

**ИНТЕГРАЛЬНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СВЕТОРАССЕЯНИЯ ВЗВЕСЕЙ  
БОЛЬШИХ НЕСФЕРИЧЕСКИХ ХАОТИЧНО ОРИЕНТИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ  
В ОБЛАСТИ РЕЛЕЯ-ГАНСА-ДЕБАЯ<sup>1</sup>**

**Н.В. Шепелевич\***

*Рассматривается возможность замены ансамбля несферических частиц полидисперсным ансамблем сферических частиц. Выявлены критерии для такой замены. На основании полученных свойств распределений сферических частиц решается обратная оптическая задача по определению формы и размера больших несферических частиц в области Релея-Ганса-Дебая.*

Существует два наиболее известных подхода в решении проблемы взаимодействия света с хаотически ориентированными несферическими частицами. Первый подход - описание оптических характеристик каждой частицы и затем получение усредненного результата. Этот подход очень сложен и трудоемок даже при современном развитии компьютерных технологий. В данном случае задача определения характеристик светорассеяния усложняется еще и тем, что точное решение задачи светорассеяния известно лишь для ограниченного класса частиц, а вследствие возможностей современной вычислительной техники в настоящее время получены численные решения, по сути, лишь для ряда осесимметричных частиц [1].

Второй подход - замена системы несферических частиц на некую усредненную частицу. Неоднократно предпринимались попытки описать несферические частицы сферическими, что связано, в первую очередь, с достаточной простотой теории Ми [2]. При этом наиболее популярными моделями ансамбля несферических частиц являются "эквивалентные" сферы, т.е. сферы с объемами ( $V$ ) или площадями поверхности ( $S$ ) как у несферических частиц (при этом предполагается, что коэффициент преломления остается одним и тем же). Однако такие методы лишь в первом приближении позволяют оценивать характеристики светорассеяния. Действительно, эквивалентные сферы имеют слишком малую площадь поверхности, что приводит к неудовлетворительному описанию характеристик светорассеяния, а у эквивалентных сфер слишком большой объем, что в свою очередь приводит к переоценке поглощения. Хороший обзор по этой теме приведен в работе [3].

Значительно улучшить описание характеристик светорассеяния можно заменой ансамбля несферических частиц набором (ансамблем) сферических частиц, которые одновременно имеют одинаковые объем и площадь поверхности, что и несферические. Так, например, в работе [3] для описания интегральных характеристик светорассеяния гексагональных призм эффективно использовался набор одинаковых сфер. При таком подходе одной несферической частице формально соответствует несколько сферических частиц, количество которых определяется из условия "эквивалентности" объема и площади поверхности.

Очевидно, что условия "эквивалентности" объема и площади поверхности можно добиться и заменой несферической частицы набором сферических с неким распределением по размерам, причем таких распределений может быть бесконечное множество.

Целью настоящей работы являлось изучение характеристик светорассеяния однородных несферических частиц произвольной формы на основе моделирования их оптических свойств ансамблем однородных сферических частиц с тем же показателем преломления и нахождение связи этих характеристик с микрофизическими параметрами частицы (размер и форма).

Так как точное решение задачи светорассеяния для произвольных частиц отсутствует, то исследование проводилось в рамках аппроксимации Релея-Ганса-Дебая (РГД). Область применения последней -  $|m - 1| \ll 1$  и  $\Delta = 2\rho|m - 1| < 1$ , где  $m$  - относительный показатель преломления рассеивателя,  $\rho = 2\pi d/\lambda$  - дифракционный параметр,  $\lambda$  - длина волны зондирующего излучения в дисперсионной среде,  $d$  - характерный размер рассеивателя [2].

### 1. Теория Релея-Ганса-Дебая

В приближении РГД интенсивность естественного света, рассеянного одиночной частицей, на большом расстоянии  $r$  описывается выражением:

$$I(\theta) = \frac{k^4 V^2 |m - 1|^2}{8\pi^2 r^2} I_0 G^2(\theta) (1 + \cos^2 \theta), \quad (1)$$

где  $V$  - объем частицы,  $\theta$  - угол рассеяния,  $I_0$  - интенсивность падающего излучения,  $k = 2\pi/\lambda$ . Величина  $G^2(\theta)$  - так называемый форм-фактор, который и определяет картину светорассеяния. Его вид получен для большинства элементарных тел, в том числе и их комбинаций [4-5].

