

## Теория возмущений в задаче рассеяния света на диэлектрическом теле

А. В. Немыкин, А. С. Берёза, Д. А. Шапиро<sup>1)</sup>

*Институт автоматизации и электротехники Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 21 сентября 2018 г.

Построено модифицированное борновское приближение, пригодное для задачи рассеяния электромагнитной волны на диэлектрическом теле. Приведен вывод системы интегральных уравнений, точно учитывающих граничные условия на поверхности. Показано, что в случае цилиндра при нормальном падении модифицированный ряд сходится к известному аналитическому решению. Обсуждается причина нарушения применимости квантовомеханического борновского приближения в оптике.

DOI: 10.1134/S0370274X18210026

**Введение.** Рассеяние электромагнитного излучения является одним из основных элементарных процессов в фотонике. К сожалению, имеется всего несколько точно решаемых симметричных задач, таких как рассеяние плоской электромагнитной волны на диэлектрическом шаре [1] или цилиндре [2]. Для тел более сложной формы разработаны высокоэффективные численные методы, такие как метод конечных разностей во временной области (*Finite Difference Time Domain* – FDTD), методы конечных и граничных элементов (*Finite Element Method* – FEM и *Boundary Element Method* – BEM), приближение точечных диполей (*Discrete Dipole Approximation* – DDA) [3]. В то же время для оптических исследований микробиологических объектов и разработки приложений были бы весьма полезны также приближенные аналитические формулы.

Примером такого приближения служит электростатический (или  $\epsilon$ ) метод [4, 5]. Если размеры рассеивателя много меньше длины волны, то поле можно считать однородным и вместо уравнений Максвелла решать уравнение Лапласа. В частности, в электростатическом пределе поддается исследованию задача рассеяния на двух параллельных цилиндрах [6]. Если характерный размер рассеивателя сравним с длиной волны, то  $\epsilon$ -метод не работает. Когда показатели преломления тела и среды отличаются слабо, возможно другое упрощение. Можно построить теорию возмущений, считая поле в свободном пространстве примерно равным невозмущенному полю падающей волны. Такая ситуация типична, например, для биологических объектов в воде. Это приближение ана-

логично тому, которое используется в квантовой механике [7] для построения борновского ряда. Однако квантовомеханический борновский ряд не дает в электродинамике корректного решения, потому что не соблюдаются граничные условия на поверхности диэлектрика.

В работе [8] получены интегральные уравнения для поля внутри и снаружи рассеивателя, точно учитывающие граничные условия. Предложена итерационная процедура построения ряда теории возмущений. Показано, что уже первое приближение дает качественно правильную диаграмму рассеяния на двух параллельных цилиндрах, а в третьем приближении точность становится лучше 1%. Проверка формул осуществлялась путем сравнения с известными численными методами граничных элементов и точечных диполей.

В настоящей работе модифицированное приближение проверено аналитически. Выбрана точно решаемая двумерная задача о рассеянии на одном цилиндре. Показано, что ряд сходится к известному аналитическому решению. Обсуждается вопрос о причине неприменимости квантовомеханического борновского ряда.

**1. Борновский ряд.** Рассмотрим трехмерную задачу рассеяния на диэлектрическом теле. На тело падает плоская волна, а на бесконечность уходит расходящаяся сферическая. Выпишем уравнение Гельмгольца для поля внутри и снаружи диэлектрика

$$(\Delta + k_p^2)\mathcal{F}_{\text{in}}(\mathbf{r}) = 0, \quad (\Delta + k^2)\mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}) = 0, \quad (1)$$

где  $k = \omega/c$ ,  $k_p = \omega\sqrt{\epsilon}/c$  – волновое число в свободном пространстве и в диэлектрике с проницаемостью

<sup>1)</sup>e-mail: shapiro@iae.nsk.su

$\varepsilon, \omega, c$  – частота и скорость света в вакууме. Здесь  $\mathcal{F}_{\text{in}}, \mathcal{F}_{\text{out}}$  – компонента электрического или магнитного поля. Поле в вакууме  $\mathcal{F}_{\text{out}}$  можно рассматривать как слабозмущенное. В то же время поле внутри диэлектрика  $\mathcal{F}_{\text{in}}$  может существенно отличаться от невозмущенного. Так, в случае проводника электрическое поле вообще стремится к нулю.

