

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Фізичний факультет
Кафедра астрономії та космічної інформатики

«Допущено до захисту»

Зав. кафедри астрономії
та космічної інформатики

проф. Шкуратов Ю. Г. _____
14 червня _____ 2024 р.



Оцінка « відмінно »

Голова ЕК

проф. Тишковець В.П.

21 червня _____ 2024 р.



Канонік Аліка Олександрівна

Поляризація світла, розсіяного частинками несиметричної форми

Кваліфікаційна робота на здобуття
освітньо-кваліфікаційного рівня
«Бакалавр» за напрямом підготовки
104 — «фізика та астрономія»
освітньо-професійна програма
«астрономія»

Науковий керівник — викладач
кафедри астрономії

Сурков Є.С

АНОТАЦІЯ

Канонік А.О. Поляризація світла, розсіяного частинками несиметричної форми. — Рукопис.

Дипломна робота на здобуття освітньо-кваліфікаційного рівня «Бакалавр» за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія». - Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2024. - 30 с. - Табл. 1. Іл. 14.

В дипломній роботі було проведено моделювання розсіювання світла частинками розміром у одну довжину хвилі у формі еліпсоїда, еліпсоїда Максвелла та листа Мебіуса за допомогою дискрет-дипольного наближення. Показано, що при хіральной формі частинки-розсіювача світла у матриці Мюллера, усередненій по орієнтаціях частинки, проявляються усі ненульові елементи при довільному куті розсіювання. Проаналізовано залежність фазової поведінки елементів M_{12} та M_{14} від коефіцієнта поглинання k . У моделюванні також виявлено асиметрію коефіцієнтів $M_{14} \neq M_{41}$ та $M_{23} \neq M_{32}$, що потребує подальшого дослідження.

Ключові слова: хіральність, матриця Мюллера, поляризація світла, CIDS.

ABSTRACT

Kanonik A.O. Polarization of light scattered by particles of asymmetric shape. — Manuscript.

Diploma thesis for obtaining the educational qualification level "Bachelor" in specialty 104 - "physics and astronomy". - V. N. Karazin Kharkiv National University, 2024. - 30 pages, 1 tables, 14 illustrations.

In the diploma thesis, light scattering modeling by particles of one wavelength in size in the form of an ellipsoid, Maxwell's ellipsoid, and a Möbius strip was conducted using the discrete dipole approximation. It was shown that in the case of a chiral shape of the light-scattering particle, all non-zero elements appear in the Mueller matrix averaged over the orientations of the particle at any scattering angle. The phase behavior dependence of the M_{12} and M_{14} elements on the absorption coefficient k was analyzed. The modeling also revealed an asymmetry in the coefficients $M_{14} \neq M_{41}$ and $M_{23} \neq M_{32}$, which requires further investigation.

Key words: chirality, Mueller matrix, light polarization, CIDS.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА СКОРОЧЕНЬ.....	5
ВСТУП.....	6
1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....	7
1.1 Характеристики розсіювання електромагнітних хвиль	7
1.2. Методи обчислення розсіювання	11
1.3 Розсіювання світла хіральною частинками	14
2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ.....	15
2.1 Підготовка геометрії розсіювача для ДДН	15
2.2. Пакет ADDA	18
3 РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕННЯ МАТРИЦЬ МЮЛЛЕРА, УСЕРЕДНЕНИХ ЗА ОРІЄНТАЦІЯМИ	20
ВИСНОВКИ	28
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	29

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА СКОРОЧЕНЬ

CIDS — Circular Intensity Differential Scattering (колова інтенсивність диференційного розсіювання)

DDA — Discrete Dipole Approximation (дискрет-дипольне наближення)

ADDA — Amsterdam Discrete Dipole Approximation (Амстердамське дискрет-дипольне наближення)

GPU — Graphic Processor Unit (графічний процесор)

CPU — Central Processor Unit (центральний процесор)

ВСТУП

Дипломна робота присвячена поляризації світла при розсіювання на несиметричних та хіральных структурах. Аналіз розсіювання світла та його поляризації в частинках дасть глибше розуміння про склад атмосфер планет, комет та інших космічних об'єктів. Враховуючи, що несиметричними є переважно органічні структури, дана задача дасть змогу дослідження потенціалу використання експериментів та поляризаційних спостережень для їхньої ідентифікації.

На даний момент існує невелика кількість досліджень, що присвячена поляризації світла у хіральных структурах і переважно такі дослідження стосуються біомедичних застосувань та досліджень біоаерозолей, оскільки хіральні структури притаманні саме біологічним частинкам, клітинам, органелам, молекулам, тощо.

Об'єкт дослідження: розсіювачі хіральної форми.

Предмет дослідження: властивості розсіювання світла частинками з порушеною симетрією.

Методи: дискрет-дипольне наближення, комп'ютерне моделювання та аналіз даних.

Для досягнення результатів були поставлені наступні **задачі:**

1. Опанування пакету ADDA для обчислення матриць Мюллера;
2. Розробити комп'ютерні скрипти для підготовки геометрії розсіювача;
3. Розробити комп'ютерні скрипти для графічного відтворення результатів;
4. Проаналізувати базові характеристики фазових залежностей коефіцієнтів матриці Мюллера.

1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Характеристики розсіювання електромагнітних хвиль

Розсіювання електромагнітної хвилі — це фізичні явища, які супроводжують взаємодію електромагнітної хвилі при їх взаємодії із речовиною, яке характеризується зміною проваторового розподілу, частоти, поляризації електромагнітних хвиль, тощо. Хоча у більш вузькому сенсі, розсіювання світла – перерозподіл кутового розподілу потоку світла.

Існує декілька видів розсіювання світла: еластичні (тобто такі, в яких втрати енергії незначні, або не відбувається зміни частоти), такі як Релеївське розсіювання та розсіювання Мі, а також нееластичні (в яких втрати енергії значні) — серед яких розсіювання Бріллюена, Раманівське розсіювання, нееластичне рентгенівське розсіювання, а також Комптонівське розсіювання [1].

Експериментально, окрім кутового розподілу інтенсивності, при дослідженнях розсіювання світла важливу роль відіграє дослідження кутової залежності та величини його поляризації. Для повної характеристики стану поляризації виділяють: лінійну поляризацію, поляризацію під 45° та колову поляризацію. Найбільша кількість досліджень на цю тему стосується саме лінійної поляризації, оскільки її найлегше зафіксувати та вона зустрічається в частинках незалежно від їхньої морфології. Довгий час колова поляризація була доволі складною для реєстрації, проте наразі існують датчики, здатні її зафіксувати.

Колова поляризація особлива тим, що не зважаючи на труднощі в її реєстрації, вона є чутливим показником, який сильно залежить від морфологічних характеристик об'єкта.

У даній роботі ми використовуватимемо два варіанти опису поляризації електромагнітних хвиль: формалізм Джонса та формалізм Мюллера.

Формалізм Джонса безпосередньо описує поляризацію електромагнітної хвилі та зберігає повну інформацію про її амплітуду та фазу. Проте він має застосування виключно у випадку повністю поляризованої хвилі. Як правило, формалізм Джонса застосовується до монохроматичних (квазімонохроматичних) хвиль.

Вектор Джонса описує комплексні компоненти поляризованого поля:

$$E = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{0x}e^{i\sigma_x} \\ E_{0y}e^{i\sigma_y} \end{pmatrix},$$

де E — вектор Джонса,

E_x, E_y — комплексні амплітуди.

Матриця Джонса [2] — це матриця (2 x 2) переходу між початковим станом поляризації поля та кінцевим:

$$E_1 = JE_0, \quad (1.1)$$

де E_1 — кінцевий стан поляризації поля,

E_0 — початковий стан поляризації поля,

J — матриця Джонса.

Формалізм Мюллера здатен описувати поляризоване, частково поляризоване, а також неполяризоване світло. Окрім цього, він зберігає інформацію про інтенсивність електромагнітної хвилі, але втрачає інформацію про фазу.

Стан поляризації світла також можна описати вектором Стокса:

$$S = \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix},$$

де I — інтенсивність електромагнітної хвилі,

Q — лінійна поляризація,

U — лінійна поляризація під 45° ,

V — колова поляризація.

Кожен вектор Стокса має задовольняти закону збереження, який можна сформулювати наступною нерівністю:

$$I^2 \geq Q^2 + U^2 + V^2;$$

Матриця Мюллера поєднує вхідний та вихідний вектори Стокса таким чином:

$$S_1 = MS_0,$$

де M — матриця Мюллера,

S_1 — вихідний вектор Стокса,

S_0 — вхідний вектор Стокса [4].

