i\,\xi,\ d \to -i\,d$.

Введем векторы для сферических $\vec{\Upsilon}_m^{(i)} = \left\{\Upsilon_{ml}^{(i)}(\vec{r})\right\}$ и сфероидальных $\vec{\Psi}_m^{(i)} = \left\{\Psi_{ml}^{(i)}(\vec{r})\right\}$ функций (7)–(8). Для введенных нами сферических и сфероидальных гармоник 1-го и 2-го родов соответствующие уравнения можно записать в матричном виде [6]

$$\vec{\Psi}_m^{(i)} = \nabla_m^{(i)}(d)\,\vec{\Upsilon}_m^{(i)}, \tag{12}$$

где элементы матриц перехода определяются из соотношений

$$\nabla_{nl,\ m}^{(1)}(d) = \frac{2n+1}{2}N_{mn}(-1)^{\frac{n-l}{2}}\frac{(n+l-1)!!}{(n-l)!!(l+m)!}\left(\frac{d}{2}\right)^{(n-l)}N_{ml},\ n \geqslant l. \tag{13}$$

$$\nabla_{nl,\ m}^{(2)}(d) = N_{mn}^{-1}\left(\frac{d}{2}\right)^{(l-n)}\ \frac{(l-m)!(2l+1)}{(l-n)!!(l+n+1)!!}\,N_{ml}, \quad n \leqslant l. \tag{14}$$

Поскольку матрица $\nabla^{(1)}(d)$ связывает полиномы степени не выше n-й, то она является нижнетреугольной

$$\Psi_{mn}^{(1)}(d) = \sum_{l=m}^{n}{}' \nabla_{nl,\ m}^{(1)}(d)\, \vec{\Upsilon}_{ml}^{(1)} \tag{15}$$

и $\nabla_{nl,\ m}^{(1)}(d) = 0, n < l$. Штрих над знаком суммы означает, что суммирование ведется по индексам l, четность которых совпадает с четностью индекса n.

Для сфероидальных гармоник 2-го рода матрицы перехода являются верхнетреугольными:

$$\Psi_{mn}^{(2)}(d) = \sum_{l=n}^{\infty}{}' \nabla_{nl,\ m}^{(2)}(d)\, \vec{\Upsilon}_{ml}^{(2)}, \tag{16}$$

так как для них на бесконечности справедливы оценки

$$\Psi_{mn}^{(2)}(d) = \frac{C}{r^{-(n+1)}} \left(1 + O\left(\frac{1}{\xi^{-1}}\right)\right). \tag{17}$$

Обратный переход от сферических гармоник к сфероидальным описывается обратными матрицами:

$$\vec{\Upsilon}_{m}^{(i)} = \left(\nabla_{m}^{(i)}(d)\right)^{-1} \vec{\Psi}_{m}^{(i)}, \tag{18}$$

элементы которой определяются из соотношений

$$\left(\nabla_{m}^{(1)}(d)\right)_{nl}^{-1} = (n+m)! N_{mn}^{-1} \frac{2}{(n-l)!!(n+l+1)!!} \left(\frac{d}{2}\right)^{(n-l)} N_{ml}^{-1}, \quad n \geqslant l. \tag{19}$$

$$\left(\nabla_{m}^{(2)}(d)\right)_{nl}^{-1}(d) = \frac{(-1)^{\frac{l-n}{2}}}{(2n+1)(n-m)!} N_{mn}^{-1} \left(\frac{d}{2}\right)^{(l-n)} \frac{(2l+1)(n+l-1)!!}{(l-n)!!} N_{ml}, \quad n \leqslant l. \tag{20}$$

Данные матрицы также являются нижнетреугольными и верхнетреугольными соответственно.

В работе [6] показано, что для матриц перехода 1-го и 2-го рода имеет место равенство

$$\nabla_{m}^{(1)}(d)\, \nabla_{m}^{(2)\,T}(d) = I, \tag{21}$$

где I – единичная матрица. Таким образом, для данных матриц справедливы следующие соотношения:

$$\left(\nabla_m^{(1)}(d)\right)^{(-1)} = \nabla_m^{(2)\,T}(d), \qquad \left(\nabla_m^{(2)}(d)\right)^{(-1)} = \nabla_m^{(1)\,T}(d), \tag{22}$$

где T означает транспонирование матрицы.