<sup>1</sup> При поддержке гранта 6-го конкурса-экспертизы научных проектов молодых ученых РАН (№217)

\* © Н.В.Шепелевич, 2003; ИВМ СО РАН; E-mail: jet.icm.krasn.ru.

В частности, для случая шара форм-фактор  $G_w^2(\theta)$  определяется выражением

$$G_w^2(\theta) = \sqrt{\frac{2\pi}{2u^3}} J_{3/2}(u), \quad (2)$$

где  $u = 2\rho \sin(\theta/2)$ ,  $J_{3/2}(u)$  - функция Бесселя порядка  $3/2$ ,  $\rho = 2\pi a/\lambda$ ,  $a$  - радиус шара.

В связи с целью работы очень важным оказывается случай хаотично ориентированных сфероидов. Форм-фактор хаотично ориентированного сфероида  $G_{сф}^2(\theta)$  равен [5]

$$G_{сф}^2(\theta) = \frac{9\pi}{2} \int_0^{\rho e} \frac{J_{3/2}(u_1)}{u_1^3} dz, \quad (3)$$

где  $u_1 = 2\rho \sin(\theta/2) \sqrt{\epsilon^2 - (\epsilon^2 - 1)z^2}$ ,  $\rho = 2\pi b/\lambda$ ,  $e = a/b$ ,  $a$  и  $b$  - полуоси сфероида ( $b$  - полуось вращения).

Как показано в работе [6], подстановка (3) в (1) с учетом (2) позволяет рассматривать интенсивность рассеивания сфероида как результат рассеяния полидисперсной системой сферических частиц:

$$I(\rho, \theta) = \int_{\rho}^{\rho e} I(\rho_w, \theta) f(\rho_w) d\rho_w. \quad (4)$$

Здесь  $I(\rho_w, \theta)$  - интенсивность светорассеяния сферической частицей с дифракционным параметром  $\rho_w = \rho \sqrt{\epsilon^2 - (\epsilon^2 - 1)z^2}$ , а функция распределения сферических частиц по размерам - типа степенного:

$$f(\rho_w) = \frac{\epsilon^4 \rho_w^5}{(\epsilon^2 - 1) \rho_w^5} \sqrt{\frac{\epsilon^2 - 1}{\rho_w^2 \epsilon^2 - \rho_w^2}}. \quad (5)$$

Распределение (5) достаточно универсально, т.к. точно такое же распределение получено для сфероидов при описании интегральных характеристик взвесей в области аномальной дифракции [7]. При этом оно обладает важными свойствами, а именно площадь поверхности, объем и квадрат объема всех сферических частиц в указанном диапазоне распределения равны площади поверхности ( $S$ ), объему ( $V$ ) и квадрату объема ( $V^2$ ) сфероида соответственно, т.е. выполняются равенства

$$S = \int_{\rho}^{\rho e} 4\pi a_w^2 f(\rho_w) d\rho_w, \quad V = \int_{\rho}^{\rho e} \frac{4\pi a_w^3}{3} f(\rho_w) d\rho_w, \quad V^2 = \int_{\rho}^{\rho e} \left( \frac{4\pi a_w^3}{3} \right)^2 f(\rho_w) d\rho_w, \quad (6)$$

где  $a_w$  - радиус шаровой частицы в распределении, причем  $\rho_w = 2\pi a_w/\lambda$ ;  $\rho$  и  $\rho e$  - минимальный и максимальный размеры дифракционного параметра сфероида (который из них минимальный или максимальный, зависит от значения  $\epsilon$ ).