Щоб привести матрицю Джонса у матрицю Мюллера, потрібно спочатку виразити інтенсивності світлових променів. Для цього ми обчислюємо добуток Кронекера для рівняння (1.1) та його комплексно спряжених множників:

$$E_1 \otimes E_1^* = JE_0 \otimes J^*E_0^* = (J \otimes J^*)(E_0 \otimes E_0^*)$$

Добуток $E \otimes E^*$ є вектором 4×1 , також відомим як вектор когерентності C . Таким чином, маємо:

$$C_1 = (J \otimes J^*)C_0 \tag{1.2}$$

Використовуючи параметри Стокса, можна виразити вектор Стокса S через вектор когерентності C наступним чином:

$$S = AC, \quad (1.3)$$

де A :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & i & -i & 0 \end{bmatrix}$$

Підставимо рівняння (1.3) у рівняння (1.2). Отримуємо:

$$S_1 = A(J \otimes J^*)A^{-1}S_0 = MS_0$$

Виразивши матрицю Мюллера з цього рівняння, маємо формулу для конвертації матриці Джонса в матрицю Мюллера:

$$M = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(E_1 + E_2 + E_3 + E_4) & \frac{1}{2}(E_1 - E_2 - E_3 + E_4) & F_{13} + F_{42} & -G_{13} - G_{42} \\ \frac{1}{2}(E_1 - E_2 + E_3 - E_4) & \frac{1}{2}(E_1 + E_2 - E_3 - E_4) & F_{13} - F_{42} & -G_{13} + G_{42} \\ & F_{14} + F_{32} & F_{14} - F_{32} & F_{12} + F_{34} \\ & G_{14} + G_{32} & G_{14} - G_{32} & G_{12} + G_{34} \quad -G_{12} + G_{34} \\ & & & F_{12} - F_{34} \end{bmatrix}$$

де

$$E_k = J_k J_k^* \quad k = 1, 2, 3, 4$$

$$F_{kl} = F_{lk} = \operatorname{Re}(J_k J_l^*) = \operatorname{Re}(J_k^* J_l) \quad k, l = 1, 2, 3, 4$$

$$G_{kl} = -G_{lk} = \operatorname{Im}(J_k^* J_l) = -\operatorname{Im}(J_k J_l^*) \quad k, l = 1, 2, 3, 4$$

Використовуючи формалізми Джонса та Мюллера, ми можемо описати різні типи поляризації електромагнітних хвиль. Наша робота в основному буде зосереджена на дослідженні лінійної та колової поляризації.

1.2. Методи обчислення розсіювання

Існує чимало методів обчислення пружного розсіювання електромагнітних хвиль. Деякі з них:

1. Геометрична оптика (ray tracing);
2. Т-матриця;
3. Дискрет-дипольне наближення

Геометро-оптичне наближення — це метод, який покладається на закони геометричної оптики в обчисленні розсіювання світла. В ньому падаюча хвиля, уявляється як жмуток окремих променів, які характеризуються двома напрямками вектору напруженості та фазою. Характеристики електромагнітного розсіювання визначаються у цьому підході колективними відповідними характеристиками усіх модельованих променів. Взаємодія окремого променя з частинкою розбивається на взаємодію променів із ділянками поверхні, які уявляються пласкою площиною. Для такого уявлення потрібно, щоб досліджувані частинки були великими у порівнянні із довжиною хвилі та достатньо гладкими. Тобто, даний метод не стільки враховує взаємодію хвилі з розсіювачем, скільки обчислює характеристики хвилі [4,5].

Основна проблема геометрично-оптичного наближення полягає в тому, що він має достатню точність лише при розмірах розсіювача в сотні разів більшим за довжину хвилі. Окрім того, цей метод не є чисельно точним, проте він доволі швидкий і менш ресурсозатратний, в порівнянні з іншими.

У методі Т-матриці [5,6], елементи матриці отримуються завдяки узгодженню граничних умов до вирішень рівнянь Максвелла. Даний метод пов'язує коефіцієнти поширення початкової та розсіяної хвилі таким чином:

$$p_{mn} = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} (T_{m'n'mn}^{11} a_{m'n'} + T_{m'n'mn}^{12} b_{m'n'})$$

$$q_{mn} = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} (T_{m'n'mn}^{21} a_{m'n'} + T_{m'n'mn}^{22} b_{m'n'}),$$

де p_{mn} , q_{mn} — коефіцієнти поширення розсіяного поля у певному базисі;
 a_{mn} , b_{mn} — коефіцієнти поширення початкового поля у певному базисі;

T^{kj} — елементи Т-матриці.

У матричній формі можна записати таким чином:

$$\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T^{11} & T^{12} \\ T^{21} & T^{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

Дискрет-дипольне наближення — це метод, основний принцип якого заключається у тому, що розсіювач розділяється на велику кількість частинок (диполів), для яких окремо рахуються матриці розсіювання світла і розсіювання між ними. Основна перевага дискрет-дипольного наближення перед іншими методами полягає в тому, що він дозволяє використовувати розсіювач будь-якої форми та не настільки залежить від розміру частинки, як інші методи. Даний метод є чисельно точним, тобто збільшення кількості та зменшення розміру до точкового субчастинок призводить до збільшення його точності, однак це потребує більших ресурсів та часу, необхідних для розрахунків[4,5,7,8]. Основні порівняльні характеристики зазначених методів подано у Таблиці 1.

Таблиця 1. Порівняння основних методів обчислення розсіювання світла.

Метод	Переваги	Недоліки
Т-матриця	Чисельно точний. Не ресурсоємний.	Має обмеження в морфології та розмірі частинок
Геометро-оптичне наближення	Швидкий. Не ресурсоємний.	Застосовується у випадку розсіювачів розміром у сотні разів більшими за довжину хвилі. Використовує емпіричні уявлення. Моделювання методами Монте-Карло за певних умов може бути доволі довгим. Слабка збіжність при збільшенні обчислення.
Дискрет-дипольне наближення	Чисельно точний. Може бути використаний для частинок практично будь-якої морфології та неоднорідного складу	Дуже ресурсоємний. Хоча вважається чисельно точним також використовує певні емпіричні уявлення про взаємодію хвилі та розсіювача. Умовно, не залежить від розміру, який практично обмежений ресурсами сучасних обчислювальних пристроїв.

1.3 Розсіювання світла хіральними частинками

Хіральність — це відсутність симетрії об'єкта таким чином, що його права частина не може бути приведена до вигляду лівої (і навпаки) за допомогою простих геометричних перетворень (повороту та/або переносу). Деякі види кристалів, спіраль, стрічка Мебіуса, еліпсоїд Максвела і т.д. є прикладами хіральної форми.

Часто хіральність є біоіндикатором — такі структури найбільше зустрічаються в органіці. Мабуть, найвідомішою хіральною органічною частинкою є подвійні спіралі ДНК/РНК, спіральні бактерії тощо.

Особлива відмінність розсіювання світла у хіральній частинці від розсіювання на частинці іншої форми полягає в тому, що після розсіювання на хіральних частинках присутня колова поляризація. Хоча, за певних умов, колова поляризація може бути проявом багатократного розсіювання на нехіральних частинках, наприклад, у роботі [9] та посилання у роботі. Прикладом цього може слугувати виникнення колової поляризації при розсіюванні світла речовиною комет.

CIDS (circular intensity differential scattering) — це параметр, який характеризує міру колової поляризації світла та дорівнює нормованому значенню елемента матриці Мюллера M_{14} :

$$CIDS = (I_R - I_L)/(I_R + I_L) = M_{14}/M_{11}$$

Для симетричних частинок або частинок, для яких може бути застосована дзеркальна симетрія, даний параметр дорівнює нулю. Однак у випадку хіральних структур даний показник може бути відмінним від нуля, що може бути застосовано у їхньому дистанційному зондуванні.

2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ

2.1 Підготовка геометрії розсіювача для ДДП

Для обчислення розсіювання світла, ми взяли три частинки (розсіювачі) різної морфології: еліпсоїд, стрічку Мебіуса та еліпсоїд Максвелла. У даному випадку еліпсоїд виконує роль еталонної частинки, підтверджуючи те, що наші розрахунки колової поляризації правильні: у цьому випадку елементи M_{13} , M_{31} , M_{14} , M_{41} , M_{23} , M_{32} , M_{24} та M_{42} мають бути рівні нулю для довільного кута розсіювання.

