計算数理工学論文集 Vol. 22 (2022 年 12 月)，論文 No. 04-221216 JASCOME

横波ベクトル場の点状散乱体による散乱問題の近似解法
– 定式化 –

APPROXIMATE SOLUTION OF SCATTERING PROBLEM OF TRANSVERSE WAVE VECTOR FIELDS BY POINT-LIKE SCATTERERS
– FORMULATION –

植田　毅 [1)]

Tsuyoshi UETA

1) 東京慈恵会医科大学物理学研究室　(〒 182-8570　東京都調布市国領町 8-3-1,　E-mail: tsuyoshi_ueta@jikei.ac.jp)

So far, an approximate solution of Dyson's equation for scattering problems of electron waves and vector fields in TM mode, so-called scalar field, by point-like scatterers has been developed and applied to various systems with remarkable results. However, it has never been realized to deal with the scattering problem of the TE mode of a vector field by point-like scatterers, which is essentially a vector field problem, by a simple approximate solution method. In this paper, we extend the formulation of the approximate solution for the scattering problem by point-like scatterers to the case of vector fields.

Key Words: Point-like Scatterers, Scattering Problem, Dyson's Equation, Approximate Solution, Transverse Vector Field

1. はじめに

半導体，絶縁体のヘテロ界面のバリスティクな２次元電子系に導入した列状，格子状アンチドット [(1)]，不純物の存在により普遍的コンダクタンスのゆらぎを示す拡散的伝導をする電子系 [(2)]，構造色を呈する羽毛，昆虫の表皮などスポンジ状の光学素材 [(3, 4, 5)]，消音用のポーラスな音響材料 [(6, 7)] は小さな散乱体が多数存在する散乱問題となる。これらの問題では波のコヒーレンスが現象の重要な因子となっており，多数存在する散乱体について統計平均を取るなどのコヒーレントポテンシャル近似 [(8)] は用いることができない。多数存在する散乱体の配置の状態について支配方程式を解く必要があり，困難なもしくは非常に計算コストのかかる問題の一つである。

この種の問題の中で散乱体の散乱半径が小さな場合について，散乱体を点状散乱体と近似し，容易に取り扱える近似的計算手法が開発された [(1)]。この計算手法では，散乱問題をダイソン方程式を用いて積分方程式を解く際，点状散乱体をデルタ関数と近似している。有限要素法で散乱体を１ノードで表したものと似た扱いであるが，グリーン関数を用いた積分方程式法では，境界のない開放系の計算においては散乱体の存在する点の波動関数のみが未知変数となり圧倒的に未知変数を少なくすることができる。また，境界がある場合の開放系では境界要素法との組み合わせへ容易に拡張できる。実際，この手法は散乱ポテンシャルがある場合の境界要素法として開発されている [(1, 9)]。しかし，グリーン関数を用いた積分方程式であるため，散乱体のある位置の波動関数に関する自己無撞着な方程式では，散乱ポテンシャルをデルタ関数として計算するとグリーン関数の対角成分が発散する。実際の散乱ポテンシャルは有限の大きさを持つため，その積分を正しく行えば発散しない。そこで，開発された近似解法では，グリーン関数の対角成分については近似を上げて積分計算を行い，散乱体の実行散乱半径をパラメータとして導入している。

この近似的な解法は，垂直に一様磁場のかかった２次元電子系のアンチドットアレーにおける飛び石軌道（runaway trajectory）の存在の証明 [(1)]，点状磁性散乱体による電子スピンの反転現象を見出す [(9, 10)] など成功を収めている。

磁性不純物の問題では電子スピンの自由度のため波動関数が２成分のスピノルの方程式となっているが，スカラー場のグリーン関数を用いる本質的にスカラー場の定式化であり，テンソルグリーン関数を用いる必要がある本質的にベクトル場の散乱問題は取り扱えなかった。すなわち，電磁場の問題では TM モードは取り扱えるが，TE モードは取り扱え

2022 年 10 月 7 日受付，2022 年 11 月 25 日受理

なかった。

本論文では点状散乱体による散乱問題の定式化を横波ベクトル場へ拡張する。

2. 支配方程式とベクトル場の積分表現

電磁場を例にとり，横波ベクトル場の積分表現を導出する。透磁率は真空中の値 μ_0 で，比誘電率が $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ のように空間的に変化する 3 次元空間を考える。この空間に電流が存在しない場合，2 つのマクスウェル方程式を統合した電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ についての方程式は

$$\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{E} = -\frac{\varepsilon(\boldsymbol{r})}{c_0^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{E} \tag{1}$$

