

УДК 535.36

## Разложение индикатрисы рассеяния оптически «мягких» хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц в ряд по полиномам Лежандра

Л.Е. Парамонов, О.В. Сорокина\*

Южное отделение Института океанологии им. П.П. Ширшова РАН  
353467, г. Геленджик, ул. Просторная, д. 12

Поступила в редакцию 5.09.2011 г.

Рассматривается эффективный метод расчета индикатрисы рассеяния оптически «мягких» хаотически ориентированных неоднородных эллипсоидальных частиц. Получено разложение индикатрисы рассеяния в ряд по полиномам Лежандра. Метод основан на оптической эквивалентности хаотично ориентированных эллипсоидальных и полидисперсных сферических частиц в приближениях Рэлея–Ганса–Дебая (РГД). Результаты иллюстрируются численными расчетами с использованием метода Т-матриц, теории Ми и приближения РГД.

*Ключевые слова:* оптическая эквивалентность, радиально неоднородная эллипсоидальная частица, индикатриса рассеяния, полиномы Лежандра; optical equivalence, radially inhomogeneous ellipsoidal particle, phase function, Legendre polynomials.

Таблицы по светорассеянию в 5 томах под редакцией проф. К.С. Шифрина [1] сыграли значимую роль при исследовании дисперсных рассеивающих сред в различных областях науки и техники и до сих пор используются специалистами. В настоящее время существует более эффективный способ хранения информации об оптических свойствах частиц, основанный на фундаментальном свойстве симметрии изотропной рассеивающей среды и разложении элементов матрицы рассеяния элементарного рассеивающего объема в ряды Фурье по обобщенным сферическим функциям [2]. Коэффициенты Фурье-разложения являются компактным и удобным способом хранения информации об оптических характеристиках частиц и могут быть использованы в задачах однократного и многократного рассеяния. При известных коэффициентах разложения элементы матрицы рассеяния для больших выборок углов рассеяния рассчитываются с минимальными вычислительными затратами; аналитически оцениваются потоки рассеянного излучения в произвольных конических телесных углах [3] и исключается трудоемкая процедура вычисления поверхностных интегралов.

Известны решения для коэффициентов разложения элементов матрицы рассеяния сферических частиц [4, 5], хаотически ориентированных осесимметричных частиц [6] и хаотически ориентированных частиц, не обладающих осевой симметрией [7]. Возможности точной теории – метода Т-матриц – при оценке оптических характеристик частиц без

осевой симметрии ограничены размерами и формой частиц, при этом следует отметить сложность аналитических алгоритмов ориентационного усреднения [6, 7] и трудоемкость вычислений коэффициентов разложения элементов матрицы рассеяния.

Особое место в исследованиях занимают оптически «мягкие» частицы, относительный показатель преломления которых незначительно отличается от единицы, что позволяет корректно использовать при оценке оптических характеристик частиц приближения Рэлея–Ганса–Дебая (РГД) и аномальной дифракции [8].

Цель настоящей статьи – используя аналитические возможности приближений, разработать эффективный алгоритм разложения индикатрисы рассеяния в ряд по полиномам Лежандра для оптически «мягких» хаотически ориентированных неоднородных эллипсоидальных частиц, чьи свойства удовлетворяют предпосылкам приближения Рэлея–Ганса–Дебая.

### 1. Приближение Рэлея–Ганса–Дебая

Область корректного применения приближения Рэлея–Ганса–Дебая –  $|m_r - 1| \ll 1$ ,  $\Delta = 2ka|m_r - 1| \ll 1$ , где  $a$  – характерный размер (например, радиус) частицы;  $k$  – волновое число окружающей среды;  $m_r$  – относительный показатель преломления частицы. В дальней зоне ( $kr \gg 1$ ) при падающей плоской волне  $\mathbf{E}^{inc}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0^{inc} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{r}}$ , где  $\mathbf{n}_i$  – единичный вектор направления падающего излучения, сферическая рассеянная волна и амплитудная матрица рассеяния имеют вид [6, 8]:

\* Леонид Евгеньевич Парамонов (lparamonov@yandex.ru); Ольга Владимировна Сорокина (romas\_o@mail.ru).

$$\mathbf{E}^{sca}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr}}{r} \mathbf{S}(\mathbf{n}_s, \mathbf{n}_i) \mathbf{E}_0^{inc}.$$

