<u>КОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА</u>

PACS 42.25.Dd; 42.25.Fx; 42.25.Kb

Когерентное рассеяние света гетерогенными случайношероховатыми пленками и эффективная среда в теории многократного рассеяния электромагнитных волн*

Ж.Бержинк

Развит общий формализм, основанный на функциях Грина, для расчета когерентного электромагнитного поля, рассеянного случайной средой с шероховатыми границами. Представлено аппроксимирующее выражение, посредством которого может быть определена эффективная диэлектрическая проницаемость, обобщаемая для слоя неоднородной случайной среды с разными типами частиц, ограниченного случайно-шероховатыми поверхностями, и описывающая когерентное распространение электромагнитных волн в такой среде. Получено выражение, содержащее в низкочастотном пределе формулу Максвелла – Гарнетта и формулу Келлера; последняя, как было доказано, находится в хорошем согласии с экспериментами для частиц с размерами больше длины волны.

Ключевые слова: когерентное рассеяние света, неоднородная случайная среда, случайно-шероховатые поверхности, эффективная диэлектрическая проницаемость, функция Грина.

1. Введение

Распространение электромагнитных волн в случайных средах широко исследовалось в последние десятилетия [1-16]. В большинстве работ основная идея заключена в вычислении первого и второго статистических моментов электромагнитного поля с тем, чтобы понять, как волны взаимодействуют с неоднородной случайной средой [8,11-13,16]. В настоящей работе мы интересуемся первым статистическим моментом, который представляет собой среднее электрическое поле. При некоторых предположениях можно показать, что оно распространяется так, как если бы среда была однородной, но с перенормированной диэлектрической проницаемостью, называемой эффективной диэлектрической проницаемостью (ЭДП). Вычисление этого параметра имеет давнюю историю, которая начинается с работ Клаузиуса-Моссотти и Максвелла-Гарнетта. С тех пор большинство исследований касаются квазистатического предела, когда эффектом запаздывания можно пренебречь. Для того чтобы учесть эффекты рассеяния, квантовая теория многократного рассеяния была перенесена на электромагнитный случай [6,8,11-13,16], но поскольку строгий аналитический ответ недостижим, было разработано несколько приближенных схем [6, 8, 12, 13, 16]. Одной из наиболее продвинутых схем является приближение квазикристаллического когерентного потенциала (QC-CPA), которое учитывает корреляции между частицами [13, 16].

В настоящей работе рассматривается когерентная компонента поля электромагнитной волны, рассеянного случайной средой, которая ограничена случайно-шероховатыми поверхностями. Для этого варианта были разработаны строгие численные методы, затратные в вычислительном плане или ограниченные 2D-геометриями. Чаще всего для объемного рассеяния используется теория переноса излучения. Этот метод хорошо подходит для вычисления интенсивности рассеянного излучения, однако он основан на феноменологических соображениях. Разработанная аналитическая теория описывает связь между случайной средой и шероховатыми границами. В работах Фурутцу [17,18] сформулирована проблема рассеяния шероховатой поверхностью на базе уравнений Дайсона и Бете-Солпитера, в которых случайная среда и шероховатые границы трактуются на одной и той же основе. К сожалению, этот подход является формальным и не дает прямого соотношения между теорией переноса излучения и классической теорией рассеяния шероховатой поверхностью. Мудальяр [19-21] использовал интегральные уравнения, где шероховатые границы рассматривались как возмущающее воздействие. Он показал, что интенсивность рассеяния описывается обобщенным транспортным уравнением. Такой подход является более гибким, чем подход Фурутцу, однако полученные выражения определяются выбором возмущающего воздействия при описании рассеяния шероховатыми поверхностями. В настоящей работе показано, что независимо от выбора теории рассеяния, применяемой на границах, можно получить общее выражение путем введения операторов рассеяния случайношероховатыми поверхностями (выражения для операторов рассеяния при использовании малоамплитудной теории возмущений см. в [22]). Кроме того, при разделении вкладов поверхностного и объемного рассеяния с помощью функций Грина могут быть использованы аналитические теории описания волн, рассеянных бесконечной случайной средой. Предметом нашего интереса является случайная среда, состоящая из статистических ансамблей различных рассеивающих фракций, и искусственные материальные структуры, созданные на основе диэлектрических или металлических резонансных частиц или наночастиц. Цель данной работы – получение новых уравнений распространения для световой волны и новых формул для ЭДП, которая характеризует когерентную часть

^{*}Перевод с англ. В.В.Шувалова.

G.Berginc. Thales, 2 avenue Gay-Lussac 78995 Elancourt, France; e-mail: gerard.berginc@fr.thalesgroup.com

Поступила в редакцию 28 мая 2013 г., после доработки – 1 августа 2013 г.

электромагнитной волны, распространяющейся в случайной среде со случайно-шероховатыми поверхностями. Отправной точкой нашей теории является теория многократного рассеяния. Мы даем формальное решение для оператора рассеяния посредством введения формализма Т-оператора и показываем, что Т-оператор удовлетворяет уравнению Липпмана-Швингера. Затем вводится приближение QC-CPA, которое учитывает корреляцию между частицами с помощью функции парного распределения. Для конструирования гетерогенных метаматериалов [23] и математического анализа рассеяния волн в этих средах важно определить новую точную формулировку ЭДП и ввести шероховатость слоя в выражение для рассеянного поля. Это может обеспечить физическое понимание процессов в областях волновой физики гетерогенных метаматериалов и нелокальной дисперсии. Текущий интерес к этим вопросам растет как из-за способности таких структур контролировать распространение электромагнитных волн на масштабах больше и меньше длины волны, так и вследствие необходимости разработки стандартизованной математической основы для оптимизации параметров таких структур. В статье представлена новая формула для ЭДП, которая содержит в низкочастотном пределе формулу Максвелла-Гарнетта и формулу Келлера, вклад шероховатых границ слоя, новые выражения для поля когерентного рассеяния, учитывающие рассеяние на случайно-шероховатых границах и случайной средой с различными типами частиц. Оператор, который описывает рассеяние на случайно-шероховатых границах слоя, может быть аппроксимирован с использованием обычных теорий рассеяния шероховатой поверхностью, таких как метод малых возмущений, теория Кирхгофа, или других более сложных теорий (малоугловое приближение, метод малых возмущений более высоких порядков).

Статья построена следующим образом. В разд.2 введен формализм многократного рассеяния для случайного слоя со случайно-шероховатыми поверхностями и рассмотрено уравнение Липпмана–Швингера. В разд.3 получена система уравнений, проверенная на ЭДП в приближении QC-CPA. В разд.4 дана формулировка ЭДП для рэлеевских рассеивателей, а в разд.5 приведены численные примеры для диэлектрических или металлических наночастиц, внедренных в диэлектрическую среду.

2. Уравнения Липпмана–Швингера и рассеянное поле

Будем рассматривать гармонические волны с частотой *ω*. Изучаемая структура (рис.1) состоит из первой



Рис.1. Определение случайного объема с шероховатыми границами.

полубесконечной среды (среда 0) с диэлектрической проницаемостью ε_0 , случайного слоя (среда 1) с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_1(\omega)$, ограниченного шероховатыми интерфейсами, и другой полубесконечной среды (среда 2) с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_2(\omega)$. Слой содержит дискретные рассеиватели, распределенные случайным образом. Для расчета рассеянного поля введем функции Грина, соответствующие различным средам. Для источника внутри среды 1 функции Грина удовлетворяют следующим уравнениям распространения:

$$\nabla \times \nabla \times \boldsymbol{G}_{SV}^{01}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0) - \varepsilon_0(\omega) K_{vac}^2 \boldsymbol{G}_{SV}^{01}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0) = 0, \qquad (1)$$

$$\nabla \times \nabla \times \boldsymbol{G}_{SV}^{11}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0) - \varepsilon_V(\boldsymbol{r}, \omega) K_{vac}^2 \boldsymbol{G}_{SV}^{11}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \boldsymbol{I}, \quad (2)$$

$$\nabla \times \nabla \times \boldsymbol{G}_{\text{SV}}^{21}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0) - \varepsilon_2(\omega) K_{\text{vac}}^2 \boldsymbol{G}_{\text{SV}}^{21}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0) = 0.$$
(3)

Верхние индексы показывают положение приемника и источника в средах 0, 1 и 2 соответственно, а нижний индекс SV показывает, что в функции Грина учитываются взаимодействия между случайным объемом и шероховатыми интерфейсами; $K_{\text{vac}} = \omega/c, c$ – скорость света в вакууме. Внутри среды с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_1(\omega)$ мы рассматриваем множество из N рассеивателей, которые полагаем сферическими с радиусом r_s и диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_s(\omega)$. В дальнейшем будут рассмотрены два типа рассеивателей с разными r и ε , которые обозначим a и b. Формулы могут быть обобщены на N типов частиц. Диэлектрическая проницаемость ε_V для слоя определена как

$$\varepsilon_{\rm V}(\mathbf{r},\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \sum_{a=1}^{N_a} [\varepsilon_a(\omega) - \varepsilon_1(\omega)] \Theta_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) + \sum_{b=1}^{N_b} [\varepsilon_b(\omega) - \varepsilon_1(\omega)] \Theta_b(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b),$$
(4)

где $\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N$ – положения центров частиц; $N_a + N_b = N$ – полное число частиц; $\Theta_{a,b}$ описывает форму частиц. Заметим, что результаты могут быть обобщены на несферические частицы. Для $\Theta_{a,b}$ имеем

$$\Theta_{a,b}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 \operatorname{прu} \|\mathbf{r}\| < r_{a,b}, \\ 0 \operatorname{пpu} \|\mathbf{r}\| > r_{a,b}, \end{cases}$$
(5)