Довільний еліпсоїд із трьома різними піввісями може бути параметризований у декартових координатах наступним чином:

$$\begin{cases} x = a \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ y = b \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ z = c \cos(\theta) \end{cases} \quad (2.1)$$

де a , b , c — піввісі еліпсоїда, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

Із застосуванням формули (2.1) визначаються точки, що належать еліпсоїду. У межах цієї поверхні ми заповнюємо фігуру певною кількістю диполів за допомогою умови, що $\sqrt{\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2} < 1$. У дипломній роботі було використано наступні вільні параметри: $a = 1\lambda$; $b = 0.75\lambda$; $c = 0.5\lambda$. На Рисунку 2.1 зображено поверхню досліджуваного еліпсоїда та його дипольну репрезентацію.

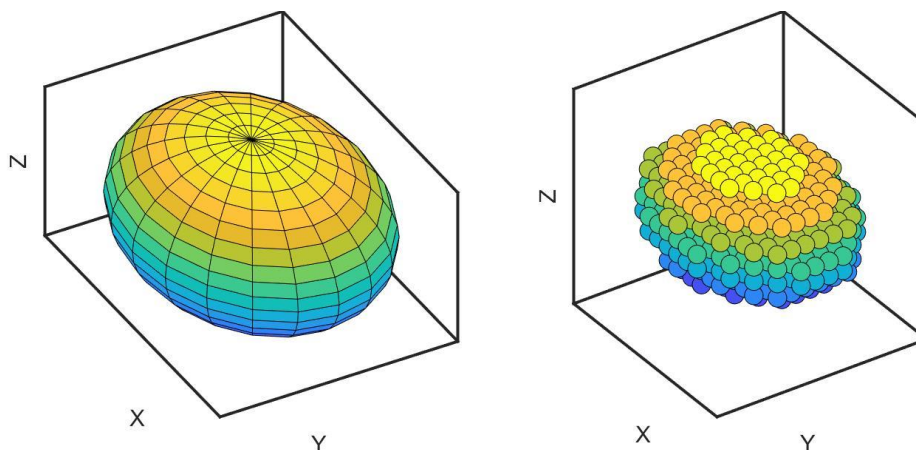


Рисунок 2.1. (1) — модель еліпсоїда; (2) — дипольна модель еліпсоїда.

Еліпсоїд Максвелла — це фігура, яка розширює поняття еліпсоїда на довільну кількість фокусів (N), наприклад, Stankevich et al. [10]. Тобто дана поверхня — геометричне місце точок, сума відстаней від яких до N обраних фіксована. Для того, щоб зробити хіральну форму поверхні ми обрали наступний чотирьохточковий каркас: $\{(0,0,0); (0,a,0); (\chi a, \chi a, 0); (\chi a, \chi a, 1)\}$, де $\chi = \pm 1$ та визначає хіральність, a — масштабний параметр. Дипольна модель такої фігури зображена на Рис. 2.3.

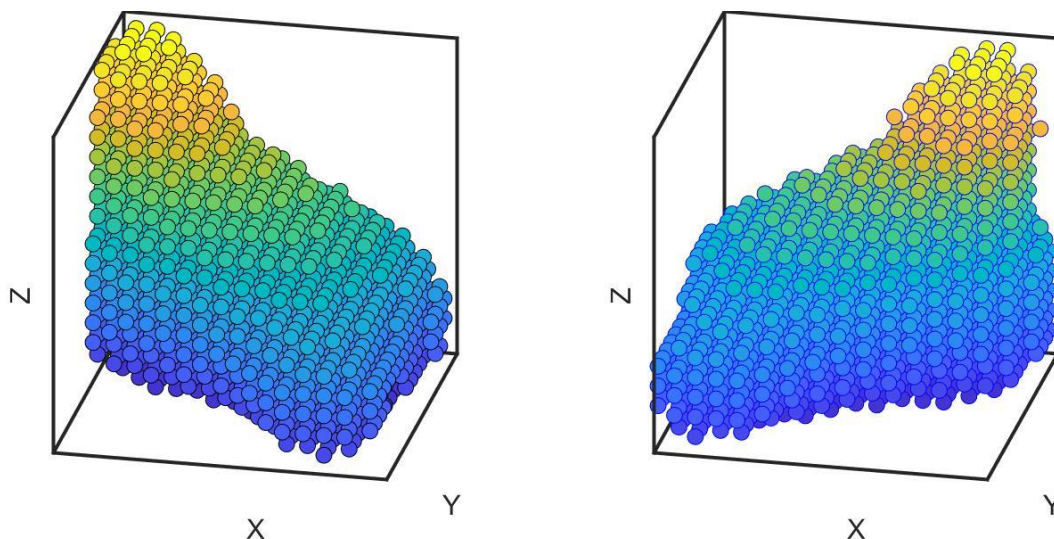


Рисунок 2.2 (1) — лівостороння дипольна модель еліпсоїда Максвелла; (2) — правостороння дипольна модель еліпсоїда Максвелла.

Як окремий клас хіральних фігур ми розглянемо правозакручену та лівозакручену стрічку Мебіуса. Хоча дана геометрична форма не дуже поширена в природі, вона відома людству ще з античних часів, а фізичні об'єкти та технічні прилади на базі цієї фігури мають унікальні та потенційно корисні властивості (наприклад, закручені частинки графену та деякі молекули, конденсатор Мебіуса, тощо). Стрічка Мебіуса параметризується таким чином:

$$\begin{cases} x(u, v) = (R + v \cos(\xi u/2)) \cos u \\ y(u, v) = (R + v \cos(\xi u/2)) \sin u \\ z(u, v) = v \sin(\xi u/2) \end{cases}$$

де $0 \leq u \leq 2\pi$ та $-a/2 \leq v \leq a/2$ — параметричні координати, R — радіус кола, що проходить через середину стрічки. Знак параметра закрученості ζ задає напрямок закрученості стрічки, де позитивне значення дає лівосторонню закрученість, а негативне — правосторонню. Значення $\zeta = 0$ дає пласке кільце. У нашому випадку $\zeta = 1$ та $\zeta = -1$. Зі збільшенням числового значення цього параметра збільшується кількість завитків стрічки. Для того, щоб зробити цю частинку у фізичному зображенні було додано «товщину» стрічки, для цього кілька ідентичних стрічок було складено одна поверх іншої із зсувом у відповідну сторону.

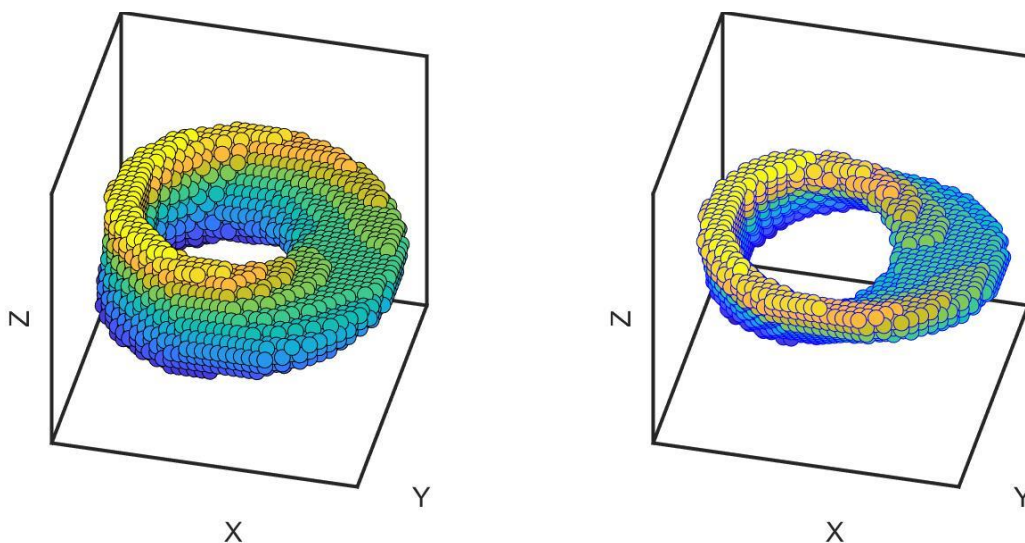


Рисунок 2.3. (1) — лівозакручена дипольна модель стрічки Мебіуса; (2) — правозакручена дипольна модель стрічки Мебіуса.

2.2. Пакет ADDA

ADDA — це пакет програм для чисельних досліджень розсіяння світла з використанням методу дискрет-дипольного наближення [8]. Даний пакет написаний на C99, що дозволяє використовувати у ньому підпрограми, написані на Fortran та C++.