と表される。ここで，c_0 は真空中での光速である。

電磁場の場合，磁場のみの方程式とすることも可能であり，磁場 $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$ の満たす方程式は

$$\boldsymbol{\nabla}\times\left(\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{r})}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{H}\right) = -\frac{1}{c_0^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{H} \tag{2}$$

となる。式 (2) は式 (1) と異なり，比誘電率の空間微分を含む。誘電体の板の場合のように，比誘電率が矩形状に変化するとき，ステップ関数の微分，すなわちデルタ関数が現れ，計算精度を悪くする。したがって，本論文では電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ についての方程式を用いて定式化する。

定常問題の支配方程式は角周波数を ω として，

$$\left(-\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times+\frac{\omega^2}{c_0^2}\varepsilon(\boldsymbol{r})\right)\boldsymbol{E} = 0 \tag{3}$$

$$\begin{aligned}\left(-\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times+\frac{\omega^2}{c_0^2}\right)\boldsymbol{E} &= -\frac{\omega^2}{c_0^2}\left(\varepsilon(\boldsymbol{r})-1\right)\boldsymbol{E} && (4)\\ &\equiv V(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E} && (5)\end{aligned}$$

となる。

方程式 (5) の解は一般に

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r}) - \int V(\boldsymbol{r}')\mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \tag{6}$$

と書ける。ここで，$\boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r})$ は $V(\boldsymbol{r})=0$ の場合の解であり，波数 $k\equiv\omega/c_0$ と定義した。

また，テンソルグリーン関数 $\mathscr{G}$ は以下のように与えられる [11]。

$$\mathscr{G}_{jl}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) \equiv \left(\delta_{jl}+\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_l}\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) \tag{7}$$

ここで，$j,l=x,y,z$ であり，また，$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)$ は

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2+k^2\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) = -\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{8}$$

を満たすヘルムホルツ方程式のグリーン関数である。

3. 点状散乱体

光速が c_0 の媒体で満たされた空間内の点 $\boldsymbol{R}$ に内部の光速が $c(\boldsymbol{R})$ の点状散乱体が存在するとする。点 $\boldsymbol{R}$ を中心とする点状散乱体を半径 a の円形領域での光速を c として

$$v_{\boldsymbol{R}}(\boldsymbol{r}) = \left\{1-\left(\frac{c_0}{c(\boldsymbol{R})}\right)^2\right\}\pi(ka)^2\frac{1}{\pi a^2}\Theta\left(a-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}|\right) \tag{9}$$

と表す。ここで，$\Theta(x)$ はヘヴィサイドの階段関数である。

$$\mathscr{V}(\boldsymbol{R}) \equiv \left\{1-\left(\frac{c_0}{c(\boldsymbol{R})}\right)^2\right\}\pi(ka)^2 \tag{10}$$

がこの散乱体の散乱能となる。

N 個の散乱体がある場合，n 番目の散乱体の位置ベクトルを $\boldsymbol{R}_n$ として，全体の散乱ポテンシャルは

$$\begin{aligned}V(\boldsymbol{r}) &= \sum_{n=1}^{N} v_{\boldsymbol{R}_n}(\boldsymbol{r})\\ &= \sum_{n=1}^{N}\mathscr{V}(\boldsymbol{R}_n)\frac{1}{\pi a^2}\Theta\left(a-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_n|\right) && (11)\end{aligned}$$

と書ける。

境界のない開放系で，入射波 $\boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r})$ がある場合の電場は式 (6) で与えられる。散乱ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ は式 (11) で与えられるから

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) &= \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r}) - \int\mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)\sum_{n=1}^{N}\mathscr{V}(\boldsymbol{R}_n)\\ &\qquad\times\frac{1}{\pi a^2}\Theta\left(a-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}_n|\right)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'\\ &= \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r}) - \sum_{n=1}^{N}\mathscr{V}(\boldsymbol{R}_n)\int\mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)\\ &\qquad\times\frac{1}{\pi a^2}\Theta\left(a-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}_n|\right)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' && (12)\end{aligned}$$