Исходя из этих свойств, можно выдвинуть гипотезу: если для произвольной хаотически ориентированной несферической частицы существует эквивалентное ей распределение сферических частиц  $f(\rho_w)$  такое, что

$$I(\rho, \theta) = \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} I(\rho_w, \theta) f(\rho_w) d\rho_w, \quad (7)$$

то вид его должен удовлетворять интегральным уравнениям

$$S = \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} 4\pi a_w^2 f(\rho_w) d\rho_w, \quad V = \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{4\pi a_w^3}{3} f(\rho_w) d\rho_w, \quad V^2 = \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \left( \frac{4\pi a_w^3}{3} \right)^2 f(\rho_w) d\rho_w, \quad (8)$$

где  $\rho_{\max}$ ,  $\rho_{\min}$  - максимальное и минимальное значение дифракционного параметра несферической частицы, а  $S$  и  $V$  - соответственно ее площадь поверхности и объем.

Необходимо отметить одну принципиальную особенность: в понятие "эквивалентность" добавляется третье уравнение (8). Например, в [3] такого соотношения нет вследствие того, что там рассматривался случай частиц с большими значениями фазового сдвига  $\Delta \gg 1$ , где применяются теории аномальной дифракции и геометрической оптики [2]. В области РГД, как известно, рассеяние вперед ( $\theta = 0^\circ$ ) пропорционально  $V^2$  [2], что и отражает третье уравнение (8).

В связи с вышесказанным существует два пути проверки выдвинутой гипотезы и решения на основе ее обратной задачи: либо непосредственное решение уравнений (8), либо нахождение таких параметров светорассеяния, которые зависят только от второго, третьего или шестого моментов эквивалентного распределения сфери-

ческих частиц (или их комбинаций). Именно возможность использования второго подхода рассматривается далее.

## 2. Интегральные характеристики светорассеяния больших РГД-частиц

Поток энергии, рассеянный произвольной частицей в телесный угол  $\Omega$ , можно найти, проинтегрировав интенсивность рассеяния из выражения (1) по соответствующему телесному углу:

$$F(\Omega) = \int_{\Omega} I(\theta) d\Omega. \quad (9)$$

В частности, в приближении РГД поток энергии  $F(\theta_0)$ , рассеянный сферической частицей радиуса  $a$  в конус с углом раствора  $2\theta_0$  в направлении вперед, определяется как

$$\frac{F(\theta_0)}{\pi a^2} = \frac{4}{9} \rho^4 |m-1|^2 I_0 \int_0^{\theta_0} G^2(2\rho \sin(\theta/2)) (1 + \cos^2 \theta) \sin \theta d\theta, \quad (10)$$

что после интегрирования приводит к выражению

$$\frac{F(\theta_0)}{\pi a^2} = I_0 |m-1|^2 \left\{ A + 2\rho^2 + (4b^2 - 2A) \frac{\sin(4\rho b)}{4\rho b} + \left[ \frac{\cos(4\rho b) - 1}{(4\rho b)^2} \right] (12b^2 - 2A) + \left( \frac{1}{2\rho^2} - 2 \right) S_1(4\rho b) \right\}, \quad (11)$$

где  $A = 2 + b^2 - \frac{1}{2b^2}$ ,  $b = \sin(\theta_0/2)$ ,  $S_1(x) = \int_0^x \frac{1 - \cos u}{u} du = \ln(x) + \gamma - Ci(x)$ ,  $Ci(x)$  - интегральный косинус,  $\gamma$  - постоянная Эйлера-Маскерони [2].

С помощью (11) легко определить поток энергии, рассеянный в телесный угол, образованный пересечением конусов с углами раствора  $\theta_1$  и  $\theta_2$ :

$$F(\theta_1 \div \theta_2) = F(\theta_1) - F(\theta_2). \quad (12)$$

В частности, оценим довольно часто используемую характеристику светорассеяния - величину потока энергии рассеянной в заднюю полусферу углов рассеяния. Для случая  $\theta_0 = \pi/2$  из (10) следует  $b = 1/\sqrt{2}$  и соответственно  $A = 3/2$ , а для  $\theta_0 = \pi$   $b = 1$  и соответственно  $A = 5/2$ .