где $r_{a,b}$ – радиусы частиц. Примем следующие граничные условия для верхней шероховатой поверхности:

$$\hat{\boldsymbol{n}}_{\mathrm{s1}}\cdot\varepsilon_{1}(\omega)\,\boldsymbol{G}_{\mathrm{SV}}^{11}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{0}) = \hat{\boldsymbol{n}}_{\mathrm{s1}}\cdot\varepsilon_{0}(\omega)\,\boldsymbol{G}_{\mathrm{SV}}^{01}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{0}),\tag{6}$$

$$\hat{n}_{s1} \times G_{SV}^{11}(r, r_0) = \hat{n}_{s1} \times G_{SV}^{01}(r, r_0),$$
(7)

$$\hat{\boldsymbol{n}}_{\mathrm{s}1} \cdot [\nabla \times \boldsymbol{G}_{\mathrm{SV}}^{11}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0)] = \hat{\boldsymbol{n}}_{\mathrm{s}1} \cdot [\nabla \times \boldsymbol{G}_{\mathrm{SV}}^{01}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0)], \qquad (8)$$

$$\hat{\boldsymbol{n}}_{s1} \times [\nabla \times \boldsymbol{G}_{SV}^{11}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0)] = \hat{\boldsymbol{n}}_{s1} \times [\nabla \times \boldsymbol{G}_{SV}^{01}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0)],$$
(9)

и для нижней шероховатой поверхности:

$$\hat{\boldsymbol{n}}_{s2} \cdot \varepsilon_1(\omega) \, \boldsymbol{G}_{SV}^{11}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0) = \hat{\boldsymbol{n}}_{s2} \cdot \varepsilon_2(\omega) \, \boldsymbol{G}_{SV}^{21}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0), \tag{10}$$

$$\hat{n}_{s2} \times G_{SV}^{11}(r, r_0) = \hat{n}_{s2} \times G_{SV}^{21}(r, r_0), \qquad (11)$$

$$\hat{\boldsymbol{n}}_{s2} \cdot [\nabla \times \boldsymbol{G}_{SV}^{11}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0)] = \hat{\boldsymbol{n}}_{s2} \cdot [\nabla \times \boldsymbol{G}_{SV}^{21}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0)], \qquad (12)$$

$$\hat{\boldsymbol{n}}_{s2} \times [\nabla \times \boldsymbol{G}_{SV}^{11}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0)] = \hat{\boldsymbol{n}}_{s2} \times [\nabla \times \boldsymbol{G}_{SV}^{21}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0)], \tag{13}$$

где \hat{n}_{s1} и \hat{n}_{s2} – внешние нормали к двум шероховатым поверхностям. Решения уравнений распространения являются единственными, если наложить условие на излучение на бесконечности для сред 0 и 2. Чтобы разделить вклады от шероховатых поверхностей и случайной среды, введем двухэлементные функции Грина $G_{S}^{11}, G_{S}^{01}, G_{S}^{21},$ которые описывают рассеяние слоем с шероховатыми границами, но без учета случайной среды. Эти функции удовлетворяют уравнениям распространения и граничным условиям, похожим на таковые для функции Грина G_{SV} , где диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_{\rm V}(\omega)$, обусловленная случайной средой, заменяется в уравнениях эффективной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_{e}(\omega)$. С учетом этого предположения слой считается однородным. В следующих разделах мы определим эту $\varepsilon_e(\omega)$. Теперь найдем потенциальную функцию, которая описывает взаимодействие между волной и частицами, а затем приведем выражение для функций Грина. Система дифференциальных уравнений с граничными условиями и условием на излучение на бесконечности может быть преобразована в интегральные уравнения. Для источника в среде 1 система интегральных уравнений, связанных с потенциальной функцией, имеет вид

$$\boldsymbol{G}_{SV}^{01} = \boldsymbol{G}_{S}^{01} + \boldsymbol{G}_{S}^{01} \cdot \boldsymbol{V}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{SV}^{11},$$
(14)

$$\boldsymbol{G}_{SV}^{11} = \boldsymbol{G}_{S}^{11} + \boldsymbol{G}_{S}^{11} \cdot \boldsymbol{V}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{SV}^{11}, \tag{15}$$

$$G_{\rm SV}^{21} = G_{\rm S}^{21} + G_{\rm S}^{21} \cdot V^{11} \cdot G_{\rm SV}^{11}.$$
 (16)

Используется следующее операторное обозначение:

$$[\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}](\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0) = \int_{V_1} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1) \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0). \tag{17}$$

Потенциальная функция может быть записана как

$$V^{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) V^1(\mathbf{r}), \tag{18}$$

$$V^{1}(\mathbf{r},\omega) = K^{2}_{\text{vac}}[\varepsilon_{\text{V}}(\mathbf{r},\omega) - \varepsilon_{\text{e}}(\omega)]\mathbf{I}.$$
(19)

Прямое доказательство этих уравнений включает в себя интегральные теоремы, поэтому проще использовать единственность решения и апостериори убедиться в том, что интегральные уравнения удовлетворяют уравнениям распространения и граничным условиям.

Нашей целью является нахождение системы уравнений, с помощью которой можно рассчитать ЭДП. Решив уравнение (15) методом итераций, получаем следующий вывод:

$$\boldsymbol{G}_{\rm SV}^{11} = \boldsymbol{G}_{\rm S}^{11} + \boldsymbol{G}_{\rm S}^{11} \cdot \boldsymbol{V}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\rm S}^{11} + \boldsymbol{G}_{\rm S}^{11} \cdot \boldsymbol{V}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\rm S}^{11} \cdot \boldsymbol{V}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\rm S}^{11} + \dots$$
(20)

Уравнение Липпмана–Швингера (15) можно выразить через оператор перехода (Т-оператор) T_{SV}^{11} , определяемый как

$$\boldsymbol{G}_{SV}^{11} = \boldsymbol{G}_{S}^{11} + \boldsymbol{G}_{S}^{11} \cdot \boldsymbol{T}_{SV}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{S}^{11}.$$
(21)

Используя определение (21) и уравнение (15), выразим оператор T_{SV}^{SI} в терминах V^{11} :

$$T_{\rm SV}^{11} = V^{11} + V^{11} \cdot G_{\rm S}^{11} \cdot T_{\rm SV}^{11},$$
(22)

$$T_{\rm SV}^{11} = V^{11} + T_{\rm SV}^{11} \cdot G_{\rm S}^{11} \cdot V^{11}.$$
 (23)

Оператор перехода T_{SV}^{11} содержит все процессы рассеяния, имеющие место в случайной среде. Если этот оператор известен, то можно вычислить все электромагнитные поля в различных средах с помощью уравнений Липпмана–Швингера.

3. Приближение когерентного потенциала и теория эффективной среды

3.1. Определение средних по ансамблю

Для того чтобы рассчитать рассеяние когерентного поля в случайном слое, определим процедуру усреднения. Символы $\langle ... \rangle_S$ и $\langle ... \rangle_V$ обозначают среднее по ансамблю соответственно по поверхностному и объемному беспорядку. Примем, что шероховатые поверхности и свойства случайной среды являются статистически независимыми. Среднее по ансамблю по случайной среде определяется как

$$\langle f \rangle_{\rm V} = \int_{V_1} {\rm d}^3 \mathbf{r}_1 \dots {\rm d}^3 \mathbf{r}_N f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) p(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \qquad (24)$$

где $\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N$ – положения частиц; $p(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N)$ – функция плотности вероятности нахождения N частиц в положениях $\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N$ в слое. Будем использовать разложение этой функции плотности по условным вероятностям:

$$p(\mathbf{r}_{1},...,\mathbf{r}_{N}) = p(\mathbf{r}_{i})p(\mathbf{r}_{1},...,\hat{\mathbf{r}}_{i},...,\mathbf{r}_{N}|\mathbf{r}_{i}),$$
(25)

$$p(\mathbf{r}_{1},...,\mathbf{r}_{N}) = p(\mathbf{r}_{i})p(\mathbf{r}_{j}|\mathbf{r}_{i})p(\mathbf{r}_{1},...,\hat{\mathbf{r}}_{i},...,\hat{\mathbf{r}}_{j},...,\mathbf{r}_{N}|\mathbf{r}_{i},\mathbf{r}_{j}),$$
(26)

где знак ^ показывает, что эти позиции не учитываются. Функция $p(\mathbf{r}_i)$ определяет плотность вероятности нахождения частицы в точке \mathbf{r}_i . Величина $p(\mathbf{r}_i | \mathbf{r}_i)$ представляет собой условную вероятность обнаружить частицу в точке r_i при заданной частице в точке r_i . Если частицы равномерно распределены внутри случайной среды V1, то одночастичная функция плотности $p(\mathbf{r}_i) = 1/V_1$, где V_1 – объем среды V1. Функция парного распределения определяется как $g(||\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i||) = p(\mathbf{r}_j |\mathbf{r}_i)/p(\mathbf{r}_j)$. Она зависит только от расстояния между двумя частицами, если предположить, что распределения частиц статистически однородны и изотропны. Нормировочный коэффициент V₁ выбран так, что частицы находятся далеко друг от друга, их положения считаются некоррелированными. С помощью этих функций условной вероятности можно определить условные средние:

$$\langle f \rangle_{\mathbf{V}\mathbf{r}_{i}} = \int_{V_{1}} \mathbf{d}^{3}\mathbf{r}_{1} \dots \widehat{d^{3}\mathbf{r}_{i}} \dots \mathbf{d}^{3}\mathbf{r}_{N} f(\mathbf{r}_{1}, \dots, \mathbf{r}_{i}, \dots, \mathbf{r}_{N})$$
$$\times p(\mathbf{r}_{1}, \dots, \widehat{\mathbf{r}}_{i}, \dots, \mathbf{r}_{N} | \mathbf{r}_{i}), \qquad (27)$$
$$\langle f \rangle_{\mathbf{V}\mathbf{r}_{i}, \mathbf{r}_{j}} = \int_{V_{1}} \mathbf{d}^{3}\mathbf{r}_{1} \dots \widehat{d^{3}\mathbf{r}_{i}} \dots \widehat{d^{3}\mathbf{r}_{j}} \dots \mathbf{d}^{3}\mathbf{r}_{N}$$

$$\times f(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_i,...,\mathbf{r}_j,...,\mathbf{r}_N)p(\mathbf{r}_1,...,\hat{\mathbf{r}}_i,...,\hat{\mathbf{r}}_j,...,\mathbf{r}_N|\mathbf{r}_i,\mathbf{r}_j).$$
 (28)