3.Решение для двухслойного сфероида со сферическим ядром

Идея решения состоит в том, чтобы в окрестности сфероидальной границы частицы потенциалы полей представлять в виде разложений по сфероидальным гармоникам, а в окрестности поверхности ядра потенциалы записывать в виде разложений по сферических гармоникам. Сшивка разложений одних и тех же потенциалов внутри оболочки частицы осуществляется с помощью известной связи между сфероидальными и сферическими гармониками.

Уравнение поверхности частицы S_1 в сфероидальной системе имеет вид

$$\xi = \xi_0. \tag{23}$$

электростатическая задача для осесимметричных частиц решается независимо для каждого слагаемого разложений потенциалов Φ в ряды Фурье по азимутальному углу φ, так как имеет место разделение относительно переменной φ. Поэтому при вертикальной ориентации внешнего поля можно рассматривать только члены с азимутальным индексом $m = 0$, а при горизонтальной ориентации – только члены с индексом $m = 1$.

Регулярный и иррегулярный потенциалы в окрестности сфероидальной поверхности частицы будем представлять в виде разложений по сфероидальным гармоникам

$$\begin{matrix} \Phi_1^1 \\ \Phi_2^1 \end{matrix} = {\sum_{l=1}^{\infty}}' \begin{matrix} a_{1,\,ml}^{(1)}\,\Psi_{ml}^{(1)}(\xi,\eta,\varphi) \\ b_{1,\,ml}^{(1)}\,\Psi_{ml}^{(2)}(\xi,\eta,\varphi). \end{matrix} \tag{24}$$

Если единичное внешнее поле направлено вдоль или перпендикулярно оси вращения, то отличны от нуля только коэффициенты $a_{01}^{(1)} = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}}$ или $a_{11}^{(1)} = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}}$ соответственно.

Для поля внутри оболочки в окрестности сфероидальной поверхности соответствующие потенциалы представляются в виде

$$\begin{matrix} \Phi_1^2 \\ \Phi_2^2 \end{matrix} = {\sum_{l=1}^{\infty}}' \begin{matrix} a_{1,\,ml}^{(2)}\,\Psi_{ml}^{(1)}(\xi,\eta,\varphi) \\ b_{1,\,ml}^{(2)}\,\Psi_{ml}^{(2)}(\xi,\eta,\varphi). \end{matrix} \tag{25}$$

Уравнение поверхности ядра частицы S_2 во сферической системе имеет вид

$$r = r_0. \tag{26}$$

Потенциалы полей во внешней окрестности поверхности ядра частицы могут быть представлены в виде разложений по сферическим гармоникам

$$\begin{matrix} \Phi_1^2 \\ \Phi_2^2 \end{matrix} = {\sum_{l=1}^{\infty}}' \begin{matrix} a_{2,\,ml}^{(2)}\,\Upsilon_{ml}^{(1)}(r,\theta,\varphi) \\ b_{2,\,ml}^{(2)}\,\Upsilon_{ml}^{(2)}(r,\theta,\varphi). \end{matrix} \tag{27}$$

Наконец, потенциал поля внутри ядра имеет вид

$$\Phi_1^3 = {\sum_{l=1}^{\infty}}' a_{ml}^{(3)}\,\Upsilon_{ml}^{(1)}(r,\theta,\varphi), \tag{28}$$

где штрих означает, что с учетом свойств четности суммирование нужно вести только по нечетным индексам l.

Проведем сшивку разложений (25) и (27), используемых внутри оболочки. В матричном виде с учетом соотношений между сфероидальными и сферическими гармониками (12) имеем

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_1^{\,(2)} \\ \vec{b}_1^{\,(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla^{(1)\,T}(d) & 0 \\ 0 & \nabla^{(2)\,T}(d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_2^{\,(2)} \\ \vec{b}_2^{\,(2)} \end{pmatrix}, \tag{29}$$

где использованы транспонированные матрицы и векторы коэффициентов разложений.

