

ミー散乱 (V) -数値計算プログラム-

1. 散乱強度の計算式

『ミー散乱 (II)』では、直線偏光の単色平面波（進行方向： z 方向、偏光方向： x 方向、振幅：1、波長： λ ）

$$\mathbf{E}_0 = \mathbf{e}_x e^{ikz} = \mathbf{e}_x e^{ikr \cos \theta} \quad (1)$$

が、原点にある粒子（半径 a ）により散乱される場合の観測方向 (θ, φ) での散乱強度は

$$I(\theta, \varphi) = \cos^2 \varphi I_{\parallel}(\theta) + \sin^2 \varphi I_{\perp}(\theta) \quad (2)$$

$$I_{\parallel}(\theta) = \left(\frac{\lambda}{2\pi r} \right)^2 \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n(\cos \theta) + b_n \tau_n(\cos \theta)) \right|^2 \quad (3)$$

$$I_{\perp}(\theta) = \left(\frac{\lambda}{2\pi r} \right)^2 \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n(\cos \theta) + b_n \pi_n(\cos \theta)) \right|^2 \quad (4)$$

と与えられることを示した [1]。ここで

$$a_n = \frac{\psi_n(m\alpha)\psi'_n(\alpha) - m\psi_n(\alpha)\psi'_n(m\alpha)}{\psi_n(m\alpha)\xi'_n(\alpha) - m\xi_n(\alpha)\psi'_n(m\alpha)} \quad (5)$$

$$b_n = \frac{m\psi_n(m\alpha)\psi'_n(\alpha) - \psi_n(\alpha)\psi'_n(m\alpha)}{m\psi_n(m\alpha)\xi'_n(\alpha) - \xi_n(\alpha)\psi'_n(m\alpha)} \quad (6)$$

$$\alpha = ka = \frac{2\pi a}{\lambda} \quad (7)$$

$$m = \frac{k_p}{k} = \frac{n_p}{n} \quad (8)$$

$$\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho) \quad (9)$$

$$\xi_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho) \quad (10)$$

$$\pi_n(\cos \theta) = \frac{P_n^1(\cos \theta)}{\sin \theta} \quad (11)$$

$$\tau_n(\cos \theta) = \frac{dP_n^1(\cos \theta)}{d\theta} \quad (12)$$

であり、式 (8) の m は相対屈折率、 n, n_p はそれぞれ媒質および粒子の屈折率である。

ミー散乱における散乱強度に対する定量的な値を求めるためには、式 (3)、(4) における散乱係数 a_n, b_n および角度関数 π_n, τ_n を数値的に求めることが必要となる。この計算のための Python プログラムとして、BHMIE、PyMieScatt、miepython [2-4] などが提供されている。以下では、BHMIE プログラムにおける数値計算手法の概略について説明する。

2. BHMIE における数値計算手法 [2, 5]

BHMIE においては、散乱係数 a_n, b_n の計算に際して、 ψ_n に対する対数微分

$$D_n(x) = \frac{d}{dx} \ln \psi_n(x) = \frac{\psi'_n(x)}{\psi_n(x)} \quad (13)$$

を導入する。式 (5)、(6) の左辺の分母・分子を $\psi_n(m\alpha)$ で割れば

$$a_n = \frac{\psi'_n(\alpha) - m\psi_n(\alpha)D_n(m\alpha)}{\xi'_n(\alpha) - m\xi_n(\alpha)D_n(m\alpha)} \quad (14)$$

$$b_n = \frac{m\psi'_n(\alpha) - \psi_n(\alpha)D_n(m\alpha)}{m\xi'_n(\alpha) - \xi_n(\alpha)D_n(m\alpha)} \quad (15)$$

となる (注 1)。ここで、リッカチ・ベッセル関数に対する漸化式 [6]