3.2. Приближение когерентного потенциала

Определенный ранее Т-оператор полезен для расчета среднего поля по объему беспорядка $\langle G_{SV}^{11} \rangle_V$. Рассмотрим уравнение Дайсона, в котором потенциальный оператор заменяется массовым оператором, содержащим все неприводимые диаграммы в представлении Фейнмана. Массо-

вый оператор может быть выражен через $\langle T_{\rm SV}^{11} \rangle_{\rm V}$. Усредненное электрическое поле удовлетворяет уравнению Дайсона с массовым оператором, связанным с ЭДП усредненной структуры. Для нахождения $\varepsilon_{\rm e}(\omega)$ используем приближение когерентного потенциала (СРА), который определяется из

$$\langle \boldsymbol{G}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}} = \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11}. \tag{29}$$

С учетом (21) можно показать, что (29) эквивалентно равенству

$$\langle T_{\rm SV}^{11} \rangle_{\rm V} = 0, \tag{30}$$

где

$$T_{\rm SV}^{11} = V^{11} + V^{11} \cdot G_{\rm S}^{11} \cdot T_{\rm SV}^{11}.$$

Уравнения (30) и (22) дают конечную замкнутую систему уравнений, где неизвестной величиной является $\varepsilon_{\rm e}(\omega)$.

3.3. Выражение для оператора рассеяния $t_{r_i}^{11}$

Выразим (22) в терминах оператора рассеяния $t_{r_i}^{11}$ для частицы с диэлектрической проницаемостью ε_{si} , расположенной в точке r_i внутри бесконечной однородной среды. Этот оператор рассеяния определяется формулой

$$\boldsymbol{t}_{r_i}^{11} = [\boldsymbol{I} - \boldsymbol{v}_{r_i}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_1^{\infty}]^{-1} \cdot \boldsymbol{v}_{r_i}^{11}$$
(31)

или следующими выражениями:

$$\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{r}_{i}}^{11} = \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{r}_{i}}^{11} + \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{r}_{i}}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{1}^{\infty} \cdot \boldsymbol{t}_{\boldsymbol{r}_{i}}^{11}, \qquad (32)$$

$$\boldsymbol{t}_{r_i}^{11} = \boldsymbol{v}_{r_i}^{11} + \boldsymbol{v}_{r_i}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_1^{\infty} \cdot \boldsymbol{v}_{r_i}^{11} + \boldsymbol{v}_{r_i}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_1^{\infty} \cdot \boldsymbol{v}_{r_i}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_1^{\infty} \cdot \boldsymbol{v}_{r_i}^{11} + \dots, \qquad (33)$$

$$t_{r_{i}}^{11}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{0}) = \boldsymbol{v}_{r_{i}}^{1}(\boldsymbol{r})\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{0}) + \int d^{3}\boldsymbol{r}_{1}\,\boldsymbol{v}_{r_{i}}^{1}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{G}_{1}^{\infty}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{1})\cdot\boldsymbol{t}_{r_{i}}^{11}(\boldsymbol{r}_{1},\boldsymbol{r}_{0}).$$
(34)

Здесь G_1^{∞} – функция Грина в неограниченной однородной среде, характеризующейся эффективной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_{\rm e}$. Рассеивающий потенциал $v_{r_i}^{11}$ определяется как

$$\boldsymbol{v}_{r_i}^{11}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_0) = (2\pi)^2 \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \, \boldsymbol{v}_{r_i}^1(\boldsymbol{r}),\tag{35}$$

$$\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{r}_{i}}^{1}(\boldsymbol{r}) = K_{\text{vac}}^{2}(\varepsilon_{\text{s}i} - \varepsilon_{1})\,\boldsymbol{\Theta}_{\text{s}}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_{i})\,\boldsymbol{I}.$$
(36)

3.4. Введение оператора перехода $\tilde{T}_{\mathrm{SV}}^{11}$

Для того чтобы переписать уравнение (22) через операторы $t_{r_i}^{11}$, воспользуемся формулой

$$V^{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = (2\pi)^2 \,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \,K^2_{\text{vac}}(\varepsilon_{\text{V}}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{\text{e}}) \,\mathbf{I}$$
(37)

и определим следующие операторы:

$$\tilde{T}_{\rm SV}^{11} = T_{\rm SV}^{11} + Q_{\rm SV}^{11} \tag{38}$$

при

$$Q_{\rm SV}^{11} = W^{11} + W^{11} \cdot G_{\rm S}^{11} \cdot T_{\rm SV}^{11}, \tag{39}$$



Рис.2. Представления операторов $t_{r_i}^{11}$, t_{S,r_i}^{11} , C_{SV,r_i}^{11}

где

$$W^{11}(\mathbf{r},\mathbf{r}_0) = (2\pi)^2 \,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \,K^2_{\text{vac}}(\varepsilon_e - \varepsilon_1) \,\mathbf{I},\tag{40}$$

$$\tilde{V}^{11} = V^{11} + W^{11}. \tag{41}$$

С учетом (35)-(37) и (40), (41) получим

$$\tilde{\mathcal{V}}^{11} = \sum_{a=1}^{N_a} \boldsymbol{v}_{r_a}^{11} + \sum_{b=1}^{N_b} \boldsymbol{v}_{r_b}^{11}.$$
(42)

Из (22) и (41), используя определения (38) и (39), находим

$$\tilde{T}_{SV}^{11} = \tilde{V}^{11} + \tilde{V}^{11} \cdot G_S^{11} \cdot T_{SV}^{11}$$
(43)

$$= \tilde{V}^{11} + \tilde{V}^{11} \cdot G_{\rm S}^{11} \cdot (\tilde{T}_{\rm SV}^{11} - Q_{\rm SV}^{11}).$$
(44)

С учетом (42), (44) представим \tilde{T}_{SV}^{11} в виде

$$\tilde{T}_{SV}^{11} = \sum_{a=1}^{N_a} C_{SV,r_a}^{11} + \sum_{b=1}^{N_b} C_{SV,r_b}^{11},$$
(45)

где

$$\boldsymbol{C}_{\text{SV},\boldsymbol{r}_{a}}^{11} = \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{r}_{a}}^{11} + \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{r}_{a}}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\text{S}}^{11} \cdot \left(\sum_{a=1}^{N_{a}} \boldsymbol{C}_{\text{SV},\boldsymbol{r}_{a}}^{11} + \sum_{b=1}^{N_{b}} \boldsymbol{C}_{\text{SV},\boldsymbol{r}_{b}}^{11} - \boldsymbol{\mathcal{Q}}_{\text{SV}}^{11}\right), \quad (46)$$

и мы получим сходное выражение для C^{11}_{SV,r_b} .

3.5. Определение оператора рассеяния t_{S,r_i}^{11} для частицы в случайной среде

Если вычесть $v_{r_a}^{11} \cdot G_{S}^{11} \cdot C_{SV,r_a}^{11}$ из двух членов уравнения (46), то получим

$$(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{v}_{r_{a}}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11}) \cdot \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV}, r_{a}}^{11}$$

= $\boldsymbol{v}_{r_{a}}^{11} + \boldsymbol{v}_{r_{a}}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11} \cdot \left(\sum_{\substack{a'=1,\\a'\neq a}}^{N_{a}} \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV}, r_{a'}}^{11} + \sum_{b=1}^{N_{b}} \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV}, r_{b}}^{11} - \boldsymbol{Q}_{\mathrm{SV}}^{11}\right), \quad (47)$

что может быть записано как

$$C_{\text{SV},r_{a}}^{11} = t_{\text{S},r_{a}}^{11} + t_{\text{S},r_{a}}^{11} \cdot G_{\text{S}}^{11} \cdot \left(\sum_{\substack{a'=1, \\ a' \neq a}}^{N_{a}} C_{\text{SV},r_{a'}}^{11} + \sum_{b=1}^{N_{b}} C_{\text{SV},r_{b}}^{11} - Q_{\text{SV}}^{11} \right), (48)$$

где

$$\boldsymbol{t}_{\mathrm{S},r_a}^{11} = [\boldsymbol{I} - \boldsymbol{v}_{r_a}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11}]^{-1} \cdot \boldsymbol{v}_{r_a}^{11}$$
(49)

$$= v_{r_a}^{11} + v_{r_a}^{11} \cdot G_{\rm S}^{11} \cdot t_{{\rm S},r_a}^{11}.$$
(50)

Оператор t_{S,r_a}^{11} является оператором рассеяния для частицы, находящейся в точке r_a внутри слоя, и этот оператор учитывает взаимодействия поля с шероховатыми поверхностями. При записи G_S^{11} в виде

$$G_{\rm S}^{11} = G_1^{\infty} + \delta G_{\rm S}^{11},\tag{51}$$

где $\delta G_{\rm S}^{11}$ – функция Грина, описывающая взаимодействия волны с шероховатыми границами эффективной среды, выражение (50) можно представить как

$$[I - v_{r_i}^{11} \cdot G_1^{\infty}] \cdot t_{\mathrm{S}, r_i}^{11} = v_{r_i}^{11} + v_{r_i}^{11} \cdot \delta G_{\mathrm{S}}^{11} \cdot t_{\mathrm{S}, r_i}^{11}.$$
 (52)

Отсюда находим

$$\boldsymbol{t}_{\mathrm{S},r_{i}}^{11} = \boldsymbol{t}_{r_{i}}^{11} + \boldsymbol{t}_{r_{i}}^{11} \cdot \boldsymbol{\delta} \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11} \cdot \boldsymbol{t}_{\mathrm{S},r_{i}}^{11}, \tag{53}$$

где $t_{r_i}^{11}$ определен в (31).