Середовище ADDA дозволяє проводити моделювання взаємодії електромагнітних хвиль із обмеженими об'єктами довільної форми та складу, які можуть «бути зануреними» у середовище, або знаходитися біля певної поверхні субстрату. Даний пакет дозволяє повністю контролювати геометрію розсіювання, орієнтацію та морфологію частинки, вигляд падаючого пучка та обчислювати інтегральні та кутові величини розсіювання (перерізи, матриці Мюллера та Джонса, тощо), або динамічні характеристики такі як сили, або моменти.

У даній роботі після підготовки програми визначення воксел-геометрії та збереження координат усіх диполів частинки в файл, робота з програмою ADDA виглядала у вигляді написання короткого .bat-скрипту, де запускався пакет та прописувалися параметри моделювання. Прикладом одного такого запуску може слугувати наступний рядок:

```
adda -lambda 1 -size 1 -shape ellipsoid 0.75 0.5 -m 1.4 0.001 -dir big -orient avg -ntheta 181
```

Де *adda* – команда, що запускає середовище ADDA, та ряд параметрів, які задано у вигляді *-ключ значення*: *-lambda* – задає довжину хвилі у вакуумі у мкм; *-size* – розмір частинки у мкм ; *-shape* – форма частинки (може приймати або ключове слово стандартної форми, або строкове значення шлях/ім'я файлу із координатами диполів у кубічній сітці; *-m* – комплексний показник заломлення, приймає два числові значення (дійсну та комплексну

частину); *-dir* – шлях до папки зберігання даних розрахунків; *-orient* – приймає значення або *avg* (розрахунок усередненої за орієнтаціями матриці Мюллера), або трійку кутів Ейлера, що задають положення частинки відносно лабораторної системи; *-ntheta* – дискретизація діапазону кута розсіювання – ціле число, яке описує кількість вузлів проміжку від 0° до 180° .

Як було вказано, геометрію диполів було створено та записано у файл з відповідним форматуванням за допомогою власних скриптів мовою Python. Частинки розбивалися на диполі таким чином, щоб відстань між ними задовольняла вимогу: $d < \lambda/(10/m)$, де λ – довжина хвилі у вакуумі. Або іншими словами – щоб на одиницю довжини хвилі у речовині частинки було не менше 10 диполів ($N_{\lambda l}$). Більш того, задля коректного опису форми, ця умова була жорсткішою $N_{\lambda l} = 10$. В той час, як перехід від макроскопічного оптичного параметру – комплексного показника заломлення – до мікроскопічного параметру – поляризованості, який характеризує взаємодію диполів із електричним полем, створеним зовнішнім полем електромагнітної хвилі та результуючим полем інших диполей, в роботі було використано класичну формулу Клаузіуса-Моссоті, яка добре працює для помірних значень показників заломлення та не дуже густого дипольного розташування. Додаткових радіаційних поправок не застосовувалося.

3 РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕННЯ МАТРИЦЬ МЮЛЛЕРА, УСЕРЕДНЕНИХ ЗА ОРІЄНТАЦІЯМИ

Домовимося далі у тексті вважати $M_{ij}(\theta) \equiv M_{ij}(\theta)/M_{11}(\theta)$, якщо не вказано інше. При моделюванні дійсна частина комплексного показника заломлення для усіх випадків однакова і дорівнює $Re(m)=1.4$, комплексна частина – варіюється. Діаметр сфери, описаної навколо відповідної частинки, дорівнює довжині хвилі у вакуумі, якщо не вказано інше. Спершу було проведено моделювання трьохвісного еліпсоїду задля перевірки коректної роботи програми та режиму усереднення. Для таких частинок можна вказати на певні характерні особливості у матриці Мюллера, наприклад, як виконання наступних симетрій $M_{12} = M_{21}$ та $M_{34} = -M_{43}$ для відповідного кута розсіювання, а також нульові значення елементів M_{13} , M_{14} , M_{23} , M_{24} та симетричних їм для довільного кута розсіювання. На рис. 3.1 та 3.2 приведено повні матриці Мюллера для таких частинок для двох значень коефіцієнта поглинання $k = 0.001$ та $k = 0.01$, відповідно.

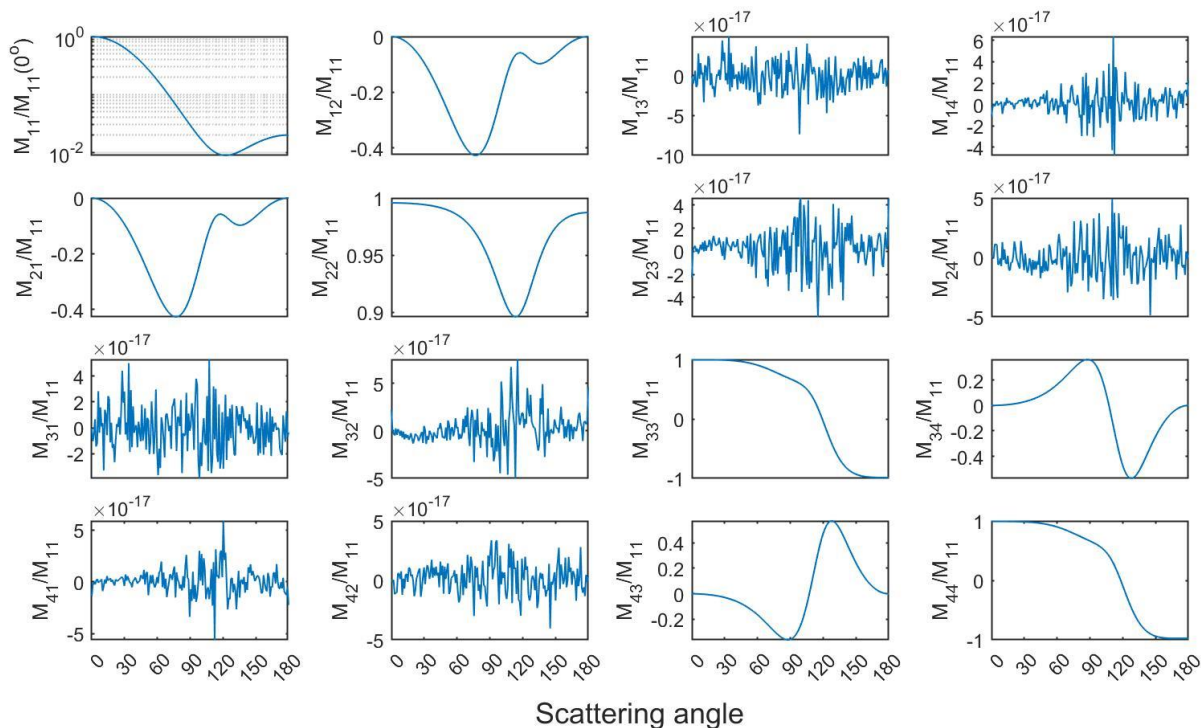


Рисунок 3.1. Матриця Мюллера для еліпсоїда з коефіцієнтом поглинання $k = 0.001$.

З даних рисунків можна побачити, що елементи M_{14} та M_{23} , та інші відповідні, чисельно дорівнюють 0 на рівні $10e-17$, в той час як для M_{12} - M_{21} та M_{34} - M_{43} виконуються відповідні симетрії. Максимальна різниця не перебільшує $10e-10$, тобто, налаштування середовища, процедуру підготовки файлу геометрії та процедуру усереднення за орієнтаціями можна вважати коректними.