Здесь  $\mathbf{n}_s$  – единичный вектор направления рассеянной волны. В приближении РГД элементы амплитудной матрицы рассеяния для одиночной частицы имеют вид

$$S_{11} = \cos\theta \frac{k^2}{4\pi} V f(\mathbf{n}_s, \mathbf{n}_i), \quad S_{12} = 0, \quad S_{21} = 0, \\ S_{22} = \frac{k^2}{4\pi} V f(\mathbf{n}_s, \mathbf{n}_i),$$

где

$$f(\mathbf{n}_s, \mathbf{n}_i) = \frac{1}{V} \int_V d^3\mathbf{r} [m_r^2(\mathbf{r}) - 1] e^{i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}}; \quad \mathbf{k}_s = k(\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_s);$$

$V$  – объем частицы;  $\theta$  – угол рассеяния. Величину  $f$  называют фактором внутренней интерференции [9], он зависит от направлений распространения падающего и рассеянного излучений, относительного показателя преломления  $m_r(\mathbf{r})$ , объема, формы, ориентации частицы.

Опуская промежуточные выкладки, основанные на представлении плоской волны и использовании теоремы сложения, приведем формулу для фактора внутренней интерференции с разделяющимися переменными

$$(kr)^3 f(\mathbf{n}_s, \mathbf{n}_i) = \sum_{n=0}^{\infty} R_n(kr) P_n(\cos\theta),$$

для однородной сферической частицы радиуса  $r$

$$R_n(kr) = \frac{3}{2} (2n+1) (kr)^3 \times \\ \times \{j_n^2(kr) - j_{n-1}(kr) j_{n+1}(kr)\} (m_r^2 - m_{r0}^2),$$

показатель преломления окружающей среды  $m_{r0}$  полагаем равным 1;

для  $m$ -слойной сферической частицы с концентрическими слоями

$$R_n(kr) = \frac{3}{2} (2n+1) \times \\ \times \sum_{i=1}^m (kr_i)^3 \{j_n^2(kr_i) - j_{n-1}(kr_i) j_{n+1}(kr_i)\} (m_{ri}^2 - m_{r(i-1)}^2)$$

$m_{ri}$  – относительный показатель преломления  $i$ -го слоя,  $r_1 = r$ ;

для радиально неоднородной сферической частицы –  $m_r(\mathbf{r}) = m_r(r)$ , получим интеграл в смысле Лебега–Стилтьеса [10]:

$$R_n(kr) = -\frac{3}{2} (2n+1) \times \\ \times \int_0^{\infty} (k\tau)^3 \{j_n^2(k\tau) - j_{n-1}(k\tau) j_{n+1}(k\tau)\} dm_r^2(\tau), \\ m_r(\tau) = 1 \quad \text{при } \tau > r, \quad (1)$$

где  $j_n(kr)$  – сферические функции Бесселя 1-го рода;  $P_n(\cos\theta)$  – полиномы Лежандра;  $\tau$  – переменная интегрирования.

**Разложение индикатрисы рассеяния оптически «мягких» хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц... 413**

В отличие от известного выражения фактора внутренней интерференции [8, 9], приведенные здесь формулы с разделяющимися переменными – более громоздкие, но имеют свои преимущества, которые реализуются при разложении индикатрисы рассеяния в ряд по полиномам Лежандра.

## 2. Коэффициенты разложения интенсивности рассеянного излучения для сферической частицы

Среди элементов матрицы рассеяния в приближении РГД независимым является только один элемент, характеризующий интенсивность рассеянного излучения при неполяризованном падающем излучении единичной интенсивности:

$$Z_{11}(\theta) = \frac{|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2}{2} = \\ = \frac{k^4 r^6}{18} |f(\mathbf{n}_s, \mathbf{n}_i)|^2 (1 + \cos^2\theta).$$

Формулы для коэффициентов разложения интенсивности рассеянного одиночной сферической частицей излучения имеют вид [11]:

$$Z_{11}(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(\cos\theta), \\ a_n = \frac{4}{3} \alpha_n + \frac{2}{3} \sum_{m=|n-2|}^{n+2} [C_{m020}^{n0}]^2 \alpha_m, \quad (2)$$

$$\alpha_m = \frac{1}{18k^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=|n-m|}^{n+m} R_n(kr) R_l(kr) [C_{n0l0}^{m0}]^2, \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

$C_{nmn'm_l}^{n'm_l}$  – коэффициенты Клебша–Гордона [12].

