

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ» (НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ, НГУ)

Факультет **ФИЗИЧЕСКИЙ**

Кафедра **ХИМИЧЕСКОЙ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

Направление подготовки **03.04.02 ФИЗИКА**

Образовательная программа: **МАГИСТРАТУРА**

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**  
(научно-исследовательский формат/проектно-исследовательский формат)

**Палаткина Никиты Юрьевича**

(Фамилия, Имя, Отчество автора)

Тема работы **Моделирование светорассеяния частицами вблизи двухслойной подложки с помощью метода дискретных диполей**

«К защите допущена»

И.о. заведующего кафедрой

**Юркин Максим Александрович**

К.ф.-м.н.

к.ф.-м.н.

С.н.с. ЛКХКМ, ИХКГ СО РАН

С.н.с, ЛЦИБ, ИХКГ СО РАН

Киселев В.Г. /.....  
(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

...../.....  
(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

«.....»...июня 2022 г.

«.....» июня 2022 г.

Дата защиты: « 21 » июня 2022 г.

Новосибирск, 2022

## Оглавление

1	Введение.....	3
2	Литературный обзор .....	6
2.1	Общее решение прямой задачи рассеяния.....	6
2.2	Функция Грина в свободном пространстве. ....	10
2.3	Однослойная подложка.....	11
2.3.1	Учет подложки в функции Грина.....	11
2.3.2	Корректировка падающего поля.....	14
2.3.3	Корректировка амплитуды рассеяния.....	18
2.4	Метод дискретных диполей (МДД).....	20
3	Методы и объекты исследования .....	23
3.1	Обобщение функции Грина для двухслойной подложки .....	23
3.2	Обобщенные коэффициенты Френеля. ....	27
3.3	Корректировка падающего и рассеянного поля.....	30
4	Результаты и обсуждение .....	31
4.1	Сравнение реализованного алгоритма с PyGDM.....	31
4.2	Моделирования.....	35
4.2.1	Построение зависимости эффективности экстинкции от угла падения волны .....	35
4.2.2	Моделирования с рассеивателем нетривиальной формы. ....	36
5	Заключение .....	39
6	Основные результаты и выводы .....	40
7	Библиографический список .....	41
	Приложение.....	44

# 1 Введение

Методы моделирования светорассеяния частицами активно развиваются и находят свое приложение в таких областях науки, как астрофизика [1], цитометрия [2], нанофотоника [3] и др.

Потребность в таком моделировании отчасти обусловлена тем что, имея полученные экспериментально параметры рассеяния, такие как индикатриса рассеяния частицей, нельзя аналитически восстановить структуру, форму и размер рассеивающей частицы (т.н. обратная задача светорассеяния). Наоборот, зная структуру, форму и размер частицы, можно теоретически получить параметры рассеяния (т.н. прямая задача светорассеяния). Поэтому для решения обратной задачи светорассеяния, экспериментальные данные часто сравниваются с базой данных. Последняя часто представляет собой синтетически сгенерированные данные, получаемые путем моделирования. Так, например, в цитометрии сопоставляя полученную экспериментально индикатрису тромбоцита с синтетически сгенерированной базой данных (где индикатрисы вычислялись для модельных частиц сфероидной формы) можно получить характеристики этого тромбоцита, такие как его показатель преломления и радиус эквивалентной по объему сферы [4]. Также базы данных создаются для различных форм снежинок, для предсказания вероятности осадков по радарным данным, полученным со спутника [5].

Решить прямую задачу светорассеяния аналитически представляется возможным только для однородных частиц сферической формы, находящихся в свободном пространстве. Это позволяет теория Лоренца-Ми [6]. Для моделирования светорассеяния частицами произвольной формы и внутренней структуры, а также, для моделирования светорассеяния частицей вблизи подложки применяются различные приближения и методы, позволяющие получить численное решение задачи.

Одним из методов, позволяющем численно решить прямую задачу рассеяния частицей произвольной формы и структуры как в свободном пространстве, так и при наличии в среде подложки является метод дискретных диполей (МДД). Существует множество программных реализаций МДД, среди которых присутствует ADDA [7] – программный пакет, написанный на языке С.

Задачи светорассеяния в присутствии подложки представляют особый интерес. Например, за счет подложки можно усилить сигнал комбинационного рассеяния (Surface-enhanced Raman scattering) [8]. Также, подложка фигурирует в экспериментах спектроскопии характеристических потерь энергии электронами (electron energy-loss spectroscopy – EELS) [9].

Ранее в ADDA был реализован функционал, позволяющий производить моделирование светорассеяния частицей вблизи подложки, являющейся полубесконечной однородной средой. Такой случай позволяет проводить моделирования экспериментов, где толщина подложки значительно превосходит линейные размеры частицы и длину волны. Для моделирований с толщиной подложки, соразмерной линейному размеру частицы, а также для моделирований вблизи подложки с тонкой пленкой требуется расширить функционал ADDA, введя поддержку двухслойной подложки (Рис. 1). Целью этой работы является модификация алгоритма решения прямой задачи рассеяния для поддержки таких двухслойных подложек.

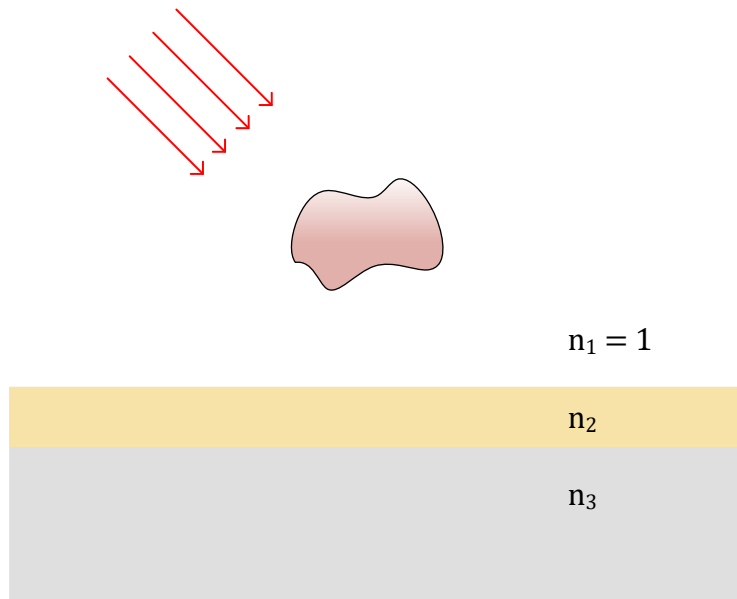


Рис. 1 Реализуемая в этой работе конфигурация подложки.  $n_1, n_2, n_3$  – показатели преломления трех слоев. Первый (полубесконечный) – это среда, содержащая частицу (в данной работе считаем вакуумом –  $n_1 = 1$ ). Второй слой имеет конечную толщину, в то время как третий слой занимает полубесконечное пространство.

## 2 Литературный обзор

### 2.1 Общее решение прямой задачи рассеяния.

Пусть в среде имеется частица, взаимодействующая с падающей на нее плоской волной. Требуется получить асимптотику рассеянного электрического вдали от этой частицы. Исходим из уравнений Максвелла (в этой работе используется система единиц СГС) [3]:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho_F, \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}_F + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (4)$$

где  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  – напряженности электрического и магнитного поля соответственно,  $\rho_F$  и  $\mathbf{J}_F$  – плотность свободных зарядов и плотность тока свободных зарядов соответственно,  $c$  – скорость света в вакууме.  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{B}$  – индукции электрического и магнитного поля соответственно. Связь напряженности и индукции задается материальными уравнениями:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = (1 + 4\pi\chi)\mathbf{E} = \varepsilon\mathbf{E}, \quad (5)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M} = (1 + 4\pi\chi_m)\mathbf{H} = \mu\mathbf{H}, \quad (6)$$

где  $\mathbf{P}$  и  $\mathbf{M}$  – поляризация и намагниченность соответственно;  $\chi$  и  $\chi_m$  – диэлектрическая и магнитная восприимчивости соответственно;  $\varepsilon$  и  $\mu$  – диэлектрическая и магнитная проницаемости соответственно.

На границах раздела сред выполняются граничные условия:

$$(\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) \cdot \mathbf{e}_n = -4\pi\rho_s, \quad (7)$$

$$(\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2) \times \mathbf{e}_n = \mathbf{0}, \quad (8)$$

$$(\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2) \cdot \mathbf{e}_n = 0, \quad (9)$$

$$(\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) \times \mathbf{e}_n = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}_s. \quad (10)$$

Где  $\mathbf{e}_n$  – нормаль к границе раздела сред,  $\rho_s$  и  $\mathbf{J}_s$  – поверхностная плотность и ток соответственно. В дальнейшем, при работе с комплексными векторами, под операциями  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  и  $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$  будем подразумевать псевдоскалярное и псевдовекторное произведение:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_i a_i b_i, \quad \mathbf{a} \times \mathbf{b} = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} a_j b_k, \quad (11)$$

где  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  – произвольные комплексные векторы с соответствующими компонентами  $a_i, b_i$ ;  $\varepsilon_{ijk}$  – символ Леви-Чивиты.

Далее сузим задачу до немагнитных материалов, полагая  $\mu = 1$ . Также положим равными нулю ток и плотность свободных зарядов:  $\rho_F = 0$ ,  $\mathbf{J}_F = 0$ .

Будем искать поле в виде гармонической волны:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \quad (12)$$

Обозначим  $V$  как объем, занимаемый частицей. Затем, примем:

$$\chi(\mathbf{r}) = \chi_{\text{in}}(\mathbf{r}) + \chi_{\text{out}}(\mathbf{r}), \quad (13)$$

где  $\chi_{\text{in}}(\mathbf{r})$  – диэлектрическая восприимчивость внутри частицы,  $\chi_{\text{out}}(\mathbf{r})$  – диэлектрическая проницаемость во внешней среде.  $\chi_{\text{in}}(\mathbf{r}) = 0$  при  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus V$ ;  $\chi_{\text{out}}(\mathbf{r}) = 0$  при  $\mathbf{r} \in V$ .

Далее, поляризацией  $\mathbf{P}(\mathbf{r})$  будем обозначать поляризацию внутри частицы:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \chi_{\text{in}}(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (14)$$

Тогда, подставляя (12) в уравнения Максвелла, взяв ротор уравнения (2) и продифференцировав по времени уравнение (4), можно получить волновое уравнение [3]:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - k_{\text{out}}^2(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 4\pi k^2 \mathbf{P}(\mathbf{r}), \quad (15)$$

где  $k^2 = \omega^2/c^2$ ;  $k_{\text{out}}^2(\mathbf{r}) = k^2[1 + 4\pi\chi_{\text{out}}(\mathbf{r})] = k^2\varepsilon_{\text{out}}(\mathbf{r})$ .

Полученное уравнение (15) можно решить методом функции Грина. Соответствующая уравнению (15) функция Грина  $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  является тензором – диадой, удовлетворяющим уравнению:

$$\nabla \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k_{\text{out}}^2(\mathbf{r})\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (16)$$

где  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  – функция Дирака. Также для функции Грина требуются выполнение граничных условий на границах раздела сред и бесконечности, (подробнее см. [10]).

Тогда, поле во всем пространстве можно представить, как решение объемно-интегрального уравнения [3]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \int_V d^3r' \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}'), \quad (17)$$

где  $\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$  – падающее на частицу поле (является решением уравнения (15) с  $\mathbf{P}(\mathbf{r}) \equiv 0$ ). Интегрирование в уравнении (17) достаточно проводить по объему частицы, поскольку  $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = 0$  при  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus V$ .

Раскрывая  $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})$  в уравнении (15), можно привести его к следующему виду [11]:

$$(\nabla_{\text{vec}}^2 + k_{\text{out}}^2(\mathbf{r}))\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -4\pi(k^2\bar{\mathbf{I}} + \nabla \otimes \nabla) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}), \quad (18)$$

где  $\nabla_{\text{vec}}^2$  – векторный лапласиан,  $\bar{\mathbf{I}}$  – диада тождественного преобразования.

Уравнение (18) позволяет получить поле в пространстве, используя скалярную функцию Грина  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , удовлетворяющую уравнению:

$$(\nabla^2 + k_{\text{out}}^2(\mathbf{r}))G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (19)$$

тогда, поле можно выразить следующим образом:



$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \int_V d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (k^2 \bar{\mathbf{I}} + \nabla' \otimes \nabla') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}'). \quad (20)$$

Путем интегрирования по частям уравнения (20) и с учетом свойства  $\nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , вытекающего из симметрии функции Грина, можно получить уравнение:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + (k^2 \bar{\mathbf{I}} + \nabla \otimes \nabla) \cdot \int_V d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{P}(\mathbf{r}'). \quad (21)$$

Сопоставляя уравнения (17) и (20), можно выразить связь введенных функций Грина:

$$\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (k^2 \bar{\mathbf{I}} + \nabla \otimes \nabla) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (22)$$

Важно отметить, что функция  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  может содержать сингулярности при  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ . Тогда для корректности интегрирования по частям при выводе уравнения (21) и для корректности внесения оператора  $(k^2 \bar{\mathbf{I}} + \nabla \otimes \nabla)$  под знак интеграла при выводе равенства (22), требуется трактовка объемного интегрирования в смысле главного значения по Коши [10].

Полагая центр координат в произвольной точке внутри частицы, рассеянное поле вдали от частицы можно получить из асимптотики уравнения (17) при  $r = |\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ :

$$(\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}))_{r \rightarrow \infty} = \left( \int_V d^3\mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}') \right)_{r \rightarrow \infty}, \quad (23)$$

где  $\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ .

Согласно [10],  $|\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r})| = O(1/r)$ , поэтому рассеянное поле удобно представить в виде:

$$(\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}))_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{\exp(ik_{\text{out}}(\mathbf{r})r)}{-ik_{\text{out}}(\mathbf{r})r} \mathbf{F}(\mathbf{n}), \quad (24)$$

где  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ ;  $\mathbf{F}(\mathbf{n})$  – амплитуда рассеяния.