3.6. Перенормировки потенциала частицы

Оператор $t_{r_i}^{11}$ описывает рассеяние частицы в бесконечной однородной среде (рис.2). Если мы хотим, чтобы оператор $t_{r_i}^{11}$ описывал рассеяние частицы с диэлектрической проницаемостью ε_s в среде с диэлектрической проницаемостью ε_e , удобно перенормировать диэлектрическую проницаемость частицы путем введения диэлектрической проницаемости $\bar{\varepsilon} = \varepsilon_{si} - (\varepsilon_1 - \varepsilon_e)$. Это дает

$$\boldsymbol{v}_{r_i}^1(\boldsymbol{r}) = K_{\text{vac}}^2(\varepsilon_{\text{s}i} - \varepsilon_1)\,\boldsymbol{\Theta}_{\text{s}}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\,\boldsymbol{I}$$
(54)

$$= K_{\rm vac}^2 (\bar{\varepsilon}_{\rm s} - \varepsilon_{\rm e}) \Theta_{\rm s} (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \boldsymbol{I}.$$
⁽⁵⁵⁾

Очевидно, что $t_{r_i}^{11}$ является оператором рассеяния для частицы с диэлектрической проницаемостью $\bar{\varepsilon}_s$ в среде с диэлектрической проницаемостью ε_e (см. рис.2). Иначе говоря, оператор t_{S,r_i}^{11} описывает рассеяние частицы, находящейся в точке r_i внутри слоя V1 с учетом взаимодействия с шероховатыми границами (рис.2). Итерация уравнения (53) дает

$$t_{\mathrm{S},r_i}^{11} = t_{r_i}^{11} + t_{r_i}^{11} \cdot \delta G_{\mathrm{S}}^{11} \cdot t_{r_i}^{11} + t_{r_i}^{11} \cdot \delta G_{\mathrm{S}}^{11} \cdot t_{r_i}^{11} \cdot \delta G_{\mathrm{S}}^{11} \cdot t_{r_i}^{11} + \dots.$$
(56)

Заметим, что первое слагаемое описывает процесс рассеяния одной частицы, а следующие слагаемые отображают взаимодействие между частицей и шероховатыми границами, поскольку оператор $\delta G_{\rm S}^{11}$ включает взаимодействия волн с шероховатыми границами эффективной среды (рис.2). Уравнение (48) отображает процесс многократного рассеяния внутри слоя, ограниченного шероховатыми поверхностями:

$$C_{SV,r_{i}}^{11} = t_{S,r_{i}}^{11} + \sum_{\substack{j=1, \ j \neq i}}^{N} t_{S,r_{i}}^{11} \cdot G_{S}^{11} \cdot t_{S,r_{j}}^{11}$$
$$+ \sum_{\substack{j=1, \ k=1, \ j \neq i}}^{N} \sum_{\substack{k=1, \ k \neq j}}^{N} t_{S,r_{i}}^{11} \cdot G_{S}^{11} \cdot t_{S,r_{j}}^{11} \cdot G_{S}^{11} \cdot t_{S,r_{k}}^{11} + \dots$$
(57)

Величина C_{SV,r_i}^{11} представляет собой поле, рассеянное частицами, локализованными в точке r_i , и учитывает взаимодействия с другими частицами и шероховатыми границами. В соответствии с введением эффективной среды $\varepsilon_e(\omega)$ в выражение G_S^{11} , заметим, что в уравнении (48) вклады многократного рассеяния демпфируются величиной Q_{SV}^{11} .

3.7. Определение эффективной диэлектрической проницаемости

Усредняя уравнение (38) в соответствии с определениями (39) и (40) и предположением СРА (30), имеем

$$(2\pi)^{2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{0}) \varepsilon_{e} K_{vac}^{2} \mathbf{I}$$

= $(2\pi)^{2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{0}) \varepsilon_{1} K_{vac}^{2} \mathbf{I} + \langle \tilde{T}_{SV}^{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{0}) \rangle_{V}.$ (58)

Учитывая определения условных средних, из (45) получаем

$$\langle \tilde{T}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}} = \sum_{a=1}^{N_a} \langle C_{\mathrm{SV},r_a}^{11} \rangle_{\mathrm{V}} + \sum_{b=1}^{N_b} \langle C_{\mathrm{SV},r_b}^{11} \rangle_{\mathrm{V}}$$
$$= \sum_{a=1}^{N_a} \int_{V_1} \mathrm{d}^3 r_a p(\mathbf{r}_a) \langle C_{\mathrm{SV},r_a}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_a} + \sum_{b=1}^{N_b} \int_{V_1} \mathrm{d}^3 r_b p(\mathbf{r}_b) \langle C_{\mathrm{SV},r_b}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_b}$$
$$= n_a \int_{V_1} \mathrm{d}^3 \mathbf{r}_a \langle C_{\mathrm{SV},r_a}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_a} + n_b \int_{V_1} \mathrm{d}^3 \mathbf{r}_b \langle C_{\mathrm{SV},r_b}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_b}, \tag{59}$$

где $n_i = N_i/V_1$ определяет плотность частиц типа *a* или *b*. В выражении (59) мы использовали правомерность замены индексов $\langle C_{SV,r_i}^{11} \rangle_{Vr_i} = \langle C_{SV,r_j}^{11} \rangle_{Vr_j}$ для $i \neq j$ и предположение случайной среды, которая статистически однородна. Усредняем уравнение (48), следуя определению условного среднего $\langle ... \rangle_{Vr_i}$, и, используя (28), получаем (i = a или *b*)

$$\langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},\boldsymbol{r}_{i}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}\,\boldsymbol{r}_{i}} = \langle \boldsymbol{t}_{\mathrm{S},\boldsymbol{r}_{i}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}\,\boldsymbol{r}_{i}}$$

$$+ \sum_{\substack{j=1,\\j\neq i}}^{N} \int_{V_{1}} \mathrm{d}^{3}\boldsymbol{r}_{j} p(\boldsymbol{r}_{j} | \boldsymbol{r}_{i}) \boldsymbol{t}_{\mathrm{S},\boldsymbol{r}_{i}}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11} \cdot \langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},\boldsymbol{r}_{j}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}\,\boldsymbol{r}_{i},\boldsymbol{r}_{j}}$$

$$- \langle \boldsymbol{t}_{\mathrm{S},\boldsymbol{r}_{i}}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11} \cdot \boldsymbol{Q}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}\,\boldsymbol{r}_{i}}. \tag{60}$$

Заметим, что t_{S,r_i}^{11} является оператором рассеяния для частицы, расположенной в точке r_i , и зависит от переменной r_i , но не зависит от переменной r_j для $j \neq i$. Отсюда следует, что процесс усреднения $\langle ... \rangle_{Vr_i}$ не влияет на выражение t_{S,r_i}^{11} . Более того, усреднение уравнения (39) приводит к тому, что

$$\langle \boldsymbol{Q}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_i} = \boldsymbol{W}^{11} + \boldsymbol{W}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11} \cdot \langle \boldsymbol{T}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_i}.$$
(61)

Это уравнение можно быть упрощено с использованием CPA, $\langle T_{\rm SV}^{11} \rangle_{\rm V} = 0$ и записано как

$$\int_{V_1} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}_i p(\boldsymbol{r}_i) \langle \boldsymbol{T}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V} \boldsymbol{r}_i} = 0.$$
(62)

Тождество (62) справедливо для любого объема V_1 , и мы имеем $\langle T_{SV}^{11} \rangle_{Vr_i} = 0$. Из уравнения (61) находим

$$\langle \boldsymbol{Q}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}\boldsymbol{r}_i} = \boldsymbol{W}^{11}. \tag{63}$$

Учитывая определения (38), (39) и приближение когерентного потенциала, можно записать следующие выражения:

$$\langle \boldsymbol{Q}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}} = \boldsymbol{W}^{11} + \boldsymbol{W}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11} \cdot \langle \boldsymbol{T}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}}$$
(64)

$$= W^{11},$$
 (65)

а также

$$\langle \tilde{T}_{SV}^{11} \rangle_{V} = \langle T_{SV}^{11} \rangle_{V} + \langle Q_{SV}^{11} \rangle_{V}$$
(66)

$$= \langle \boldsymbol{Q}_{\rm SV}^{11} \rangle_{\rm V}. \tag{67}$$

Принимая во внимание (63),(65),(67) и уравнение (59), для $i \in [1, N_i]$ получим

$$\langle \boldsymbol{Q}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}\boldsymbol{r}_{i}} = \langle \tilde{\boldsymbol{T}}_{\mathrm{SV}}^{11} \rangle_{\mathrm{V}} \tag{68}$$

$$= n_i \int_{V_1} \mathrm{d}^3 \mathbf{r}_j \langle \mathbf{C}_{\mathrm{SV}, \mathbf{r}_j}^{11} \rangle_{\mathrm{V} \mathbf{r}_j}.$$
 (69)

Уравнение (60) записывается как

$$\langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},r_i}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_i} = \boldsymbol{t}_{\mathrm{S},r_i}^{11} + n_i \boldsymbol{t}_{\mathrm{S},r_i}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{\mathrm{S}}^{11}$$
$$\times \int_{V_1} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}_j [g(\|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\|) \langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},r_j}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_i,r_j} - \langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},r_j}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_j}], \qquad (70)$$

где использовано приближение $n_i \simeq (N_i - 1)/V_1$, которое справедливо для большого числа частиц ($N \gg 1$).

