

УДК 538.958

DOI 10.25587/2222-5404-2023-20-4-31-38

Численное моделирование распространения волны через сферическую частицу в рамках обобщенной теории Лоренца-Ми

А. Г. Федоров ✉, М. П. Миронов

Северо-Восточный федеральный университет, г. Якутск, Россия

✉ ag.fedorov@s-vfu.ru

Аннотация. Одним из актуальных направлений применения голографии является измерение/визуализация переходных процессов в многофазных потоках. Одним из недостатков такого подхода ранее являлись регистрация в различных фоточувствительных элементах с последующим его переносом на цифровой формат и восстановление. С развитием цифровых технологий стала возможна прямая регистрация в ПЗС-матрицу интерференционных картин (голографических изображений). Однако и в цифровой голографии существует ряд проблем, требующих решения. К таким проблемам можно отнести алгоритмы восстановления, эффективную обработку данных, разрешение и т. д. В настоящее время численную реализацию восстановления и обработку голографических изображений можно осуществить в рамках классической теории дифракции или с помощью обобщенной теории Лоренца-Ми. Первое подразумевает не прямое решение уравнений Максвелла, т. е. применение принципа Гюйгенса-Френеля. Второй подход подразумевает прямое решение уравнений Максвелла для задачи голографии. В рамках данной работы предлагается численное моделирование голографического изображения полей от сферических частиц на основе обобщенной теории Лоренца-Ми. В рамках данной работы представлена численная реализация моделирования голографических изображений однородной сферы на основе обобщенной теории Лоренца-Ми. Представлен код реализации на языке программирования python. Результаты исследования демонстрируют возможность эффективного использования цифровой голографии для визуализации и анализа сферических объектов.

Ключевые слова: Обобщенная теория Лоренца-Ми, осевая голография, вектор Пойнтинга, принцип Гюйгенса-Френеля, интерференционные картины от сферических частиц.

Для цитирования: Федоров А. Г., Миронов М. П. Численное моделирование распространения волны через сферическую частицу в рамках обобщенной теории Лоренца-Ми. Вестник СВФУ. 2023, Т. 20, №4. С. 31–38. DOI:10.25587/2222-5404-2023-20-4-31-38

Numerical simulation of wave propagation through a spherical particle within the framework of generalised Lorenz-Mie theory

A. G. Fedorov ✉, M. P. Mironov

M.K. Ammosov North-Eastern Federal University, Yakutsk, Russia

✉ ag.fedorov@s-vfu.ru

Abstract. Holography has been widely used for measuring and visualising transients in multiphase flows. Earlier, one of the drawbacks of this approach was the need to register on various photosensitive elements and its subsequent transfer to digital format and restoration. With the development of digital technologies, direct registration of interference patterns (holographic images) into a CCD matrix became possible. However, even in digital holography there are a number of problems that need to be solved. These problems pertain to recovery algorithms, efficient data processing and resolution, among others. Currently, the numerical implementation of the restoration and processing of holographic images can be done within the framework of classical diffraction theory or with the help of generalised

Lorenz-Mie theory. The first implies an indirect solution of Maxwell's equations, i.e., application of the Huygens-Fresnel principle. The second approach involves a direct solution of Maxwell's equations for the holographic problem. In the framework of this work, a numerical simulation of holographic imaging of fields from spherical particles based on the generalised Lorenz-Mie theory is proposed. Within the framework of this work, a numerical implementation of modelling of holographic images of a homogeneous sphere based on the generalised Lorenz-Mie theory is presented. The implementation code in the python programming language is presented. The results of the study demonstrate the possibility of effective use of digital holography for visualisation and analysis of spherical objects.

Keywords: Generalised Lorenz-Mie theory, axial holography, Poynting vector, Huygens-Fresnel principle, interference patterns from spherical particles.

For citation: Fedorov A. G., Mironov M. P. Numerical simulation of wave propagation through a spherical particle within the framework of generalised Lorenz-Mie theory. Vestnik of NEFU. 2023, Vol. 20, No. 4. Pp. 31–38. DOI: 10.25587/2222-5404-2023-20-4-31-38

Введение

Электронная голография (ЭГ) представляет собой один из разделов электронной микроскопии, позволяющей исследовать объекты на атомарном уровне, что представляет большой интерес во многих областях науки.