Представления потенциалов полей удовлетворяют уравнению Лапласа (1) и условиям на бесконечности, при этом неизвестные коэффициенты определяются из граничных условий (2) или интегральных уравнений (3). В первом случае применяется метод разделения переменных, а во втором – метод расширенных граничных условий. Оба метода для рассматриваемой задачи эквивалентны, так как приводят к одинаковым системам линейных алгебраических уравнений, которые решаются в явном виде. Нетрудно показать, что эти решения одинаковы.

Рассмотрим метод EBCM. Для алгебраизации интегральных уравнений на поверхности частицы подставим в них разложения потенциалов и функции Грина в сфероидальной системе координат. В результате получим

$$\left.\begin{aligned} \vec{a}^{\,(1)} &= A_{31}^{(1)}\ \ \vec{a}_1^{\,(2)} + A_{33}^{(1)}\ \ \vec{b}_1^{\,(2)}, \\ \vec{b}^{\,(1)} &= A_{11}^{(1)}\ \ \vec{a}_1^{\,(2)} + A_{13}^{(1)}\ \ \vec{b}_1^{\,(2)}. \end{aligned}\right\} \tag{30}$$

Аналогично для ядра частицы используются разложения потенциалов и функции Грина в сферической системе координат:

$$\left.\begin{aligned} \vec{a}_1^{\,(2)} &= A_{31}^{(2)}\ \ \vec{a}^{\,(3)}, \\ \vec{b}_1^{\,(2)} &= A_{11}^{(2)}\ \ \vec{a}^{\,(3)}. \end{aligned}\right\} \tag{31}$$

Выше были введены векторы

$$\vec{a}_i^{\,(j)} = \left\{a_{ml}^{j}\right\}_m^{\infty}, \quad \vec{b}_i^{\,(j)} = \left\{b_{ml}^{j}\right\}_m^{\infty}$$

и матрицы

$$\begin{aligned} A_{31}^{(1)} &= \left\{\delta_l^n + (\varepsilon_2 - 1)\ L_{nl,\ m}^{1,\ 31}\right\}_m^{\infty}, \qquad A_{33}^{(1)} = \left\{(\varepsilon_2 - 1)\ L_{nl,\ m}^{1,\ 33}\right\}_m^{\infty}, \\ A_{11}^{(1)} &= \left\{-(\varepsilon_2 - 1)\ L_{nl,\ m}^{1,\ 11}\right\}_m^{\infty}, \qquad A_{13}^{(1)} = \left\{\delta_l^n - (\varepsilon_2 - 1)\ L_{nl,\ m}^{1,\ 13}\right\}_m^{\infty}. \end{aligned} \tag{32}$$

Здесь использовано обозначение для интегралов

$$L_{nl,\ m}^{1,\ ki} = \int\limits_{S_1} \Psi_{mn}^{(k)}(\vec{r})\frac{\partial \Psi_{ml}^{(i)}(\vec{r})}{\partial n}\mathrm{d}s. \tag{33}$$

Для второй системы сфероидальные гармоники следует заменить сферическими и интегрировать по поверхности ядра (сфере). Окончательно с учетом соотношений (10) матричные элементы легко найти в явном виде

$$
\begin{aligned}
(A_{31}^{(1)})_{nn} &= 1 + (\varepsilon_2 - 1)\frac{(n-m)!}{(n+m)!}((\xi_0)^2 - 1){P_n^m}'(\xi_0)Q_n^m(\xi_0),\\
(A_{33}^{(1)})_{nn} &= (\varepsilon_2 - 1)\left(\frac{(n-m)!}{(n+m)!}\right)^2\left(\frac{d}{2}\right)^{-(2n+1)}((\xi_0)^2 - 1){Q_n^m}'(\xi_0)Q_n^m(\xi_0),\\
(A_{11}^{(1)})_{nn} &= -(\varepsilon_2 - 1)\left(\frac{d}{2}\right)^{2n+1}((\xi_0)^2 - 1){P_n^m}'(\xi_0)P_n^m(\xi_0),\\
(A_{13}^{(1)})_{nn} &= 1 - (\varepsilon_2 - 1)\frac{(n-m)!}{(n+m)!}((\xi_0)^2 - 1){Q_n^m}'(\xi_0)P_n^m(\xi_0),\\
(A_{31}^{(2)})_{nn} &= 1 + (\varepsilon_3 - 1)\frac{n}{2n+1},\\
(A_{11}^{(2)})_{nn} &= -(\varepsilon_3 - 1)n\,(r_0)^{2n+1}.
\end{aligned}
\tag{34}
$$

Соотношения для сплюснутых частиц можно получить с помощью стандартной замены.