となる [1, 9]。

散乱体の有効散乱半径 a が十分小さいとして，$\mathscr{V}(\boldsymbol{R}_n)$ を一定に保ったまま，$a\to0$ とすると，$\frac{1}{\pi a^2}\Theta\left(a-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_n|\right)\to\delta\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_n\right)$ となるから

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r}) - \sum_{n=1}^{N}\mathscr{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}_n;k)\mathscr{V}(\boldsymbol{R}_n)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_n) \tag{13}$$

を得る。

点状散乱体の位置 $\boldsymbol{R}_m$ の電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)$ に対する自己無撞着な方程式を得るために $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{R}_m$ とすると，式 (13) の右辺の和の中に $\mathscr{G}(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{R}_n;k)$ が現れるが，$\mathscr{G}(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{R}_m;k)$ は発散する。しかし，実際には，式 (12) の右辺は発散しないため，$a\to0$ の極限を取る前の積分

$$\int\mathscr{G}(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{r}';k)\frac{1}{\pi a^2}\Theta\left(a-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}_m|\right)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \tag{14}$$

をより正確に評価する必要がある。

定式化をこれより先に進めるためには，具体的な系を想定する必要がある。平行に並んだ円柱状誘電体散乱体と球状誘電体散乱体について具体的な定式化を行う。

4. 平行に並んだ円柱状誘電体散乱体

散乱体として，軸が z 軸方向に向いた無限に長い半径 a の誘電体円柱が複数並んだ系を考える。この系では，電磁波が z 成分のみの TM モードの場合，本質的にスカラー場の問題に帰着するため，電磁波が x, y 成分のみを持つ（$E_z=0$ の）TE モードを考える。入射波が x 軸方向の波数 $k_x>0$ で入射するものとする。電場の成分は，入射波の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ に

対して，横波の条件 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{E}=0$ を満たすように決定される。入射波が誘電体円柱（z 軸）に対して，波数 k_z で斜めに入射する場合，電場の z 依存性を変数分離し，$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{E}(x,y)e^{ik_z z}$ と表す。x-y 平面内の波数 $k_\perp \equiv \sqrt{k_x^2+k_y^2}=\sqrt{k^2-k_z^2}$ を定義すると，波数 $k_\perp$ の波が入射する 2 次元問題となる。この場合には，グリーン関数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)$ には

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)=\frac{i}{4}H_0^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right) \tag{15}$$

を用いる。ここで，$H_0^{(1)}$ は 0 次第 1 種ハンケル関数である。

4.1. テンソルグリーン関数

テンソルグリーン関数 $\mathscr{G}$ は式 (7) で与えられるから

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{xx} &= \left(1+\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) \qquad (16)\\
&= \frac{i}{8k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\\
&\quad\times\Big[k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\left\{(x-x')^2+2(y-y')^2\right\}H_0^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\\
&\quad -2(y-y')^2H_1^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\\
&\quad +k(x-x')^2|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|H_2^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\Big] \qquad (17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{yy} &= \left(1+\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) \qquad (18)\\
&= \frac{i}{8k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\\
&\quad\times\Big[k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\left\{2(x-x')^2+(y-y')^2\right\}H_0^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\\
&\quad -2(x-x')^2H_1^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\\
&\quad +k(y-y')^2|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|H_2^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\Big] \qquad (19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{xy} &= \mathscr{G}_{yx}\\
&= \frac{1}{k^2}\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k) \qquad (20)\\
&= -\frac{i(x-x')(y-y')}{8k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\\
&\quad\times\Big\{k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|H_0^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\\
&\quad -2H_1^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\\
&\quad -k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|H_2^{(1)}\left(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\right)\Big\}. \qquad (21)
\end{aligned}$$

ここで，$H_1^{(1)}$, $H_2^{(1)}$ はそれぞれ 1 次, 2 次の第 1 種ハンケル関数である。

4.2. $\mathscr{G}(\boldsymbol{R}_n,\boldsymbol{R}_n;k)$ の計算

式 (14) を $\mathscr{G}_{xx}$, $\mathscr{G}_{yy}$, $\mathscr{G}_{xy}$ に対して，散乱体の半径 a が小さいとして近似的に評価する。

$\mathscr{G}_{xx}$ を評価する。点状散乱体内でベクトル場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')$ は変化しないとして，積分の外に出し，また，

$$\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}_m=r(\cos\theta,\sin\theta)$$