Наиболее часто голографический способ исследования применяют для исследования нитевидных полимерных или углеродных волокон, подвешенных на различных отверстиях [1, 2], макромолекул [3, 4], углеродных нанотрубок [5–7], ДНК [4,8] и металлических волокон [9]. Также ЭГ получила применение при исследовании вирусов, например, вируса табачной мозаики [10]. Группа авторов [11-12] предложила применение электронной голографии для исследования тонких слоистых структур.

Во всех этих исследованиях структуры достаточно малы или ограничены малым количеством слоев. Это обусловлено условием формирования голографического изображения – опорная волна должна быть во много раз больше, чем объектная [13]. Интересным в этом плане являются исследования достаточно прозрачных многослойных объектов, в частности многослойных сфер. С одной стороны, можно задать объект сферической формы достаточно меньшего диаметра для выполнения условия формирования голограммы. С другой стороны, достаточно прозрачный, чтобы в объектную волну вносили вклады множественные оболочки сферы. Классический подход моделирования распространения волны через объект основан на принципе Гюйгенса-Френеля. Для случая, когда рассматриваются сферические частицы, наиболее подходящим является обобщенная теория Лоренца-Ми [14].

В связи с вышесказанным, в рамках данной работы рассматривается модельная задача рассеяния электромагнитной волны на сфере. Представлена численная реализация для одной непрозрачной сферы. Код реализации представлен на языке программирования Python.

Методы исследования

В рамках настоящей работы рассматривается следующая задача (рис. 1): плоская волна проходит через объект сферической формы, часть которой рассеивается от объекта (объектная волна), часть проходит без взаимодействия (опорная волна). На некотором расстоянии от плоскости образца объектная и опорная волны, интерферируя, образуют голографическое изображение. В первом приближении рассматривается одна непрозрачная сферическая частица, но в перспективе теорию можно обобщить для N сферических частиц. Поэтому математическая модель представлена для N частиц, где через индекс i обозначается частица, а координаты (x_i, y_i, z_i) обозначают расположение i -ой частицы в декартовой системе координат $OXYZ$. Количество оболочек в будущем можно также увеличить (в рамках данной работы не рассматривается).

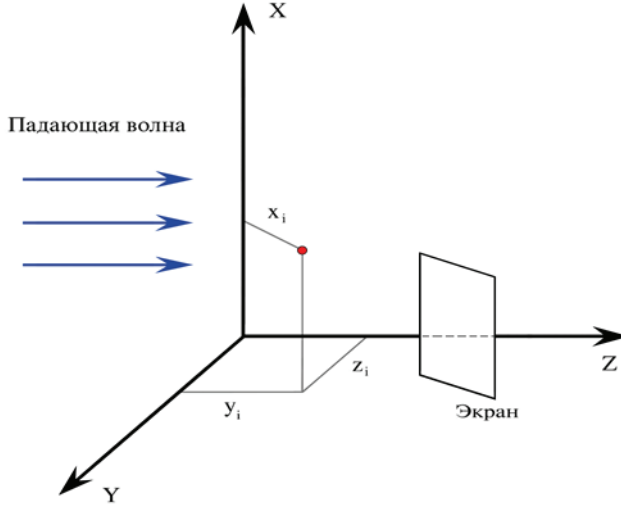


Рис. 1. Постановка задачи
Fig. 1. Setting of the problem

Регистрирующая среда математически представляет собой матрицу с координатами (x_d, y_d, z_i) (на практике, в случае, когда рассматриваются электронная волна за регистрирующую среду, выступает система из координатно-чувствительного детектора с ПЗС-матрицей. Для случая оптического диапазона за регистрирующую среду может выступать только ПЗС-матрица) и размерности $M \times M$, с физическим размером пикселя $dpix$, метр. Интерференционная картина (голографическое изображение) формируется на плоскости регистрирующей среды. Предполагается, что опорная волна является плоской и падает на регистрирующую среду под прямым углом.

Классическим подходом при моделировании рассеяния электромагнитной волны на сферической частице является применение обобщенной теории Лоренца-Ми в представлении Бромвича [14-16].