Общую систему можно записать в виде

$$
\left.
\begin{aligned}
\vec{a}^{\,(1)} &= A_1\ \vec{a}^{\,(3)},\\
\vec{b}^{\,(1)} &= A_2\ \vec{a}^{\,(3)},
\end{aligned}
\right\}
\tag{35}
$$

где матрицы A_1 и A_2 удовлетворяют соотношению

$$
\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{31}^{(1)} & A_{33}^{(1)} \\ A_{11}^{(1)} & A_{13}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla^{(1)\,T}(d) & 0 \\ 0 & \nabla^{(2)\,T}(d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{31}^{(2)} \\ A_{11}^{(2)} \end{pmatrix}. \tag{36}
$$

Теперь нетрудно найти коэффициенты разложения потенциала “рассеянного” излучения, а именно

$$
\vec{b}^{\,(1)} = A_2(A_1)^{(-1)}\ \vec{a}^{\,(1)} = T\ \vec{a}^{\,(1)}. \tag{37}
$$

Ранее была найдена связь между T-матрицей и поляризуемостью частицы [7]. Например, при ориентации внешнего поля перпендикулярно оси вращения частицы имеем

$$\alpha_x = \alpha_y = -\frac{4\pi}{3}\,\frac{b_{11}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = -\frac{4\pi}{3}\,T_{11},$$

$$\alpha_z = -\frac{4\pi}{3}\,\frac{b_{01}^{(1)}}{a_{01}^{(1)}} = -\frac{4\pi}{3}\,T_{11}. \tag{38}$$

Таким образом, для приближения Релея требуется только один элемент этой матрицы – T_{11}. Для полного решения электростатической задачи требуется вся T-матрица.

4. Свойства T-матрицы

Ниже построим другое выражение для Т-матрицы. Сначала из уравнения (31) найдем Т-матрицу для ядра:

$$\vec{b}_2^{(2)} = A_{11}^{(2)}(A_{31}^{(2)})^{(-1)}\;\vec{a}_2^{(2)} = T_c\;\vec{a}_2^{(2)}, \tag{39}$$

которая представляет собой диагональную матрицу. Затем из уравнения для сшивки полей (29) найдем Т-матрицу для ядра, но в сфероидальной системе:

$$\vec{b}_1^{(2)}=\nabla^{(2)T}(d)\,T_c(\nabla^{(1)T}(d))^{-1}\vec{a}_1^{(2)}=\nabla^{(2)T}(d)\,T_c\,\nabla^{(2)}(d)\,\vec{a}_1^{(2)}=\widetilde{T}_c\,\vec{a}_1^{(2)}, \tag{40}$$

Теперь систему (30) можно записать в виде

$$\left.\begin{aligned} \vec{a}^{\,(1)} &= A_{31}^{(1)}\;\;\vec{a}_1^{(2)} + A_{33}^{(1)}\;\;\widetilde{T}_c\;\vec{a}_1^{(2)},\\ \vec{b}^{\,(1)} &= A_{11}^{(1)}\;\;\vec{a}_1^{(2)} + A_{13}^{(1)}\;\;\widetilde{T}_c\;\vec{a}_1^{(2)}. \end{aligned}\right\} \tag{41}$$

Из этой системы легко найти Т-матрицу двухслойной частицы:

$$T = \left(A_{11}^{(1)} + A_{13}^{(1)}\;\widetilde{T}_c\right)\left(A_{31}^{(1)} + A_{33}^{(1)}\;\widetilde{T}_c\right)^{-1}, \tag{42}$$

