

文章编号:1002-2082(2006)06-0543-03

微小颗粒的光散射数值模拟

邓志宏¹, 桂许春¹, 廖树帜^{1,2}

(1. 湖南师范大学 物理与信息科学学院, 长沙 410081; 2. 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110015)

摘要: 简单介绍了以经典 Mie 理论为基础的光散射测量技术在颗粒直径和颗粒浓度测量中广泛的应用。分别以 Mie 理论和离散偶极子近似理论(DDA)为基础, 用数值计算方法分析了球型颗粒的光散射特性, 给出了微小颗粒对平行入射光散射的强度函数和散射偏振度的数值计算方法。得到了强度函数和偏振度随相关物理参量变化的三维图, 为微小颗粒散射研究提供了一种三维视图。计算结果表明: 当尺度参量 $x < 4$ 时, 2 种方法所得结果差异不大; 随尺度参量增大, 2 种方法所得结果出现较大差异。与经典 Mie 理论相比, 由于离散偶极子近似理论可以解决各种形状的颗粒散射问题, 其应用前景更广泛。

关键词: Mie 氏理论; 离散偶极子近似; 强度函数; 偏振度

中图分类号:O436

文献标志码:A

Numerical simulation of light scattering from small particles

DENG Zhi-hong¹, GUI Xu-chun¹, LIAO Shu-zhi^{1,2}

(1. College of Physics and Information Science, Hunan Normal University, Changsha 410081, China;
2. International Center for Material Physics, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015, China)

Abstract: Light scattering measurement technology based on the classical Mie theory is widely used in the measurement of particle diameter and particle density measurement. The characteristics of light scattering from spherical particles in aerosol are analyzed with a numerical calculation method based on the classical Mie theory and discrete-dipole approximation (DDA) theory respectively. A numerical calculation method for intensity function and polarization ratio of the collimated incident beam scattered by small particles is given. The 3D graph for variation of the intensity function and polarization ratio with the relative physical parameters was obtained for the research of small particle scattering. The calculation results show that the results obtained by two methods based on DDA theory or classical Mie theory differ slightly when dimension parameter $x < 4$, and the results differ greatly along with the increase of dimension parameters. In comparison with the classical Mie theory, the DDA theory has greater potential in application since it may solve particle scattering problem for different shapes of particles.

Key words: Mie theory; discrete-dipole approximation (DDA); light intensity function; polarization ratio

引言

气溶胶在工程技术领域中占有重要地位, 一直是随机介质中光传播、大气辐射和大气探测等领

域的一个重要研究内容。随着科学技术的发展, 人们往往要求知道气溶胶中所含有的固体或液体颗粒的大小及其浓度。比如火灾烟雾, 火灾烟雾是可

燃物燃烧产生的气溶胶, 是火灾的前兆和伴随产物。“烟为火始”, 烟雾作为火灾探测的基础参量, 是火灾探测研究的基础内容。对火灾中产生的各种烟雾的物理特性, 尤其是对激光的散射特性进行深入研究是火灾烟雾探测研究的重要方向。为此, 近年来关于气溶胶中的颗粒直径和颗粒浓度的测量技术日益引起人们的兴趣和重视, 其中光散射测量技术得到了广泛的应用。显然, 在采用光散射测量技术时, 必须首先从理论上计算出光散射的有关物理量与散射颗粒浓度及粒径的数量关系。本文分别利用 Mie 理论^[1-6] 和离散偶极子近似理论 (DDA), 得出所需数量关系, 并加以比较。

1 理论基础

光散射是指由于介质中的微粒对照射光束产生散射, 从而使光波偏离原来的传播方向而向四周散射的现象, 其物理本质是光波的电场与介质分子相互作用的结果。对于不均匀介质, 在各个方向上都会产生散射光。散射光强大小与入射光的光强及波长、颗粒的几何尺寸及复折射率、接收方向及距离等多个因素有关。