Центр рассеяния Ми (абсолютно сферическая, изотропная и однородная частица с диаметром d и комплексным показателем преломления m) находится в точке O_j декартовой системы координат $OXYZ$. Считается, что среда, окружающая частицу, не поглощающая, компоненты рассеянного электромагнитного поля (обозначаемые как $V_k^{s,j}$, где V обозначает E или H , s обозначает рассеянный, j – номер частицы, а k обозначает координату r , θ или ϕ) в направлении θ_j , ϕ_j и на расстоянии r_j от центра частицы задаются следующим образом:

$$E_r^{s,j} = E_0 \cos(\phi_j) \sum_{n=1}^{\infty} i^{n+1} \tilde{n} a_n \left[\xi_n''(kr_j) + \xi_n(kr_j) \right] P_1^n(\cos(\theta_j)),$$

$$E_{\theta}^{s,j} = E_0 \frac{kr_j}{\cos(\phi_j)} \sum_{n=1}^{\infty} i^{n+1} \tilde{n} \left[a_n \xi_n'(kr_j) \tau_n \cos(\theta_j) - i b_n \xi_n(kr_j) \pi_n \cos(\theta_j) \right],$$

$$E_{\phi}^{s,j} = -E_0 \frac{kr_j}{\sin(\phi_j)} \sum_{n=1}^{\infty} i^{n+1} \tilde{n} \left[a_n \xi_n'(kr_j) \pi_n \cos(\theta_j) - i b_n \xi_n(kr_j) \tau_n \cos(\theta_j) \right],$$

$$H_r^{s,j} = E_0 \left(\frac{\epsilon}{\mu} \right)^{1/2} \sin(\phi_j) \sum_{n=1}^{\infty} i^{n+1} \tilde{n} b_n \left[\xi_n''(kr_j) + \xi_n(kr_j) \right] P_1^n(\cos(\theta_j)),$$

$$H_\theta^{s,j} = E_0 \frac{kr_j}{\sqrt{\epsilon/\mu}} \sin(\phi_j) \sum_{n=1}^{\infty} i^{n+1} \tilde{n} \left[-ia_n \xi_n'(kr_j) \pi_n \cos(\theta_j) + b_n \xi_n(kr_j) \tau_n \cos(\theta_j) \right],$$

$$H_\phi^{s,j} = E_0 \frac{kr_j}{\sqrt{\epsilon/\mu}} \cos(\phi_j) \sum_{n=1}^{\infty} i^{n+1} \tilde{n} \left[-ia_n \xi_n'(kr_j) \tau_n \cos(\theta_j) + b_n \xi_n(kr_j) \pi_n \cos(\theta_j) \right],$$

где $\tilde{n} = \frac{2n+1}{n(n+1)}$, E_0 – амплитуда падающей плоской волны, π_n и τ_n – функции Лежандра:

$$\pi_n(\cos(\theta)) = \frac{P_1^n(\cos(\theta))}{\sin(\theta)},$$

$$\tau_n(\cos(\theta)) = \frac{dP_1^n(\cos(\theta))}{d\theta},$$

$$P_1^n(\cos(\theta_j)) = -\frac{\sin(\theta) dP_n}{d\cos(\theta)},$$

где $P_n(\cos(\theta))$ – классические полиномы Лежандра.

Функция $\xi_n(kr)$ определена следующим образом, по сути представляющая собой функцией Ханкеля:

$$\xi_n(kr) = kr \left[\psi_n(kr) + i\chi_n(kr) \right],$$

$$\psi_n(kr) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} J_{n+\frac{1}{2}}(kr),$$

$$\chi_n(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} J_{-n-\frac{1}{2}}(kr),$$

где $J_{n+\frac{1}{2}}(kr)$ – классические функции Бесселя полуцелого порядка, $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число.

Коэффициенты рассеяния:

$$a_n = \frac{\psi_n(\alpha) \psi_n'(\beta) - m \psi_n'(\alpha) \psi_n(\beta)}{\xi_n(\alpha) \psi_n'(\beta) - m \xi_n'(\alpha) \psi_n(\beta)},$$

$$b_n = \frac{m \psi_n(\alpha) \psi_n'(\beta) - \psi_n'(\alpha) \psi_n(\beta)}{m \xi_n(\alpha) \psi_n'(\beta) - \xi_n'(\alpha) \psi_n(\beta)},$$

где $\alpha = \pi d/\lambda$ – параметр частицы (единица измерения – метр), $\beta = m\alpha$. Знак апострофа указывает на производную по аргументу, указанному в скобках.

Опорную волну около плоскости регистрации можно представить в следующем виде:

$$E_{x_d}^i = E_0 \exp(-ikR),$$

$$E_{y_d}^i = 0,$$

$$E_{z_i}^i = 0,$$

$$H_{x_d}^i = 0,$$

$$H_{y_d}^i = E_0 \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \exp(-ikR),$$

$$E_{z_i}^i = 0.$$

Общее поле задается в виде:

$$V_w^t = V_w^i + \sum_{j=1}^N U_w^{s,j},$$

где N – общее количество частиц в контрольном объеме, V означает E или H , w означает X , Y или Z в декартовой системе координат, U – компонента E или H рассеянного поля в той же системе.