Первое важное свойство Т-матрицы заключается в том, что она является симметричной. Оно следует из уравнения

$$\left(A_{31}^{(1)}+\widetilde{T}_c\,A_{33}^{(1)}\right)\left(A_{11}^{(1)}+A_{13}^{(1)}\,\widetilde{T}_c\right)=\left(A_{11}^{(1)}+\widetilde{T}_c\,A_{13}^{(1)}\right)\left(A_{31}^{(1)}+A_{33}^{(1)}\,\widetilde{T}_c\right), \tag{43}$$

которое нетрудно доказать, учитывая соотношения (34) и следующее из них равенство
$$A_{31}^{(1)} A_{13}^{(1)} - A_{11}^{(1)} A_{33}^{(1)} = \varepsilon_2. \tag{44}$$
Отметим, что матрица $\widetilde{T}_c$ также является симметричной.

Второе свойство связано с зависимостью от размера частицы и ее ядра. Пусть размер частицы и ее ядра увеличивается в k раз. Тогда новое фокусное расстояние и радиус ядра увеличится в k раз: $\hat{d} = kd$ и $\hat{r}_0 = kr_0$. В данном случае система уравнений аналогичная (29)–(36) будет иметь точно такой же вид, но относительно переменных $\hat{a}_{ml}^{(i)} = k^l a_{ml}^{(i)}$ и $\hat{b}_{ml}^{(i)} = k^{-(l+1)} b_{ml}^{(i)}$. В результате получим
$$\vec{\hat{b}}^{\,(1)} = T\ \vec{\hat{a}}^{\,(1)}, \tag{45}$$
т.е.
$$\hat{b}_{mn}^{(1)} = \sum_{l=1}^{\infty} T_{nl}\ \hat{a}_{ml}^{(1)}, \tag{46}$$
Таким образом, элементы новой и старой Т-матриц будут связаны соотношением
$$\hat{T}_{nl} = k^{(n+l+1)}\ T_{nl}. \tag{47}$$
В частности, основной элемент и поляризуемость частицы увеличатся в k^3 раз: $\hat{T}_{11} = k^3\ T_{11}$ и $\hat{\alpha}_j = k^3\ \alpha_j$.

Рассмотрим связь сфероидальной и сферической Т-матриц. В последнем случае потенциалы внешнего и “рассеянного” полей представляются в виде
$$\begin{array}{c} \Phi_1^1 \\ \Phi_2^1 \end{array} = \sum_{l=1}^{\infty}{}' \begin{array}{l} \widetilde{a}_{2,\,ml}^{(1)}\ \Upsilon_{ml}^{(1)}(r,\theta,\varphi) \\ \widetilde{b}_{2,\,ml}^{(1)}\ \Upsilon_{ml}^{(2)}(r,\theta,\varphi), \end{array} \tag{48}$$
а для коэффициентов разложения имеем
$$\vec{\widetilde{b}}^{\,(1)} = \widetilde{T}\ \vec{\widetilde{a}}^{\,(1)}. \tag{49}$$
Принимая во внимание полученные ранее результаты (25), (27) и (29), можно записать уравнения
$$\vec{\widetilde{a}}^{\,(1)} = \nabla^{(1)\,T}(d)\ \vec{a}^{\,(1)}, \tag{50}$$
$$\vec{\widetilde{b}}^{\,(1)} = \nabla^{(2)\,T}(d)\ \vec{b}^{\,(1)}. \tag{51}$$
Подставляя в формулу (49), имеем
$$\nabla^{(2)\,T}(d)\ \vec{b}^{\,(1)} = \widetilde{T}\ \nabla^{(1)\,T}(d)\ \vec{\widetilde{a}}^{\,(1)}. \tag{52}$$

Учитывая соотношения (22), получим

$$\vec{b}^{(1)} = \nabla^{(1)}(d)\ \widetilde{T}\ \nabla^{(1)\,T}(d)\ \vec{a}^{(1)}. \tag{53}$$

Сравнивая соотношения (37) и (53), находим связь между сферической и сфероидальной матрицами:

$$T = \nabla^{(1)}(d)\ \widetilde{T}\ \nabla^{(1)\,T}(d), \tag{54}$$

и

$$\widetilde{T} = \nabla^{(2)\,T}(d)\ T\ \nabla^{(2)}(d), \tag{55}$$

Данные соотношения могут служить надежной проверкой результатов численных расчетов. В частности, для основного элемента T-матрицы и поляризуемости частицы получим $T_{11} = \widetilde{T}_{11}$ и $\alpha_j = \widetilde{\alpha}_j$.