$$\psi'_n(z) = \psi_{n-1}(z) - \frac{n\psi_n(z)}{z} \quad (16)$$

$$\xi'_n(z) = \xi_{n-1}(z) - \frac{n\xi_n(z)}{z} \quad (17)$$

を用いれば

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{\left(\psi_{n-1}(\alpha) - \frac{n\psi_n(\alpha)}{\alpha}\right) - m\psi_n(\alpha)D_n(m\alpha)}{\left(\xi_{n-1}(\alpha) - \frac{n\xi_n(\alpha)}{\alpha}\right) - m\xi_n(\alpha)D_n(m\alpha)} \\ &= \frac{\left(mD_n(m\alpha) + \frac{n}{\alpha}\right)\psi_n(\alpha) - \psi_{n-1}(\alpha)}{\left(mD_n(m\alpha) + \frac{n}{\alpha}\right)\xi_n(\alpha) - \xi_{n-1}(\alpha)} \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{m\left(\psi_{n-1}(\alpha) - \frac{n\psi_n(\alpha)}{\alpha}\right) - \psi_n(\alpha)D_n(m\alpha)}{m\left(\xi_{n-1}(\alpha) - \frac{n\xi_n(\alpha)}{\alpha}\right) - \xi_n(\alpha)D_n(m\alpha)} \\ &= \frac{\left(D_n(m\alpha) + \frac{n}{\alpha}\right)\psi_n(\alpha) - m\psi_{n-1}(\alpha)}{\left(D_n(m\alpha) + \frac{n}{\alpha}\right)\xi_n(\alpha) - m\xi_{n-1}(\alpha)} \end{aligned} \quad (19)$$

と表すことができる。

ここで

$$\begin{aligned} \xi_n(z) &= zh_n^{(1)}(z) \\ &= z(j_n(z) + in_l(z)) \end{aligned}$$

であるので

$$\chi_n(z) = -zn_l(z) \quad (20)$$

と定義すれば

$$\xi_n(z) = \psi_n(z) - i\chi_n(z) \quad (21)$$

となる。式 (18)、(19)、(20) における ψ_n , ξ_n , χ_n , D_n に対しては以下の漸化式が成り立つ [6]。

$$\psi_{n+1}(z) = \frac{2n+1}{z}\psi_n(z) - \psi_{n-1}(z) \quad (22)$$

$$\xi_{n+1}(z) = \frac{2n+1}{z}\xi_n(z) - \xi_{n-1}(z) \quad (23)$$

$$\chi_{n+1}(z) = \frac{2n+1}{z}\chi_n(z) - \chi_{n-1}(z) \quad (24)$$

$$D_{n-1}(z) = \frac{n}{z} - \frac{1}{D_n(z) + \frac{n}{z}} \quad (25)$$

BHMIE では、式 (22)-(24) の出発点を

$$\psi_{-1}(z) = z\sqrt{\frac{\pi}{2z}}J_{-1/2}(z) = z\sqrt{\frac{\pi}{2z}}\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos z = \cos z \quad (26)$$

$$\psi_0(z) = z\sqrt{\frac{\pi}{2z}}J_{1/2}(z) = z\sqrt{\frac{\pi}{2z}}\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\sin z = \sin z \quad (27)$$

$$\chi_{-1}(z) = -z\sqrt{\frac{\pi}{2z}}Y_{-1/2}(z) = -z\sqrt{\frac{\pi}{2z}}\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\sin z = -\sin z \quad (28)$$

$$\chi_0(z) = -z\sqrt{\frac{\pi}{2z}}Y_{1/2}(z) = z\sqrt{\frac{\pi}{2z}}\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos z = \cos z \quad (29)$$

として、 n の増加する向きに式(22)-(24)を計算する。式(3)、(4)の n についての和の上限 NSTOP としては

$$\alpha + 4\alpha^{1/3} + 2 \quad (30)$$

に最も近い整数と定めればよいことが示されている [5, 8]。

一方、式(18)、(19)における $D_n(m\alpha)$ に関しては、誤差を低減するために $D_{\text{NMX}}(m\alpha)$ から n の値が減少する向きに計算する。式(25)より $n \gg z$ に対しては

$$\begin{aligned} D_{n-1}(z) &= \frac{n}{z} - \frac{1}{D_n(z) + \frac{n}{z}} \\ &\approx \frac{n}{z} \end{aligned} \quad (31)$$

と近似できるので、 $D_{n-1}(z)$ は $D_n(z) = 0$ とした式(31)で近似することができる。ここで、 $n \gg z$ に対応する n の値を NMX とすれば、NMX は NSTOP、 $|m\alpha|$ に比べて十分に大きな値であり、BHMIE では

$$\text{NMX} = \text{Max}(\text{NSTOP}, |m\alpha|) + 15 \quad (32)$$

と設定している。この NMX に対して $D_{\text{NMX}} = (0.0, i0.0)$ として、式(25)を n の減少する向きに計算している [5]。式(25)、(31)、(32)の漸化式による ψ_n に対する対数微分を Python の科学技術計算パッケージ scipy を用いて求めた値と比較したものを図1に示す ($\alpha = 3.0$, $m = 1.33 + i10^{-8}$, NSTOP = 10, NMX = 25 の場合)。