Интенсивность можно вычислить с помощью вектора Пойнтинга при известном поле V_i :

$$S = \frac{1}{2} \text{Re}(E^t H^{t*}).$$

В этом случае $I = \text{abs}(S)$.

Результаты

Численная реализация математической модели распространения волны через сферическую частицу была реализована с помощью языка программирования Python.

Рассматривалась частица сферической формы диаметром 1 мкм, коэффициент преломления – 1;59. Расположение центральной частицы (0,0,0).

На рис. 2 представлены численные результаты для одной частицы в разных расположениях. Как видно из рисунка, значения интенсивности для второго случая (рис. 2 а) имеют нестандартную форму ввиду того, что значения для интенсивности брались по центру, тогда как сама частица расположена в нижней правой области координатной плоскости.

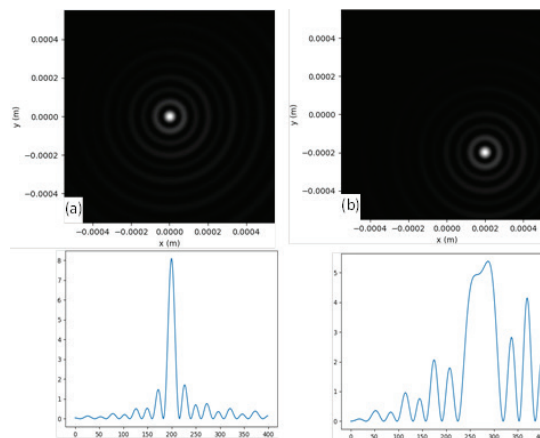


Рис. 2. Голографические изображения и их амплитуды (графики снизу) сферической частицы диаметром 1 мкм: а) расположение частицы (0;0;0); б) расположение частицы (0.0002;0.0002;0)

Fig. 2. Holographic images and their amplitudes (graphics below) of a spherical particle measuring 1 μm in diameter: (a) particle location (0;0;0); (b) particle location (0.0002;0.0002;0)

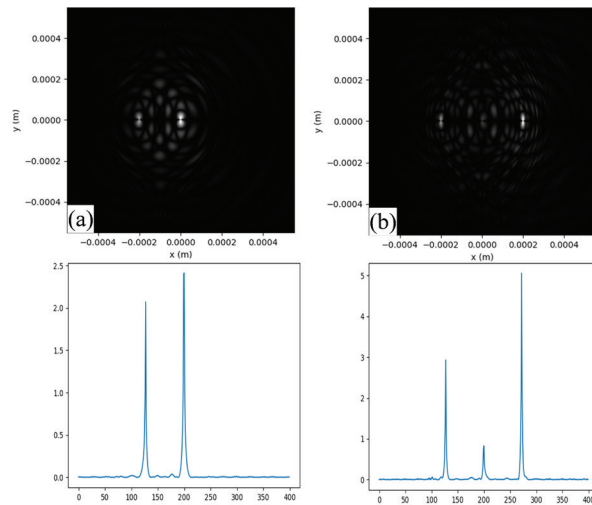


Рис. 3. Голографические изображения и их амплитуды (графики снизу) нескольких сферических частиц с диаметром 1 мкм: а) расположение двух частиц $(-0.0002; 0; 0)$, $(0; 0; 0)$, соответственно; б) расположение трех частиц $(-0.0002; 0; 0)$, $(0; 0; 0)$, $(0.0002, 0, 0)$, соответственно

Fig. 3. Holographic images and their amplitudes (graphics below) of several spherical particles measuring 1 μm in diameter: (a) location of two particles $(-0.0002; 0; 0)$, $(0; 0; 0)$, respectively; (b) location of three particles $(-0.0002; 0; 0)$, $(0; 0; 0)$, $(0.0002, 0, 0)$, respectively

На рис. 3 представлены численные результаты с двумя (рис. 3 а) и с тремя (рис. 3 б) частицами. В силу наложения интерференционных колец, пики интенсивности отличаются друг от друга, в особенности это заметно для случая, представленного на рис. 3 б.