5. Обсуждение результатов численных расчетов

Численные расчеты проводились для сфероидов со сферическим ядром, показатели преломления сред которых равны $m_1 = 1.3$ и $m_2 = 1.7$ соответственно. Размер ядра предполагался равным $r_0 = 0.8$, а малая полуось сфероида $b = 1$, при этом отношение полуосей частицы выбирается равным $a/b = 1.5$, $(\sqrt{2}+1)$ и 5, т.е. форма частицы меняется от близкой к сферической до сильно вытянутой. Напряженность электрического поля предполагается направленной вдоль оси вращения сфероида.

В таблице 1 приведены значения поляризуемостей рассматриваемой частицы, вычисленные с использованием разных подходов. Во-первых, применялся метод EBCM2, развитый в настоящей работе. Как было отмечено выше, он эквивалентен методу разделения переменных (SVM2). Также использовались методы SVM1 [8] и EBCM1 [4], где потенциалы полей представляются в виде разложений по единому сферическому базису. В таблице указывается количество N слагаемых в разложениях полей, учитываемых при численных расчетах.

Как известно, применение единого сферического базиса для слоистых сфероидальных частиц имеет ограничения [4, 9], а именно, отношение полуосей внешнего сфероида должно удовлетворять условию $a/b < (\sqrt{2}+1)$. Из таблиц 1 видно, что EBCM1 не работает при нарушении этого неравенства. Что касается SVM1, то он дает приемлемые результаты при $a/b = (\sqrt{2}+1)$, однако при $a/b = 5$ также не работает.

N	SVM2	SVM1	EBCM1
	$a_1 = 1.5 \quad b_1 = 1.0$		
8	5.24201	5.24144	5.24213
16	5.24201	5.24204	5.24204
24	5.24201	5.24204	5.24204
32	5.24201	5.24204	5.24204
	$a_1 = 1 + \sqrt{2} \quad b_1 = 1.0$		
8	8.05617	7.92088	8.13858
16	8.05569	8.05043	8.12831
24	8.05569	8.05552	8.06616
32	8.05569	8.05574	7.77332
	$a_1 = 5.0 \quad b_1 = 1.0$		
8	15.82094	13.11243	74.9
16	15.81271	12.94706	–
24	15.81182	14.71105	–
32	15.81175	13.69797	–

Таблица 1. Поляризуемости в зависимости от a_1/b_1 ($a_2 = b_2 = 0.8$).

k	SVM2				SVM1		EBCM1	
	T_{1k}	T_{k1}	$\tilde{T}_{1k}$	$\tilde{T}_{k1}$	T_{1k}	T_{k1}	T_{1k}	T_{k1}
3	0.94277	0.94277	-1.05659	-1.05659	-1.05777	-1.05777	-1.05777	-1.05777
5	-1.80051	-1.80051	-1.17674	-1.17674	-1.17662	-1.17662	-1.17662	-1.17662
7	3.02661	3.02661	-1.33322	-1.33322	-1.33327	-1.33327	-1.33327	-1.33327
9	-4.74483	-4.74483	-1.53278	-1.53278	-1.53283	-1.53277	-1.53283	-1.53283
11	7.11794	7.11794	-1.78236	-1.78236	-1.78241	-1.78167	-1.78241	-1.78241
13	-10.35754	-10.35754	-2.09095	-2.09095	-2.09100	-2.08431	-2.09101	-2.09100
15	14.73719	14.73719	-2.47014	-2.47014	-2.47020	-2.42551	-2.47021	-2.47017
17	-20.60871	-20.60874	-2.93459	-2.93459	-2.93464	-2.71262	-2.93468	-2.93454
19	28.41253	28.41344	-3.50256	-3.50256	-3.50257	-2.68710	-3.50265	-3.50223
21	-38.34969	-38.37753	-4.19665	-4.19665	-4.19657	-2.01079	-4.19677	-4.19560
23	41.27604	41.96036	-5.04481	-5.04481	-5.04455	-0.81076	-5.04495	-5.04200

Таблица 2. T матрица для сфероидов с $a_1 = 1.5$ и $b_1 = 1.0$ ($N = 24$).