## 2.2 Функция Грина в свободном пространстве.

Если частица находится в вакууме, то  $\varepsilon_{\text{out}}(\mathbf{r}) \equiv 1$ , тогда уравнение (18) примет вид неоднородного уравнения Гельмгольца:

$$(\nabla_{\text{vec}}^2 + k^2)\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -4\pi(k^2\bar{\mathbf{I}} + \nabla \otimes \nabla) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}), \quad (25)$$

тогда из физических соображений, требуя затухание скалярной функции Грина при  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ , можно выразить явный вид скалярной функции Грина [12]:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{R}) = \frac{\exp(ikR)}{R}, \quad (26)$$

где  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ .

Тогда, подставляя уравнение (26) в соотношение (22), можно получить аналитический вид функции Грина в виде диады, соответствующего уравнению (15)[12; 13]:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & \frac{\exp(ikR)}{R} \left[ k^2 \left( \bar{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) - \frac{1 - ikR}{R^2} \left( \bar{\mathbf{I}} - 3 \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) \right] \\ & - \frac{4\pi}{3} \bar{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{R}), \end{aligned} \quad (27)$$

где  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ;  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ .

Подставляя функцию Грина (27) в объемно-интегральное уравнения (17) и устремляя  $r \rightarrow \infty$ , получаем амплитуду рассеяния [12; 14]:

$$\mathbf{F}(\mathbf{n}) = -ik^3 \left( \bar{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} \right) \cdot \int_V d^3\mathbf{r}' \exp(-ik\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}) \mathbf{P}(\mathbf{r}'), \quad (28)$$

## 2.3 Однослойная подложка

### 2.3.1 Учет подложки в функции Грина

Пусть в среде присутствует однослойная подложка – полубесконечное однородное пространство. Примем  $\varepsilon_1 = 1$  – показатель преломления среды, в которой находится рассеивающая частица;  $\varepsilon_2 = \varepsilon_s$  – показатель преломления подложки (избыточное введение  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  удобно для дальнейших обобщений уравнений этого параграфа для случая двухслойной подложки). Тогда, в задаче требуется учесть наличие границы раздела сред. Пусть центр координат находится внутри частицы, направим ось  $z$  вдоль нормали к границе раздела сред в сторону среды, содержащей рассеивающую частицу. Тогда формально учет границы раздела соответствует выполнению дополнительных граничных условий для функции Грина, соответствующих граничным условиям (7) и (8):

$$\mathbf{e}_z \times [\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{1-2}^+, \mathbf{r}') - \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{1-2}^-, \mathbf{r}')] = \mathbf{0}, \quad (29)$$

$$\mathbf{e}_z \cdot [\varepsilon_1 \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{1-2}^+, \mathbf{r}') - \varepsilon_2 \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{1-2}^-, \mathbf{r}')] = 0, \quad (30)$$

где вектор  $\mathbf{r}_{1-2}$  лежит на границе раздела сред. В векторах  $\mathbf{r}_{1-2}^\pm$  плюс означает малое смещение вектора в область среды, содержащей частицу, а минус – смещение в область подложки.

Поскольку для вычисления амплитуды рассеяния достаточно знать поляризацию внутри частицы (см. равенства (58) и (59) в п. 2.3.3), достаточно вычислить функцию Грина в пространстве над подложкой ( $\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z > -h$ ). Тогда функцию Грина удобно представить в виде:

$$\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \bar{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (31)$$

где  $\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  – отраженная компонента тензора Грина.

Задачу нахождения  $\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  можно решить точно. Однако, содержащиеся в решении интегралы Зоммерфельда обуславливают высокую временную

сложность алгоритмов численного вычисления, поэтому часто используется аппроксимация – метод изображений, которая позволяет ускорить вычисления.

Метод изображений является квазистатическим приближением, применимым в случае, когда размер частицы много меньше длины падающей волны (формально соответствует  $k \rightarrow 0$ ). В этом методе граничные условия выполняются точно, в то время как равенство (16). выполняется лишь приближенно [3].

В рамках метода изображений, функции Грина задается следующим выражением [3]:

$$\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{cases} \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + a_{12} \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' - 2h\mathbf{e}_z) \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z), & |\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z| > -h \\ b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), & |\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z| < -h \end{cases} \quad (32)$$

Где  $h$  – расстояние от центра координат до подложки.  $\bar{\mathbf{I}}_z = \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z$ , вектор  $\mathbf{r}'$  расположен над подложкой, коэффициенты  $a_{12}$  и  $b_{12}$  задаются соотношениями:

$$a_{12} = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \quad b_{12} = \frac{2\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}. \quad (33)$$

Тогда в поставленной задаче отраженной компоненте функции Грина соответствует:

$$\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1 - \varepsilon_s}{1 + \varepsilon_s} \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' - 2h\mathbf{e}_z) \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z). \quad (34)$$

Суть метода изображений можно проиллюстрировать, вычислив поле над подложкой, рассеянное на точечном диполе  $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{P}\delta(\mathbf{r})$ :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \left[ \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{0}) + \frac{1 - \varepsilon_s}{1 + \varepsilon_s} \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, -2h\mathbf{e}_z) \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) \right] \cdot \mathbf{P}. \quad (35)$$

Идентичное уравнение получится при рассеивании поля двумя диполями в свободном пространстве:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{P}\delta(\mathbf{r}) + \mathbf{P}'\delta(\mathbf{r} - 2h), \quad \mathbf{P}' = \frac{1 - \varepsilon_s}{1 + \varepsilon_s} (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) \cdot \mathbf{P}. \quad (36)$$

т.е. подложка влияет на результирующее поле как изображение исходного диполя, аналогичное зеркальному отражению (Рис. 2)

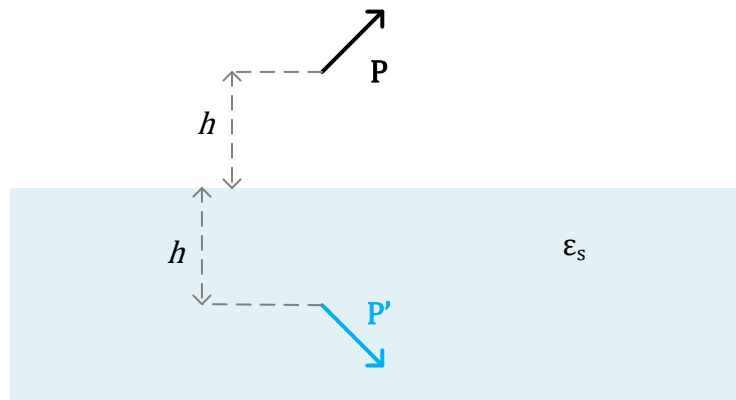


Рис. 2. Иллюстрация принципа метода изображений: Подложка влияет на картину рассеяния точечного диполя  $\mathbf{P}$  аналогично точечному диполю  $\mathbf{P}'$ : см. уравнение (25).

### 2.3.2 Корректировка падающего поля

В свободном пространстве однородная плоская волна, падающая на частицу, совпадает с  $\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ :

$$\mathbf{E}^{\text{inc,free}}(\mathbf{r}) = E^0 \mathbf{e}^0 \exp(i\mathbf{k}^0 \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{k}^0 = \frac{\omega}{c} \mathbf{n}^0, \quad (37)$$

где  $\mathbf{e}^0$  – вектор направления поляризации волны ( $\mathbf{e}^0 \cdot \mathbf{e}^0 = 1$ );  $\mathbf{k}^0$  – волновой вектор падающей волны;  $\mathbf{n}^0$  – вектор направления распространения волны ( $\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{n}^0 = 1, \text{Im } \mathbf{n}^0 = \mathbf{0}$ ) – однородная волна).

При учете подложки, волна может падать на частицу как из вакуума, так и из подложки:

$$\mathbf{k}^0 = \frac{\omega}{c} \mathbf{n}^0 \cdot \begin{cases} 1, & |\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z < 0 \\ n_s, & |\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z > 0 \end{cases} \quad (38)$$

где  $n_s = \sqrt{\varepsilon_s}$  – показатель преломления подложки

Поскольку падающая на частицу волна может отражаться от подложки ( $\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z < 0$ ), так и проходить через подложку ( $\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z > 0$ ), поле  $\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$  необходимо скорректировать с учетом этих эффектов.

Для этого, рассмотрим задачу падения плоской волны на границу раздела двух сред:

$$\mathbf{E}^i(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^i \mathbf{e}^i \exp(i\mathbf{k}^i \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{k}^i = n_1 \frac{\omega}{c} \mathbf{n}^i. \quad (39)$$

В рамках этой задачи положим за начало координат произвольную точку на границе раздела. Присвоим индекс 1 среде из которой распространяется волна и индекс 2 среде, на которую волна падает. Эту волну удобно разбить на композицию  $s$  и  $p$  поляризованных волн:

$$E^i \mathbf{e}^i = E_s^i \mathbf{e}_s^i + E_p^i \mathbf{e}_p^i, \quad \mathbf{e}_s^i \cdot \mathbf{e}_p^i = 0. \quad (40)$$

Если волна  $\mathbf{E}^i(\mathbf{r})$  однородна (вектор  $\mathbf{n}^i$  действителен), и при отсутствии поглощения в средах справедливо геометрическое определение поляризаций:

вектор  $\mathbf{e}_s$  перпендикулярен плоскости падения, вектор  $\mathbf{e}_p$  лежит в плоскости падения (см. Рис. 3).

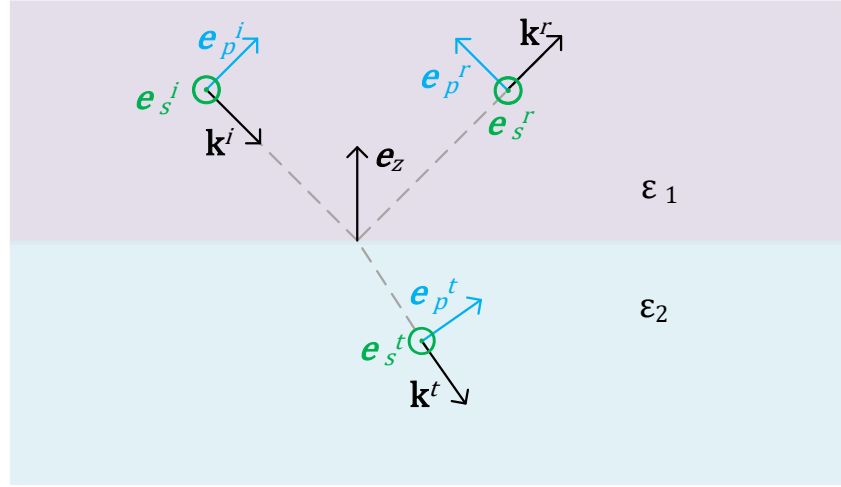


Рис. 3. Иллюстрация взаимодействия плоской волны с подложкой

Однако, если, например, в среде 1 присутствует поглощение, то диэлектрическая проницаемость  $\epsilon_1$  становится комплексной. Также, для случая неоднородных волн, единичный вектор  $\mathbf{n}^i$  является комплексным. В таком случае геометрическая интерпретация (Рис. 3) становится неприменима, поскольку компоненты волновых векторов падающей, отраженной и прошедшей волн могут принимать комплексные значения.

В общем случае  $s$  и  $p$  поляризации можно определить следующим образом [15]:

$$\mathbf{e}_s = \frac{\mathbf{e}_z \times \mathbf{n}}{\sqrt{(\mathbf{e}_z \times \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{e}_z \times \mathbf{n})}}, \quad \mathbf{e}_p = \mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_s, \quad (41)$$

где  $\mathbf{e}_z$  – нормаль к границе раздела сред, направленная в среду 1.

Далее, будем обозначать отраженную от подложки волну и прошедшую волну Индексами  $r$  и  $t$  соответственно. Будем искать волны в виде:

$$\mathbf{E}^r(\mathbf{r}) = (E_s^r \mathbf{e}_s^r + E_p^r \mathbf{e}_p^r) \exp(i\mathbf{k}^r \cdot \mathbf{r}), \quad (42)$$

$$\mathbf{E}^t(\mathbf{r}) = (E_s^t \mathbf{e}_s^t + E_p^t \mathbf{e}_p^t) \exp(i\mathbf{k}^t \cdot \mathbf{r}). \quad (43)$$

Из граничных условий следует непрерывность тангенциальных компонент волновых векторов[15]:

$$\mathbf{k}_{\parallel}^i = \mathbf{k}_{\parallel}^r = \mathbf{k}_{\parallel}^t = (\bar{\mathbf{I}} - \bar{\mathbf{I}}_z) \cdot \mathbf{k}^i, \quad (44)$$

где  $\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{e}_z = 0$ .

Используя уравнение (44) и дисперсионное соотношение  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = \varepsilon \omega^2 / c^2$  можно выразить вектора z компоненты векторов  $\mathbf{k}^r$  и  $\mathbf{k}^t$  через  $\mathbf{k}^i$  [15]:

$$\mathbf{k}_z^r = -\mathbf{k}^i \cdot \mathbf{e}_z, \quad (45)$$

$$\mathbf{k}_z^t = -\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_2 - \mathbf{k}_{\parallel}^i \cdot \mathbf{k}_{\parallel}^i}. \quad (46)$$

Подставив вектора  $\mathbf{n}^r = c\mathbf{k}^r / (\omega\varepsilon_1)$  и  $\mathbf{n}^t = c\mathbf{k}^t / (\omega\varepsilon_2)$ , полученные из уравнений (43), (45) и (46), в уравнение (41), можно выразить вектора поляризаций пройденной и отраженной волны.