Следуя той же процедуре, можно усреднить уравнение (48) с $\langle ... \rangle_{Vr_i, r_j}$ и получить уравнение для функции $\langle C_{SV, r_i}^{11} \rangle_{Vr_i, r_j}$, зависящей от функции $\langle C_{SV, r_k}^{11} \rangle_{Vr_i, r_j, r_k}$, и итерировать эту процедуру. Мы генерируем систему уравнений для неизвестных функций $\langle C_{SV, r_k}^{11} \rangle_{Vr_i, r_j}, \langle C_{SV, r_k}^{11} \rangle_{Vr_i, r_j}$, Эту бесконечную систему можно замкнуть с помощью квазикристаллического приближения QCA, которое требует выполнения условия

$$\langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},\boldsymbol{r}_j}^{11} \rangle_{\mathrm{V}\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j} = \langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},\boldsymbol{r}_j}^{11} \rangle_{\mathrm{V}\boldsymbol{r}_j}.$$
(71)

Это приближение выполнено строго, когда частицы имеют фиксированные положения, как в кристалле. Квазикристаллическое приближение состоит в пренебрежении флуктуацией электромагнитного поля, взаимодействующего с частицей, расположенной в точке r_i , из-за отклонения частицы, расположенной в точке r_i , от ее среднего положения. В приближении QCA с учетом уравнения (58) ЭДП $\varepsilon_e(\omega)$ удовлетворяет системе уравнений

$$(2\pi)^{2} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_{0}) \varepsilon_{e} K_{vac}^{2} \boldsymbol{I} = (2\pi)^{2} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_{0}) \varepsilon_{1} K_{vac}^{2} \boldsymbol{I}$$

$$+ n_{a} \int_{V_{1}} d^{3} \boldsymbol{r}_{a} \langle \boldsymbol{C}_{SV,r_{a}}^{11}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{0}) \rangle_{Vr_{a}} + n_{b} \int_{V_{1}} d^{3} \boldsymbol{r}_{b} \langle \boldsymbol{C}_{SV,r_{b}}^{11}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{0}) \rangle_{Vr_{b}}, \quad (72)$$

$$\langle \boldsymbol{C}_{SV,r_{i}}^{11} \rangle_{Vr_{i}} = \boldsymbol{t}_{S,r_{i}}^{11} + n_{i} \boldsymbol{t}_{S,r_{i}}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{S}^{11}$$

$$\times \int_{V_{1}} d^{3} \boldsymbol{r}_{j} [g(\|\boldsymbol{r}_{j} - \boldsymbol{r}_{i}\|) - 1] \langle \boldsymbol{C}_{SV,r_{j}}^{11} \rangle_{Vr_{j}}. \quad (73)$$

Функция $g(\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|)$ является функцией парного распределения и определяется как

$$g(\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|) = p(\mathbf{r}_j | \mathbf{r}_i) / p(\mathbf{r}_j).$$
(74)

Это один из основных результатов настоящей работы. Уравнения (72) и (73) можно упростить, если принять, что в выражении $G_{\rm S}^{11} = G_1^{\infty} + \delta G_{\rm S}^{11}$ вкладом $\delta G_{\rm S}^{11}$ рассеяния шероховатой поверхностью можно пренебречь при выполнении условия $K_{\rm e}^{"}H \gg 1$, где $K_{\rm e}^{"} = {\rm Im} K_{\rm e}$. Длину экстинкции определим как $l_{\rm e} = 1/(2K_{\rm e}^{"})$. Данное условие означает, что толщина слоя должна быть больше длины экстинкции. При выполнении этого условия заменим в выражении (73) функцию Грина $G_{\rm S}^{11}$ на $G_{\rm I}^{\infty}$ и оператор $t_{{\rm S},r_{\rm I}}^{11}$ на $t_{\rm I}^{r_{\rm I}}$. Тогда получим

$$\langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},r_i}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_i} = \boldsymbol{t}_{r_i}^{11} + n_i \boldsymbol{t}_{r_i}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_1^{\infty}$$
$$\times \int_{V_1} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}_j [g(\|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\|) - 1] \langle \boldsymbol{C}_{\mathrm{SV},r_j}^{11} \rangle_{\mathrm{V}r_j}. \tag{75}$$

В этой процедуре при расчете ЭДП мы пренебрегаем поверхностными эффектами. Для того чтобы выразить (75) в фурье-пространстве, используем определение

$$f(\mathbf{k}|\mathbf{k}_0) = \iint \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}}{(2\pi)^3} \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}_0}{(2\pi)^3} \exp\left(-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r} + \mathrm{i}\mathbf{k}_0\mathbf{r}_0\right) f(\mathbf{r},\mathbf{r}_0).$$
(76)

В фурье-пространстве трансляционная инвариантность оператора $t_{r_1}^{r_1}$ может быть выражена как

$$t_{r_i}^{11}(k|k_0) = \exp\left[-i(k-k_0)r_i\right] t_0^{11}(k|k_0),$$
(77)

где $t_{o}^{11}(k|k_{0}) = t_{r_{i}=0}^{11}(k|k_{0})$ – оператор рассеяния для частицы, находящейся в начале координат. Используя выражение (77) и уравнение (75), мы показываем, что $\langle C_{SV,r_{i}}^{11}(k|k_{0}) \rangle_{Vr_{i}}$ обладает аналогичным свойством:

$$\langle C_{SV,r_i}^{11}(k|k_0) \rangle_{Vr_i} = \exp[-i(k-k_0)r_i] C_{i,0}^{11}(k|k_0).$$
 (78)

Здесь $C_{i,o}^{11} = \langle C_{SV,r_i=0}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_0) \rangle_{Vr_i=0}$. Подставляя (77) и (78) в уравнения (72) и (75), получаем

$$\varepsilon_{\rm e} K_{\rm vac}^2 \boldsymbol{I} = \varepsilon_1 K_{\rm vac}^2 \boldsymbol{I} + \boldsymbol{C}_{\rm o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_0), \tag{79}$$

$$C_{o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_{0}) = n_{a} \boldsymbol{t}_{a,o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_{0}) + n_{b} \boldsymbol{t}_{b,o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_{0}) + \int \frac{\mathrm{d}^{3}\boldsymbol{k}_{1}}{(2\pi)^{3}} h(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_{1})[n_{a} \boldsymbol{t}_{a,o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_{1}) + n_{b} \boldsymbol{t}_{b,o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_{1})] \cdot \boldsymbol{G}_{1}^{\infty}(\boldsymbol{k}_{1}) \cdot \boldsymbol{C}_{o}^{11}(\boldsymbol{k}_{1}|\boldsymbol{k}_{0}),$$
(80)

где (*i* = *a* или *b*)

$$\boldsymbol{t}_{i,0}^{11} = \boldsymbol{v}_{i,0}^{11} + \boldsymbol{v}_{i,0}^{11} \cdot \boldsymbol{G}_{1}^{\infty} \cdot \boldsymbol{t}_{i,0}^{11},$$
(81)

$$\boldsymbol{v}_{i,o}^{11}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_0) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \boldsymbol{v}_{i,o}^{11}(\boldsymbol{r}), \tag{82}$$

$$\boldsymbol{v}_{i,o}^{11}(\boldsymbol{r}) = K_{\text{vac}}^2(\bar{\varepsilon}_{\text{s},i} - \varepsilon_{\text{e}})\Theta_{\text{s},i}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{I},$$
(83)

$$h(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) = \int d^3 \mathbf{r} \exp[-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)\mathbf{r}][g(\|\mathbf{r}\|) - 1],$$
(84)

$$\boldsymbol{G}_{1}^{\infty}(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{d}^{3}\boldsymbol{r} \exp\left[-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}\right] \boldsymbol{G}_{1}^{\infty}(\boldsymbol{r}). \tag{85}$$

4. Теория эффективной среды для рэлеевских рассеивателей

4.1. Рассеиватели Рэлея

В этом разделе в соответствии с уравнениями (79) и (80) рассчитана ЭДП в случае рассеивателей Рэлея. Рассмотрим сферы, радиусы которых r_d малы по сравнению с длиной волны падающего излучения ($r_d \ll \lambda$). Определим ε_d как диэлектрическую проницаемость рассеивателей Рэлея, которые ведут себя как диполи, поляризованные падающим полем. Чтобы охарактеризовать диполь, расположенный в начале координат в среде с диэлектрической проницаемостью ε_e , введем поляризуемость $a_{\rm pol}^1$, которая связана с дипольным моментом $p_{\rm dip}$ и электрическим полем $E^{\rm li}(r)$, взаимодействующим с диполем, соотношением

$$\boldsymbol{p}_{\rm dip} = \varepsilon_{\rm vac} \alpha_{\rm pol}^{\rm l} \boldsymbol{E}^{\rm li}(0). \tag{86}$$

Для расчета α_{pol}^1 рассмотрим поляризуемость α_B^1 , которая не учитывает среду, окружающую сферу:

$$\boldsymbol{p}_{\rm dip} = \varepsilon_{\rm vac} \alpha_{\rm B}^{\rm l} \boldsymbol{E}_{\rm local}^{\rm l}(0). \tag{87}$$

Здесь E_{local}^{l} – локальное поле, действующее на диполь. Справедливо следующее соотношение:

$$\boldsymbol{E}_{\text{local}}^{1}(\boldsymbol{r}=0) \approx \boldsymbol{\Lambda}_{\text{Loc}}^{-1} \boldsymbol{E}^{1i}(0), \tag{88}$$

где

$$\Lambda_{\rm Lor} = \frac{\varepsilon_{\rm d} + 2\varepsilon_{\rm l}}{3\varepsilon_{\rm l}} \tag{89}$$

– лоренцевский фактор деполяризации.