Нормированный элемент  $F_{11}(\theta) = \frac{4\pi}{C_{sca}} Z_{11}(\theta)$  – индикатриса рассеяния, коэффициент рассеяния имеет вид

$$C_{sca} = \int_{4\pi} Z_{11}(\theta) d\omega,$$

интегрирование проводится по телесному углу  $4\pi$ . Имеет место соотношение  $C_{sca} = 4\pi a_0$ .

Для полидисперсных сферических частиц  $\alpha_m$  (2) необходимо усреднить с учетом функции распределения частиц по размерам.

## 3. Оптическая эквивалентность хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц и полидисперсных сферических частиц

Пусть  $a, b, c$  – полуоси эллипсоидальной частицы и  $a < b < c$ . В этом разделе в выражениях для полуосей  $a, b, c$  и радиуса сферических частиц  $r$  опускается множитель  $k$  – волновое число, отмеченные параметры являются безразмерными. Согласно

результатам [11] монодисперсные хаотически ориентированные эллипсоидальные частицы в приближении РГД оптически эквивалентны полидисперсным сферическим частицам, плотность распределения по размерам для оптически эквивалентного ансамбля сферических частиц имеет вид полного эллиптического интеграла 1-го рода в форме Лежандра

$$\rho_{eq}(r) = \frac{2(\mu - \nu)a^2b^2c^2}{\pi r^5 \sqrt{(v^2 + pv + q)(\mu^2 + p'\mu + q')}} F\left(\frac{\pi}{2}, \tau\right);$$

$$F\left(\frac{\pi}{2}, \tau\right) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - \tau^2 \sin^2 \varphi}} = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)(1-\tau^2 x^2)}}, \quad (3)$$

для  $a < r < b$

$$p = -(b^2 + c^2), \quad q = b^2c^2, \quad p' = -(a^2 + r^2), \quad q' = a^2r^2;$$

$\mu, \nu$  – наибольший и наименьший корни уравнения

$$(p - p')z^2 + 2(q - q')z + (p'q - pq') = 0.$$

Если  $b < r < c$ , формула для  $\rho_{eq}(r)$  имеет тот же вид (3) с той разницей, что следует поменять местами  $b$  и  $r$  в формулах  $p, q, p', q'$ . Во всех случаях

$$\tau^2 = \frac{(v^2 + p'\nu + q')(\mu^2 + p\mu + q)}{(v^2 + p\nu + q)(\mu^2 + p'\mu + q')} < 1.$$

Необходимо отметить, что если  $r = b$ , то  $\tau = 1$  и интеграл (3) будет расходящимся, при стремлении  $r$  к  $b$  слева и справа функция  $\rho_{eq}(r)$  неограниченно возрастает. Однако эта особенность функции является интегрируемой, к тому же функция плотности финитна, ее носитель принадлежит интервалу  $[a, c]$ . На рис. 1 показана плотность распределения по размерам полидисперсных сферических частиц, оптически эквивалентных хаотически ориентированным эллипсоидальным частицам с полуосями  $a = 10, b = 20, c = 30$ .

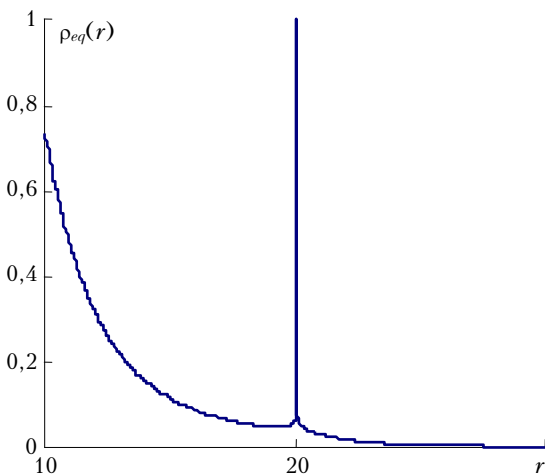


Рис. 1. Плотность распределения по размерам эквивалентного ансамбля сферических частиц

Существуют определенные неудобства, связанные с интегрированием функции с особенностями, это относится к сходимости несобственных инте-

гралов, увеличению числа точек интегрирования в окрестности особой точки при численном интегрировании. Основываясь на оптической эквивалентности хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц и полидисперсных сферических частиц, можно показывать, что оптические характеристики эквивалентных ансамблей связаны соотношением [11]:

$$\langle f(a, b, c) \rangle = \frac{a^2b^2c^2}{4\pi} \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \frac{f(r)}{r^6}, \quad (4)$$

$$r = \sqrt{a^2 \cos^2 \gamma \sin^2 \beta + b^2 \sin^2 \gamma \sin^2 \beta + c^2 \cos^2 \beta},$$

где функция под знаком интеграла не имеет особых точек.