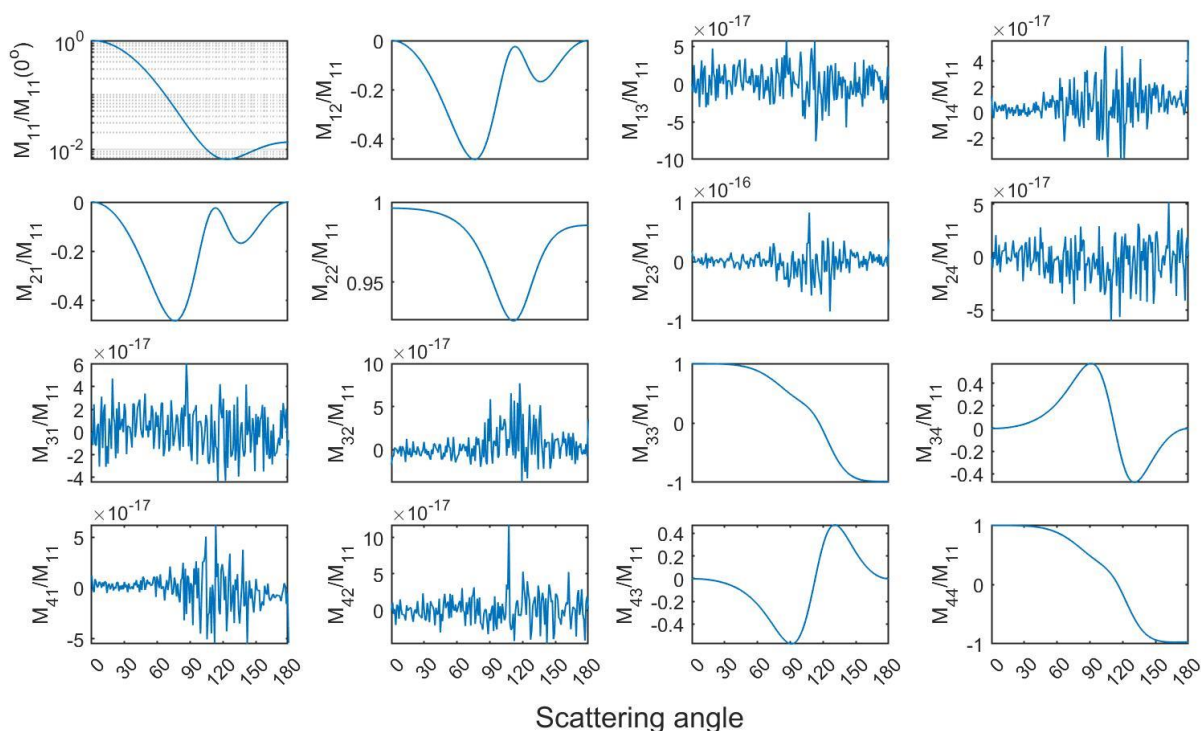


Рисунок 3.2. Матриця Мюллера для еліпсоїда з коефіцієнтом поглинання $k = 0.01$.

На рис. 3.3 та 3.4 представлено повну фазову залежність для матриці Мюллера для хірального еліпсоїда Максвелла з коефіцієнтом поглинання $k = 0.001$ та $k = 0.01$.

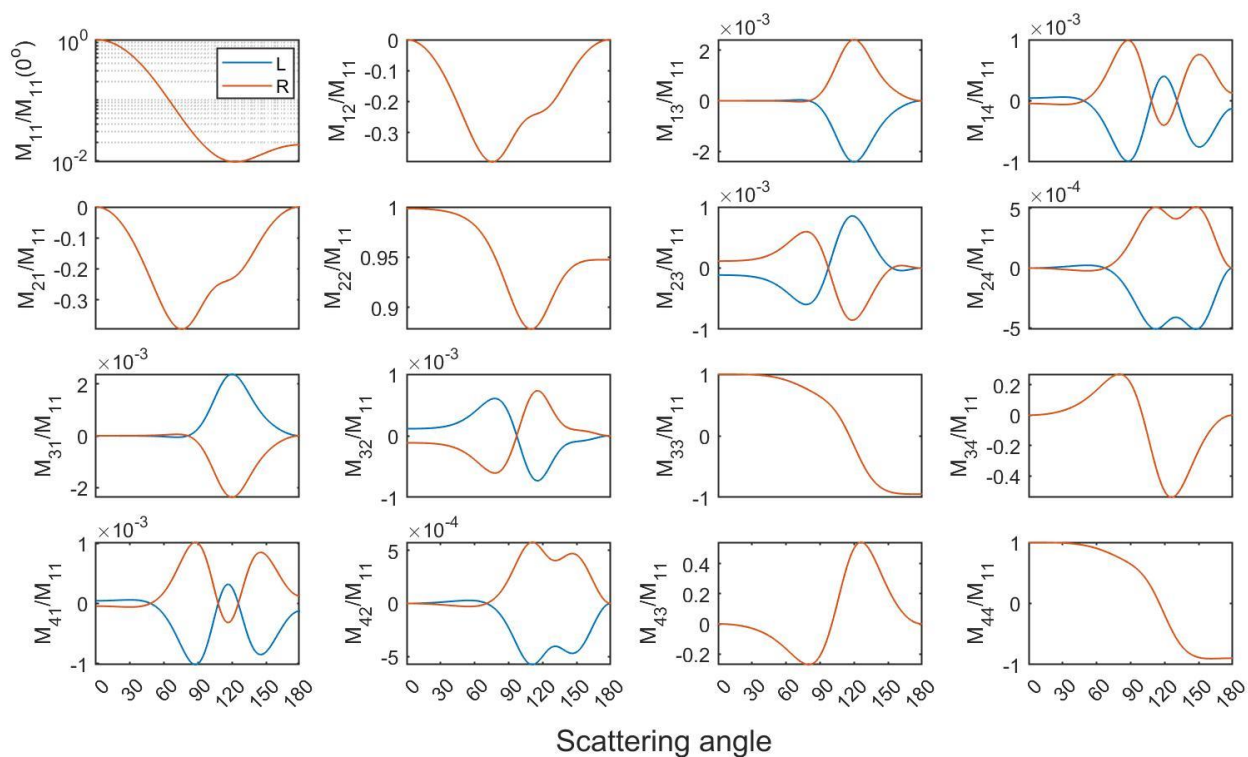


Рисунок 3.3. Матриця Мюллера для еліпсоїда Максвелла з коефіцієнтом поглинання $k = 0.001$.

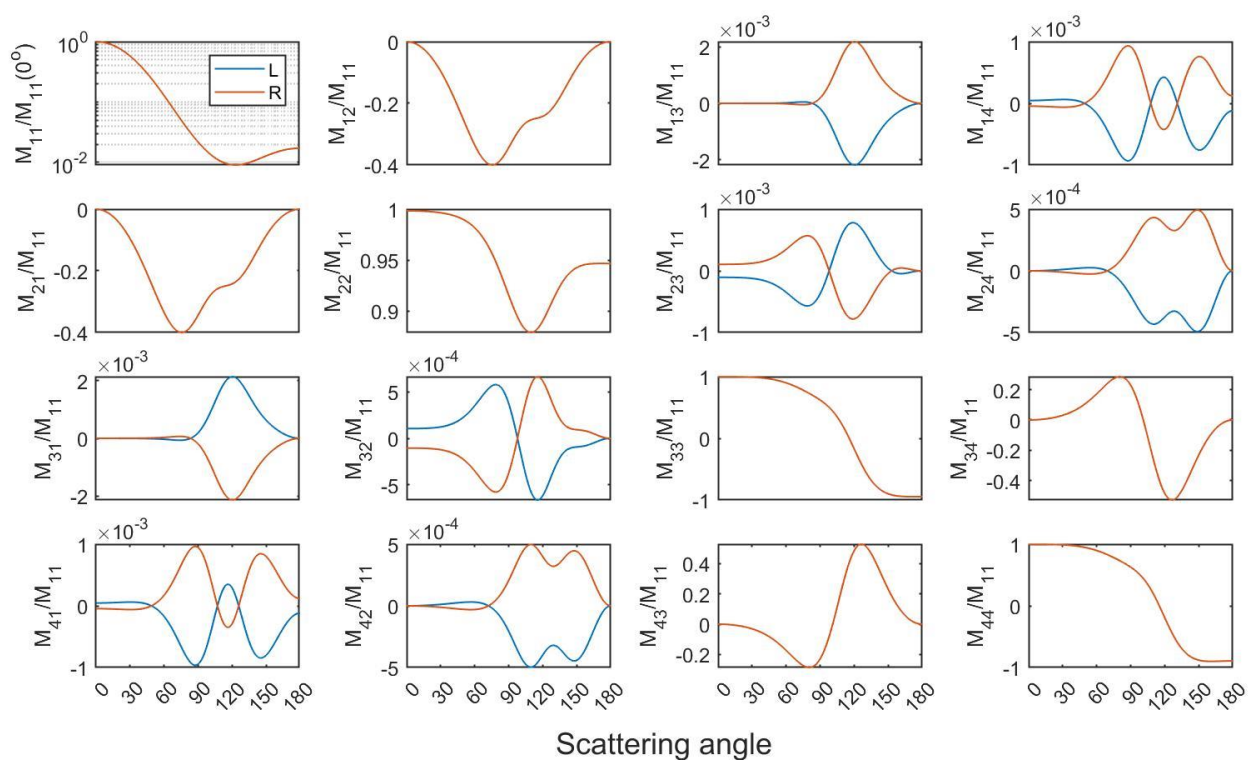


Рисунок 3.4. Матриця Мюллера для еліпсоїда Максвелла з коефіцієнтом поглинання $k = 0.01$.