Поляризуемость рассеивателя Рэлея в среде определяется как

$$\alpha_{\rm pol}^{\rm l} = \frac{3\varepsilon_{\rm l}\alpha_{\rm B}^{\rm l}}{\varepsilon_{\rm d} + 2\varepsilon_{\rm l}}.\tag{90}$$

Выразим $\alpha_{\rm B}^{\rm l}$ как функцию диэлектрической проницаемости среды и рассеивателей. В случае частиц с радиусом, меньшим длины волны, поляризуемость $p_{\rm dip}$ может быть записана в терминах вектора поляризации P(r):

$$\boldsymbol{p}_{\rm dip} = \int d^3 \boldsymbol{r} \, \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}),\tag{91}$$

Для сферы радиусом r_d с диэлектрической проницаемостью ε_d в среде с диэлектрической проницаемостью ε_1 вектор поляризации

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{\text{vac}}(\varepsilon_{\text{r}} - \varepsilon_{1})\boldsymbol{E}_{\text{local}}^{\text{l}}(\boldsymbol{r}), \qquad (92)$$

где $\varepsilon_{\rm r}$ – относительная диэлектрическая проницаемость рассеивателя или среды, окружающей рассеиватель, определяемая как

$$\varepsilon_{\rm r} = \varepsilon_1 + (\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)\Theta_{\rm d}(\mathbf{r}). \tag{93}$$

Вектор поляризации P(r) задан в виде

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\text{vac}}(\varepsilon_{\text{d}} - \varepsilon_{1})\Theta_{\text{d}}(\mathbf{r})E_{\text{local}}^{1}(\mathbf{r}).$$
(94)

Тогда с учетом (93) для поляризуемости сферы имеем

$$\boldsymbol{p}_{\rm dip} = \varepsilon_{\rm vac} (\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1) \int d^3 \boldsymbol{r} \, \boldsymbol{\Theta}_{\rm d}(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{E}_{\rm local}^{\rm l}(\boldsymbol{r}). \tag{95}$$

Поскольку размер рассеивателя мал по сравнению с длиной волны, будем считать, что поле E_{local}^{l} , взаимодействующее со сферой, однородно, т.е. $E_{local}^{l}(r) \approx E_{local}^{l}(0)$, поэтому

$$\boldsymbol{p}_{\rm dip} = \varepsilon_{\rm vac}(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1) \, \boldsymbol{V}_{\rm d} \boldsymbol{E}_{\rm local}^{\rm l}(\boldsymbol{r} = 0), \tag{96}$$

где $V_{\rm d} = 4\pi r_{\rm d}^3/3$ – объем рассеивателя. Сравнив это выражение с определением (87) для $\alpha_{\rm B}^1$, получим

$$\alpha_{\rm B}^1 = (\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1) V_{\rm d}. \tag{97}$$

Таким образом, поляризуемость a_{pol}^1 рассеивателя Рэлея может быть определена как функция диэлектрической проницаемости:

$$\alpha_{\rm pol}^{1} = 3\varepsilon_{1} V_{\rm d} \frac{\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_{\rm l}}{\varepsilon_{\rm d} + 2\varepsilon_{\rm l}}.$$
(98)

Заметим, что используя приближение (96), вектор поляризации может быть записан как

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{\rm vac}(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1) V_{\rm d} \delta(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{E}_{\rm local}^1(\boldsymbol{r}). \tag{99}$$

Тогда приближение рассеивателя Рэлея математически выражается соотношением

$$\Theta_{\rm d}(\mathbf{r}) = V_{\rm d} \,\delta(\mathbf{r}). \tag{100}$$

4.2. Выражение оператора перехода для рассеивателей Рэлея

В предыдущих разделах мы определили оператор перехода (34)

$$t_{r_i}^{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = v_{r_i}^1(\mathbf{r})\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \int d^3 \mathbf{r}_1 v_{r_i}^1(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{G}_1^\infty(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{t}_{r_i}^{11}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_0)$$

и рассеивающий потенциал (36):

$$\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{r}_i}^1(\boldsymbol{r}) = K_{\text{vac}}^2(\varepsilon_{\text{s}i} - \varepsilon_1)\,\boldsymbol{\Theta}_{\text{s}}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\,\boldsymbol{I}.$$

Оператор $G_1^{\infty}(r, r_1)$ имеет сингулярность при $r = r_1$. Для вычисления интеграла в выражении (34) определим его следующим образом:

$$G_1^{\infty}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \text{P.V.} \{G_1^{\infty}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)\} - \frac{1}{K_1^2} \,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \,\frac{I}{3}, \tag{101}$$

где Р.V. – главное значение обобщенной функции; $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$ – сингулярность оператора G_1^{∞} ; $K_1^2 = \varepsilon_1 K_{\text{vac}}^2$. Эта сингулярность является математической формулировкой понятия исключенного объема, введенного Лоренцем для расчета фактора деполяризации (89). Подставляя (101) в (34) и используя выражения для рассеивателей Рэлея, получим

где

$$\boldsymbol{v}_{\text{Lor}r_{l}}^{1}(\boldsymbol{r}) = \left[1 + \frac{\boldsymbol{v}_{r_{l}}^{1}(\boldsymbol{r})}{3K_{1}^{2}}\right]^{-1} \boldsymbol{v}_{r_{l}}^{1}(\boldsymbol{r})$$
(103)

$$= K_{\text{vac}}^2 3\varepsilon_1 \frac{\varepsilon_d - \varepsilon_1}{\varepsilon_d + 2\varepsilon_1} \Theta_d(\mathbf{r}) \mathbf{I}$$
(104)

$$=K_{\rm vac}^2 \alpha_{\rm pol}^1 \frac{\Theta_{\rm d}(\boldsymbol{r})}{V_{\rm d}} \boldsymbol{I}$$
(105)

и α_{pol}^1 задано уравнением (98). Потенциал $v_{\text{Lorr}_i}^1(\mathbf{r})$ выражается как функция поляризуемости α_{pol}^1 каждого диполя, содержащегося в частицах, геометрическая форма которых задана фактором $\Theta_{\text{d}}(\mathbf{r})$. Таким образом, интегральное уравнение (102) описывает все процессы рассеяния для каждого диполя, определяющего поляризуемость α_{pol}^1 и содержащегося в частице. Используя приближение (100) для рассеивателей Рэлея, потенциал $v_{\text{Lorr}_i}^1(\mathbf{r})$ может быть записан в виде

$$\boldsymbol{v}_{\text{Lorr}}^{1}(\boldsymbol{r}) \approx K_{\text{vac}}^{2} \alpha_{\text{pol}}^{1} \delta(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{I}.$$
(106)

Распределение Дирака $\delta(\mathbf{r})$ позволяет аналитически рассчитать оператор перехода $t_{r_i}^{11}$, используя (102):

$$\boldsymbol{t}_{\boldsymbol{r}_{i}}^{11}(\boldsymbol{r}_{1},\boldsymbol{r}_{2}) = \delta(\boldsymbol{r}_{1}-\boldsymbol{r}_{2})\,\delta(\boldsymbol{r}_{1})\,\boldsymbol{t}^{1}(\omega),\tag{107}$$

$$t^{1}(\omega) = K_{\rm vac}^{2} \alpha_{\rm ray}^{1}, \tag{108}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_{ray}^{1} = \alpha_{pol}^{1} [\boldsymbol{I} - K_{vac}^{2} \alpha_{pol}^{1} P.V. \{ \boldsymbol{G}_{1}^{\infty} (\boldsymbol{r} = 0) \}]^{-1}.$$
(109)

Здесь мы учли тот факт, что функция Грина свободного пространства является трансляционно-инвариантной: $G_1^{\infty}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = G_1^{\infty}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$. Согласно расчету

P.V. {
$$G_1^{\infty}(\mathbf{r}=0)$$
} = $\lim_{\|\mathbf{r}\|\to 0} \left[\frac{1}{6\pi\|\mathbf{r}\|} + \frac{iK_1}{6\pi} + O(\|\mathbf{r}\|)\right] \mathbf{I}.$ (110)

Первый член расходится как δ^{-1} , что обусловлено использованием приближения точечного рассеивателя. Регуляризируем этот член, положив

$$P.V.\{G_1^{\infty}(r=0)\} = \left[\frac{\Lambda_T}{6\pi} + \frac{iK_1}{6\pi}\right]I,$$
(111)

где $A_{\rm T}$ – параметр, который мы должны зафиксировать с тем же порядком величины, что $1/r_{\rm d}$. Введение параметра $A_{\rm T}$ может оказаться очень полезным, т. к. рассеиватель может давать резонанс. Таким образом, добавление этого члена обеспечивает описание более общей модели точечных рассеивателей. В дальнейшем мы удержим только второй член в выражении (111), т. к. рассматриваем только рассеиватели Рэлея. Оператор перехода для точечного рассеивателя определяется заменой диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\rm d}$ рассеивателя на диэлектрическую проницаемость $\bar{\varepsilon}_{\rm d} = \varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_{\rm 1} + \varepsilon_{\rm e}$, а также заменой диэлектрической проницаемости среды $\varepsilon_{\rm 1}$ на $\varepsilon_{\rm e}$ (рис.2). Приближение когерентного потенциала связано с понятием эффективной среды в формулировке операторов перехода $t_{\rm (e)o}^{11}$.