光波被球状颗粒的散射可由 Mie 散射理论形式给出。该理论的精确解可通过矢量球谐波展开形式得到。根据 Mie 理论, 球型颗粒的散射只与颗粒的复折射率 m 和尺度参量 x 有关。 $m = n + i\kappa$, 其中 n 是折射率, 虚部 κ 是消光系数, i 为虚单位。 $x = 2\pi a/\lambda$, 其中 a 是球型颗粒的半径, λ 是入射光的波长。

DDA 法^[7]的基本思想是: 将连续散射物体近似为有限个可极化的点阵, 每个点通过对局域电场 (入射场以及其他点的辐射场) 的响应获得偶极矩, 散射体上所有点在远场的辐射总和构成散射场。

使用这种近似必须满足: 1) 点阵间距远小于入射波长; 2) 点阵间距足够小, 使得该点阵足够好地体现散射体的基本特征。当粒子尺度远小于光波长时, 可使用瑞利近似; 当粒子尺度远大于光波长时, 可使用几何光学近似。

在大气气溶胶光散射问题的实际应用中, 我们一般都把颗粒近似为球型颗粒。而 DDA 不仅能够计算球型颗粒的散射, 还可以计算方型颗粒^[7], 圆柱型颗粒等其他形状的颗粒。这是因为任何连续散射物体都可以近似为有限个可极化的点阵, 因此从理论上说, DDA 适用于任何形状的物体, 应用范围比 Mie 理论广。运用 DDA 计算所需参量列于表 1。

表 1 DDA 球型颗粒数值运算的有关参数

Table 1 Relevant parameters used in numerical computation of sphere particle with DDA

x	m	3D 离散点数	总离散点数	运算精度
4	$1.5 + 0.57i$	10,10,10	522	$1.00e-5$
7	$1.5 + 0.57i$	10,10,10	522	$1.00e-5$

2 模拟结果与讨论

按以上理论, 计算了不同颗粒对平行光散射的有关物理量的数值, 并用图形表示。图 1~图 4 给出了复折射率 $m = 1.5 + 0.57i$ 的烟灰颗粒的散射情况, 复折射率的虚数部分表示颗粒有吸收。在图 1~图 4 中, x 轴坐标表示散射角 θ 的值, y 轴坐标表示尺度参数 x , z 轴分别表示垂直散射强度相

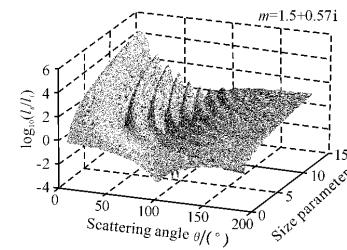


图 1 平行散射强度

Fig. 1 Parallel scattered irradiance

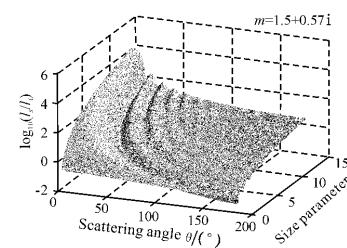


图 2 垂直散射强度

Fig. 2 Perpendicular scattered irradiance

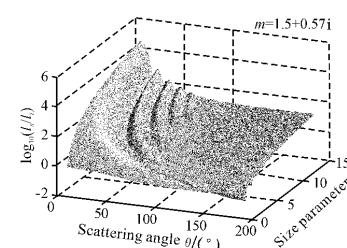


图 3 总散射强度

Fig. 3 Total scattered irradiance

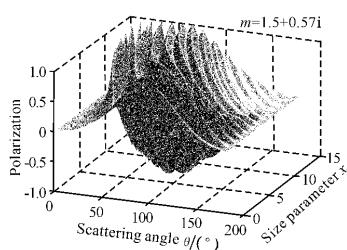


图 4 偏振度

Fig. 4 Polarization

对值 $\log(I_1/I_i)$ 、平行散射强度相对值 $\log(I_2/I_i)$ 、总散射强度相对值 $\log(I_s/I_i)$ 及偏振度。从图中可以看出, 随着尺度参量的增大, 图形的起伏增加。图 1、图 2、图 3 表明随着尺度参数的增大, 散射强度波浪起伏增多。图 4 显示当尺度参数增大时偏振度急剧振荡。