で定義した極座標を用いて表すと

$$\begin{aligned}
&\int\mathscr{G}_{xx}(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{r}';k)\frac{1}{\pi a^2}\Theta\left(a-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}_m|\right)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'\\
&\simeq \frac{1}{\pi a^2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int\mathscr{G}_{xx}(k|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}_m|)\Theta(a-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}_m|)d\boldsymbol{r}'\\
&= \frac{1}{\pi a^2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\int_0^{2\pi}\mathscr{G}_{xx}(r,\theta;k)rdrd\theta\\
&= \frac{1}{\pi a^2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\int_0^{2\pi}\frac{i}{8}\Big[\left(1+\sin^2\theta\right)H_0^{(1)}(kr)\\
&\qquad -2\frac{1}{kr}\sin^2\theta H_1^{(1)}(kr)+\cos^2\theta H_2^{(1)}(kr)\Big]rdrd\theta\\
&= \frac{1}{\pi a^2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\frac{i}{4}\pi H_0^{(1)}(kr)\,rdr\\
&\approx \frac{i}{4a^2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\left\{1+i\frac{2}{\pi}\left(\ln r+\ln k+\gamma-\ln 2\right)\right\}rdr\\
&= -\frac{1}{4}\left(2\ln\frac{ka}{2}+2\gamma-1-i\pi\right)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m) \qquad (22)
\end{aligned}$$

のように評価できる。ここで，γ は Euler 定数である。また，最後から 3 行目から 2 行目への変形において

$$H_0^{(1)}(z)\approx 1+i\frac{2}{\pi}\left(\ln z+\gamma-\ln 2\right) \tag{23}$$

なる展開を用いた [12]。

この結果は方向に依存しておらず，$\mathscr{G}_{yy}$ に対する結果も同じになる。したがって，

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{xx}(\boldsymbol{R}_n,\boldsymbol{R}_n;k) &= \mathscr{G}_{yy}(\boldsymbol{R}_n,\boldsymbol{R}_n;k)\\
&\simeq -\frac{1}{4}\left(2\ln\frac{ka}{2}+2\gamma-1-i\pi\right) \qquad (24)
\end{aligned}$$

とすればよいことが分かる。

同様に，$\mathscr{G}_{xy}$ の場合は

$$\begin{aligned}
&\int\mathscr{G}_{xy}(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{r}';k)\frac{1}{\pi a^2}\Theta\left(a-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}_m|\right)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'\\
&\simeq \frac{1}{\pi a^2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\int_0^{2\pi}-\frac{i\cos\theta\sin\theta}{8}\\
&\times\left\{H_0^{(1)}(kr)-\frac{2}{kr}H_1^{(1)}(kr)-H_2^{(1)}(kr)\right\}rdrd\theta\\
&= 0 \qquad (25)
\end{aligned}$$

と評価される。したがって，

$$\mathscr{G}_{xy}(\boldsymbol{R}_n,\boldsymbol{R}_n;k)=\mathscr{G}_{yx}(\boldsymbol{R}_n,\boldsymbol{R}_n;k)=0 \tag{26}$$

とすればよい。

以上により，円柱状誘電体散乱体が平行に並んだ場合の定式化が完了した。

4.3. 自己無撞着方程式

まとめると，点状散乱体の位置 $\{\boldsymbol{R}_n\}$ のベクトル場 $\{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_n)\}$ を求めるための自己無撞着方程式は以下のように与えられる。

$$\begin{aligned}
E_j(\boldsymbol{R}_m) &= E_{0j}(\boldsymbol{R}_m)\\
&\quad -\sum_{n=1}^{N}\sum_{l=x,y}\mathscr{G}_{jl}(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{R}_n;k)\mathscr{V}(\boldsymbol{R}_n)E_l(\boldsymbol{R}_n) \qquad (27)
\end{aligned}$$

$$\mathscr{G}_{jl}(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{R}_n;k)\equiv$$

$$\begin{cases}\left(\delta_{jl}+\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{R}_{mj}\partial \boldsymbol{R}_{ml}}\right)G(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{R}_n;k) & m\neq n\\ -\frac{1}{4}\left(2\ln\frac{ka}{2}+2\gamma-1-i\pi\right)\delta_{jl} & m=n\end{cases} \tag{28}$$