Как показывают исследования, в численных расчетах предпочтительнее использовать формулу (4). Используя результаты [11] и формулу (1), можно доказать, что оптическая эквивалентность и формула (4) имеют место и для хаотически ориентированных неоднородных эллипсоидальных частиц, если поверхности уровня относительного показателя преломления  $m_r(\tau)$  являются эллипсоидами с полуосями  $a\tau, b\tau, c\tau$  ( $0 \leq \tau \leq 1$ ), а для эквивалентного ансамбля сферических частиц поверхностями уровня  $m_r(\tau)$  будут сферы радиуса  $r\tau$ .

#### 4. Обсуждение результатов

О корректности полученных в приближении РГД формул для коэффициентов разложения индикатрисы рассеяния оптически «мягких» хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц в ряд по полиномам Лежандра свидетельствуют расчетные данные, приведенные на рис. 2 и в таблице. Значения  $Z_{11}(\theta)$  и  $C_{sca}$  приводятся с точностью до множителя  $k^{-2}$ , который необходимо учесть в конечном результате.

Расчеты проведены для хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц с полуосями  $ka = 10, kb = 20, kc = 30$  и усредненным по объему относительным показателем преломления  $m_r = 1,0001$ . Принята следующая нумерация кривых на рис. 2 и столбцов в таблице:

1, 2 – однородные эллипсоидальные частицы, для которых вычисления выполнены с помощью метода Т-матриц с использованием аналитического ориентационного усреднения для элементов матрицы рассеяния [7] и приближения РГД соответственно;

3, 4 – неоднородные эллипсоидальные частицы с  $m_r(\tau) = 1 + \tau \cdot 0,0001(3)$ ,  $0 \leq \tau \leq 1$ , так как в настоящее время отсутствует точное решение, расчеты проведены для оптически эквивалентного ансамбля радиально неоднородных сферических частиц с использованием рекурсивного алгоритма [13] для многослойных сферических частиц, где число слоев определялось условиями сходимости до 4 верных значащих цифр, и с помощью приближения РГД на основе формул (1), (2) и (4) соответственно;

5, 6 – то же, что и в предыдущем случае,

$$m_r(\tau) = 1,0002 - \tau \cdot 0,0001(3), \quad 0 \leq \tau \leq 1.$$

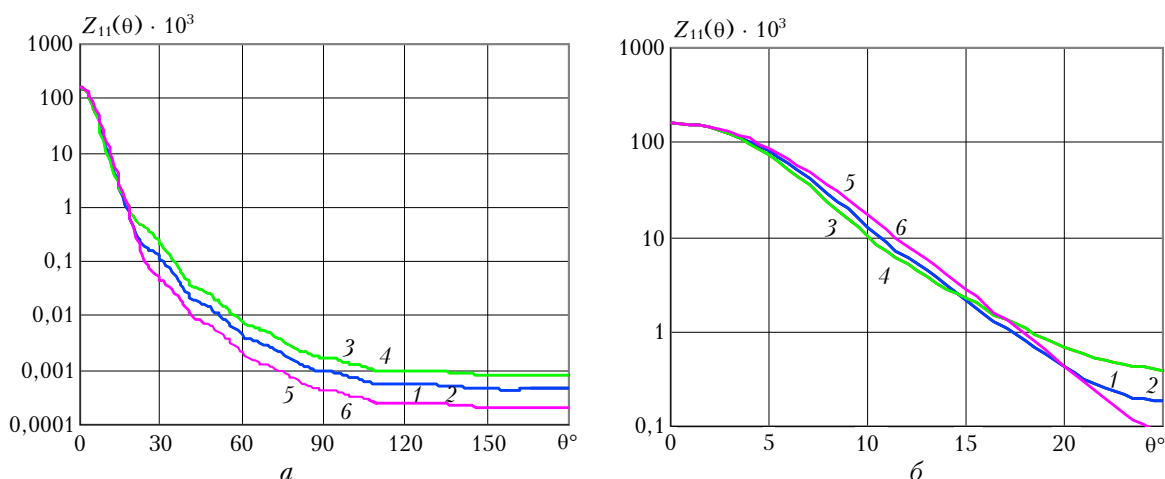


Рис. 2. Угловая зависимость  $Z_{11}(\theta)$  хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц различной внутренней структуры