图 5 给出尺度参量为 4 时, 用 Mie 球型理论和离散偶极子近似方法得出的结果比较。在运用 2 种方法同时对相同参量的颗粒计算时, 发现在当尺度参量从 1 变化到 4 时, 2 种理论所得结果一致。但当尺度参量继续增大, 离散偶极子近似方法所得结果与 Mie 球型理论偏差增大。如图 6, 当尺度参量 $x = 7$ 时, 0° 到 60° 的前向散射, 2 种理论吻合, 大于 60° 的 2 种散

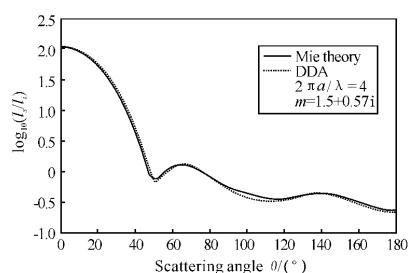


图 5 总散射强度

Fig. 5 Total scattered intensity

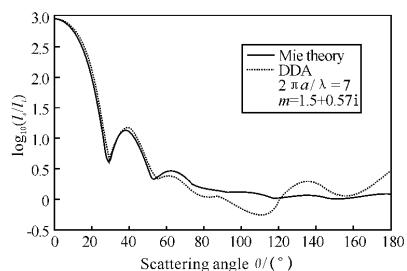


图 6 总散射强度

Fig. 6 Total scattered intensity

射理论所得强度数值差异较大。

3 结论

本文按经典 Mie 氏理论和离散偶极子近似理论用数值计算方法分析了球型粒子的光散射特性。所得结果在一定程度上反映了大部分尺度参数下的一般情况, 在所考虑的尺度参数范围内, 可以直观地看出散射相关物理量的一些变化趋势。比较 2 种理论得出结果, 发现当尺度参量 $x < 4$ 时, 2 种方法所得结果相同; 随尺度参量增大, 2 种方法所得结果出现较大差异。DDA 还可以计算不同形状颗粒的光散射, 适用范围比 Mie 球型理论广, 应用前景可观。

致谢: 美国 Princeton University Observatory 的 B. T. Draine 博士向作者提供了他的 DDA 程序, 在此表示感谢!

参考文献:

- [1] 杨晔, 张镇西, 蒋大宗. Mie 散射物理量的数值计算 [J]. 应用光学, 1997, 18(4): 17-19.
YANG Ye, ZHANG Zhen-xi, JIANG Da-zong. Numerical computation of Mie scattering physical quantities [J]. Journal of Applied Optics, 1997, 18(4): 17-19. (in Chinese)
- [2] HULST H C. Light scattering by small particles [M]. New York: John Wiley & Sons, 1957. 128-130.
- [3] HULST H C. Light scattering by small particles [M]. New York: Dover, 1981. 456-458.
- [4] BOHREN C F, HUFFMAN D R. Absorption and scattering of light by small particles [M]. New York: Wiley, 1998. 781-790.
- [5] 王少清, 任中京, 张希明. Mie 散射系数计算方法的研究 [J]. 应用光学, 1997, 18(2): 4-9.
WANG Shao-qing, REN Zhong-jing, ZHANG Xi-ming. Study of calculating method of Mie scattering coefficient [J]. Journal of Applied Optics, 1997, 18(2): 4-9. (in Chinese)
- [6] 高永锋, 邹丽新, 黄惠杰, 等. 尘埃粒子计数器中光源对传感器光通量的影响分析 [J]. 应用光学, 2005, 26(3): 45-49.
GAO Yong-feng, ZOU Li-xin, HUANG Hui-jie, et al. Influence of the light source in airborne laser particle counter on the flux of transducer [J]. Journal of Applied Optics, 2005, 26(3): 45-49. (in Chinese)
- [7] RAO Rui-zhong. Numerical analysis light scattering by randomly oriented cubic particles [J]. Chin Phys Soc, 1998, 47(11): 1790-1797.