Для вычисления амплитуд поляризаций в уравнениях (42) и (43) вводятся коэффициенты Френеля [3]:

$$r_{12}^s = \frac{k_z^i - k_z^t}{k_z^i + k_z^t}, \quad (47)$$

$$r_{12}^p = \frac{\varepsilon_2 k_z^i - \varepsilon_1 k_z^t}{\varepsilon_2 k_z^i + \varepsilon_1 k_z^t}, \quad (48)$$

$$t_{12}^s = \frac{2k_z^i}{k_z^i + k_z^t}, \quad (49)$$

$$r_{12}^p = \frac{2\varepsilon_2 k_z^i}{\varepsilon_2 k_z^i + \varepsilon_1 k_z^t} \cdot \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}}, \quad (50)$$

где индексация 12 означает, что волна  $\mathbf{E}^i(\mathbf{r})$  падает из среды 1 на границу сред 1 и 2.



Амплитуды поляризации в уравнениях (42) и (43) выражаются через коэффициенты Френеля следующим образом:

$$E_{s(p)}^{r(t)} = r(t)_{12}^{s(p)} E_{s(p)}^i. \quad (51)$$

Теперь можно вернуться к задаче поправки поля  $\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ . Падающая на границу раздела волна определяется соотношением (37). В случае падения однородной плоской волны на подложку ( $\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z < 0$ ) необходимо учесть отраженную волну, тогда поле над подложкой будет задаваться соотношением [14]:

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc,free}}(\mathbf{r}) + E^0 (r_{12}^s \mathbf{e}_s^r + r_{12}^p \mathbf{e}_p^r) \cdot \mathbf{e}^0 \exp(i\mathbf{k}^r \cdot \mathbf{r} + 2ikh_z^0) \quad (52)$$

где набег фазы  $2ikh_z^0$  вызван распространением поля от центра координат до подложки и обратно.

При распространении волны из-под подложки ( $\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z > 0$ ) поле над подложкой будет описываться выражением [14]:

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = E^0 (t_{21}^s \mathbf{e}_s^t + t_{21}^p \mathbf{e}_p^t) \cdot \mathbf{e}^0 \exp(i\mathbf{k}^t \cdot \mathbf{r} - ih(k_z^0 - k_z^t)), \quad (53)$$

где набег фазы  $-ih(k_z^0 - k_z^t)$  возник из следующих соображений: поскольку центр координат расположен внутри частицы, фаза  $-ihk_z^0$  имела у волны при падении на границу раздела сред. Затем при распространении от границы до центра координат возник набег  $ihk_z^t$ .

### 2.3.3 Корректировка амплитуды рассеяния

Согласно принципу взаимности (reciprocity principle) при наличии в среде источников тока  $\mathbf{J}_1$  и  $\mathbf{J}_2$ , порождающих поля  $\mathbf{E}_1$  и  $\mathbf{E}_2$ , выполняется соотношение [16]:

$$\int_{V_1} \mathbf{J}_1(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}^3 = \int_{V_2} \mathbf{J}_2(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}^3. \quad (54)$$

где  $V_1$  и  $V_2$  – объемы, содержащие соответствующие источники. Это соотношение можно интерпретировать так, что источник сигнала и приемник можно поменять местами при вычислении их взаимодействия.

Вернемся к задаче рассеяния частиц в свободном пространстве. Подставим выражение (28) в (24) и запишем полученное уравнение в следующем виде:

$$\int_{\delta\mathbf{r}} d\mathbf{r}^3 \delta(\mathbf{r}') \bar{\mathbf{I}} \cdot \mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}') \sim \frac{\exp(ikr)}{-ikr} \left[ k^3 \left( \bar{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} \right) \cdot \int_V d^3\mathbf{r}' \exp(-ik\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}) \mathbf{P}(\mathbf{r}') \right], \quad (55)$$

где  $\delta\mathbf{r}$  – малый объем, содержащий  $\mathbf{r}$ . Если учесть, что поляризационный ток равен:  $\mathbf{J} = i\omega\mathbf{P}/c$ , то каждая векторная компонента выражения (55) имеет вид выражения (54).

Тогда, согласно интерпретации принципа взаимности, приемники  $\mathbf{P}(\mathbf{r}')$  взаимодействуют с излучением точечного источника, помещенного на бесконечно удалённое расстояние ( $r \rightarrow \infty$ ) в направлении  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ . В рамках асимптотики  $r \rightarrow \infty$ , поляризации  $\mathbf{P}(\mathbf{r}')$  взаимодействуют с плоской волной, пропорциональной  $\exp(-ik\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n})$ , распространяющейся в направлении  $-\mathbf{n}$ . Тогда, рассматривая взаимодействие этой плоской волны с подложкой аналогично рассуждениям из п. 2.3.2. можно обобщить выражение (24) для задачи рассеивания частиц вблизи подложки.

В задаче рассеяния частиц вблизи подложки уравнение (24) принимает вид:

$$(\mathbf{E}^{\text{sca}}(\mathbf{r}))_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{\exp(ik_{\text{sca}}r)}{-ik_{\text{sca}}r} \mathbf{F}(\mathbf{n}), \quad (56)$$

где  $k_{\text{sca}}$  определяется выражением:

$$k_{\text{sca}} = \frac{\omega}{c} \cdot \begin{cases} 1, & |\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z| > 0 \\ n_s, & |\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z| < 0 \end{cases} \quad (57)$$

При расположении приемника над подложкой ( $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z > 0$ ), к амплитуде рассеяния добавляется отраженная компонента [14]:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{n}) = & \mathbf{F}^{\text{free}}(\mathbf{n}) - ik^3 (r_{12}^s \mathbf{e}_s^{-\mathbf{n}} \otimes \mathbf{e}_s^r + r_{12}^p \mathbf{e}_s^{-\mathbf{n}} \otimes \mathbf{e}_s^t) \\ & \cdot \int_V d^3r' \mathbf{P}(\mathbf{r}') \exp(ik^r \cdot \mathbf{r}' + 2ihk_z^0), \end{aligned} \quad (58)$$

где  $e_{s(p)}^{-\mathbf{n}}$  соответствует поляризации волны распространяющейся в направлении  $-\mathbf{n}$ .

При расположении приемника под подложкой ( $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z < 0$ ), получаем выражение:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{n}) = & -ik^3 n_s (t_{21}^s \mathbf{e}_s^{-\mathbf{n}} \otimes \mathbf{e}_s^t + t_{21}^p \mathbf{e}_s^{-\mathbf{n}} \otimes \mathbf{e}_s^t) \cdot \\ & \cdot \int_V d^3r' \mathbf{P}(\mathbf{r}') \exp(ik^r \cdot \mathbf{r}' - ih(k_z^0 - k_z^t)). \end{aligned} \quad (59)$$

где множитель  $n_s$  возникает для компенсации  $k_{\text{sca}}$  в уравнении (56).

## 2.4 Метод дискретных диполей (МДД)

Данный параграф следует изложению в [13]. МДД – численно точный метод, позволяющий моделировать светорассеяние частицы произвольной формы и структуры. ADDA является программной реализацией этого метода.

МДД основан на разбиении объема интегрирования  $V$  в уравнении (17) на элементарные ячейки (например, кубические) (см. Рис. 4).

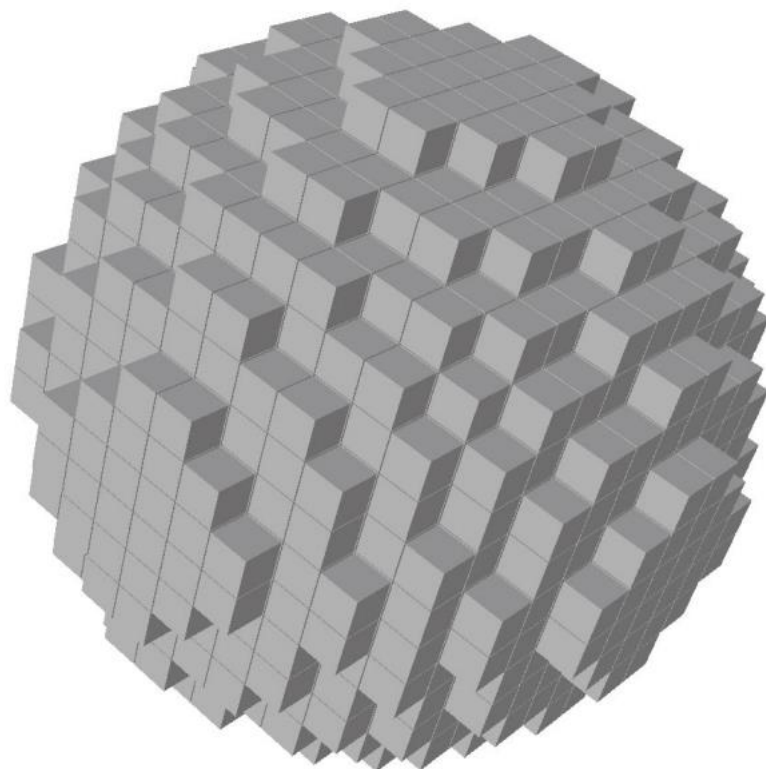


Рис. 4 Дискретизация шара на кубические ячейки [13].

Для дискретизации, удобно использовать альтернативную форму уравнения (17) для нахождения поля внутри частицы [10; 13]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \int_{V \setminus V_0} d^3r' \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}') + \mathbf{M}(V_0, \mathbf{r}) + \bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}), \quad (60)$$

где  $V_0 \subset V$ ;  $\partial V_0$  – граница  $V_0$ ;  $\mathbf{r} \in V_0 \setminus \partial V_0$ . Интегралы  $\mathbf{M}(V_0, \mathbf{r})$  и  $\bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r})$  возникают за счет исключения объема  $V_0$  из области интегрирования. Они определяются равенствами:

$$\mathbf{M}(V_0, \mathbf{r}) = \int_{V_0} d^3 \mathbf{r}' \left[ \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \nabla \otimes \nabla \frac{1}{R} \right] \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}') \quad (61)$$

$$\bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r}) = \int_{\partial V_0} d^2 \mathbf{r}' \otimes \frac{\mathbf{R}}{R^3}, \quad (62)$$

где  $d^2 \mathbf{r}'$  – элемент поверхности, направленный вдоль внешней нормали.

Если  $\mathbf{r}$  лежит в центре кубической ячейки  $V_0$  то:

$$\bar{\mathbf{L}}(\partial V_0, \mathbf{r}) = \frac{4\pi}{3} \bar{\mathbf{I}}. \quad (63)$$

Таким образом, равенство (63) позволяет явно выделить особенность  $4\pi \bar{\mathbf{I}} \delta(\mathbf{R})/3$  в функции Грина (27).

Разобьем  $V$  на элементарные ячейки  $V_i$ ; каждой ячейке сопоставим вектор  $\mathbf{r}_i$ , направленный в соответствующий центр ячейки. тогда согласно уравнению (60) получаем выражение:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}_i) &= \mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}_i) \\ &+ \sum_{j \neq i} \int_{V_j \setminus V_i} d^3 \mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}') + \mathbf{M}(V_i, \mathbf{r}_i) + \bar{\mathbf{L}}(\partial V_i, \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}_i). \end{aligned} \quad (64)$$

Для дальнейшей дискретизации, диэлектрическая восприимчивость и электрическое поле полагается постоянным в объеме каждой ячейки, тогда:

$$\int_{V_j \setminus V_i} d^3 \mathbf{r}' \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}') \approx V_j \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_j) \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}_i) = \bar{\mathbf{G}}_{ij} \cdot \mathbf{P}_j, \quad (65)$$

$$\mathbf{M}(V_i, \mathbf{r}_i) = \chi_i \bar{\mathbf{M}}_i \cdot \mathbf{E}_i. \quad (66)$$

Поскольку интеграл  $\bar{\mathbf{L}}_i = \bar{\mathbf{L}}(\partial V_i, \mathbf{r}_i)$  явно содержит особенность функции Грина из выражения (27), то дискретизированной функции Грина в свободном пространстве будет соответствовать:

$$\bar{\mathbf{G}}_{ij}^{\text{free}} = \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{\exp(ikR)}{R} \left[ k^2 \left( \bar{\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) - \frac{1 - ikR}{R^2} \left( \bar{\mathbf{I}} - 3 \frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2} \right) \right], \quad (67)$$

где  $\mathbf{R} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ ;  $R = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$

Подставляя выражения (65) и (66) в уравнение (60), можно получить поляризуемости  $\mathbf{P}_i$  из системы линейных уравнений:

$$\bar{\alpha}_i^{-1} \cdot \mathbf{P}_i - \sum_{j \neq i} \bar{\mathbf{G}}_{ij} \cdot \mathbf{P}_j = \mathbf{E}_i^{\text{inc}}, \quad (68)$$

$$\bar{\alpha}_i = V_i \chi_i (\bar{\mathbf{I}} + (\bar{\mathbf{L}}_i - \bar{\mathbf{M}}_i) \chi_i)^{-1}, \quad (69)$$

где  $\bar{\alpha}_i$  – тензор поляризуемости.  $\bar{\mathbf{L}}_i = \bar{\mathbf{L}}(\partial V_i, \mathbf{r}_i)$ .

Существует множество методов и приближений для определения тензора поляризуемости (69) (см. [13]). Например, в приближении Клаузиуса-Моссотти пренебрегается тензор  $\bar{\mathbf{M}}_i$ , тогда с учетом равенства (63):

$$\bar{\alpha}_i = \bar{\mathbf{I}} V_i \frac{3 \varepsilon_i - 1}{4\pi \varepsilon_i + 2}. \quad (70)$$

Выражения для поправок падающего и рассеянного поля (52), (53), (58), (59) в присутствии подложки тривиально дискретизируются заменами  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_i$ ;  $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}_j$ ;  $\int_V d^3 \mathbf{r}' \mathbf{P}(\mathbf{r}') \dots \rightarrow \sum_i \mathbf{P}_i \dots$

### 3 Методы и объекты исследования

#### 3.1 Обобщение функции Грина для двухслойной подложки

В случае, когда рассеивающая частица находится над двухслойной подложкой, требуется обобщить выражение для отраженного термина  $\mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , соответствующего выражению (34).