$$t^{1}(\omega) = K^{2}_{\text{vac}} \alpha^{1}_{\text{ray}},$$

$$\alpha^{1}_{\text{ray}} = \alpha^{1}_{\text{pol}} [1 - K^{2}_{\text{vac}} \alpha^{1}_{\text{pol}} \frac{iK_{1}}{6\pi}]^{-1},$$
(112)

$$\alpha_{\rm pol}^1 = 3\varepsilon_{\rm e} V_{\rm d} \, \frac{\bar{\varepsilon}_{\rm d} - \varepsilon_{\rm e}}{\bar{\varepsilon}_{\rm d} + 2\varepsilon_{\rm e}}.$$
(113)

Согласно (107) оператор перехода $t_{r_i}^{11}$ имеет следующий вид в фурье-пространстве:

$$t_{r_i}^{11}(k|k_0) = \iint \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}}{(2\pi)^3} \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}_0}{(2\pi)^3} \exp\left(-\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r} + \mathrm{i}k_0\mathbf{r}_0\right) t_{r_i}^{11}(\mathbf{r},\mathbf{r}_0) \quad (114)$$

$$= t^{1}(\omega)\delta(k - k_{0})I.$$
(115)

4.3. Выражение для оператора C_0^{11}

С помощью результатов, полученных в предыдущих разделах, можно записать выражение для оператора C_0^{11} (80) в виде:

$$C_{o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_{0}) = n_{a}t_{a}^{1}(\omega) + n_{b}t_{b}^{1}(\omega)$$

+ $\int \frac{\mathrm{d}^{3}\boldsymbol{k}_{1}}{(2\pi)^{3}}h(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_{1})[n_{a}t_{a}^{1}(\omega) + n_{b}t_{b}^{1}(\omega)]$
 $\cdot \boldsymbol{G}_{1}^{\infty}(\boldsymbol{k}_{1})\cdot\boldsymbol{C}_{o}^{11}(\boldsymbol{k}_{1}|\boldsymbol{k}_{0}).$ (116)

Как следствие, имеем

$$\boldsymbol{C}_{o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_{0}) = \left[\boldsymbol{I} - \int \frac{\mathrm{d}^{3}\boldsymbol{k}_{1}}{(2\pi)^{3}}h(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_{1})[n_{a}\boldsymbol{t}_{a}^{1}(\omega) + n_{b}\boldsymbol{t}_{b}^{1}(\omega)]\cdot\boldsymbol{G}_{1}^{\infty}(\boldsymbol{k}_{1})\right]$$
$$\cdot [n_{a}\boldsymbol{t}_{a}^{1}(\omega) + n_{b}\boldsymbol{t}_{b}^{1}(\omega)]. \tag{117}$$

Используя классическое соотношение между сверткой двух функций и произведением их фурье-преобразований, запишем

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} h(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0) \, \mathbf{G}_1^{\infty}(\mathbf{k}_1) = \int \mathrm{d}^3 \mathbf{r} \exp(-\mathrm{i}\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \, \mathbf{G}_1^{\infty}(\mathbf{r}).$$
(118)

Подставляя разложение $G_1^{\infty}(k_1)$ в уравнение (118) и учитывая тот факт, что область существования корреляционной функции для рассеивателей Рэлея очень мала, а именно:

$$h(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l) \approx \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l) \int d^3 \mathbf{r} h(\mathbf{r}), \qquad (119)$$

получим

$$\int \frac{d^3 \mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} h(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0) \mathbf{G}_1^{\infty}(\mathbf{k}_1)$$

= $-\frac{h(0)}{3K_e^2}$ + P.V. { $\mathbf{G}_1^{\infty}(\mathbf{r} = 0)$ } $\int d^3 \mathbf{r} h(\mathbf{r})$. (120)

Используя приближение (111) с $\Lambda_{\rm T}$ = 0 в (120), в соответствии с (117) имеем

$$C_{o}^{11}(\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}_{0}) = [n_{a}\boldsymbol{t}_{a}^{1}(\omega) + n_{b}\boldsymbol{t}_{b}^{1}(\omega)]\boldsymbol{I}$$

$$\times \left\{1 - \left(-\frac{h(0)}{3K_{e}^{2}}[n_{a}\boldsymbol{t}_{a}^{1}(\omega) + n_{b}\boldsymbol{t}_{b}^{1}(\omega)]\right\}$$

$$+ \frac{iK_{e}}{6\pi} \left[\int d^{3}\boldsymbol{r}h_{a}(\boldsymbol{r})n_{a}\boldsymbol{t}_{a}^{1}(\omega) + \int d^{3}\boldsymbol{r}h_{b}(\boldsymbol{r})n_{b}\boldsymbol{t}_{b}^{1}(\omega)\right]\right\}^{-1}.$$
 (121)

Парное распределение Перкуса–Йевика позволяет рассчитать интеграл функции h(r):

$$n_i \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \, h_i(\boldsymbol{r}) = -1 + w_i, \tag{122}$$

где

$$w_i = \frac{(1 - f_{\rm vol}^i)^4}{(1 + 2f_{\rm vol}^i)^2}$$
(123)

 $(n_i -$ число частиц типа *i*, $V_i -$ их объем и $f_{vol}^i = n_i V_i -$ их объемная доля).

Используя определение h(r) = g(r) - 1, можно заключить, что h(0) = -1, поскольку g(r) – корреляционная функция двух рассеивателей. Действительно, g(0) = 0, т. к. два разных рассеивателя не могут быть локализованы в одной и той же точке. С учетом предыдущих результатов выражение для $t_i^1(\omega)$ имеет следующий вид (i = a или b для двух типов рассеивателей):

$$t_{i}^{1}(\omega) = 3K_{\text{vac}}^{2}\varepsilon_{e}V_{i}(\varepsilon_{i}-\varepsilon_{1})$$

$$\times \left\{ (\varepsilon_{i}-\varepsilon_{1}) \left[1 - \frac{i3K_{e}K_{\text{vac}}^{2}}{6\pi}\varepsilon_{e}V_{i} \right] + 3\varepsilon_{e} \right\}^{-1}, \quad (124)$$

где $K_{\rm e}^2 = \varepsilon_{\rm e} K_{\rm vac}^2$.

4.4. Уравнение для эффективной диэлектрической проницаемости

В соответствии с уравнениями (121) и (122) уравнение (79) для ЭДП может быть записано как

$$\varepsilon_{e} = \varepsilon_{1} + \frac{1}{K_{vac}^{2}} [n_{a} t_{a}^{1}(\omega) + n_{b} t_{b}^{1}(\omega)]$$

$$\times \left\{ 1 - \left(\frac{1}{3K_{e}^{2}} [n_{a} t_{a}^{1}(\omega) + n_{b} t_{b}^{1}(\omega)] + \frac{iK_{e}}{6\pi} [(w_{a} - 1)t_{a}^{1}(\omega) + (w_{b} - 1)t_{b}^{1}(\omega)] \right) \right\}^{-1}.$$
(125)

Если положить a = b и $n_a + n_b = n$, получим уравнение для идентичных частиц. Уравнение (125) является нелинейным уравнением для эффективной диэлектрической проницаемости ε_e по отношению к диэлектрическим проницаемостям слоя (ε_1) и рассеивателей (ε_a и ε_b). Это уравнение может быть обобщено на случай N типов рассеивателей Рэлея.

5. Приложения и численные оценки эффективной диэлектрической проницаемости для случайной среды с наночастицами

Рассмотрим примеры сред, состоящих из статистических ансамблей различных рассеивающих фракций, и искусственные материальные структуры, разработанные на основе диэлектрических или металлических наночастиц. Пусть длина волны лазерного излучения $\lambda = 800$ нм. Проверим алгоритм решения нелинейного уравнения (125) для ε_e , который дает новую формулировку ЭДП для двух типов частиц. Записав уравнение (125) для случая одного типа рассеивателей, получим выражение, которое представляет собой обобщенную формулу Максвелла–Гарнетта:

$$\varepsilon_{\rm e} = \varepsilon_1 + \frac{3(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_{\rm l})\varepsilon_{\rm e}f_{\rm vol}}{(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_{\rm l})(1 - f_{\rm vol} - \frac{2}{3}i(K_{\rm vac}r_{\rm d})^3\varepsilon_{\rm e}^{3/2}w) + 3\varepsilon_{\rm e}} .$$
(126)

Здесь *w* – функция парного распределения Перкуса– Йевика. Если разложить знаменатель (126) до первого порядка, то получим

$$\varepsilon_{\rm e} = \varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_1(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)(1 - f_{\rm vol}) + 3\varepsilon_1\varepsilon_e + 3(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)\varepsilon_e f_{\rm vol}}{(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)(1 - f_{\rm vol}) + 3\varepsilon_e} + 2i\frac{(K_{\rm vac}r_{\rm d})^3(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)^2wf_{\rm vol}\varepsilon_e^{5/2}}{[(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)(1 - f_{\rm vol}) + 3\varepsilon_e]^2}.$$
(127)

~

Уравнение (127) представляет собой обычный низкочастотный предел приближения QC-CPA, полученный в работах [13, 16]. Отметим, что в статическом случае мнимая часть в уравнении (127) равна нулю, и если мы в правой части уравнения заменим эффективную диэлектрическую проницаемость ε_e на ε_1 , то восстановим классическую формулу Максвелла–Гарнетта. Рассмотрим теперь приближенное решение (127) для ε_1 и ε_d , имеющих действительные значения. Если предположить, что реальная часть ε_e больше ее мнимой части, то получим приближенное решение для действительной части (127):

$$\operatorname{Re}\varepsilon_{\rm e} = \frac{1}{6} \left[-\left\{ (\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_{\rm 1})(1 - f_{\rm vol}) - 3\varepsilon_{\rm 1} - 3(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_{\rm 1})f_{\rm vol} \right\} + \Delta^{1/2} \right], (128)$$