Рассмотрим случай больших частиц ( $\rho \gg 1$ ). Количество света, рассеянного сферической частицей в заднюю полусферу углов рассеяния  $F_{назад}$  согласно (11)-(12), равно

$$F_{назад} = F(\pi) - F(\pi/2) \approx \pi a^2 I_0 |m-1|^2 (1 - \ln 2). \quad (13)$$

Здесь  $\pi a^2$  - площадь поперечного сечения сферы.

Но тогда, принимая во внимание выдвинутую гипотезу (8), для монодисперсной взвеси хаотично ориентированных несферических частиц произвольной формы со значениями  $\rho_{\min}, \rho_{\max} \gg 1$  величина потока, рассеянного в заднюю полусферу согласно (7)-(9) и (13), равна

$$F_{назад} = F(\pi) - F(\pi/2) \approx \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \pi a^2 I_0 |m-1|^2 (1 - \ln 2) f(\rho) d\rho = I_0 |m-1|^2 (1 - \ln 2) \frac{S}{4}, \quad (14)$$

где  $S$  - площадь поверхности частицы.

На рис. 1,2 представлены расчеты по проверке выражения (14) для ряда несферических хаотично ориентированных частиц (сфероиды, цилиндры и куб), для которых известны значения форм-фактора, входящего в (1). В частности, форм-фактор сфероиды описывается выражением (3), а форм-факторы цилиндра ( $G_u^2(\theta)$ ) и куба ( $G_k^2(\theta)$ ) соответственно выражениями [4-5]

$$G_u^2(\theta) = \frac{2\pi}{vu^2} \int_0^{\pi/2} \frac{J_{1/2}^2(v \cos \beta) J_1^2(u \sin \beta) d\beta}{\sin \beta \cos \beta}, \quad (15)$$

где  $J_1(x)$ ,  $J_{1/2}(x)$ , - функции Бесселя соответствующих порядков;  $u = 4\pi a/\lambda \sin(\theta/2)$ ,  $v = 2\pi a \varepsilon/\lambda \sin(\theta/2)$ ,  $a$  - радиус цилиндра,  $\varepsilon = L/2a$ ,  $L$  - высота цилиндра;

$$G_k^2(\theta) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\tau \int_0^1 P(\theta, \tau, y) dy, \quad (16)$$

$$P(\tau, y) = E^2 \left( v \cos \tau \sqrt{1-y^2} \right) E^2 \left( v \sin \tau \sqrt{1-y^2} \right) E^2(vy),$$

где  $E(s) = \sin s / s$ ,  $v = 2\pi L / \lambda \sin(\theta/2)$ ,  $L$  - ребро куба.

В качестве координат были выбраны:  $\rho_{\text{экв}}$  - величина дифракционного параметра шаровой частицы, имеющей такой же объем, что и несферическая частица и безразмерная величина площади поверхности фигуры, которая рассчитывалась нормировкой на  $a_{\text{экв}}^2$  - квадрат радиуса эквивалентной шаровой частицы ( $\rho_{\text{экв}} = 2\pi a_{\text{экв}} / \lambda$ ). Таким образом, для каждого значения  $\rho_{\text{экв}}$  различные несферические частицы имеют один и тот же объем.

Расчет для несферических частиц проводился нахождением величины  $F_{\text{назад}}$  с помощью непосредственного интегрирования выражения (9) с учетом (3), (15), (16) для соответствующего вида частиц и нахождением величины  $S$  из выражения (14). Результат сравнивается с непосредственными значениями площади поверхности несферических частиц (на рисунках им соответствуют горизонтальные асимптоты).

Итак, при увеличении размера частицы мы получаем хорошее подтверждение формулы (14). Таким образом, с одной стороны, косвенно подтверждается выдвинутая гипотеза (8), а с другой - полученный результат может быть использован для решения обратной задачи.