$$G(\boldsymbol{R}_m,\boldsymbol{R}_n;k)\equiv\frac{i}{4}H_0^{(1)}\left(k|\boldsymbol{R}_m-\boldsymbol{R}_n|\right) \tag{29}$$

$$j,l=x,y,\quad m,n=1,2,\cdots,N$$

5. 球状誘電体状散乱体

散乱体として，半径 a の誘電体球が複数並んだ系を考える。入射波が x 軸方向の波数 $k_x > 0$ で入射するものとする。電場の成分は，入射波の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ に対して，横波の条件 $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{E} = 0$ を満たすように決定される。この問題のグリーン関数 $G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k)$ は

$$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; k) = \frac{1}{4\pi|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \exp\left(ik\left|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\right|\right) \tag{30}$$

である。

5.1. テンソルグリーン関数

テンソルグリーン関数 $\mathscr{G}$ は式 (7) で与えられるから

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{xx} &= \frac{e^{ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|}}{4\pi k^2\left|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\right|^5} \\
&\quad \times \left[(x-x')^2\left\{k^2\left((y-y')^2 + (z-z')^2\right)\right.\right. \\
&\qquad\qquad \left. -2ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| + 2\right\} \\
&\quad + \left((y-y')^2 + (z-z')^2\right)\left\{k^2\left((y-y')^2 + (z-z')^2\right)\right. \\
&\qquad\qquad \left.\left. +ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| - 1\right\}\right]
\end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{yy} &= \frac{e^{ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|}}{4\pi k^2\left|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\right|^5} \\
&\quad \times \left[k^2(x-x')^4\right. \\
&\quad +(x-x')^2\left\{k^2\left((y-y')^2 + 2(z-z')^2\right)\right. \\
&\qquad\qquad \left. +ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| - 1\right\} \\
&\quad +(y-y')^2\left\{k^2(z-z')^2 - 2ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| + 2\right\} \\
&\quad \left. +(z-z')^2\left\{k^2(z-z')^2 + ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| - 1\right\}\right]
\end{aligned} \tag{32}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{zz} &= \frac{e^{ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|}}{4\pi k^2\left|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\right|^5} \\
&\quad \times \left[k^2(x-x')^4 + (x-x')^2\right. \\
&\quad \times \left\{k^2\left(2(y-y')^2 + (z-z')^2\right) + ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| - 1\right\} \\
&\quad +(y-y')^2\left\{k^2(z-z')^2 + ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| - 1\right\} \\
&\quad \left. +k^2(y-y')^4 + 2(z-z')^2\left\{1 - ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|\right\}\right]
\end{aligned} \tag{33}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{xy} &= \mathscr{G}_{yx} \\
&= \frac{e^{ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|}}{4\pi k^2\left|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\right|^5} \\
&\quad \times(x-x')(y-y') \\
&\quad \times\left\{k^2\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right)^2 + 3ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| - 3\right\}
\end{aligned} \tag{34}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{xz} &= \mathscr{G}_{zx} \\
&= \frac{e^{ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|}}{4\pi k^2\left|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\right|^5} \\
&\quad \times(x-x')(z-z') \\
&\quad \times\left\{k^2\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right)^2 + 3ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| - 3\right\}
\end{aligned} \tag{35}$$

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{yz} &= \mathscr{G}_{zy} \\
&= \frac{e^{ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|}}{4\pi k^2\left|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\right|^5} \\
&\quad \times(y-y')(z-z') \\
&\quad \times\left\{k^2\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right)^2 + 3ik\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right| - 3\right\}
\end{aligned} \tag{36}$$

5.2. $\mathscr{G}(\boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{R}_n; k)$ の計算

式 (14) を $\mathscr{G}_{xx}$, $\mathscr{G}_{yy}$, $\mathscr{G}_{zz}$, $\mathscr{G}_{xy}$, $\mathscr{G}_{xz}$, $\mathscr{G}_{yz}$ に対して，散乱体の半径 a が小さいとして近似的に評価する。

点状散乱体内でベクトル場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')$ は変化しないとして，積分の外に出し，また，

$$\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m = r(\cos\phi\sin\theta, \sin\phi\sin\theta, \cos\theta)$$