Обозначим индексами 1, 2, 3 пространство над подложкой, верхний и нижний слой подложки соответственно (см. Рис. 1). Также обозначим толщину верхнего слоя как  $\delta$ . Тогда для функции Грина требуется выполнение граничных условий на границах раздела сред 1-2 и 2-3:

$$\mathbf{e}_z \times [\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{1-2}^+, \mathbf{r}') - \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{1-2}^-, \mathbf{r}')] = \mathbf{0}, \quad (71)$$

$$\mathbf{e}_z \cdot [\varepsilon_1 \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{1-2}^+, \mathbf{r}') - \varepsilon_2 \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{1-2}^-, \mathbf{r}')] = 0, \quad (72)$$

$$\mathbf{e}_z \times [\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{2-3}^+, \mathbf{r}') - \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{2-3}^-, \mathbf{r}')] = \mathbf{0}, \quad (73)$$

$$\mathbf{e}_z \cdot [\varepsilon_2 \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{2-3}^+, \mathbf{r}') - \varepsilon_3 \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{2-3}^-, \mathbf{r}')] = 0. \quad (74)$$

Будем решать задачу итерационно. Для этого, в качестве нулевого приближения примем функцию  $\bar{\mathbf{G}}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  равной выражению (32) в средах 1 и 2 и нулю в среде 3, тогда будут выполняться только условия (71) и (72) (далее обозначаем как условия 1-2). Условия (73), (74) (условия 2-3) будут нарушаться.

Удобно ввести обозначение:

$$\bar{\mathbf{G}}^a(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' + a\mathbf{e}_z), \quad (75)$$

Где  $a$  – параметр сдвига координат. Для простоты выкладок будем опускать зависимость от  $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ . Также обозначим условие  $-h < \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z$  как (I); условие  $-h - \delta < \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z < -h$  как (II) и условие  $-h < \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z$  как (III). Получаем выражение:

$$\bar{\mathbf{G}}^{(0)} = \begin{cases} \bar{\mathbf{G}}^0 + a_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) & \text{(I)} \\ b_{12} \bar{\mathbf{G}}^0 & \text{(II)} \\ \bar{\mathbf{0}} & \text{(III)} \end{cases} \quad (76)$$

Где коэффициенты  $a_{12}, b_{12}$  определяются согласно (33). Красным цветом обозначены нарушенная пара граничных условий. Далее также будем обозначать красным цветом компоненты функции Грина, вызывающих нарушение граничных условий, верных на предыдущей итерации.

Для сшивки граничных условий 2-3, можно рассмотреть задачу взаимодействия функции  $b_{12} \bar{\mathbf{G}}^0$  с подложкой 3. Подставляя  $b_{12} \bar{\mathbf{G}}^0$  вместо  $\bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}$  в уравнение (32) и подставляя итоговое выражение в (76), получаем:

$$\bar{\mathbf{G}}^{(1)} = \begin{cases} \bar{\mathbf{G}}^0 + a_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z), & \text{(I)} \\ b_{12} \bar{\mathbf{G}}^0 + a_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h-2\delta} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z), & \text{(II)} \\ b_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^0. & \text{(III)} \end{cases} \quad (77)$$

Теперь компонента  $a_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h-2\delta} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z)$  влечет нарушение условий 1-2. Аналогично предыдущему шагу вычисляем поправку для взаимодействия этой компоненты со средой 1. С учетом равенства  $(\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) = \bar{\mathbf{I}}$ :

$$\bar{\mathbf{G}}^{(2)} = \begin{cases} \bar{\mathbf{G}}^0 + a_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) + b_{21} a_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h-2\delta} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z), & \text{(I)} \\ b_{12} \bar{\mathbf{G}}^0 + a_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h-2\delta} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) + a_{21} a_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{2\delta}, & \text{(II)} \\ b_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^0. & \text{(III)} \end{cases} \quad (78)$$

$$\bar{\mathbf{G}}^{(3)} = \begin{cases} \dots + b_{21} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h-2\delta} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z), & \text{(I)} \\ \dots + a_{21} a_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{2\delta} + a_{23} a_{21} a_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h-4\delta} (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z), & \text{(II)} \\ b_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^0 + b_{23} a_{21} a_{23} b_{12} \bar{\mathbf{G}}^{2\delta}. & \text{(III)} \end{cases} \quad (79)$$

Такой процесс можно продолжать неограниченно. Тогда формально можно получить:

$$\bar{\mathbf{G}}^{(\infty)} = \begin{cases} \bar{\mathbf{G}}^0 + a_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) + b_{21} b_{12} \bar{\mathbf{S}}^r, & \text{(I)} \\ b_{12} (\bar{\mathbf{G}}^0 + \bar{\mathbf{S}}^r + \bar{\mathbf{S}}^t), & \text{(II)} \\ b_{23} b_{12} (\bar{\mathbf{G}}^0 + \bar{\mathbf{S}}^t). & \text{(III)} \end{cases} \quad (80)$$



где:

$$\bar{\mathbf{S}}^r = a_{23} \sum_{n=1}^{\infty} (a_{21}a_{23})^{n-1} \bar{\mathbf{G}}^{-2h-2\delta n} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z), \quad (81)$$

$$\bar{\mathbf{S}}^t = \sum_{n=1}^{\infty} (a_{21}a_{23})^n \bar{\mathbf{G}}^{2\delta n}. \quad (82)$$

Проанализируем полученное решение. Подставим  $\bar{\mathbf{G}}^{(n)}$  в граничные условия (71), (72), (73), (74). Поскольку граничные условия линейны, то отличие от нуля левой части граничных условия будет пропорционально норме члена, возникшего в области 2 в текущем шаге итерации (ранее обозначался красным цветом). Этот член пропорционален либо  $(a_{21}a_{23})^n \bar{\mathbf{G}}^{2\delta n}$ , либо  $(a_{21}a_{23})^n \bar{\mathbf{G}}^{-2h-2\delta n}$ . Поскольку из выражения (27) норма  $\|\bar{\mathbf{G}}^{\text{free}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\| = O(1/R)$ , то:

$$\|(a_{21}a_{23})^n \bar{\mathbf{G}}^{2\delta n}\| = \|(a_{21}a_{23})^n \bar{\mathbf{G}}^{-2h-2\delta n}\| = O\left(\frac{(a_{21}a_{23})^n}{n}\right)_{n \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (83)$$

Т.е. нарушение граничных условий стремится к нулю при увеличении количества итераций алгоритма.

При любых конечных  $\varepsilon_2$  и  $\varepsilon_3$ :  $|a_{21}| < 1$  и  $|a_{23}| < 1$ . Тогда из асимптотики (80) следует, что ряды  $\bar{\mathbf{S}}^r$  и  $\bar{\mathbf{S}}^t$  будут мажорироваться сходящимся степенным рядом  $\sum (a_{21}a_{23})^n$ , и, следовательно, сходиться. Однако формально слои могут быть идеально проводящими: что соответствует  $\varepsilon = \infty$ . Если  $\varepsilon_2 = \infty$ , то поле не проникает в слой 2 и, соответственно в слой 3:  $b_{12} = 0$ . Поэтому, такая задача эквивалентна задаче с однослойной идеально проводящей подложкой. Если  $\varepsilon_2$  конечен и  $\varepsilon_3 = \infty$ , то  $a_{21}$  все еще меньше единицы по модулю. Поэтому  $\bar{\mathbf{S}}^r$  и  $\bar{\mathbf{S}}^t$  также сойдутся.

Таким образом при любых конечных  $\varepsilon_2$  справедливо решение  $\bar{\mathbf{G}}^{(\infty)}$  в рамках метода изображений. Если  $\varepsilon_2 = \infty$ , то достаточно решить задачу с однослойной подложкой (более того, тогда метод изображений дает точный ответ).

Таким образом, итоговое выражение для  $\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ :

$$\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [a_{12} \bar{\mathbf{G}}^{-2h}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) + b_{21} b_{12} \bar{\mathbf{S}}^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]; \quad (84)$$

дискретизированный отраженный тензор:

$$\bar{\mathbf{R}}_{ij} = [a_{12} \bar{\mathbf{G}}_{ij}^{-2h} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\bar{\mathbf{I}}_z) + b_{21} b_{12} \bar{\mathbf{S}}_{ij}^r]. \quad (85)$$

Алгоритм вычисления отраженной компоненты  $\bar{\mathbf{R}}_{ij}$  для двухслойной подложки был реализован в ADDA. Суммирование членов ряда (81) продолжают до тех пор, пока норма Фробениуса последующего члена станет порядка ULP (unit of least precision) относительно суммы норм Фробениуса первых двух членов  $\bar{\mathbf{R}}_{ij}$  в равенстве (85).

### 3.2 Обобщенные коэффициенты Френеля.

В задаче рассеяния частицей вблизи двухслойной подложки присутствуют две границы раздела сред. Поэтому для корректировки падающего и рассеянного поля требуется рассмотреть задачу прохождения и отражения плоской волны от слоя некой толщины  $\delta$  (см. Рис. 5).

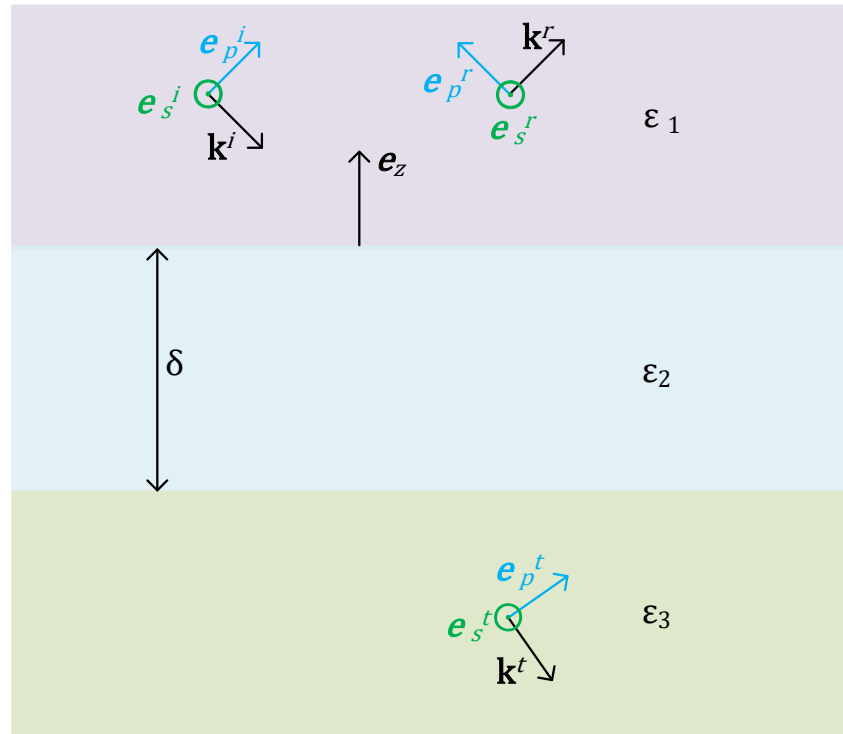


Рис. 5 Иллюстрация прохождения плоской волной слоя толщины  $\delta$ .

Аналогично п. 2.3.2. положим начало координат на границе 1-2. И зададим падающую волну:

$$\mathbf{E}^i(\mathbf{r}) = (E_s^i \mathbf{e}_s^i + E_p^i \mathbf{e}_p^i) \exp(i\mathbf{k}^i \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{k}^i = n_1 \frac{\omega}{c} \mathbf{n}^i. \quad (86)$$

Будем искать отраженное и пройденное поле в виде:

$$\mathbf{E}^r(\mathbf{r}) = (E_s^r \mathbf{e}_s^r + E_p^r \mathbf{e}_p^r) \exp(i\mathbf{k}^r \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{k}^r = n_1 \frac{\omega}{c} \mathbf{n}^r, \quad (87)$$

$$\mathbf{E}^t(\mathbf{r}) = (E_s^t \mathbf{e}_s^t + E_p^t \mathbf{e}_p^t) \exp(i\mathbf{k}^t \cdot (\mathbf{r} + \delta \mathbf{e}_z)), \quad \mathbf{k}^t = n_3 \frac{\omega}{c} \mathbf{n}^t. \quad (88)$$

В выражении (43) введение набега фазы  $i\delta\mathbf{k}^t \cdot \mathbf{e}_z$  позволяет принять фазу падающей волны на границе 1-2 равной фазе пройденной волны на границе 1-3. При этом фактическое изменение фазы учитывается в комплексных амплитудах  $E_s^t$  и  $E_p^t$ . В такой постановке введем обобщенные коэффициенты Френеля аналогично определению (51):

$$E_{s(p)}^{r(t)} = \tilde{r}(\tilde{t})_{13}^{s(p)} E_{s(p)}^i, \quad (89)$$

Где  $\tilde{r}$  и  $\tilde{t}$  – обобщенные коэффициенты Френеля.

Учет фазы, возникающей при распространении волны в слое ненулевой толщины, а также выбор начала координат вызывают неоднозначность в определении обобщенных коэффициентов Френеля, в связи с этим, в литературе возникают различающиеся определения [3; 16]. Поэтому в этой главе приводится вывод обобщенных коэффициентов Френеля в постановке уравнений (86), (87), (88) и (89). Задачу нахождения этих коэффициентов можно решить, последовательно рассматривая прохождения и отражения плоской волны через имеющиеся границы раздела. Тогда вследствие переотражений волны внутри слоя 2 от границ 1-2 и 2-3, возникнет бесконечный ряд:

$$E_r = r_{12}E^i + t_{12}r_{23}t_{21}P^2E^i + t_{12}r_{23}r_{21}r_{23}t_{21}P^4E^i + \dots, \quad (90)$$

$$E_t = t_{12}t_{23}E^i + t_{12}r_{23}r_{21}t_{23}P^2E^i + t_{12}r_{23}r_{21}r_{23}t_{23}P^4E^i + \dots, \quad (91)$$

где набег фазы при прохождении слоя 2 обозначен  $P = \exp(-ik_z^m\delta)$ ,  $k_z^m$  – z компонента волнового вектора волны, пройденной из среды 1 в среду 2. Индексы вида  $s(p)$  подразумеваются у всех коэффициентов Френеля и амплитуд в выражениях (90), (91). Полученные ряды можно взять аналитически, откуда получаем выражение для коэффициентов Френеля:

$$\tilde{r}_{13} = r_{12} + \frac{t_{12}r_{23}t_{21}P^2}{1 - r_{23}r_{21}P^2}, \quad (92)$$

$$\tilde{t}_{13} = \frac{t_{12}t_{23}}{1 - r_{23}r_{21}P^2}. \quad (93)$$

Вычисление обобщенных коэффициентов Френеля было реализовано в коде ADDA.