В частности, возможна следующая принципиальная схема решения обратной задачи. Во-первых, нахождение объема несферической частицы методом молотковой индикатрисы светорассеяния [6]. В этом случае находится дифракционный параметр эквивалентного шара, а следовательно, и сам объем несферической частицы. Второй шаг - нахождение площади поверхности по величине потока рассеянного назад, согласно (14). Наконец, зная объем и площадь поверхности частицы, можно однозначно определить ее форму. Таким образом, решается обратная задача по определению размера и формы частицы.

Суммируя полученные в работе результаты, можно отметить, что моделирование оптических свойств несферических частиц заменой их на распределение сферических достаточно эффективно. Так, например, нет необходимости рассчитывать форм-факторы для разных видов частиц, а можно непосредственно оперировать с микрофизическими свойствами этих частиц (объем, площадь поверхности). Продемонстрирована область, где, используя эти свойства, можно решать обратную задачу по определению размеров и форм исследуемых несферических частиц. В частности, в эту область попадает значительная часть биологических жидкостей и природных водных взвесей, например водоросли.

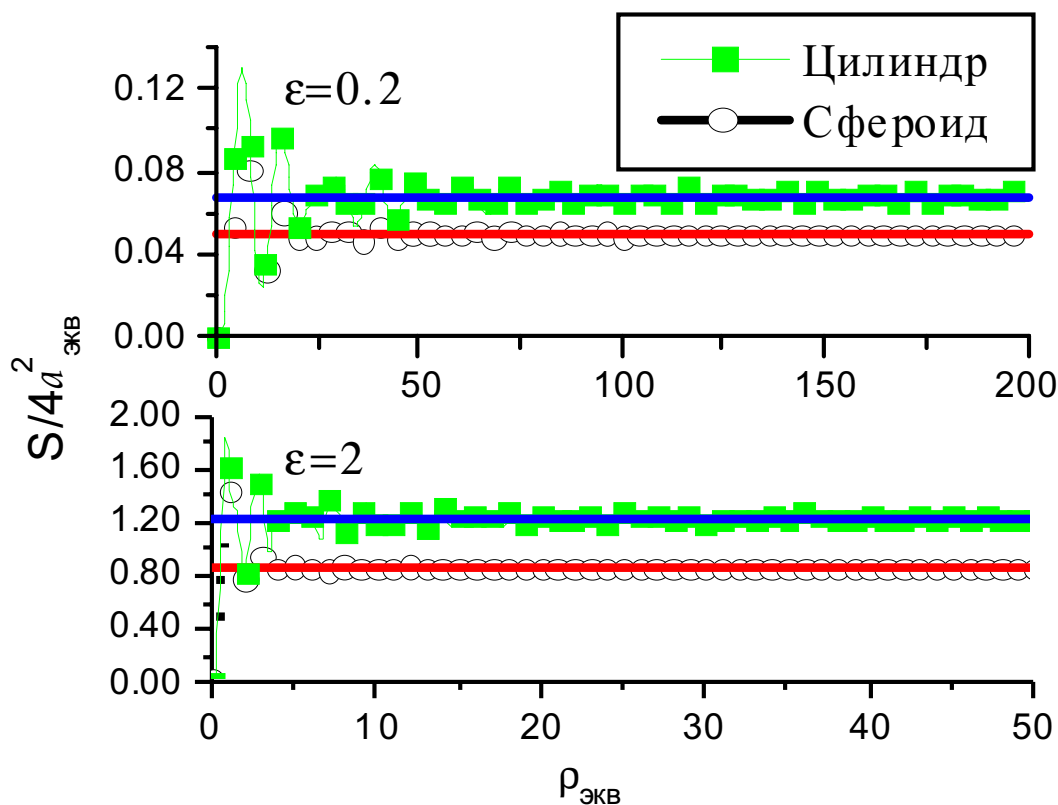


Рис.1. Нормированная площадь поверхности несферических частиц при расчете с помощью (14).  
Случаи вытянутых и сжатых сфероидов и цилиндров