で定義した極座標を用いる。

$\mathscr{G}_{xx}$ は

$$\begin{aligned}
&\int \mathscr{G}_{xx}(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{r}'; k)\frac{3}{4\pi a^3}\Theta\left(a - |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m|\right)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \\
&\simeq \frac{3}{4\pi a^3}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int \mathscr{G}_{xx}(k|\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m|)\Theta(a - |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m|)d\boldsymbol{r}' \\
&= \frac{3}{4\pi a^3}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\mathscr{G}_{xx}(r,\phi,\theta;k)r^2\sin\theta drd\phi d\theta \\
&= \frac{3}{4\pi a^3}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{e^{ikr}}{32\pi k^2r^3} \\
&\times\left\{k^2r^2\cos 2(\theta+\phi) + \left(k^2r^2 + 3ikr - 3\right)\cos 2(\theta-\phi)\right. \\
&\qquad + 2\left(k^2r^2 + 3ikr - 3\right)\cos 2\theta \\
&\qquad - 2k^2r^2\cos 2\phi + 6k^2r^2 \\
&\qquad + 3ikr\cos 2(\theta+\phi) - 6ikr\cos 2\phi \\
&\qquad \left. +2ikr - 3\cos 2(\theta+\phi) + 6\cos 2\phi - 2\right\} \\
&\qquad\quad \times r^2\sin\theta drd\phi d\theta \\
&= \frac{3}{4\pi a^3}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\frac{2}{3}re^{ikr}dr \\
&= \frac{-1 + e^{ika}(1 - ika)}{2\pi a(ka)^2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)
\end{aligned} \tag{37}$$

のように評価できる。この結果は方向に依存しておらず，$\mathscr{G}_{yy}$, $\mathscr{G}_{zz}$ に対する結果も同じになる。したがって，

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{xx}(\boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{R}_n; k) &= \mathscr{G}_{yy}(\boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{R}_n; k) \\
&= \mathscr{G}_{zz}(\boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{R}_n; k) \\
&\simeq \frac{-1 + e^{ika}(1 - ika)}{2\pi a(ka)^2} && (38) \\
&\approx \frac{1}{4\pi a}\left(1 + \frac{2}{3}i(ka) - \frac{1}{4}(ka)^2\right) && (39)
\end{aligned}$$

とすればよい。

同様に $\mathscr{G}_{xy}$ を評価すると

$$\begin{aligned}
&\int \mathscr{G}_{xy}(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{r}'; k)\frac{3}{4\pi a^3}\Theta\left(a - |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}_m|\right)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \\
&\simeq \frac{3}{4\pi a^3}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\mathscr{G}_{xy}(r,\phi,\theta;k)r^2\sin\theta drd\phi d\theta \\
&= \frac{3}{4\pi a^3}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_m)\int_0^a\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \\
&\qquad \times\frac{e^{ikr}}{4\pi k^2r^3}\left(-k^2r^2 - 3ikr + 3\right)\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi \\
&\qquad\quad \times r^2\sin\theta drd\phi d\theta \\
&= 0
\end{aligned} \tag{40}$$

となる。この結果は方向に寄らないため，

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{ij}(\boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{R}_n; k) &= 0 \\
i \neq j, &\qquad (i, j = x, y, z)
\end{aligned} \tag{41}$$

を得る。

以上により，球状誘電体状散乱体の場合の定式化が完了した。

5.3. 自己無撞着方程式

まとめると，点状散乱体の位置 $\{\boldsymbol{R}_n\}$ のベクトル場 $\{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_n)\}$ を求めるための自己無撞着方程式は以下のように与えられる。

$$E_j(\boldsymbol{R}_m) = E_{0j}(\boldsymbol{R}_m) - \sum_{n=1}^{N} \sum_{l=x,y,z} \mathscr{G}_{jl}(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{R}_n; k)\mathscr{V}(\boldsymbol{R}_n)E_l(\boldsymbol{R}_n) \quad (42)$$

$$\mathscr{G}_{jl}(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{R}_n; k) \equiv \begin{cases} \left(\delta_{jl} + \frac{1}{k^2}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{R}_{m\,j}\partial \boldsymbol{R}_{m\,l}}\right) G(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{R}_n; k) & m \neq n \\ \frac{-1+e^{ika}(1-ika)}{2\pi a(ka)^2}\delta_{jl} & m = n \end{cases} \quad (43)$$

$$G(\boldsymbol{R}_m, \boldsymbol{R}_n; k) \equiv \frac{1}{4\pi|\boldsymbol{R}_m - \boldsymbol{R}_n|} \exp\left(ik\,|\boldsymbol{R}_m - \boldsymbol{R}_n|\right) \quad (44)$$

$$j, l = x, y, z, \quad m, n = 1, 2, \cdots, N$$

6. 結論

横波ベクトル波が境界のない自由空間において点状散乱体により散乱される散乱問題について，ベクトル波動場の積分方程式の近似的解法を，電磁場を具体例として円柱状，球状誘電体微小散乱体の場合に定式化した。