На рис. 3.5 та 3.6 представлено повну фазову залежність для матриці Мюллера для стрічки Мебіуса з коефіцієнтом поглинання $k = 0.001$ та $k = 0.01$.

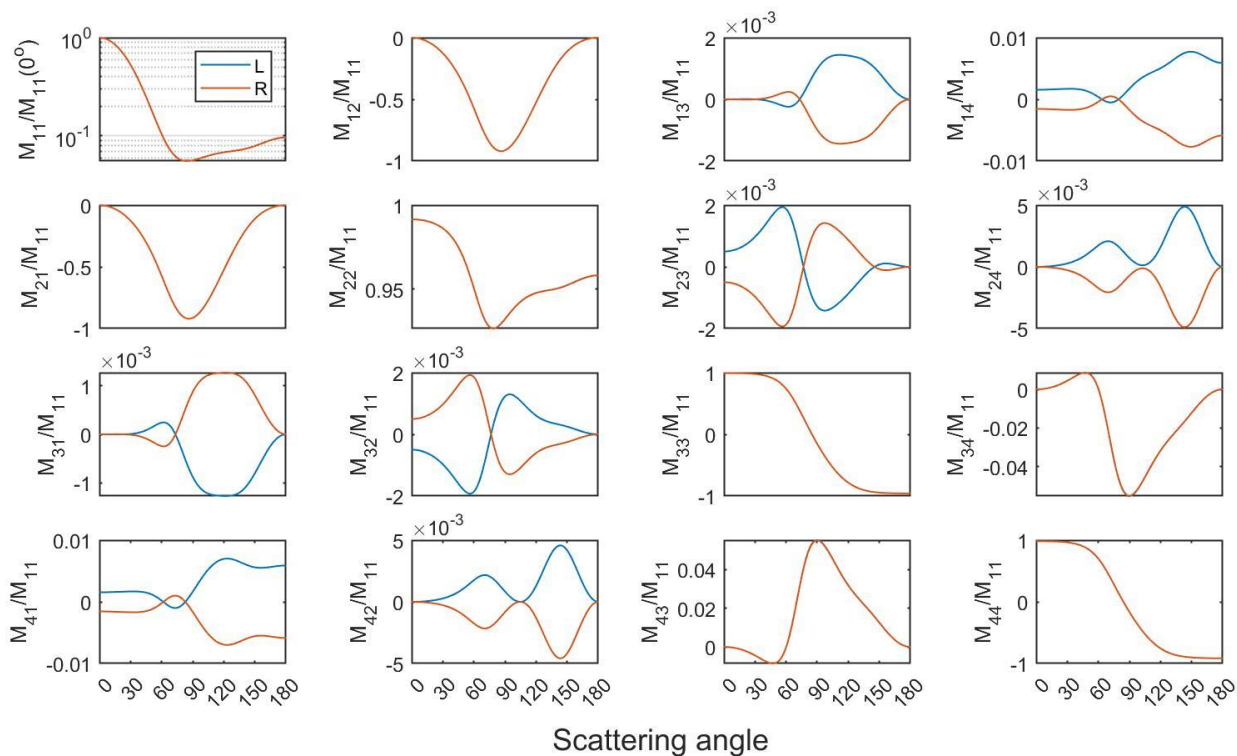


Рисунок 3.5. Матриця Мюллера для стрічки Мебіуса з коефіцієнтом поглинання $k = 0.001$.

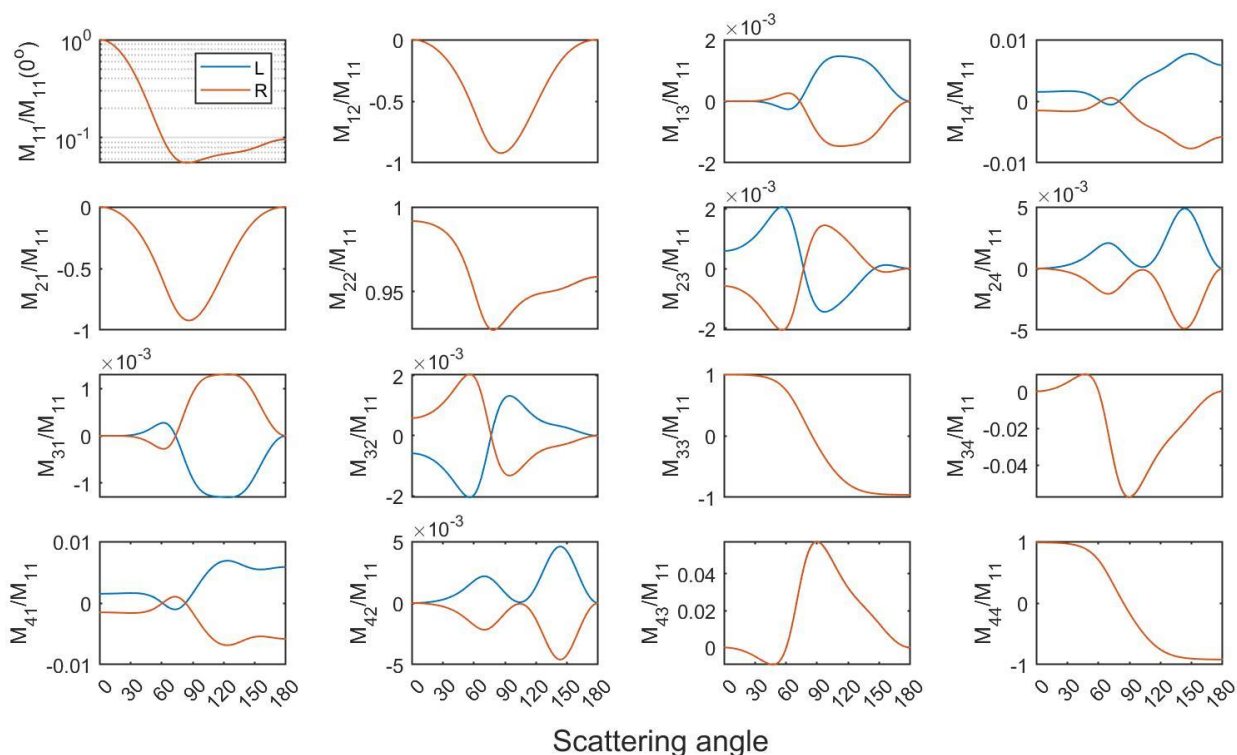


Рисунок 3.6. Матриця Мюллера для стрічки Мебіуса з коефіцієнтом поглинання $k = 0.01$.

На рис.3.7 – 3.9 наведено залежності для елементів матриці Мюллера M_{12} та M_{14} , які характеризують лінійну та колову поляризації, для досліджуваних частинок. Загалом, при збільшенні коефіцієнта поглинання для трьохвісних еліпсоїдів та еліпсоїдів Максвелла спостерігається збільшення значення у екстремумах, хоча на їхнє положення даний параметр впливає слабо. Зсув положення побічного екстремуму для випадку еліпсоїда Максвелла – візуальний ефект від того, що він виплоджується та при значенні $k = 0.001$ вже взагалі не може бути охарактеризований. Для стрічки Мебіуса суттєвої залежності M_{12} від коефіцієнта поглинання не виявлено. Колова поляризація залишається доволі стійкою у досліджуваному діапазоні значень коефіцієнту поглинання.

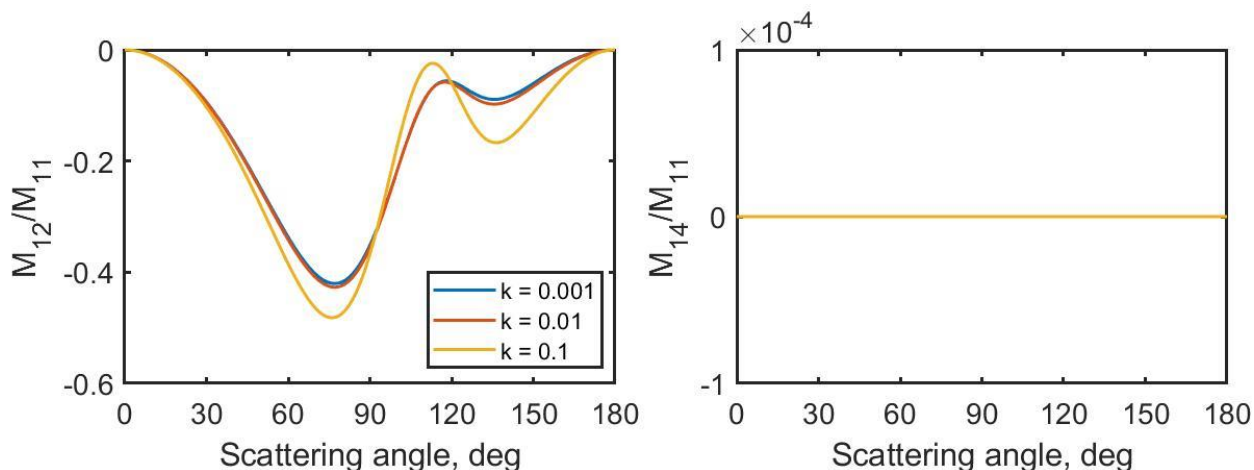


Рисунок 3.7. Залежність елементів матриці Мюллера M_{12}/M_{11} та M_{14}/M_{11} від коефіцієнта поглинання k для еліпсоїда.