### 3.3 Корректировка падающего и рассеянного поля.

Для корректировки падающего на частицу поля в случае отражения волны от подложки ( $\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z < 0$ ) достаточно заменить коэффициенты Френеля в выражении (52) на обобщенные коэффициенты Френеля:

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\text{inc,free}}(\mathbf{r}) + E^0(\tilde{r}_{13}^s \mathbf{e}_s^r + \tilde{r}_{13}^p \mathbf{e}_p^r) \cdot \mathbf{e}^0 \exp(i\mathbf{k}^r \cdot \mathbf{r} + 2ihk_z^0). \quad (94)$$

В случае прохождения падающей волны через подложку ( $\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z < 0$ ) требуется обобщить выражение (53): при падении поля на границу раздела сред 3-2 волна имеет фазы  $-ihk_z^0(h + \delta)$ . Набег фазы при прохождении слоя  $\delta$  учтен в обобщенных коэффициентах Френеля. При распространении до начала координат волна набирает фазу  $ihk_z^t h$ . Получаем выражение:

$$\mathbf{E}^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = E^0(\tilde{t}_{31}^s \mathbf{e}_s^r + \tilde{t}_{31}^p \mathbf{e}_p^r) \cdot \mathbf{e}^0 \exp(i\mathbf{k}^t \cdot \mathbf{r} - ih(k_z^0 - k_z^t) - i\delta k_z^0). \quad (95)$$

Обобщим аналогичным образом выражения (58) и (59). При расположении приемника над подложкой ( $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z > 0$ ):

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{n}) = \mathbf{F}^{\text{free}}(\mathbf{n}) - ik^3 (\tilde{r}_{13}^s \mathbf{e}_s^{-\mathbf{n}} \otimes \mathbf{e}_s^r + \tilde{r}_{13}^p \mathbf{e}_s^{-\mathbf{n}} \otimes \mathbf{e}_s^t) \\ \cdot \int_V d^3\mathbf{r}' \mathbf{P}(\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}^r \cdot \mathbf{r}' + 2ihk_z^0); \end{aligned} \quad (96)$$

при расположении приемника под подложкой ( $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z < 0$ ):

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{n}) = -ik^3 n_3 (\tilde{t}_{31}^s \mathbf{e}_s^{-\mathbf{n}} \otimes \mathbf{e}_s^t + \tilde{t}_{31}^p \mathbf{e}_s^{-\mathbf{n}} \otimes \mathbf{e}_s^t) \cdot \\ \cdot \int_V d^3\mathbf{r}' \mathbf{P}(\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}^r \cdot \mathbf{r}' - ih(k_z^0 - k_z^t)). \end{aligned} \quad (97)$$

Соответствующие корректировки были реализованы в коде ADDA

## 4 Результаты и обсуждение

### 4.1 Сравнение реализованного алгоритма с PyGDM

Для тестирования достоверности получаемых результатов моделирования было решено сравнить работу алгоритма с реализацией другого программного пакета. Для такого сравнения была выбрана python библиотека PyGDM [17], где реализована поддержка вычислений с двухслойной подложкой [18] в квазистатическом приближении ( $k \rightarrow 0$ ).

В целях удобства, для ADDA была реализована python обертка, которая позволяет запустить вычисления ADDA с задаваемой в python коде конфигурацией, а также, создает объектное отображение вычисляемых величин посредством парсинга выходных файлов ADDA.

Была задана следующая конфигурация: сферическая частица с диаметром 30 нм лежит на тонкой подложке толщиной 30 нм, показатель преломления которой варьируется:  $n_2 \in \{1.0 \dots 3.0\}$ . Остальное пространство задано как вакуум ( $n_1 = n_3 = 1$ ). На частицу падает плоская волна с длиной волны 700 нм, при которой показатель преломления частицы равен  $1.5 + 0.2i$ . Волна направлена вдоль нормали к поверхности:  $\mathbf{n}^0 \cdot \mathbf{e}_z = -1$ .

Сравнения алгоритмов велось при дискретизации с сеткой  $17 \times 17 \times 17$ . При этом, сравнивались получаемые эффективности экстинкции. При показателе преломления  $n_2 = 1$  частица находится в свободном пространстве, поэтому ожидается стремление результатов моделирования к результатам теории Лоренца-Ми при стремлении  $n_2 \rightarrow 1$ .

Результаты моделирований приведены на Рис. 6.

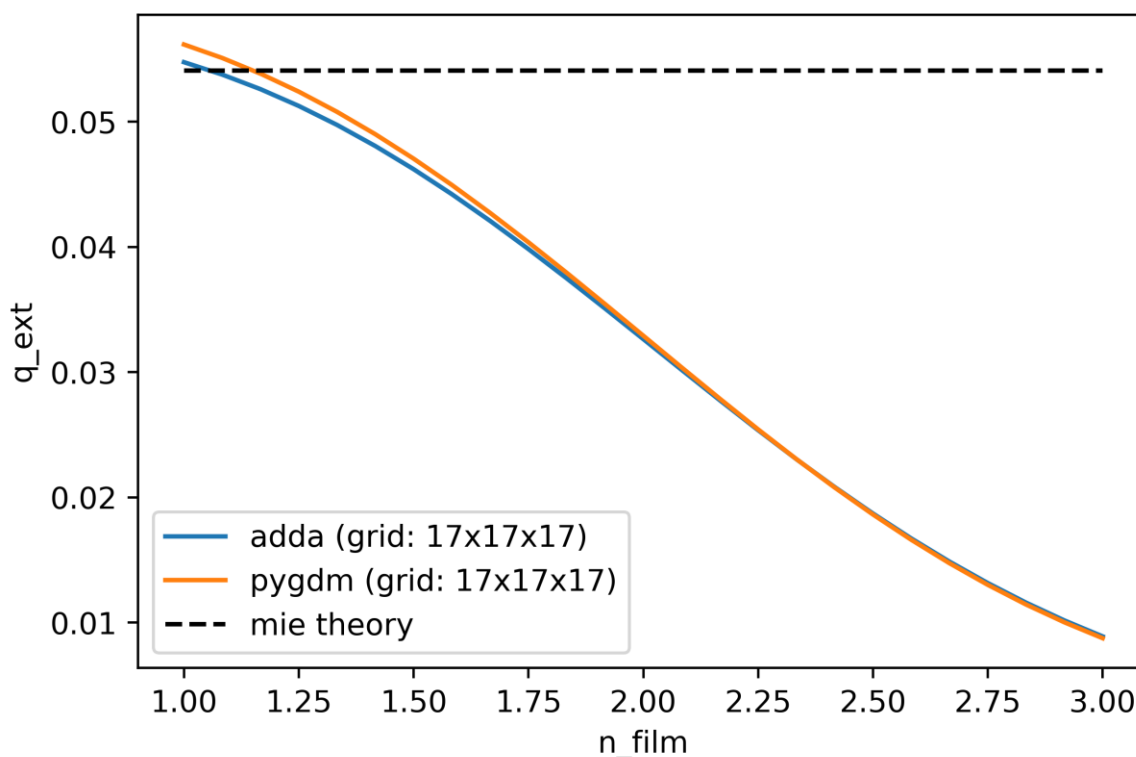


Рис. 6 Эффективность экстинкции ( $q_{ext}$ ), полученные путем моделирования программными пакетами ADDA и PyGDM рассеяния частицей при варьируемом показателе преломления тонкой подложки  $n_2 = n_{film}$  и фиксированном показателе преломления  $n_3 = 1$ . При  $n_2 \rightarrow 1$ , результаты моделирований можно сравнить с теорией Лоренца-Ми.

При прочих идентичных параметрах моделирования была задана подложка, где нижний слой имеет показатель преломления  $n_3 = 3$ . Также был вычислен коэффициент рассеяния аналогичной частицы, лежащей на однослойной подложке с показателем преломления  $n_s = 3$ . При этом, использовалась сетка дискретизации  $128 \times 128 \times 128$ , а также моделирование проводилось с использованием алгоритма получения точного решения, основанного на вычислении интегралов Зоммерфельда. Ожидаем, что эффективность экстинкции, вычисляемое для частицы, лежащей на тонкой пленке будет стремиться к полученной эффективности экстинкции для однослойной подложки при  $n_2 \rightarrow 3$ . Полученные результаты приведены на Рис. 7:



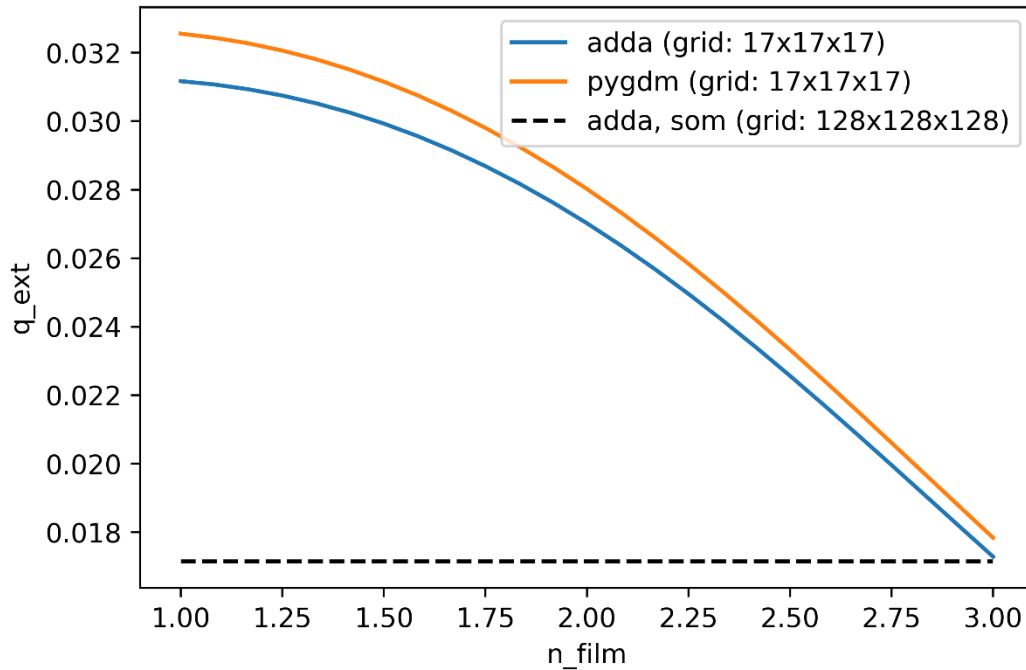


Рис. 7 Эффективность экстинкции ( $q_{ext}$ ), полученные путем моделирования программными пакетами ADDA и PyGDM рассеяния частицей, при варьируемом показателе преломления тонкой подложки  $n_2 = n_{film}$  и фиксированном показателе преломления  $n_3 = 3$ . При  $n_2 \rightarrow 3$ , результаты сравниваются с вычислениями ADDA для однослойной подложки, где применяется точный метод решения, основанный на вычислении интегралов Зоммерфельда.

Проанализируем полученные результаты. В первом численном эксперименте (Рис. 6) значения, получаемые моделированием ADDA дают меньшее отличие от теории Лоренца-Ми при  $n_2 = 1$ . Отличие эффективностей экстинкции, полученных программными пакетами, максимально при  $n_2 = 1$  и составляет 3%. При этом, отличие получаемого PyGDM значения эффективности экстинкции при  $n_2 = 1$  от теории Лоренца-МИ (которое можно принять как оценку ошибки дискретизации) составляет 4%; отличие результата ADDA от теории Лоренца-Ми составляет 1%. Таким образом, отличие вычисленных коэффициентов не превышает ошибки дискретизации на всем используемом в эксперименте диапазоне значений  $n_2$

Во втором эксперименте при  $n_2 = n_3 = 3$  отличие результатов PyGDM от результатов, полученных ADDA с использованием точного алгоритма на сетке  $128 \times 128 \times 128$  также не превышает 4%. Отличие результата ADDA, полученного методом изображений при  $n_2 = 3$  на сетке  $17 \times 17 \times 17$  от результата ADDA, полученного точным алгоритмом составило 1%. При этом максимальное отлечение результатов ADDA и PyGDM также равно 4%.

Далее, были замерены временные затраты и потребление памяти алгоритмов ADDA и PyGDM. Результаты были занесены в таблицу:

	Затраты памяти (Мб)	Время вычисления (с)
ADDA (grid: $17 \times 17 \times 17$ )	5.2	0.4
PyGDM (grid: $17 \times 17 \times 17$ )	6.7	13.2
ADDA (grid: $64 \times 64 \times 64$ )	228.4	8.6
PyGDM (grid: $64 \times 64 \times 64$ )	$\sim 10^6$	-

Из таблицы видно, что ADDA проводит вычисления быстрее при меньших затратах памяти. Стоит отметить, что в PyGDM используются такие вычислительно затратные операции, как обращение матриц, в связи с чем, емкостная сложность алгоритма PyGDM по количеству узлов сетки не позволяет провести вычисления на сетке  $64 \times 64 \times 64$  на обычном компьютере (стоит также отметить, что такая реализация имеет свои преимущества в ряде задач [18]).