где

$$\Delta = [(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)(1 - f_{\rm vol}) - 3\varepsilon_1 + 3(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)f_{\rm vol}]^2 + 12\varepsilon_1(\varepsilon_{\rm d} - \varepsilon_1)(1 - f_{\rm vol}).$$

Подставив решение для Re_{e} в третий член уравнения (127), находим приближенное значение для $\text{Im} \varepsilon_{e}$:

$$\operatorname{Im}\varepsilon_{e} = 2 \frac{(K_{\operatorname{vac}}r_{d})^{3}(\varepsilon_{d} - \varepsilon_{l})^{2} w f_{\operatorname{vol}} \operatorname{Re}\varepsilon_{e}^{5/2}}{\left[(\varepsilon_{d} - \varepsilon_{l})(1 - f_{\operatorname{vol}}) + 3\operatorname{Re}\varepsilon_{e}\right]^{2}}.$$
(129)

Эти формулы выведены с тем, чтобы дать явное приближенное выражение для ЭДП в случае вещественных диэлектрических проницаемостей слоя и рассеивателей. Общий числовой процесс решения (125) состоит в следующем:

– выражаем уравнение (125), которое является функцией ε_e , в комплексной форме (ε_1 и ε_d – действительные или комплексные числа);

– полагаем, что действительная часть ε_e больше, чем ее мнимая часть, и находим численное решение для $\text{Re}\varepsilon_e$;

– численно решаем уравнение для $\text{Im}\varepsilon_e$ с использованием полученного значения $\text{Re}\varepsilon_e$;

 оба решения являются начальными значениями для итерационной процедуры вычисления (125), и мы фиксируем критерии численной сходимости для получения решения нелинейного уравнения.

С помощью такой процедуры можно получить численное решение для ЭДП в случае приближения QC-CPA.

В табл.1 приведены некоторые численные результаты решения нелинейного уравнения (125). Сравним результаты для одного и двух типов рассеивателей при различной диэлектрической проницаемости слоя. Отметим, что увеличение объемной доли f_{vol1} в 100 раз приводит к увеличению мнимой части диэлектрической проницаемости (строка 3) на три порядка, величина действительной части также зависит от многократного рассеяния. Добавление мнимой части в диэлектрическую проницаемость ε_{d1} увеличивает Im ε_e на три порядка. Наличие нанорассеивателей приводит к появлению в диэлектрической проницаемости мнимой части, которая может быть значительной (особенно для металлических наночастиц, строка 5). Наличие в слое двух типов рассеивателей с различными диэлектрическими проницаемостями или радиусами отра-

N₂	r _{d1}	$f_{\rm vol1}$	ε _{d1}	r _{d2}	f _{vol2}	ε_{d2}	ε	<i>e</i>
1	0.035λ	1×10 ⁻⁴	2.0	_	_	_	1.2	$1.2 + i 1.1 \times 10^{-8}$
2	0.070λ	1×10^{-4}	2.0	_	_	_	1.2	$1.2 \pm i 8.87 \times 10^{-7}$
3	0.035λ	1×10^{-2}	2.0	_	_	_	1.2	$1.207 + i 1.03 \times 10^{-5}$
4	0.035λ	1×10^{-4}	5.0	_	_	_	1.2	$1.2 \pm i 8.84 \times 10^{-7}$
5	0.035λ	1×10^{-4}	i∞	_	_	_	2.0	$2.0 \pm i 1.2 \times 10^{-5}$
6	0.035λ	1×10^{-4}	5.0 + i0.5	_	_	_	2.0	$2.0 \pm i 2.35 \times 10^{-5}$
7	0.035λ	1×10^{-4}	5.0	_	_	_	2.0 + i0.5	2.0+i0.49
8	0.035λ	5×10^{-5}	2.0	0.070λ	5×10^{-5}	2.0	1.2	$1.2 \pm i4.98 \times 10^{-7}$
9	0.035λ	5×10^{-5}	2.0	0.035λ	5×10^{-5}	5.0	1.2	$1.2 \pm i4.97 \times 10^{-7}$
10	0.035λ	5×10^{-5}	2.0	0.035λ	5×10^{-5}	$5.0 \pm i0.5$	2.0	$2.0 \pm i 1.17 \times 10^{-5}$
11	0.035λ	9×10^{-3}	2.0	0.035λ	1×10^{-3}	5.0	1.2	$1.2 \pm i 1.79 \times 10^{-5}$
12	0.035λ	5×10^{-5}	2.0	0.035λ	5×10^{-5}	5.0+i0.5	$2.0 + i5 \times 10^{-5}$	$2.0 \pm i6.17 \times 10^{-5}$

Табл.1. Эффективная диэлектрическая проницаемость ε_{e} при наличии рассеивателей типа 1 (r_{d1} , f_{vol1} , ε_{d1}) и типа 2 (r_{d2} , f_{vol2} , ε_{d2}) и диэлектрическая проницаемость слоя ε_{1} .

жено в строках 8–12. Проанализируем влияние наночастиц на ЭДП. Одним из принципиальных эффектов, связанных с наличием диэлектрических наночастиц с низкой концентрацией, является введение мнимой части в диэлектрическую проницаемость. Результаты анализа показывают, что следует учитывать рассеяние наночастицами при их низкой концентрации в среде, особенно в тех случаях, когда создаются оптические компоненты, которые могут передавать или рассеивать оптическое поле с заданными угловыми, пространственными или спектральными свойствами.

6. Заключение

Теория эффективной диэлектрической проницаемости распространена на случайные среды с разными типами частиц, ограниченные шероховатыми поверхностями. С использованием операторов перехода, определенных в настоящей работе, может быть получено выражение для рассеянного когерентного поля. Получена новая формула для эффективной диэлектрической постоянной, которая характеризует когерентную часть электромагнитной волны, распространяющейся в случайной среде. Отправной точкой нашей теории было приближение квазикристаллического когерентного потенциала, который учитывает корреляцию между частицами. Представленная формулировка содержит поправки к эффективной диэлектрической проницаемости, обусловленные случайно-шероховатыми поверхностями. Эти поправки выражены с помощью функций Грина рассеяния шероховатой поверхностью. Точность определения эффективной диэлектрической проницаемости значительно улучшается при подходе CPA-QCA, поскольку приближенная формула может быть выведена из теории многократного рассеяния, которая является обобщением обычной формулы Максвелла-Гарнетта. Численные вычисления эффективной диэлектрической проницаемости в соответствии с приближением QC-CPA могут быть выполнены для тонкого слоя. Можно также найти приближенное выражение для эффективной диэлектрической проницаемости, которое содержит формулу Максвелла-Гарнетта и приближение Келлера [23]. Формула Келлера может быть получена при рассмотрении подхода QC-CPA в скалярном случае [13, 16]. Уравнения, представленные в настоящей работе, идентичны ранее полученным уравнениям при условии, что двухэлементная функция Грина заменена скалярной функцией Грина.

- 1. Chandrasekhar S. Radiative Transfer (New York: Dover, 1960).
- 2. Van de Hulst H.C. *Light Scattering by Small Particles* (New York: Wiley, 1957).
- 3. Van de Hulst H.C. *Multiple Light Scattering* (New York: Academic, 1980, vol. 1, 2).
- Bohren C., Huffman D. Absorption and Scattering of Light by Small Particles (New York: Wiley-Interscience, 1983).
- Ishimaru A. Wave Propagation and Scattering in Random Media (New York: Acad. Press, 1978, vol.2).
- 6. Frish U., in *Probabilistic Methods in Applied Mathematics* (New York: Acad. Press, 1968, vol. 1).
- 7. Lagendijk A., van Tiggelen B.A. Phys. Rep., 270, 143 (1996).
- 8. Apresyan L.A., Kravtsov Y.A., *Radiation Transfer: Statistical and Wave Aspects* (Amsterdam: Gordon and Breach, 1996).
- 9. Rytov S.M., Kravtsov Y.A., Tatarskii V.I. Principle of Statistical Radiophysics (Berlin: Springer-Verlag, 1989, vol. 4).
- Barabanenkov Y.N., Kravtsov Y.A., Ozrin V.D., Saichev A.I., Prog. Opt., XXIX, 65 (1991).
- Sheng P. Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena (San Diego: Acad. Press, 1995).
- Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media, Ed. by P.Sheng (Singapore: World Scientific, 1990).
- Tsang L., Kong J.A., Shin R. *Theory of Microwave Remote Sensing* (New York: Wiley-Interscience, 1985).
- Tsang L., Kong J.A., Ding K.H. Scattering of Electromagnetic Waves: Theories and Applications (New York: Wiley-Interscience, 2000, vol. 1).
- Tsang L., Kong J.A., Ding K.H., Ao C.O. Scattering of Electromagnetic Waves: Numerical Simulations (New York: Wiley-Interscience, 2001, vol. 2).
- 16. Tsang L., Kong J.A. *Scattering of Electromagnetic Waves: Advanced Topics* (New York: Wiley-Interscience, 2001, vol. 3).
- 17. Furutsu K. Phys. Rev. A, 43, 2741 (1991).
- Furutsu K. Random Media and Boundaries Unified Theory, Two-Scale Method, and Applications (Berlin: Springer-Verlag, 1983).
- 19. Mudaliar S. Waves in Random Media, 9, 521 (1999).
- 20. Mudaliar S., Waves in Random Media, 11, 45 (2001).
- 21. Mudaliar S. Waves in Random Media, 4, 167 (1994).
- 22. Berginc G., in *Light Scattering and Nanoscale Surface Roughness*, Ed. by A.A.Maradudin (New York: Springer, 2007).
- 23. Shvartsburg A.B., Maradudin A.A. *Waves in Gradient Metamaterials* (Singapore: World Scientific, 2013).