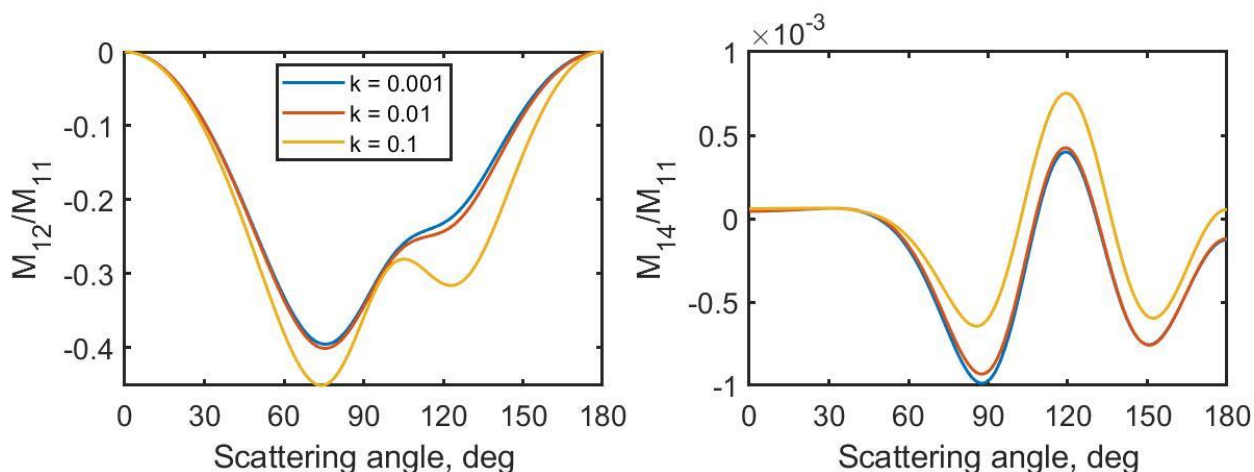


Рисунок 3.8. Залежність елементів матриці Мюллера M_{12}/M_{11} та M_{14}/M_{11} від коефіцієнта поглинання k для еліпсоїда Максвелла

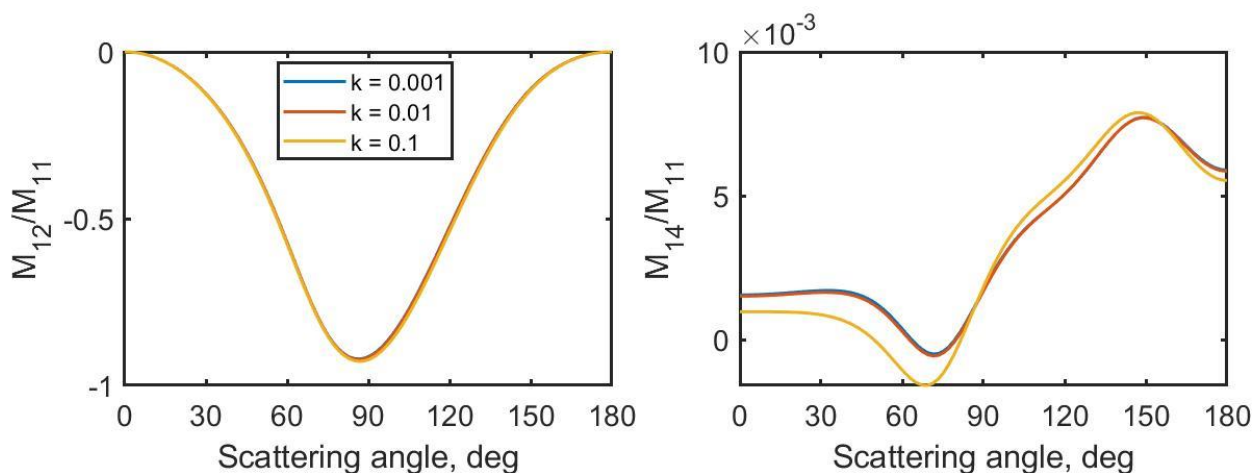


Рисунок 3.9. Залежність елементів матриці Мюллера M_{12}/M_{11} та M_{14}/M_{11} від коефіцієнта поглинання k для стрічки Мебіуса

Цікавим фактом, виявленим під час моделювання, була асиметрія коефіцієнтів M_{14} та M_{41} для одного й того самого енантіомеру, проте ідеальне (різниця менша за $1e-10$) співпадіння із точністю до знаку того ж самого елемента матриці цієї ж частинки з іншою симетрією. Це може бути виражено наступним чином:

$$M_{pq}^{\chi} \neq M_{qp}^{\chi}, \text{ але } M_{pq}^{\chi} = M_{pq}^{-\chi},$$

де $pq \in$ парами $\{13\}, \{14\}, \{23\}, \{24\}$,

χ відповідає певній хіральності,

– χ відповідає протилежній хіральності.

Така різниця цілком можлива для середовища частинок, проте не спостерігалось, на скільки відомо, у одночастинковому експерименті. Із результатів розрахунків було побудовано залежність цієї різниці для $(M_{14}-M_{41})/M_{11}$ та $(M_{23}+M_{32})/M_{11}$ від значення коефіцієнта поглинання. Асиметрія $M_{14}-M_{41}$ виявилася більш стійкою для даного параметру.

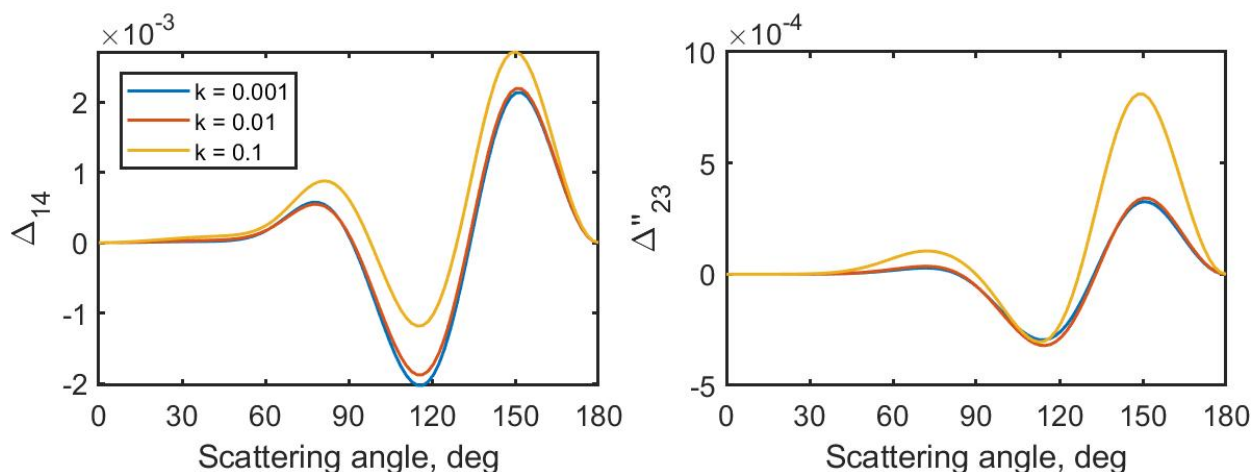


Рисунок 3.10. Залежність різниці асиметричних елементів матриці Мюллера M_{14}/M_{11} та M_{23}/M_{11} від зміни коефіцієнта поглинання k для стрічки Мебіуса

Іншим фактором, від якого суттєво залежить асиметрія виявився розмір частинки. Асиметрія є суттєвою лише на розмірах частинки близьких до розміру довжини хвилі, у випадку зменшення, вона починає швидко