В таблицах 2–3 приведены значения элементов 1-й строки и 1-го столбца T-матрицы, в том числе матрицы $\widetilde{T}$ в сферическом базисе, пересчитанной по T-матрице в сфероидальном базисе по формуле (55).

Ниже обсуждаются результаты для T-матрицы. Если форма внешнего сфероида близка к сферической ($a/b = 1.5$), то все методы дают

	SVM2				SVM1	
k	T_{1k}	T_{k1}	T_{1k}	T_{k1}	T_{1k}	T_{k1}
3	4.04685e+00	4.04685e+00	-6.89182e+00	-6.89182e+00	-6.89198e+00	-6.88488e+00
5	-2.93900e+01	-2.93900e+01	-2.96401e+01	-2.96401e+01	-2.96240e+01	-2.9321e+01
7	1.89626e+02	1.89626e+02	-1.29687e+02	-1.29687e+02	-1.29543e+02	-1.232e+02
9	-1.14639e+03	-1.14639e+03	-5.75873e+02	-5.75873e+02	-5.74775e+02	-4.891e+02
11	6.64803e+03	6.64803e+03	-2.58651e+03	-2.58651e+03	-2.57908e+03	-1.73e+03
13	-3.74534e+04	-3.74534e+04	-1.17205e+04	-1.17205e+04	-1.16742e+04	-5.18e+03
15	2.06564e+05	2.06564e+05	-5.34827e+04	-5.34827e+04	-5.32118e+04	-1.24e+04
17	-1.12083e+06	-1.12083e+06	-2.45432e+05	-2.45432e+05	-2.43915e+05	-2.24e+04
19	6.00369e+06	6.00369e+06	-1.13152e+06	-1.13152e+06	-1.12331e+06	-2.85e+04
21	-3.18232e+07	-3.18232e+07	-5.23690e+06	-5.23690e+06	-5.19357e+06	-2.26e+04
23	1.67221e+08	1.67221e+08	-2.43170e+07	-2.43170e+07	-2.40927e+07	-8.40e+03

Таблица 3. То же, что и в табл.2, но для $a_1 = 1 + \sqrt{2}$ и $b_1 = 1.0$.

согласованные результаты (см. Таблицу 2). Только для SVM1 наблюдается нарушение симметрии с увеличением количества учитываемых слагаемых $N \geqslant 15$.

Сравнение сферической T-матрицы с “пересчитанной” $\widetilde{T}$-матрицей показывает, что их совпадение является отличной проверкой для нового алгоритма.

Если сфероид становится достаточно вытянутым ($a/b = (\sqrt{2}+1)$), что соответствует границе области применимости методов с единым сферическим базисом, то EBCM1 совсем не работает (таблицы 1 и 3). Метод SVM1 сохраняет симметричность T-матрицы с ошибкой менее 1% только для элементов T_{13} и T_{15}, но дальше погрешность быстро растет. Это показывает, что применимость SVM1 в данном случае вызывает вопросы. Из таблицы 3 видно, что при использовании этого метода неплохие результаты показывает 1-я строка, т.е. T_{1k}, а не 1-й столбец, который соответствует решению задачи. Это известный результат для однородной частицы [7,10], указывающий на целесообразность использования другой схемы решения, приводящей к транспонированной T-матрице.

Для сильно вытянутых частиц с $a/b = 5$ работает только SVM2. Его применимость подтверждается сходимостью с ростом числа N как поляризуемости частицы (таблица 1), так и элементов T-матрицы и “пересчитанной” $\widetilde{T}$-матрицы при $N = 24 - 32$ с точностью до 5 значащих цифр.