Чтобы найти связь поля на границе раздела с полем в пространстве, воспользуемся соотношениями, следующим из формулы Грина:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{in}}(\mathbf{r}') &= \\ &= \int_{\omega} \left[ \mathcal{F}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \Delta G_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta \mathcal{F}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \right] dV, \\ \mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}') &= \\ &= \int_{\Omega} \left[ \mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta \mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \right] dV. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $dV$  – элемент интегрирования по объему по переменной  $\mathbf{r}$ ,  $\omega$  – область внутри диэлектрического рассеивателя, а  $\Omega$  – область снаружи. Функция Грина во внутренней области подчиняется уравнению

$$(\Delta + k_p^2)G_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3)$$

Нас интересует его решение в виде расходящейся сферической волны

$$G_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik_p R}}{4\pi R}, \quad R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|. \quad (4)$$

Функция Грина  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  свободного пространства получается из (4) заменой  $k_p \rightarrow k$ .

Чтобы связать уравнения (2) в систему, с помощью теоремы Гаусса сведем интегралы по объему к поверхностным и применим граничные условия на  $\gamma$ :

$$\mathcal{F}_{\text{in}} = \mathcal{F}_{\text{out}}, \quad \varepsilon^\alpha \frac{\partial \mathcal{F}_{\text{in}}}{\partial n} = \frac{\partial \mathcal{F}_{\text{out}}}{\partial n}. \quad (5)$$

Интегральные соотношения (2) примут вид

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{in}}(\mathbf{r}') &= \\ &= \int_{\gamma} \mathbf{n} \left[ \mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \nabla G_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \varepsilon^{-\alpha} G_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \right] dS, \\ \mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}') &= \\ &= - \int_{\gamma} \mathbf{n} \left[ \mathcal{F}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \varepsilon^\alpha G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \mathcal{F}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \right] dS + \\ &+ \int_{\Gamma} \mathbf{n} \left[ \mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \mathcal{F}_{\text{out}}(\mathbf{r}) \right] dS, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $dS$  – элемент интегрирования по границе по переменной  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{n}$  – единичный вектор внешней нормали,  $\gamma$  – граница рассеивателя,  $\Gamma$  – замкнутая поверхность в виде сферы, радиус которой мы устремляем к бесконечности. Интеграл по удаленной поверхности  $\Gamma$  дает невозмущенное поле падающей волны  $\mathcal{F}_{\text{out}}^{(0)} = \mathcal{F}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ .

Предполагая возмущение внешнего поля малым, мы можем построить ряд последовательных приближений для поля внешнего  $\mathcal{F}_{\text{out}} = \mathcal{F}_{\text{out}}^{(0)} + \mathcal{F}_{\text{out}}^{(1)} + \dots$  и внутреннего  $\mathcal{F}_{\text{in}} = \mathcal{F}_{\text{in}}^{(0)} + \mathcal{F}_{\text{in}}^{(1)} + \dots$ . Из (6) получаем рекуррентные соотношения для поправок

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{in}}^{(j)}(\mathbf{r}') &= \\ &= \int_{\gamma} \mathbf{n} \left[ \mathcal{F}_{\text{out}}^{(j)}(\mathbf{r}) \nabla G_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \varepsilon^{-\alpha} G_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \mathcal{F}_{\text{out}}^{(j)}(\mathbf{r}) \right] dS, \\ \mathcal{F}_{\text{out}}^{(j+1)}(\mathbf{r}') &= \\ &= - \int_{\gamma} \mathbf{n} \left[ \mathcal{F}_{\text{in}}^{(j)}(\mathbf{r}) \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \varepsilon^\alpha G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \mathcal{F}_{\text{in}}^{(j)}(\mathbf{r}) \right] dS. \end{aligned} \quad (7)$$

Полученное соотношение позволяет последовательно найти борновские приближения высших порядков,  $j = 0, 1, \dots$

Данное рассмотрение подходит не только для одиночного рассеивателя, но и для системы тел, ограниченных гладкими поверхностями  $\gamma = \cup_i \gamma_i$ . Тогда граница будет состоять из нескольких поверхностей, а интеграл по  $\gamma$  сведется к сумме интегралов. Аналогичные соотношения получаются и в двумерном случае, только  $\gamma$  становится замкнутым контуром или объединением контуров. В следующем разделе мы рассмотрим двумерный случай кругового цилиндра при нормальном падении.