## 4.2 Моделирования

### 4.2.1 Построение зависимости эффективности экстинкции от угла падения волны

Для исследования зависимости получаемых результатов от направления падающего на сферическую частицу поля использовалась конфигурация, аналогичная п. 4.1: диаметр частицы и толщина подложки равны 30 нм, показатель преломления частицы задан равным  $1.5 + 0.2i$ ; показатель преломления верхнего слоя был задан равным  $2 + 0.5i$ , нижний слой является вакуумом. Результаты моделирования для различных направлений волны и поляризаций приведены на Рис. 8.

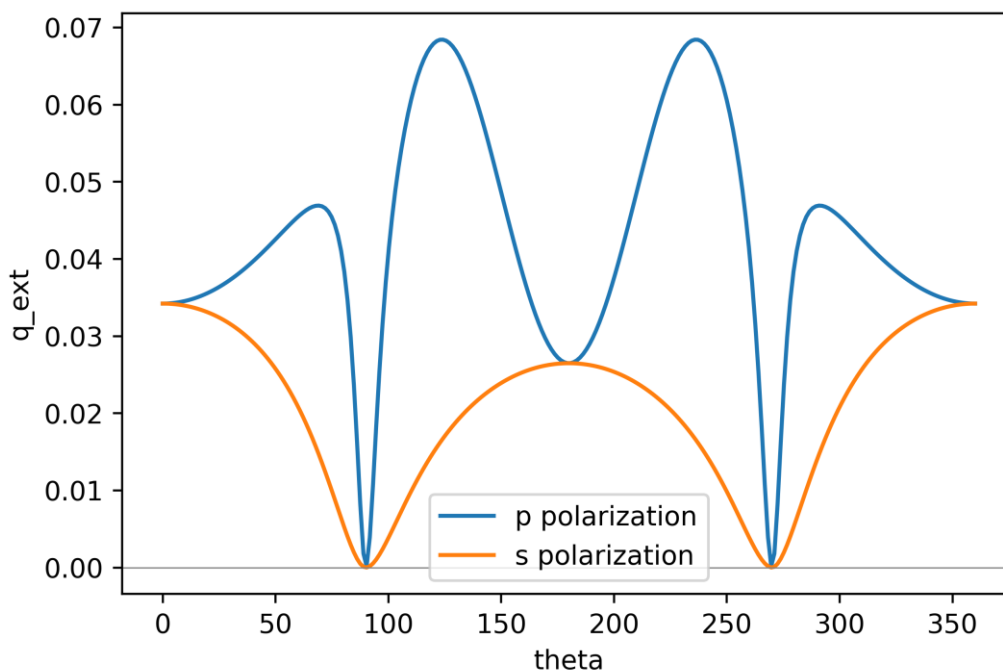


Рис. 8. Зависимость эффективности экстинкции от направления волны.  $\theta$  — угол между векторами ( $\mathbf{n}^0$  и  $\mathbf{e}_z$ ) в градусах.

#### 4.2.2 Моделирования с рассеивателем нетривиальной формы.

Для прикладных задач представляют интерес моделирования светорассеяния частицами произвольной формы (например, модели эритроцита).

Особый интерес представляет моделирование с рассеивателем, имеющего форму альбертозавра (*Albertosaurus sarcophagus*) (см Рис. 9)

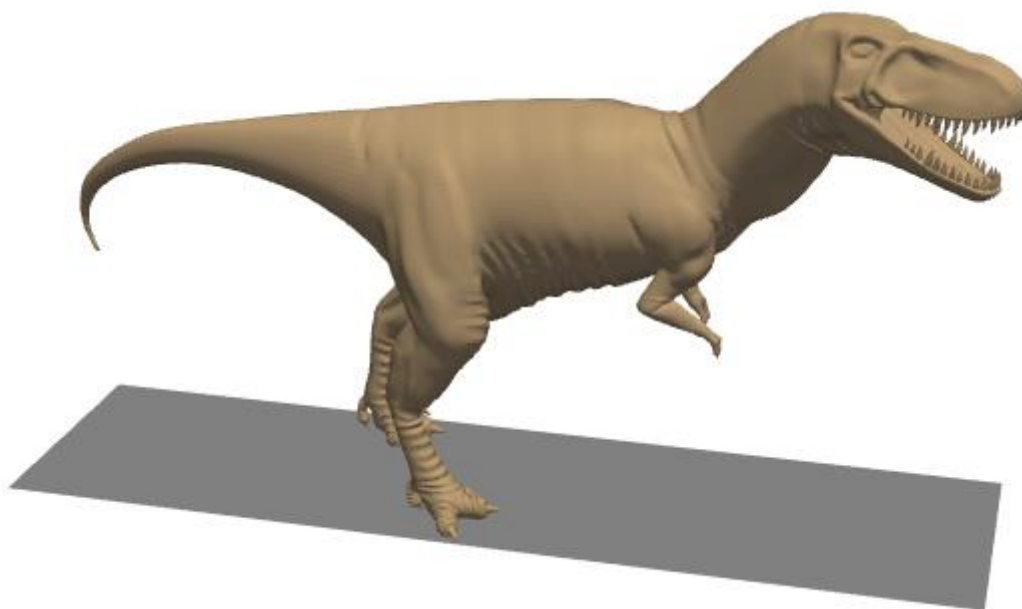


Рис. 9. Используемая 3D модель альбертозавра [19].

Для дальнейшей вокселизации модели, а также для всех 3D визуализаций в этой работе использовалась python библиотека PyVista [20]. Используемая модель была отображена на сетку вокселей размером  $24 \times 88 \times 47$  и подана на вход ADDA (см. Рис. 10).

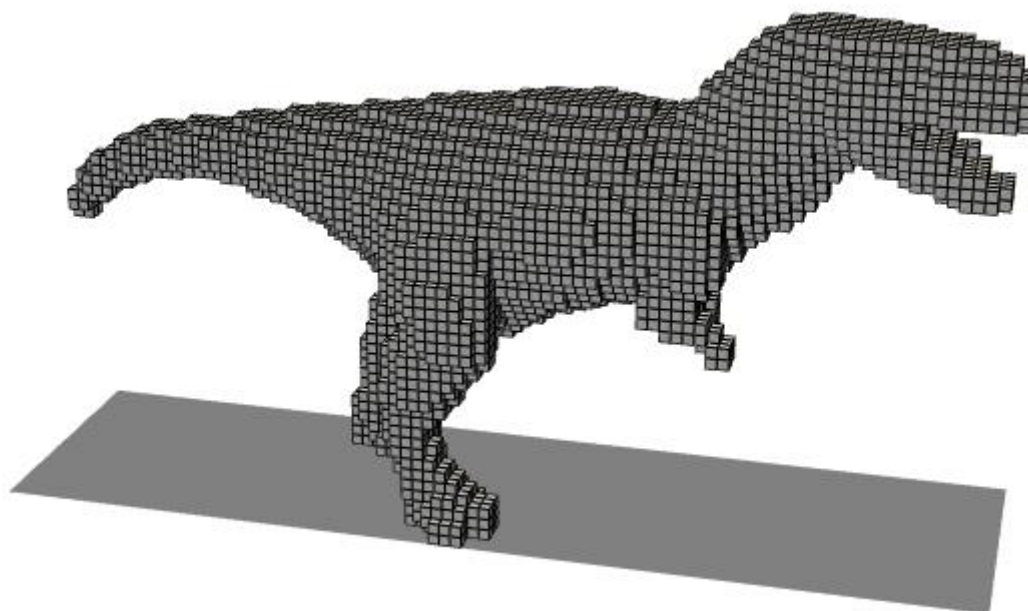


Рис. 10. Отображение используемой модели альбертозавра на воксельную сетку размером  $24 \times 88 \times 47$ .

Показатель преломления альбертозавра был задан равным  $1.5 + 0.2i$ . Его длина (вдоль оси  $x$ ) положена равной 30 нм. Рассеиватель находится на слое толщины 40 нм с коэффициентом преломления равным  $2 + 0.5i$ , этот слой, в свою очередь, располагается над идеально проводящей подложкой (ADDA поддерживает задание идеально проводящей подложки; такая возможность была сохранена для нижнего слоя в реализованном в разработанном алгоритме). На рассеиватель падает волна, направленная вдоль  $-\mathbf{e}_z$ , Длина волны равна 700 нм.

ADDA позволяет сохранять значения поляризации каждого диполя, в частности их квадрат модуля:  $|\mathbf{P}_i|^2$ . Их можно отобразить на облако точек центров кубических ячеек как скалярное поле. Результаты такого отображения проиллюстрированы на Рис. 11.

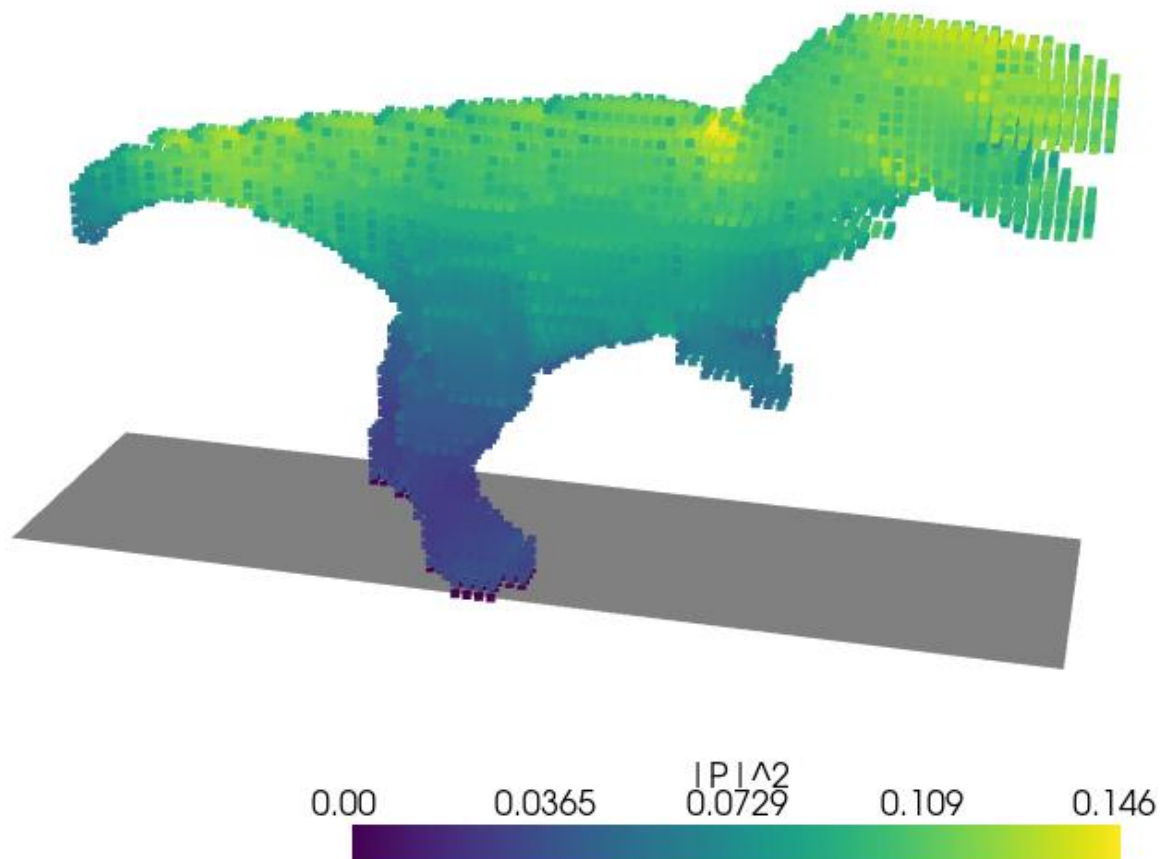


Рис. 11. Карта значений  $|P_i|^2$ , соответствующих каждому элементарному диполю.

## 5 Заключение

В работе была исследована возможность моделирования светорассеяния частицами произвольной формы и внутренней структуры, располагающихся вблизи двухслойной подложки. Был разработан алгоритм, позволяющий моделировать такое светорассеяние с использованием метода дискретных диполей. Предложенный алгоритм был реализован в коде ADDA. Результаты моделирований этого алгоритма были сопоставлены с результатами вычислений python библиотеки PyGDM, в результате чего было установлено, что отличия результатов моделирований имеют порядок ошибки дискретизации. В качестве иллюстрации возможностей введенной модификации кода ADDA была получена карта квадратов модулей поляризаций элементарных диполей для рассеивателя имеющего нетривиальную форму (альбертозавр). Таким образом, метод может быть успешно применен для нахождения различных параметров светорассеяния в условиях применимости метода изображений.

## 6 Основные результаты и выводы

[1] Был разработан алгоритм, позволяющий проводить моделирование светорассеяния вблизи двухслойной подложки частицами произвольной формы и структуры. Показано, что используемое в алгоритме итерационное вычисление отраженной компоненты функции Грина будет сходиться и асимптотически удовлетворяет граничным условиям.

[2] Алгоритм был реализован в коде ADDA. Получаемые этим алгоритмом эффективности экстинкции были сопоставлены с эффективностями, полученными путем моделирования python библиотекой PyGDM при прочих равных условиях. Установлено, что отличия результатов вычислений ADDA и PyGDM имеют порядок ошибки дискретизации.

[3] В качестве иллюстрации возможностей реализованной модификации ADDA в работе была получена карта квадратов модулей поляризаций элементарных диполей для рассеивателя нетривиальной формы (модель альбертозавра).