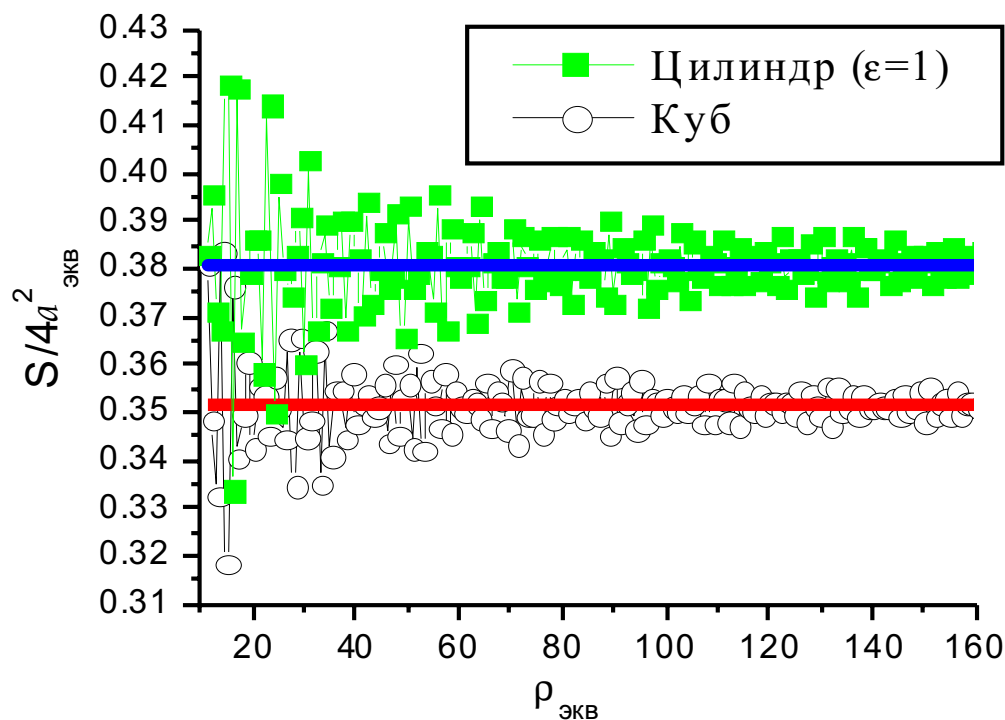


Рис.2. Нормированная площадь поверхности несферических частиц при расчете с помощью (14).  
Случаи куба и равно широкого цилиндра

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mishchenko M.I., Hovenier J.W., Travis L.D. (Eds). Light Scattering by Nonspherical Particles. - New York: Academic Press, 2000. - P. 856.
2. Van de Hulst H.C. Light scattering by small particles. - New York: Wiley, 1957. - P. 533.
3. Grenfell T.C., Warren S.G. Representation of a nonspherical ice particle by a collection of independent spheres for scattering and absorption of radiation // J.Geophys.Res. - 1999. - V. 104, No. D24. - P. 697-709.
4. Kerker M. The scattering of light and other electromagnetic radiation. - New York: Acad.Press, 1969. - P. 666.
5. Kokhanovsky A.A. Optics of light scattering media. Problems and solutions. - Chichester: Praxis Publishing, 1999. - P. 219.
6. Сидько Ф.Я., Лопатин В.Н., Парамонов Л.Е. Поляризационные характеристики взвесей биологических частиц. - Новосибирск: Наука, 1990. - С. 118.
7. Лопатин В.Н., Сидько Ф.Я. Введение в оптику взвесей клеток. - Новосибирск: Наука, 1988. - С. 250.

#### INTEGRAL OPTICAL PARAMETERS OF SUSPENSION OF LARGE NONSPHERICAL RANDOMLY ORIENTED PARTICLES WITHIN THE FRAMEWORK OF THE RAYLEIGH-GANS-DEBYE APPROXIMATION

N.V. Shepelevich

*In this work the opportunity of replacement of an ensemble of nonspherical particles by an ensemble of spherical ones is conducted. The criterions of such replacement are established. The solution of an inverse problem within the Rayleigh-Gans-Debye approximation domain for large nonspherical randomly oriented particles has been shown.*