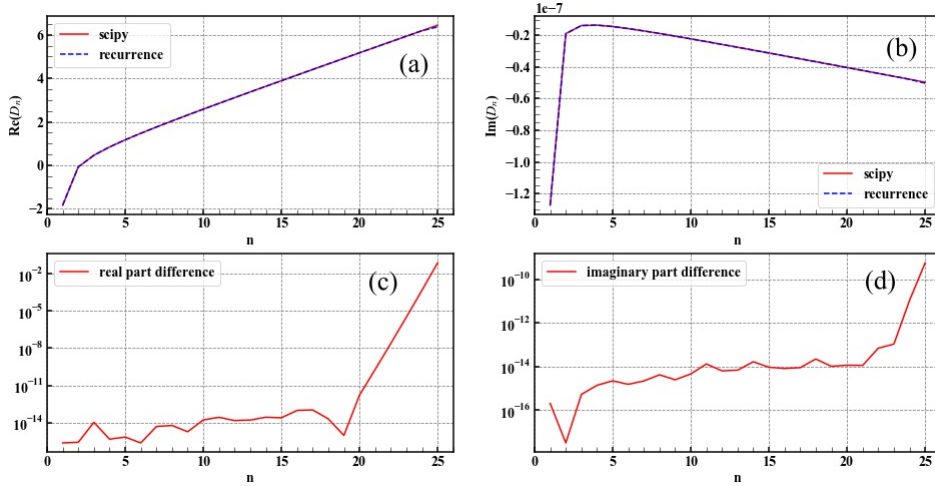


図1 ψ_n に対する対数微分 D_n の n 依存性：(a) 実数部、(b) 虚数部、(c) 実数部の差、(d) 虚数部の差

$n \leq \text{NSTOP} = 10$ では、scipy と漸化式による ψ_n に対する対数微分の差は 10^{-10} 以下である。このことから、 $\text{NMX} = \text{NSTOP} + 15$ として $D_{\text{NMX}} = (0.0, i0.0)$ から n の減少する向きに順次計算する方法は妥当であると言える [6]。

散乱角度 θ に関する $\pi_n(\cos \theta)$, $\tau_n(\cos \theta)$ については、 $x = \cos \theta$ として以下の漸化式が成り立つ [7]。

$$\pi_n(x) = \frac{2n-1}{n-1}x\pi_{n-1}(x) - \frac{n}{n-1}\pi_{n-2}(x) \quad (33)$$

$$\tau_n(x) = nx\pi_n(x) - (n+1)\pi_{n-1}(x) \quad (34)$$

ここで

$$\pi_0(x) = 0 \quad \pi_1(x) = 1 \quad (35)$$

となるので、式(35)を出発点として n の増加する向きに順次計算する。

BHMIE の Python によるプログラムおよび計算結果を『ミー散乱における散乱強度の数値計算』[8]

に示す (注 2)。

(注 1) 本資料では、文献 [9] の定義を用いて散乱係数 a_n, b_n を定義しているため、文献 [2, 5] などの散乱係数の定義と a_n, b_n が逆になっていることに注意が必要である。

(注 2) BHMIE プログラムは 1983 年時点のコンピューターの性能をもとにコーディングされたものであるので、現時点 (2020 年) のコンピューターのメモリー、計算速度にもとづいて考えると対数微分や漸化式を用いない方法によるコーディングが可能となる。Python では、scipy を用いて第 1 種球面ベッセル関数、第 1 種ハンケル関数とその微分を直接定義することで散乱係数 a_n, b_n を求めている場合もある [10]。

参考文献

- 1) 『ミー散乱 (II)』
(https://ieyasu03.web.fc2.com/EM/EM_11_Mie_2.html)
- 2) BHMIE
(<http://scatterlib.wdfiles.com/local--files/codes/bhmie.py>)
- 3) PyMieScatt
(<https://pymiescatt.readthedocs.io/en/latest/>)
- 4) miepython
(<https://miepython.readthedocs.io/en/latest/index.html>)
- 5) C. F. Bohren and D. R. Huffman : Absorption and Scattering of Light by Small Particles
p.126 Wiley-VCH (2012/04/27)
- 6) 『第一種リッカチ・ベッセル関数の対数微分』
(<https://ieyasu03.web.fc2.com/Computer/Mie/03-D-function.html>)
- 7) 『ルジャンドル多項式およびルジャンドル陪多項式の漸化式』
(https://ieyasu03.web.fc2.com/PhysicsMath/52_Legendre_F.html)
- 8) 『ミー散乱における散乱強度の数値計算』
(https://ieyasu03.web.fc2.com/Computer/Mie/01-MieScattering_1.html)
- 9) 松山 達 : 『ミー散乱理論の導出』 J. Soc. Powder Technol., Japan, **43**, 115-124(2006)
(https://www.jstage.jst.go.jp/article/sptj1978/43/2/43_2_115/_article/-char/ja/)
- 10) 梶川 浩太郎、岡本 隆之 : 『Python を使った光電磁場解析』 p.48
株式会社 コロナ社 (2019/08/08)