## 7 Библиографический список

1. Draine B.T. The discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains//The Astrophysical Journal, 1988, Vol. 333, P. 848-872.
2. Yurkin M.A., Semyanov K.A., Tarasov P.A., Chernyshev A.V., Hoekstra A.G., Maltsev V.P. Experimental and theoretical study of light scattering by individual mature red blood cells with scanning flow cytometry and discrete dipole approximation//Applied Optics, 2005, Vol. 44, No. 25, P. 5249-5256.
3. Novotny L., Hecht B. Principles of Nano-Optics. – Cambridge: Cambridge University Press, 2006. – 558 p.
4. Moskalensky A.E., Yurkin M.A., Konokhova A.I., Strokotov D.I., Nekrasov V.M., Chernyshev A.V., Tsvetovskaya G.A., Chikova E.D., Maltsev V.P. Accurate measurement of volume and shape of resting and activated blood platelets from light scattering//Journal of Biomedical Optics, 2013, Vol. 18, No. 1, P. 017001.
5. Liu G. A database of microwave single-scattering properties for nonspherical ice particles//Bulletin of the American Meteorological Society, 2008, Vol. 89, No. 10, P. 1563-1570.
6. Bohren C.F., Huffman D.R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles/25793. – New York: Wiley, 1983. – 544 p.
7. Yurkin M.A., Hoekstra A.G. The discrete-dipole-approximation code ADDA: capabilities and known limitations//Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2011, Vol. 112, The discrete-dipole-approximation code ADDA, No. 13, P. 2234-2247.
8. Campion A., Kambhampati P. Surface-enhanced Raman scattering//Chemical society reviews, 1998, Vol. 27, No. 4, P. 241-250.
9. Cherqui C., Thakkar N., Li G., Camden J.P., Masiello D. Characterizing localized surface plasmons using electron energy-loss spectroscopy//Annual Review of Physical Chemistry, 2016, Vol. 67, No. 1, P. 331-357.
10. Yurkin M.A., Mishchenko M.I. Volume integral equation for electromagnetic scattering: Rigorous derivation and analysis for a set of multilayered particles with piecewise-smooth boundaries in a passive host medium//Physical Review A, 2018, Vol. 97, Volume integral equation for electromagnetic scattering, No. 4, P. 043824.

11. Goedecke G.H., O'Brien S.G. Scattering by irregular inhomogeneous particles via the digitized Green's function algorithm//Applied Optics, 1988, Vol. 27, No. 12, P. 2431-2438.
12. Kahnert F.M. Numerical methods in electromagnetic scattering theory//Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2003, Vol. 79, P. 775-824.
13. Юркин М.А. Моделирование светорассеяния клетками крови с помощью метода дискретных диполей : Дис. ... канд. физ.-мат. наук/М.А. Юркин. – Новосибирск: Институт Химической Кинетики и Горения СО РАН, 2008. – 231 р.
14. Yurkin M.A., Hoekstra A.G. User manual for the discrete dipole approximation code ADDA 1.4.0//00000. - URL: <https://github.com/adda-team/adda/raw/v1.4.0/doc/manual.pdf> (дата обращения: 23.09.2015).
15. Dupertuis M.A., Proctor M., Acklin B. Generalization of complex Snell–Descartes and Fresnel laws//JOSA A, 1994, Vol. 11, No. 3, P. 1159-1166.
16. Bae E., Zhang H., Hirleman E.D. Application of the discrete dipole approximation for dipoles embedded in film//Journal of the Optical Society of America A, 2008, Vol. 25, No. 7, P. 1728-1736.
17. Wiecha P.R. pyGDM – A Python Toolkit for Full-Field Electro-Dynamical Simulations and Evolutionary Optimization of Nanostructures//Computer Physics Communications, 2018, Vol. 233, P. 167-192.
18. Wiecha P.R., Majorel C., Arbouet A., Patoux A., Brûlé Y., Colas des Francs G., Girard C. “pyGDM” - new functionalities and major improvements to the python toolkit for nano-optics full-field simulations//Computer Physics Communications, 2022, Vol. 270, P. 108142.
19. Albertosaurus v1 Free 3D Model - .obj .stl - Free3D. - URL: <https://free3d.com/3d-model/albertosaurus-v1--754959.html> (дата обращения: 10.06.2022).
20. Sullivan C., Kaszynski A. PyVista: 3D plotting and mesh analysis through a streamlined interface for the Visualization Toolkit (VTK)//Journal of Open Source Software, 2019, Vol. 4, No. 37, P. 1450.
21. Cow v4 Free 3D Model - .obj .stl - Free3D. - URL: <https://free3d.com/3d-model/cow-v4--997323.html> (дата обращения: 14.06.2022).
22. Bird v1 Free 3D Model - .obj .stl - Free3D. - URL: <https://free3d.com/3d-model/bird-v1--94904.html> (дата обращения: 14.06.2022).

23. Stellar dendrites shaped Snowflake v1 Free 3D Model - .obj .stl - Free3D. - URL: <https://free3d.com/3d-model/stellar-dendrites-shaped-snowflake-v1--182503.html> (дата обращения: 14.06.2022).

## Приложение

В приложении аналогично п. 4.2.2 рассматриваются карты поляризации для различных форм рассеивателя.

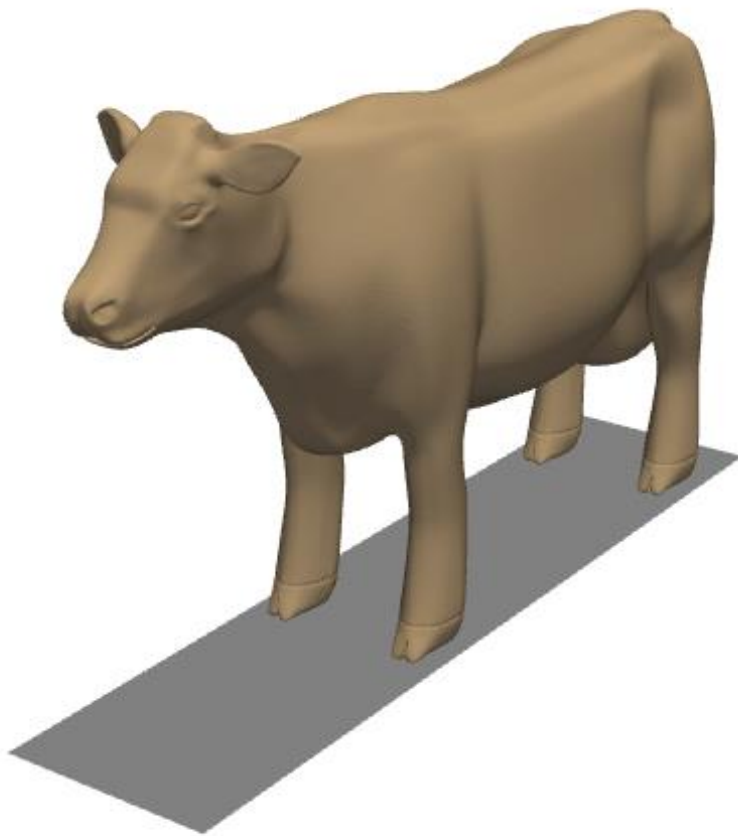


Рис. 12. Рассеиватель в форме коровы[21]

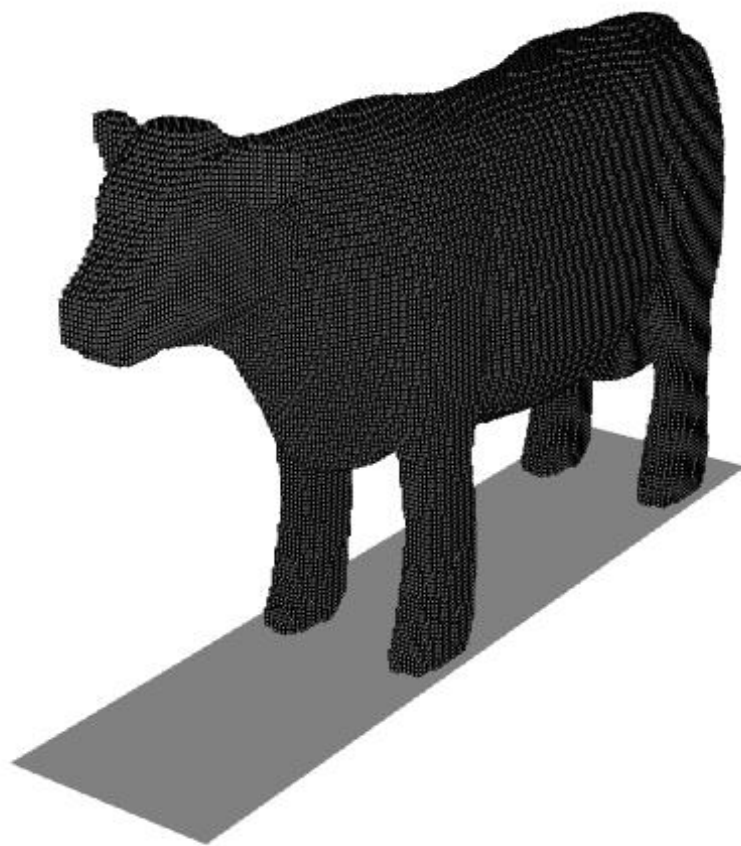


Рис. 13. Отображение модели рассеивателя на воксельную сетку размером  $196 \times 46 \times 115$ .

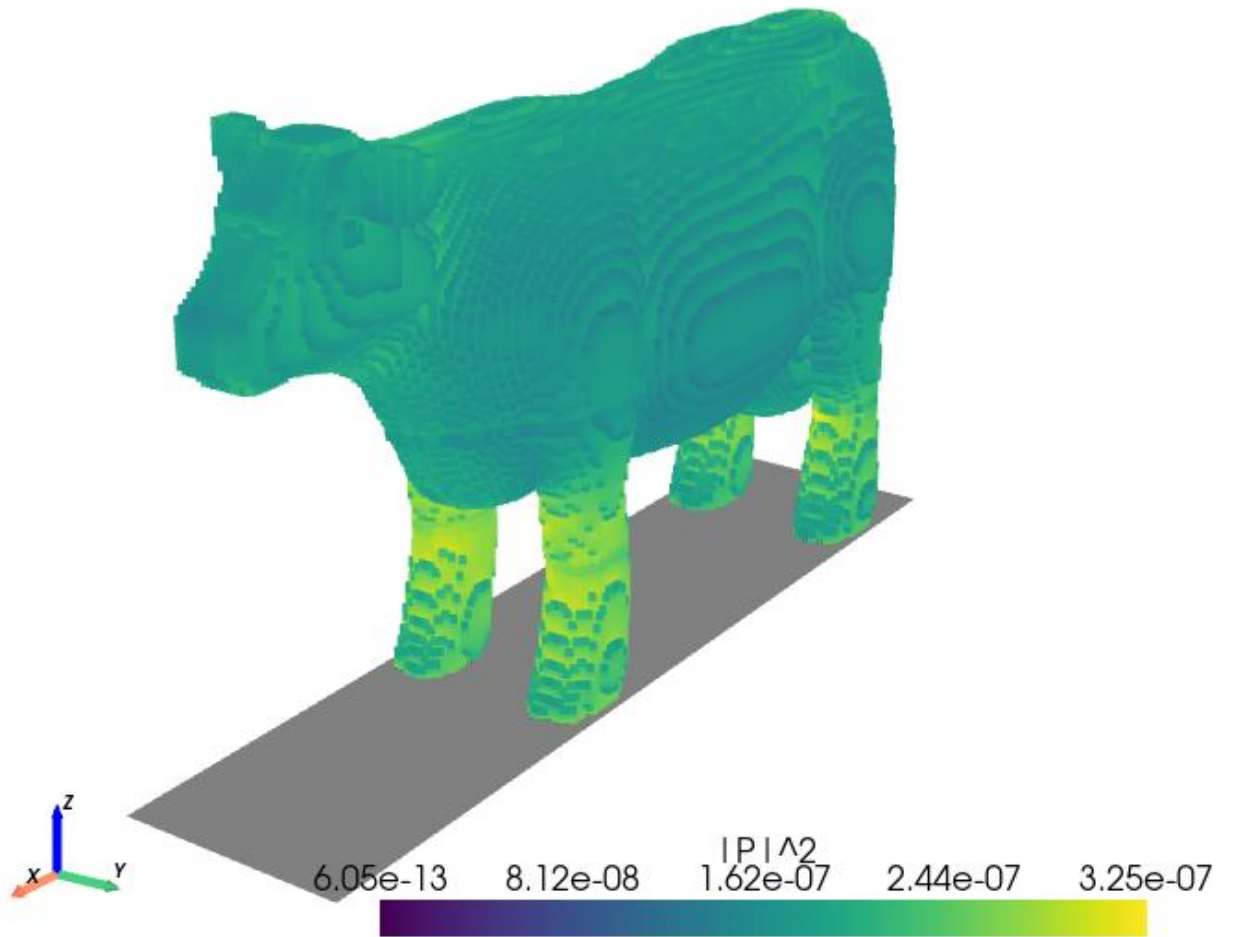


Рис. 14. Карта значений  $|P_i|^2$ , соответствующих каждому элементарному диполю. Волна падает на рассеиватель под углом 45 градусов ( $\mathbf{e}^0 \cdot \mathbf{e}_z = -1/\sqrt{2}$ ;  $\mathbf{e}^0 \cdot \mathbf{e}_x = -1/\sqrt{2}$ ) при прочих условиях аналогичных условиям эксперимента в п. 4.2.2

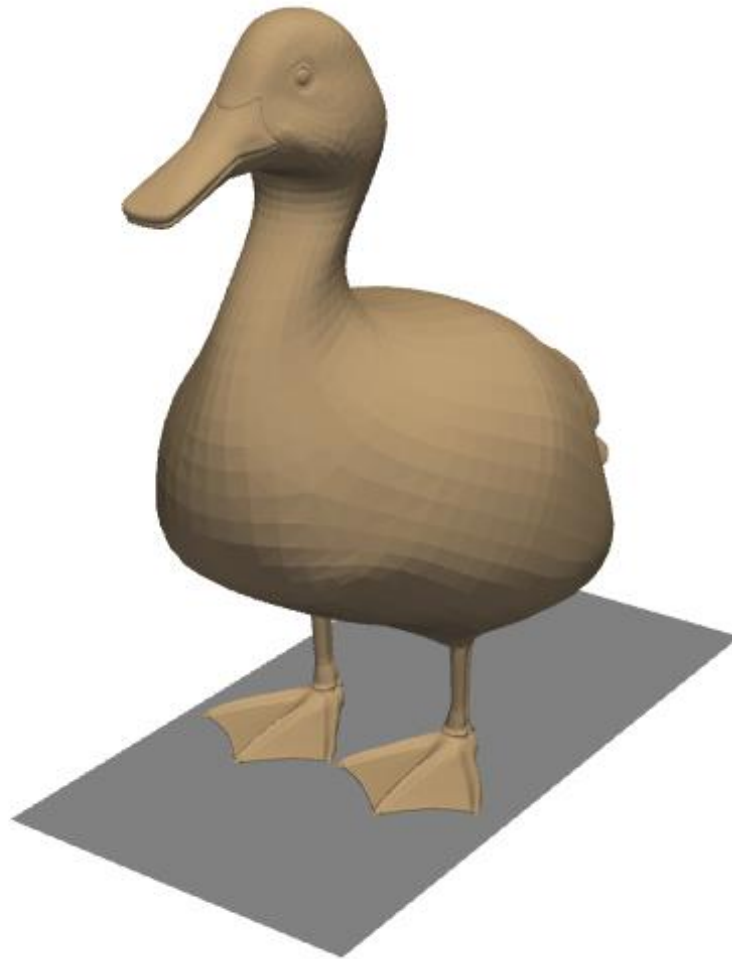


Рис. 15. Рассеиватель в форме утки [22].