зникати як для листа Мебіуса, так і для еліпсоїду Максвелла, що продемонстровано рис. 3.11. При цьому зберігається властивість, що $M_{pq}^{\chi} = M_{pq}^{-\chi}$, де $pq \in \{13\}, \{14\}, \{23\}, \{24\}$, а χ відповідає певній хіральності, а $-\chi$ – протилежній

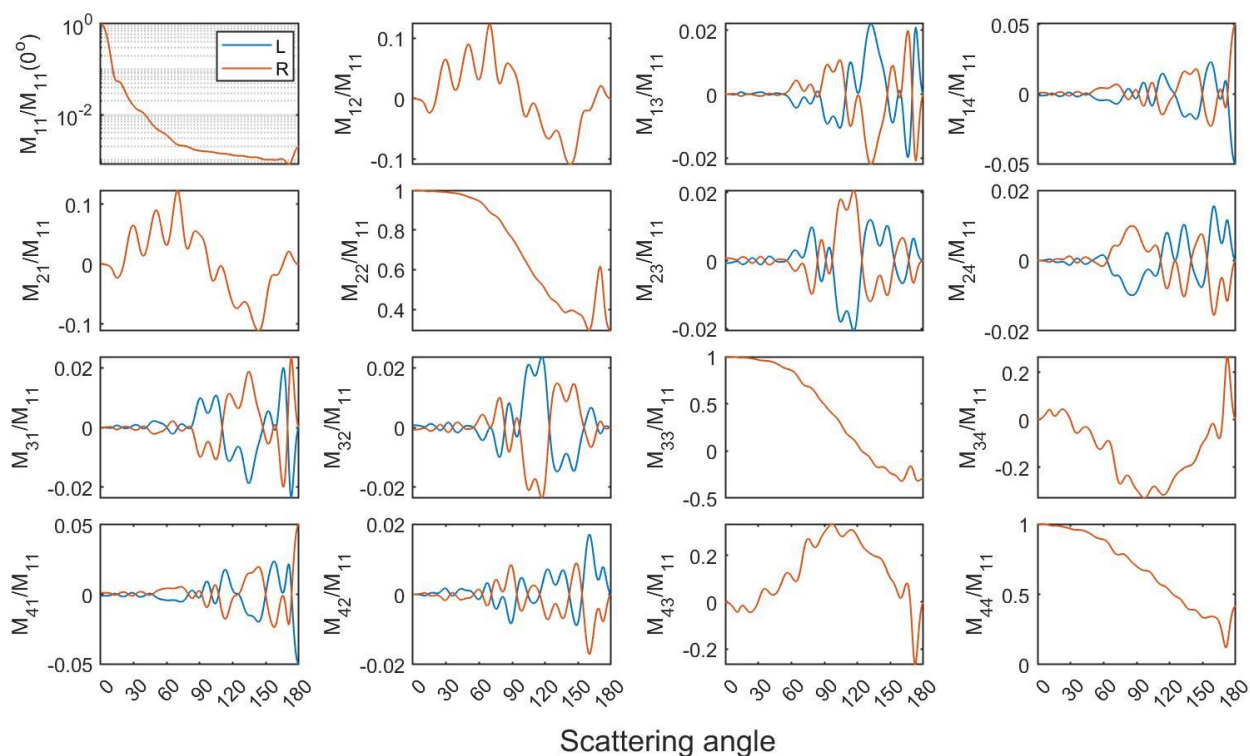


Рисунок 3.11. Матриця Мюллера для стрічки Мебіуса при розмірі розсіювача $d=3\lambda$.

На жаль, під час виконання дипломної роботи не вдалося знайти доброї фізичної інтерпретації даного ефекту. Щодо можливих артефактів моделювання, то усереднення проводилося з різними параметрами та початковим положенням частинки, також у кожному експерименті було проведено оцінку схеми та параметрів усереднення для нехіральної форми, які добре зводилися до 0. Попри усі ці порівняння, усереднення за орієнтаціями для маленьких хіральних частинок може потребувати іншого підходу та подальших досліджень.

ВИСНОВКИ

У дипломній роботі було проведено моделювання розсіювання світла однією частинкою з використанням методу дискрет-дипольного наближення (ДДП). Було розраховано матриці Мюллера, усереднені за орієнтацією, для частинок різної форми з діаметром, що дорівнює одній довжині хвилі в вакуумі. Досліджуваними формами були: (1) трьохвісні еліпсоїди; (2) чотирьохфокусні еліпсоїди Максвелла та (3) частинки у формі стрічки Мебіуса.

Основними результатами роботи є:

- 1) Показано, що для трьохвісного еліпсоїду в матриці Мюллера, усередненій за орієнтацією, недіагональні елементи, окрім M_{12} - M_{21} та M_{34} – M_{43} , чисельно дорівнюють нулю. В той час як для хіральних частинок при тому самому режимі усереднення по орієнтаціях усі елементи матриці Мюллера відмінні від 0. Більш того, для хіральних частинок малого розміру проявляється певна асиметрія $M_{14} \neq M_{41}$ та $M_{23} \neq -M_{32}$. Дана асиметрія швидко зменшується при збільшенні розміру частинки.
- 2) Дослідження фазової залежності лінійної поляризації, елемента M_{12}/M_{11} , від коефіцієнта поглинання показали, що при його збільшенні максимуми фазової кривої збільшуються, але їхнє положення від цього параметру залежить слабше. Аналогічна поведінка виявляється і для колової поляризації, вираженої елементом M_{14}/M_{11} .
- 3) Виявлена в моделюванні асиметрія, з точністю до відповідного знака, елементів матриці Мюллера, усередненої за орієнтацією, для малих хіральних частинок, в цілому, не типова для одночастинкового розсіювання. При чому для відповідних лівих та правих енантіомерів можна встановити наступні тотожності: $M_{14}^l = -M_{14}^r$ та $M_{23}^l = -M_{23}^r$.

4) Фазова поведінка різниці для маленьких частинок не збігається в положенні максимумів з фазовими кривими для відповідних елементів Матриці Мюллера. Асиметрія, в цілому, спадає із збільшенням коефіцієнта поглинання, проте швидко спадає із збільшенням розміру частинки. Наразі, достовірної інтерпретації цього ефекту не знайдено, потрібні подальші дослідження перш за все тестування режимів усереднення для маленьких хіральних частинок.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. M.I. Mishchenko, L.D. Travis, A. Lacis. *Scattering, Absorption and Emission of Light by Small Particles*, Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2002. 448 p.
2. O. Arteaga. *Mueller matrix polarimetry of anisotropic chiral media*: Doctoral Thesis / University of Barcelona. Barcelona, 2010. 226 p.
3. E.Collett. *Field Guide to Polarization*, Bellingham, WA: SPIE Press, 2005. 151 p.
4. F. M. Kahnert. *Numerical methods in electromagnetic scattering theory*, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2003. Vol. 79–80, pp. 775– 824.
5. M.I. Mishchenko, V.P. Tishkovets, L.D. Travis et al. *Electromagnetic scattering by a morphologically complex object: Fundamental concepts and common misconceptions*. 2011. Vol. 112(4), pp. 671-692
6. M.I. Mishchenko, L.D. Travis, D.W. Mackowski. *T-matrix Computations of Light Scattering by Nonspherical Particles: A Review*, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 1996. Vol. 55, No. 5, pp. 535-575.
7. Y. Surkov, Y. Shkuratov, Y.-L. Pan et al. *Light scattering from spiral particles*, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2023. Vol. 298, Art. No. 108494, 8 p.

8. M.A. Yurkin, A.G. Hoekstra. *User Manual for the Discrete Dipole Approximation Code ADDA 1.4.0*. URL: <https://github.com/adda-team/adda/raw/v1.4.0/doc/manual.pdf>. 2020.
9. L. Kolokolova, C. Koenders, C. Goetz, V. Rosenbush, N. Kiselev, T. Hoang, A. Lazanin. *Clues to cometary circular polarization from studying the magnetic field in the vicinity of the nucleus of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko*, Monthly Notices. 2016. Vol. 462, p. 422-431. doi: 10.1093/mnras/stw2843
10. D. Stankevich, Y. Shkuratov, C.K. Sim, M. Jeong, Y.-J. Choi, S. Kim, G. Videen. *Light scattering by media consisting of Maxwell 3-foci concave particles in the geometrical optics approximation*. Journal of Quant Spectroscopy and Radiat Transf. Vol. 296, 108457. doi: 10.1016/j.jqsrt.2022.108457