Обсуждение

Полученные численные результаты достаточно хорошо согласуются с литературными данными. Все результаты представлены для случая прямого распространения волны, т. е. часть волны, проходя без взаимодействия с объектом, часть – взаимодействуя, интерферируют между собой на экране, в частности на регистрирующей среде, формируя тем самым голографическое изображение. Задача обратного рассеяния в рамках данной работы не рассматривается. Обратное рассеяние подразумевает восстановление голографических изображений, т. е. самого объекта. Для этого можно применить один из классических способов, основанный на принципе Гюйенса-Френеля.

Следует отметить, что для работы с большим количеством частиц требуется оптимизация алгоритма. Так, например, расчет трех частиц занимает около трех минут.

Также в будущем планируется рассмотреть задачу моделирования распространения волны через сферическую частицу с несколькими оболочками.

Заключение

В рамках данной работы была проведена численная реализация математической модели распространения волны через сферическую частицу на основе обобщенной теории Лоренца-Ми.

Получены голографические изображения одной частицы диаметром 1 мкм. Получены голографические изображения нескольких частиц того же диаметра.

Представленные графики интенсивности показали, что для случая двух и более частиц происходит ослабление центральных пиков.

Л и т е р а т у р а

1. D. Gabor. A new microscope principle // Nature 161. 1948. pp. 777–778.
2. H.-W. Fink, W. Stocker, H. Schmid. Physical Review Letters 65(10), с. 1204-1206 (1990).

3. A. Götzhäuser, B. Völkel, B. Jäger, M. Zharnikov, H. J. Kreuzer, and M. Grunze, J. Vac. Sci. Technol., A 16 (1998) 3025.
4. G.B. Stevens, M. Krüger, T. Latychevskaia, P. Lindner, A. Plückthun, and H.-W. Fink. Individual filamentous phage imaged by electron holography // Eur. Biophys. J. 40 (2011) 1197–1201.
5. Pavel S. Dorozhkin, Artem S. Trifonov and Zhen-Chao Dong. Rectifying Behavior of a Free-Standing Carbon Nanotube Kink-Shaped Heterojunction // Japanese Journal of Applied Physics, Volume 41, Part 2, Number 12A
6. I.-S. Hwang, Che-Cheng Chang, Chien-Hung Lu, Shih-Chin Liu, Yuan-Chih Chang, Ting-Kuo Lee, Horng-Tay Jeng, Hong-Shi Kuo¹, Chun-Yueh Lin, Chia-Seng Chang and Tien T Tsong. Investigation of single-walled carbon nanotubes with a low-energy electron point projection microscope // New Journal of Physics 15(2013) 043015 P. 14.
7. H. Schmid, H.-W. Fink. Carbon nanotubes are coherent electron sources. Carbon nanotubes are coherent electron sources // Applied Physics Letters 70, 2679 (1997).
8. A. Eisele, B. Völkel, M. Grunze, A. Götzhäuser. Nanometer Resolution Holography with the Low Energy Electron Point Source Microscope // Z. Phys. Chem. 222(2008) pp. 779–787.
9. W. Lai, A. Degiovanni, R. Morin. Microscopic observation of weak electric fields // Appl. Phys. Lett. 74 (1999) 618.
10. J.-N. Longchamp, T. Latychevskaia, C. Escher, H.-W. Fink. Low-energy electron holographic imaging of individual tobacco mosaic virions // Appl. Phys. Lett. 107, 133101 (2015).
11. N. V. Egorov, A. G. Karpov, L. I. Antonova, A. G. Fedorov, V. V. Trofimov, and S. R. Antonov. Technique for Investigating the Spatial Structure of Thin Films at a Nanolevel // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2011, Vol. 5, No. 5, pp. 992–995.
12. N. V. Egorov, L. I. Antonova, V. V. Trofimov, and A. Yu. Gileva. Atomic structure probing of thin metal films via vacuum holographic microscopy // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2019, Vol. 13, No. 6, pp. 1267–1271.
13. Гудмен Дж. Введение в Фурье-оптику // Перевод с английского В. Ю. Галицкого, М. П. Головея ; под редакцией Г. И. Косоурова. – Москва : Мир, 1970. – С. 261–274.
14. Gouesbet G., Grehan G. Generalized Lorenz-Mie Theories. Springer International Publishing. 2017. doi: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-46873-0>.
15. F. Slimani, G. Grehan, G. Gouesbet, D. Allano. Nearfield lorenzmie theory and its application to microholography // Applied Optics. 1984. Vol. 23. No. 22. P. 4140. doi: <https://doi.org/10.1364/ao.23.004140>.
16. X. Wu, S. Meunier-Guttin-Cluzel, Yingchun Wu et al. Holography and microholography of particle fields: A numerical standard // Optics Communications. 2012. Vol. 285. No. 1314. P. 3013–3020. doi: <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2012.02.101>.