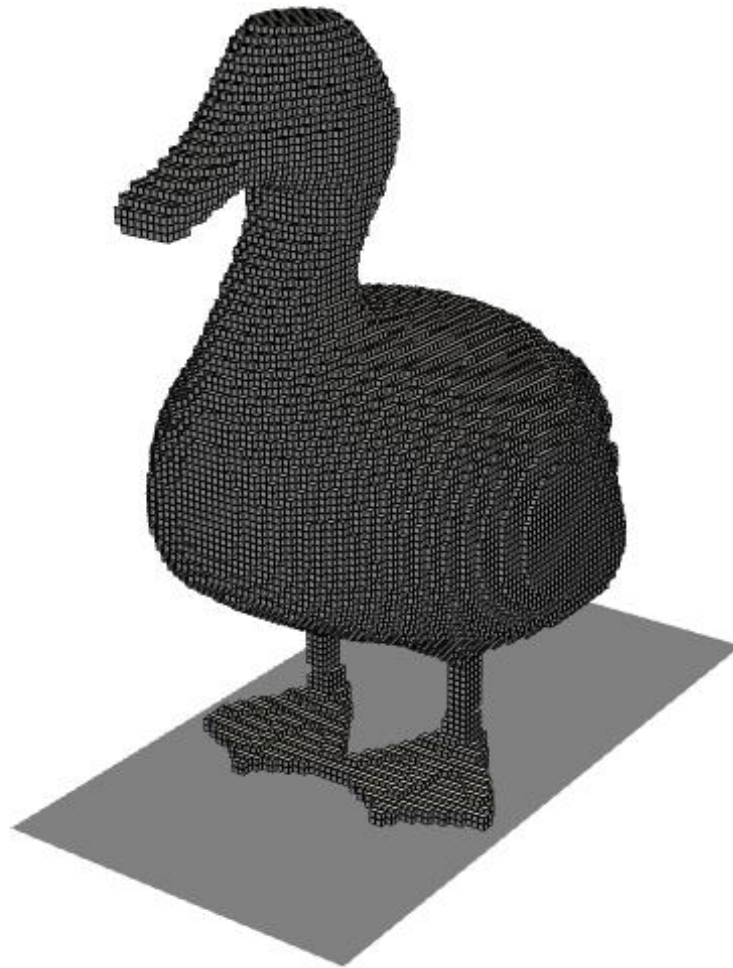


Рис. 16. Отображение модели рассеивателя на воксельную сетку размером  $56 \times 106 \times 109$ .



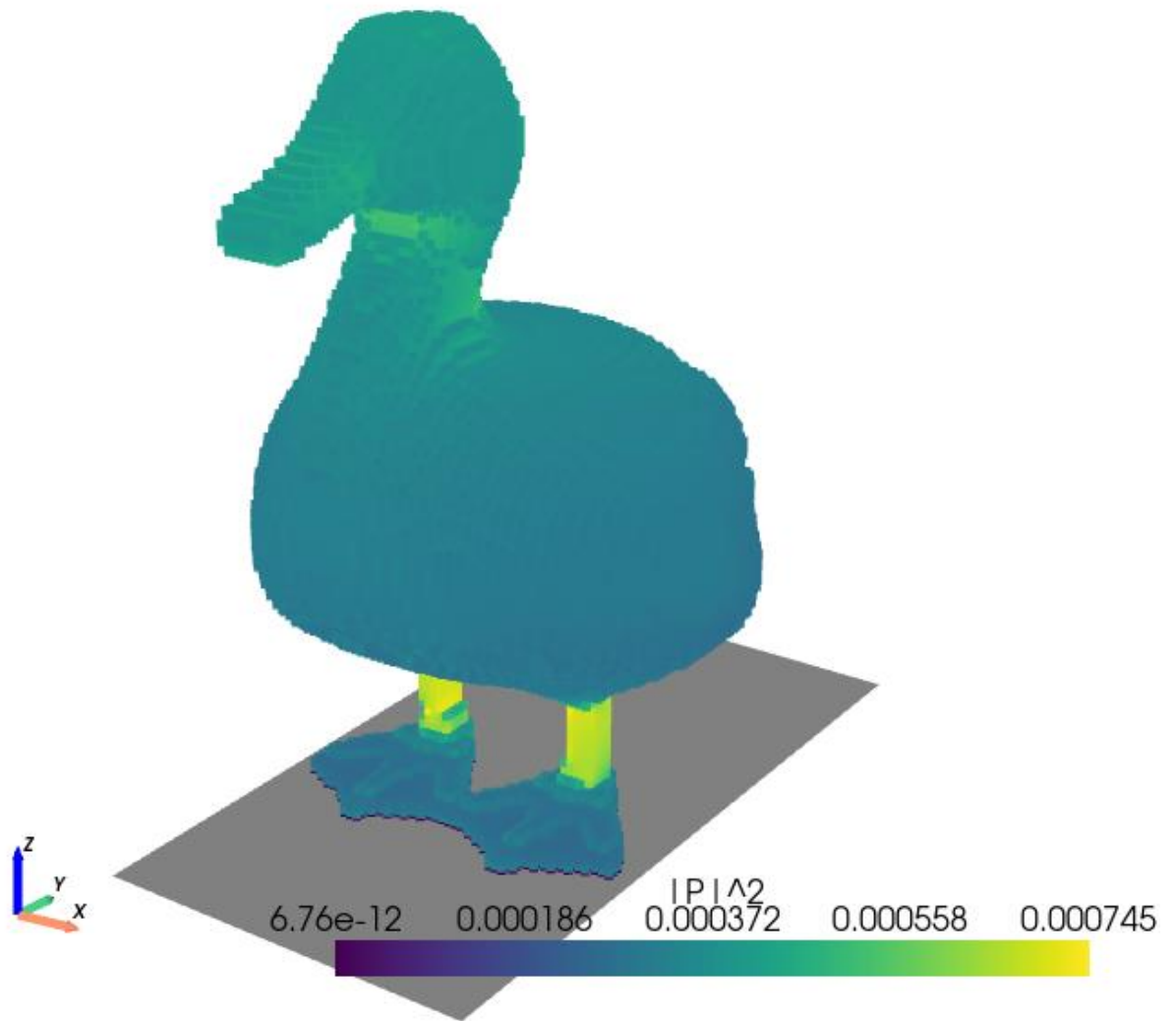


Рис. 17. Карта значений  $|P_i|^2$ , соответствующих каждому элементарному диполю. Волна падает на рассеиватель под углом 45 градусов ( $\mathbf{e}^0 \cdot \mathbf{e}_z = -1/\sqrt{2}$ ;  $\mathbf{e}^0 \cdot \mathbf{e}_y = 1/\sqrt{2}$ ) при прочих условиях аналогичных условиям эксперимента в п. 4.2.2



Рис. 18. Рассеиватель в форме снежинки [23].

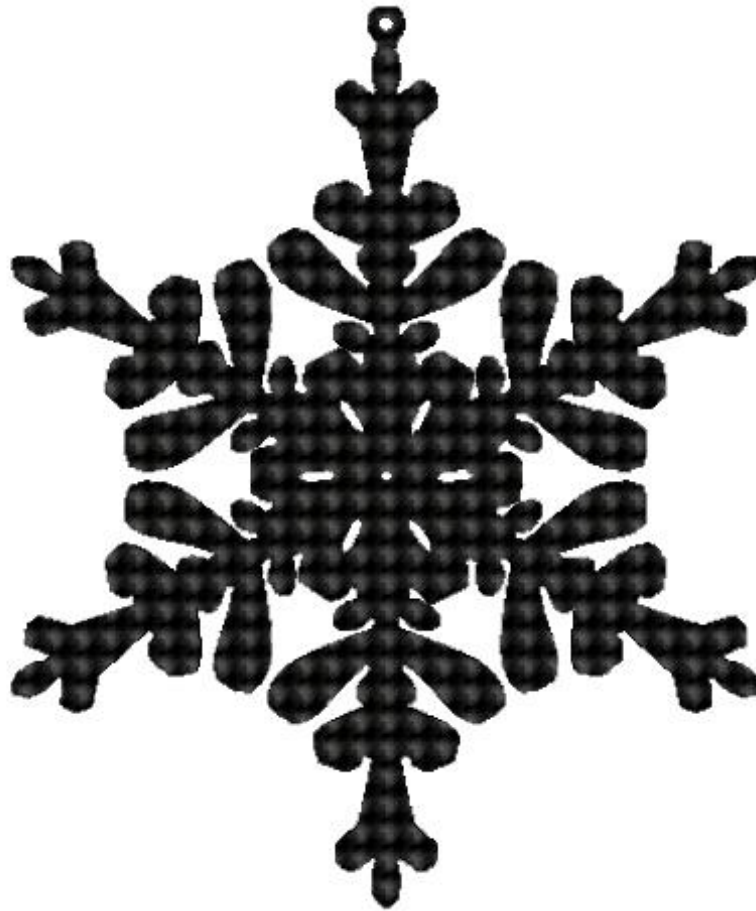


Рис. 19. Отображение модели рассеивателя на воксельную сетку размером  $344 \times 415 \times 6$ .

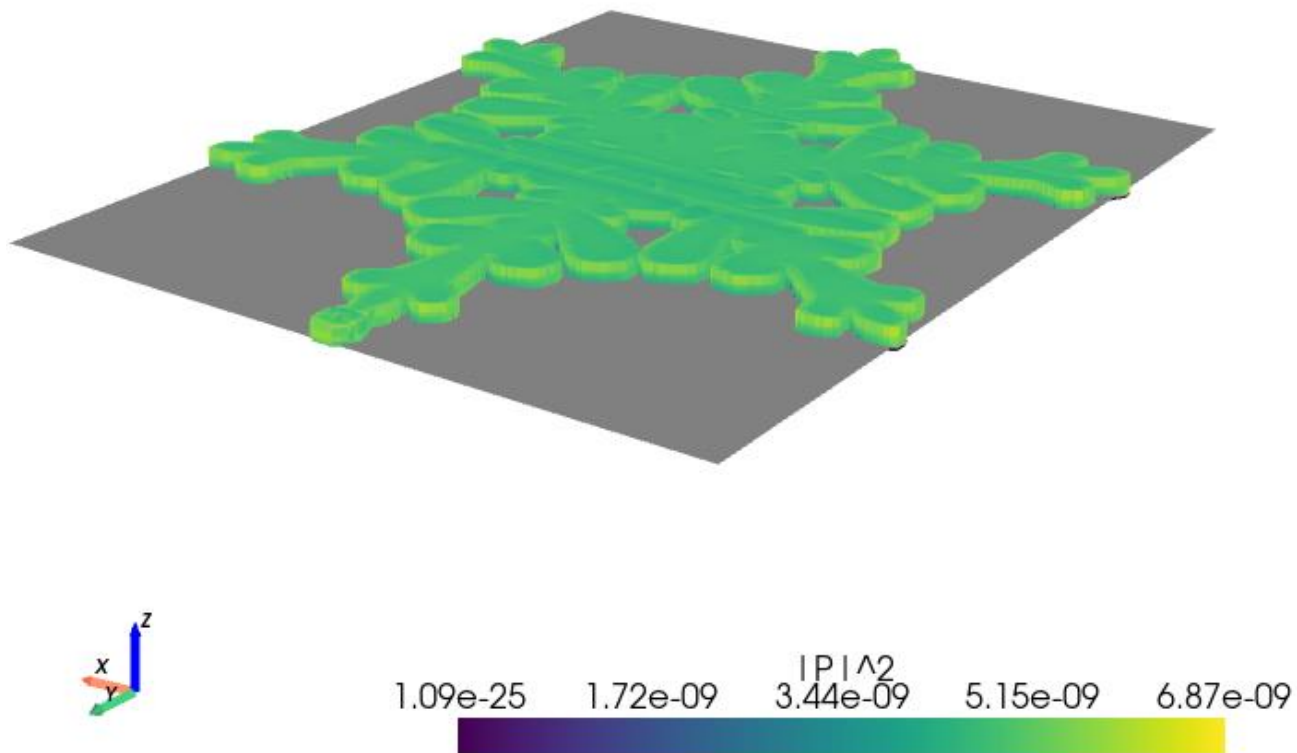


Рис. 20. Карта значений  $|P_i|^2$ , соответствующих каждому элементарному диполю. Волна падает на рассеиватель под углом 45 градусов ( $\mathbf{e}^0 \cdot \mathbf{e}_z = -1/\sqrt{2}$ ;  $\mathbf{e}^0 \cdot \mathbf{e}_x = 1/\sqrt{2}$ ) при прочих условиях аналогичных условиям эксперимента в п. 4.2.2