Выводы

1. Построено эффективное решение электростатической задачи для сфероида со сферическим ядром, основанное на максимальном учете геометрии задачи. При этом используются представления потенциалов полей в виде разложений по сфероидальным и сферическим гармоникам в окрестностях поверхностей частицы и ядра соответственно. Внутри оболочки осуществляется сшивка двух указанных выше представлений полей.

2. Найдена связь между Т-матрицами рассматриваемой задачи, соответствующими сфероидальному и сферическому базисам. Установлена симметричность построенной матрицы и ее зависимость от размера частицы.

3. Численные расчеты показали, что предложенное решение рассматриваемой задачи является эффективным как для двухслойной частицы близкой по форме к сферической, так и для сильно вытянутой, в отличии от методов, использующих единый сферический базис.

Список литературы

1. К. Борен, Д. Хаффмен, *Поглощение и рассеяние света малыми частицами,* М.: Мир, 1986.
2. В. В. Климов, *Наноплазмоника,* М.: Физматлит, 2009.
3. Ф. М. Морс, Г. Фешбах, *Методы теоретической физики,* М.: ИЛ, 1958.
4. В. Г. Фарафонов, В. И. Устимов, М. В. Соколовская, *Условие применимости EBCM для малых многослойных частиц.* — Опт. и спектр., **120** (2016), 470–483.
5. В. И. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов, *Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции.* М.: Наука, 1976.
6. В. Г. Фарафонов, В. И. Устимов, В. Б. Ильин, *Соотношения между сфероидальными гармониками и приближение Релея для многослойных несофокусных сфероидов.* — Зап. науч. семин. ПОМИ, **483** (2019), 199–240.
7. В. Г. Фарафонов, В. И. Устимов, *О свойствах Т-матрицы в релеевском приближении.* — Опт. и спектр., **119** (2015), 1020–1032.
8. В. Г. Фарафонов, В. И. Устимов, *Рассеяние света малыми многослойными частицами: обобщенный метод разделения переменных.* — Опт. и спектр., **124** (2018), 255–263.
9. В. Г. Фарафонов, В. Б. Ильин, *О применимости сферического базиса для сфероидальных слоистых рассеивателей.* — Опт. и спектр., **115** (2013), 836–843.
10. В. Г. Фарафонов, *Гипотеза Релея и область применимости метода расширенных граничных условий в электростатических задачах для несферических частиц.* — Опт. и спектр., **117** (2014), 949–962.

Farafonov V. G., Ustimov V. I., Farafonova A. E., Il'in V. B. On the T-matrix in the electrostatic problem for the spheroidal particle with a spherical core.

A solution to the electrostatic problem for the spheroidal particle with a spherical core is constructed. To involve the problem geometry in a full manner, in a vicinity of the particle surface the potentials of the fields are represented by their expansions in terms of spheroidal harmonics of Laplace's equation, while in a vicinity of the core surface by the expansions in terms of spherical harmonics. Matching of the fields inside the particle shell is made by using the relations between the spheroidal and spherical harmonics. The T-matrix relates the coefficients of expansions of the incident and "scattered" fields. In the paper, both the particle polarizability related to the main matrix element T11, and the whole T-matrix are considered. The symmetry of the matrix as well as its dependence on the size of the layered particle are shown. A relation between the T-matrixes in the spherical and spheroidal systems was also found. Numerical calculations made for particles of small and large aspect ratios ($a/b = 1.5 - 5.0$) confirmed high efficiency of the suggested solution in contrast to the methods that use a single spherical basis.

С.-Петербургский государственный университет
аэрокосмического приборостроения,
ул. Б. Морская, д. 67,
190000, С.-Петербург, Россия
E-mail: far@aanet.ru
E-mail: vl.ust1@ya.ru

Поступило 9 ноября 2020 г.

С.-Петербургский государственный университет,
Университетский пр., д. 28,
С.-Петербургский государственный университет
аэрокосмического приборостроения,
ул. Б. Морская, д. 67,
Главная (Пулковская) Астрономическая
обсерватория РАН, Пулковское ш., д. 65/1
С.-Петербург, Россия
E-mail: v.b.ilin@spbu.ru