**2. Расеяние на цилиндре** Рассмотрим двумерную задачу рассеяния с цилиндрической расходящейся волной на бесконечности. Пусть на цилиндр радиуса  $a$ , изображенный на рис. 1, перпендикулярно

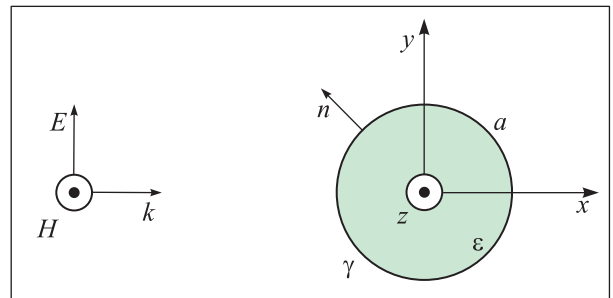


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема постановки двумерной задачи рассеяния для  $p$ -волны на цилиндре

оси падает плоская волна. Выберем координату  $z$  по оси цилиндра,  $x$  – вдоль волнового вектора  $\mathbf{k}$  и ограничимся  $p$ -поляризацией, которая используется для возбуждения поверхностных плазмонов. Тогда магнитное поле  $\vec{H}$  направлено вдоль оси  $z$ , а ось  $y$  выберем вдоль электрического поля  $\vec{E}$ . Уравнению Гельмгольца (1) удовлетворяет магнитное поле  $\mathcal{F} = \mathcal{H}$  с граничными условиями (5) непрерывности тангенци-

альной компоненты магнитного поля и его взвешенной нормальной производной ( $\alpha = -1$ ).

Функцию Грина свободного пространства удобно представить в виде суммы по азимутальным модам:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4i} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')} \times \begin{cases} H_m^{(1)}(kr) J_m(kr'), & r > r', \\ H_m^{(1)}(kr') J_m(kr), & r' > r, \end{cases}$$

где  $J_m$  – функция Бесселя порядка  $m$ ,  $H_m^{(1)}$  – функция Ганкеля первого рода [9].

Поле внутри цилиндра в нулевом приближении, найденное из соотношения (7), можно записать как

$$\mathcal{H}_{in}^{(0)}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_0 \sum_m e^{im\varphi} i^m D_{in}^{m(0)} J_m(k_p r),$$

$$D_{in}^{m(0)} = \frac{\pi\sqrt{\varepsilon}a}{2i} \times \left[ kJ_m(ka) \dot{H}_m^{(1)}(k_p a) - k_p \dot{J}_m(ka) H_m^{(1)}(k_p a) \right], \quad (8)$$

где точкой обозначена производная цилиндрической функции по своему аргументу. Подстановка найденного поля внутри диэлектрика в соотношения (7) дает возможность найти первую поправку к внешнему полю:

$$\mathcal{H}_{out}^{(1)}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_0 \sum_m e^{im\varphi} i^m D_{out}^m D_{in}^{m(0)} H_m^{(1)}(kr). \quad (9)$$

Каждая последующая поправка к внутреннему полю будет умножаться на  $D_{in}^m$ , а поправка к внешнему полю – на  $D_{out}^m$ . Коэффициенты даются формулами

$$D_{in}^m = \frac{\pi\sqrt{\varepsilon}a}{2i} \times \left[ kH_m^{(1)}(ka) \dot{H}_m^{(1)}(k_p a) - k_p \dot{H}_m^{(1)}(ka) H_m^{(1)}(k_p a) \right],$$

$$D_{out}^m = \frac{\pi a}{2i\sqrt{\varepsilon}} \times \left[ kJ_m(ka) \dot{J}_m(k_p a) - k_p \dot{J}_m(ka) J_m(k_p a) \right]. \quad (10)$$

Меняя порядок суммирования по азимутальным модам и порядкам борновского ряда, можно показать, что сложение всех поправок сводится к сумме геометрической прогрессии:

$$\mathcal{H}_{in}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_0 \sum_m e^{im\varphi} i^m \frac{D_{in}^{m(0)}}{1 - D_{in}^m D_{out}^m} J_m(k_p r),$$

$$\mathcal{H}_{out}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_0 \sum_m e^{im\varphi} i^m \frac{D_{out}^m D_{in}^{m(0)}}{1 - D_{in}^m D_{out}^m} H_m^{(1)}(kr). \quad (11)$$

Чтобы упростить выражение (11), введем обозначения для функций двух переменных, обобщенных определителей Вронского:

$$\begin{aligned} \Delta_{JJ}(t, s) &= tJ_m(t) \dot{J}_m(s) - s \dot{J}_m(t) J_m(s), \\ \Delta_{HH}(t, s) &= tH_m^{(1)}(t) \dot{H}_m^{(1)}(s) - s \dot{H}_m^{(1)}(t) H_m^{(1)}(s), \\ \Delta_{JH}(t, s) &= tJ_m(t) \dot{H}_m^{(1)}(s) - s \dot{J}_m(t) H_m^{(1)}(s), \\ \Delta_{HJ}(t, s) &= tH_m^{(1)}(t) \dot{J}_m(s) - s \dot{H}_m^{(1)}(t) J_m(s). \end{aligned} \quad (12)$$