本論文では定式化のみで数値計算を実行していない。一般に，電磁場解析において，本論文同様に電場のみでの定式化においても，TM モードに比べ，TE モードの方が計算精度が悪い [13]。したがって，同様の近似を用いたスカラー場の計算手法の計算精度と本論文における定式化を用いた場合の計算精度を比較し精査する必要がある。

また，電磁場を例に定式化を行ったが，散乱ポテンシャルを自由空間中および散乱体内の位相速度の比で表してあるため，従う方程式が同形であればそのまま適用できる。

本論文では境界のない自由空間に複数の点状散乱体がある場合を取り扱ったが，境界のある開放系の中に点状散乱体が複数存在している場合にも，境界でディリクレ，ノイマン境界条件が課されるときには，通常のヘルムホルツ方程式に対する境界要素法と組み合わせることで容易に拡張することができる [1, 9]。この場合，散乱体がないときには，ベクトル場は各成分が独立しているため，スカラー場と同じ境界要素法を用いて解ける。x, y, z の 3 成分の方程式に，点状散乱体の位置のベクトル場を未知変数に加え，方程式に各成分を混合する散乱項を加えて，連立すればよい。

謝辞:

本研究は JSPS 科研費 課題番号 18K04028, 19H00740, 22K03987 の助成を受けて行われました。

参考文献

(1) T. Ueta: Boundary Element Method for Electron Transport in the Presence of Pointlike Scatterers in Magnetic Fields, Phys. Rev. B, **60** (1999), pp. 8213–8217.

(2) P. A. Lee and A. D. Stone: Universal Conductance Fluctuations in Metals, Phys. Rev. Lett., **55** (1985), pp. 1622–1625.

(3) H. Miyazaki, M. Hase, H. T. Miyazaki, Y. Kurokawa and N. Shinya: Photonic Material for Designing Arbitrarily Shaped Waveguides in Two Dimensions, Phys. Rev. B, **67** (2003), 235109.

(4) T. Ueta, G. Fujii, G. Morimoto, K. Miyamoto, A. Kosaku, T. Kuriyama and T. Hariyama: Numerical Study on the Structural Color of Blue Birds by a Disordered Porous Photonic Crystal Model, Euro. Phys. Lett. **107** (2014), 34004.

(5) T. Ueta, G. Fujii and G. Morimoto: Full-model Finite-element Analysis for Structural Color of Tarsiger Cyanurus's Feather Barbs, Forma, **35**, (2020), pp. 21–26.

(6) V. Tournat, V. Pagneux, D. Lafarge and L. Jaouen: Multiple Scattering of Acoustic Waves and Porous Absorbing Media, Phys. Rev. E, **70**, (2004), 026609.

(7) M. A. Kuczmarski and J. C. Johnston: Acoustic Absorption in Porous Materials, NASA/TM, (2011), 216995.

(8) P. Soven: Coherent-Potential Model of Substitutional Disordered Alloys, Phys. Rev., **156** (1967), pp. 809–813.

(9) Y. Miyagawa and T. Ueta: A Novel Numerical Method for the Analysis of Electron Transport in the Presence of Pointlike Magnetic Scatterers, J. Phys.: Condens. Matter, **20** (2008), 365208.

(10) Y. Miyagawa and T. Ueta: Numerical Study on Ballistic Electron Transport in the Presence of Pointlike Magnetic Scatterers, Thin Solid Films, **505**, (2006), pp. 57–59.

(11) K. Ohtaka: Scattering Theory of Low-energy Photon Diffraction, J. Phys. C: Solid State Phys, **13**, (1980), pp. 667–680.

(12) M. Abramowitz and I. A. Stegun (ed.): *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover, New York, 1972), pp. 358–360.

(13) K. Ohtaka, T. Ueta and K. Amemiya: Calculation of Photonic Bands Using Vector Cylindrical Waves and Reflectivity of Light for an Array of Dielectric Rods, Phys. Rev. B, **57**, (1998), pp. 2550–2568.