References

1. Gabor D., (1948). *A new microscope principle*. Nature 161. pp. 777–778.
2. Fink H.-W., Stocker W. and Schmid H., (1990). *Physical Review Letters*. 65(10), pp. 1204–1206.
3. Götzhäuser A., Völkel B., Jäger B., Zharnikov M., Kreuzer H.J. and Grunze M., (1998). *Journal of Vacuum Science and Technology A*, 16 3025.
4. Stevens G.B., Krüger M., Latychevskaia T., Lindner P., Plückthun A., and Fink H.-W. (2011). Individual filamentous phage imaged by electron holography. *European Biophysics Journal*, 40, 1197–1201.
5. Dorozhkin P.A., Trifonov A.S. and Dong Zh.-Ch., (2002). Rectifying Behavior of a Free-Standing Carbon Nanotube Kink-Shaped Heterojunction. *Japanese Journal of Applied Physics*, 41(2), No. 12A.
6. Hwang I.-S., Chang Che-Cheng, Lu Chien-Hung, Liu Shih-Chin, Chang Yuan-Chih, Lee Ting-Kuo, Jeng Horng-Tay, Kuo Hong-Shi, Lin Chun-Yueh, Chang Chia-Seng and Tsong Tien T. (2013). Investigation of single-walled carbon nanotubes with a low-energy electron point projection microscope. *New Journal of Physics*, 15. P. 14.
7. Schmid H. and Fink H.-W. (1997). Carbon nanotubes are coherent electron sources. Carbon nanotubes are coherent electron sources. *Applied Physics Letters*, 70, 2679.

8. Eisele A., Völkel B., Grunze M. and Götzhäuser A., (2008). Nanometer Resolution Holography with the Low Energy Electron Point Source Microscope. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 222, pp. 779–787.
9. Lai W., Degiovanni A. and Morin R., (1999). Microscopic observation of weak electric fields. *Applied Physics Letter*. 74. P. 618.
10. Longchamp J.-N., Latychevskaia T., Escher C., Fink H.-W. (2015). Low-energy electron holographic imaging of individual tobacco mosaic virions. *Applied Physics Letter*, 107, 133101.
11. Egorov N.V., Karpov A.G., Antonova L.I., Fedorov A.G., Trofimov V.V. and Antonov S.R., (2011). Technique for Investigating the Spatial Structure of Thin Films at a Nanolevel. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 5(5), pp. 992–995.
12. Egorov N.V., Antonova L.I., Trofimov V.V. and Gileva A.Yu., (2019). Atomic structure probing of thin metal films via vacuum holographic microscopy. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 13(6), pp. 1267–1271.
13. Goodman J., (1970). *Introduction to Fourier optics*. Translated from English by Galitsky V.Yu. and Golovey M.P., edited by Kosourov G.I. Moscow: Mir, pp. 261–274. (In Russ.)
14. Gouesbet G., Grehan G., (2017). Generalised Lorenz-Mie Theories. *Springer International Publishing*. doi: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-46873-0>
15. Slimani F., Grehan G., Gouesbet G. and Allano D. (1984). Nearfield lorenzmie theory and its application to microholography. *Applied Optics*, 23(22). P. 4140. doi: <https://doi.org/10.1364/ao.23.004140>.
16. Wu X., Meunier-Guttin-Cluzel S., Wu Yingchun, et al. (2012). Holography and microholography of particle fields: A numerical standard. *Optics Communications*, 285(1314). P. 3013–3020. doi: <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2012.02.101>.

ФЕДОРОВ Артур Григорьевич – к. т. н., доцент кафедры теоретической физики ФТИ, СВФУ им. М.К. Аммосова.

E-mail: ag.fedorov@s-vfu.ru

FEDOROV Artur Grigoryevich – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Theoretical Physics, Institute of Physics and Technologies, M.K. Ammosov North-Eastern Federal University.

МИРОНОВ Мичил Петрович – студент 4 курса, группы БА-Ф-19-2 ФТИ, СВФУ им. М.К. Аммосова.

MIRONOV Michil Petrovich – 4th year student, of the Institute of Physics and Technologies M.K. Ammosov North-Eastern Federal University.