Можно проверить, что для таких функций выполняется тождество

$$\begin{aligned} \Delta_{JH}(t, t) \Delta_{JH}(s, s) - \Delta_{HH}(t, s) \Delta_{JJ}(t, s) &= \\ = \Delta_{JH}(t, s) \Delta_{HJ}(t, s). \end{aligned} \quad (13)$$

Как видно из (12), диагональные элементы  $\Delta_{JH}(t, t) = \Delta_{JH}(t, t)$  выражаются через известные вронскианы цилиндрических функций, откуда

$$\frac{\pi}{2i} \Delta_{JH} = 1. \quad (14)$$

Записав единицу в виде произведения диагональных элементов (14), мы убедимся, что знаменатель в каждом слагаемом суммы (11) согласно тождеству (13) преобразуется к виду

$$1 - D_{in}^m D_{out}^m = -\frac{\pi^2}{4} \Delta_{JH}(ka, k_p a) \Delta_{HJ}(ka, k_p a).$$

Отсюда следует, что сумма (11) сводится к точному решению [2], которое во внешней области имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(r, \varphi) &= \\ = \mathcal{H}_0 \left[ e^{ikr \cos \varphi} + \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m i^m e^{im\varphi} H_m^{(1)}(kr) \right], \\ c_m &= -\frac{\Delta_{JJ}(ka, k_p a)}{\Delta_{HJ}(ka, k_p a)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Этот факт подтверждается численным расчетом: из угловой диаграммы на рис. 2 видно, что борновский ряд быстро сходится к точному решению.

**3. Связь уравнений Шрёдингера и Гельмгольца.** Чтобы понять, почему квантовомеханическая теория возмущений не подходит в электродинамике, мы сравним уравнения Шредингера и Гельмгольца в простейшем одномерном случае. Уравнение Гельмгольца для компоненты магнитного поля  $\mathcal{H}$  имеет вид:

$$\frac{d^2 \mathcal{H}}{dx^2} + \frac{\omega^2 n^2(x)}{c^2} \mathcal{H} = 0, \quad (16)$$

где  $n(x)$  – показатель преломления как функция координаты  $x$ . Сравним (16) со стационарным одномерным уравнением Шредингера:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + [E - U(x)] \psi = 0, \quad (17)$$

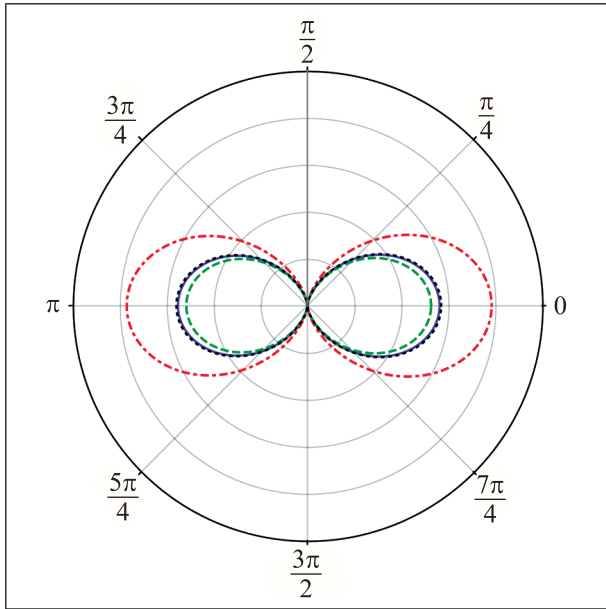


Рис. 2. (Цветной онлайн) Квадрат модуля рассеянного поля на расстоянии 10 мкм с учетом первой (штрихпунктир), второй (длинные штрихи), третьей (короткие штрихи) поправки и точного решения (сплошная линия) при  $a = 0.03$  мкм,  $\lambda = 1.5$  мкм

где  $\psi$  – волновая функция,  $E$  – энергия,  $U(x)$  – потенциальная энергия. Мы видим, что функцию  $n^2(x)$  нельзя считать потенциалом, а  $\omega^2/c^2$  – энергией, потому что в уравнение (17) потенциальная и полная энергия входят аддитивно, а в (16) – мультипликативно.

Выполним преобразования неизвестной функции и независимой переменной, чтобы свести произведение к разности. Для этого, следуя [10], перейдем к новой независимой переменной, оптическому пути

$$\xi = \int_0^x n(x') dx' + \xi_0. \tag{18}$$

Мы интегрируем от 0 до  $x$ , чтобы зафиксировать начало новой координаты  $\xi = \xi_0$  при  $x = 0$ . Уравнение (16) принимает вид

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \xi^2} + \frac{n'}{n^2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \xi} + k^2 \mathcal{H} = 0. \tag{19}$$

Здесь и далее штрих означает производную по  $x$ . Чтобы привести (19) к каноническому виду без первой производной, выполним преобразование  $\mathcal{H}(\xi, t) = u(\xi)n^{-1/2}$ . Для новой неизвестной функции  $u(\xi)$  получим

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + \left[ \frac{3}{4} \left( \frac{n'}{n^2} \right)^2 - \frac{n''}{2n^3} + k^2 \right] u = 0. \tag{20}$$

Теперь можно сопоставить (20) с уравнением (17). Мы видим, что роль энергии играет  $E_{\text{eff}} = k^2 = \omega^2/c^2$ , а эффективного потенциала – функция

$$U_{\text{eff}}(\xi) = -\frac{3}{4} \left( \frac{n'}{n^2} \right)^2 + \frac{n''}{2n^3}. \tag{21}$$

Формулу (21) можно упростить, если ввести вспомогательную функцию

$$q = \frac{n'}{2n^2}. \tag{22}$$

Тогда потенциал запишется как  $U_{\text{eff}} = dq/d\xi + q^2$ .

Пусть, как в рассмотренной в разделах 1, 2 задаче, функция  $n(x)$  – кусочно постоянная. Тогда  $U_{\text{eff}} = 0$ , а граничные условия между отрезками с разными значениями показателя преломления  $n_1, n_2$  получаются для  $p$ -волны из формулы (5) при  $\alpha = -1$ :

$$u_1 n_1^{-1/2} = u_2 n_2^{-1/2}, \quad \frac{du_1}{d\xi} n_1^{-3/2} = \frac{du_2}{d\xi} n_2^{-3/2}. \tag{23}$$

Для  $s$ -волны  $\alpha = 0$ , откуда

$$u_1 n_1^{-1/2} = u_2 n_2^{-1/2}, \quad \frac{du_1}{d\xi} n_1^{-1/2} = \frac{du_2}{d\xi} n_2^{-1/2}. \tag{24}$$

В квантовой механике одной частицы в одномерном кусочно-постоянном потенциале непрерывны волновая функция и ее производная на границе. Поэтому квантовомеханическое борновское приближение неприменимо в задаче рассеяния электромагнитной волны.

Если значения потенциала  $n_i, i = 1, \dots, N$  заданы на  $N$  отрезках, можно записать решение  $u = A_i \cos k\xi + B_o \sin k\xi$  и из условий (23) или (24) получить систему линейных уравнений на коэффициенты  $A_i, B_i$ . При стремлении длины отрезков к нулю это свойство можно использовать как численный метод решения одномерного уравнения Гельмгольца.

**Заключение.** Таким образом, модифицированное борновское приближение проверено на примере точно решаемой задачи о рассеянии  $p$ -волны на диэлектрическом цилиндре. Установлено, что ряд сходится к известному разложению по цилиндрическим волнам. Показано, что квантовомеханический борновский ряд не работает в электродинамике из-за специфики граничных условий на поверхности диэлектрика.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований # 16-02-00511.

1. G. Mie, Annalen der Physik **330**, 377 (1908).

2. L. Rayleigh, *Philosophical Magazine, Series 6* **36**(215), 365 (1918).
3. A. Lavrinenko, J. Lægsgaard, N. Gregersen, F. Schmidt, and T. Søndergaard, *Numerical Methods in Photonics*, CRC Press, Boca Raton (2015).
4. Н. Войтович, Б. З. Каценелебаум, А. Н. Сивов, УФН **118**, 709 (1976).
5. В. В. Климов, *Наноплазмоника*, Физматлит, М. (2010).
6. Р. Е. Vorobev, *ЖЭТФ* **110**, 193 (2010).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (Нерелятивистская теория)*, Физматлит, М. (2004) [L. D. Landau and E. V. Lifshits, *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)*, Pergamon Press, Oxford, N.Y. (1991)].
8. A. S. Bereza, A. V. Nemykin, S. V. Perminov, L. L. Frumin, and D. A. Shapiro, *Phys. Rev. A* **95**, 063839 (2017).
9. F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, and C. W. Clark, *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge University Press, N.Y. (2010).
10. O. V. Belai, L. L. Frumin, E. V. Podivilov, and D. A. Shapiro, *Opt. Lett.* **33**, 2101 (2008).