Значения  $Z_{11}(\theta) \cdot 10^3$  и  $C_{sca} \cdot 10^3$  для хаотически ориентированных однородных и радиально неоднородных эллипсоидальных частиц

$\theta^\circ$	1	2	3	4	5	6
0	160,03	160,01	160,02	160,01	160,03	160,01
30	0,11076	0,11072	0,21100	0,21102	0,04666	0,04665
60	0,004407	0,004404	0,007783	0,007778	0,002086	0,002085
90	0,000989	0,000989	0,001762	0,001761	0,000445	0,000445
120	0,000549	0,000549	0,000983	0,000983	0,000244	0,000244
150	0,000469	0,000469	0,000829	0,000829	0,000213	0,000213
180	0,000471	0,000471	0,000837	0,000839	0,000210	0,000211
$C_{sca} \cdot 10^3$	6,2358	6,2357	5,8472	5,8473	6,9550	6,9548

Внутренняя структура  $[m_r(\tau)]$  частиц проявляется и наиболее выражена в диапазоне углов рассеяния больше  $25^\circ$ , бóльшие значения интенсивности рассеянного излучения в этом диапазоне углов соответствуют бóльшему значению относительного показателя преломления на поверхности частиц —  $m_r(1)$ . Оценка потоков рассеянного излучения показывает: рассеяние в телесном угле — ( $0 \leq \theta \leq 15^\circ$ ,  $0 \leq \varphi \leq 360^\circ$ ) вносит 95%-й вклад в коэффициент рассеяния  $C_{sca}$ , что объясняет порядок и соотношение коэффициентов рассеяния, приведенных в таблице (см. также рис. 2, б).

Предложенный алгоритм обладает устойчивостью при расчетах без ограничения на размер и параметры формы частиц, который эффективнее более чем на 2 порядка по времени численной реализации соответствующего алгоритма для однородных эллипсоидальных частиц с использованием метода Т-матриц и может служить основой для создания базы данных коэффициентов разложения индикатрисы рассеяния оптически «мягких» эллипсоидальных частиц — моделей биологических клеток. Система управления базами данных коэффициентов разложения с целью реализации их информационного потенциала может включать программы расчета коэффициента рассеяния, индикатрисы рассеяния и потоков рассеянного излучения в произвольных конических телесных углах.

Ранее [11] было показано, что и в приближении аномальной дифракции оптическая эквива-

лентность (4) имеет место для коэффициентов рассеяния ( $f = C_{sca}$ ) для однородных хаотически ориентированных эллипсоидальных и полидисперсных сферических частиц. Результаты, представленные в настоящей статье, дают основания полагать, что в приближении аномальной дифракции имеет место оптическая эквивалентность и для неоднородных эллипсоидальных и полидисперсных сферических частиц.

Эти результаты могут найти приложение в оптической классификации изотропных ансамблей неоднородных оптических «мягких» эллипсоидальных частиц [14] и в решении обратных задач на классах эквивалентности [15] оптики атмосферного аэрозоля [16] и оптики океана [17].

1. *Таблицы по светорассеянию*: в 5 т. / Под ред. К.С. Шифрина. Л.: Гидрометеиздат, 1966–1973.
2. Domke H. The expansion of scattering matrices for an isotropic medium in generalized spherical functions // *Astrophys. Space Sci.* 1974. V. 29, N 2. P. 379–386.
3. Paramonov L.E. Light scattering by randomly oriented particles into solid angles // *J. Opt. Soc. Amer. A.* 1994. V. 11, N 4. P. 1360–1369.
4. Domke H. Fourier expansion of the phase matrix for the Mie scattering // *Z. Meteorologie.* 1975. V. 25, N 6. P. 357–361.
5. de Rooij W.A., van der Stap C.C.A.H. Expansion of Mie scattering matrices in generalized spherical functions // *Astron. Astrophys.* 1984. V. 131, N 2. P. 237–248.

6. *Mishchenko M.I., Travis L.D., Lacis A.A.* Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. 445 p.
7. *Парамонов Л.Е., Шмидт В.А., Черкасова Г.В.* Аналитические алгоритмы усреднения в задачах дифракции света несферическими частицами // Вычислительные технологии. 2005. Т. 10, спец. выпуск. С. 100–108.
8. *Ван де Хюлт Г.* Рассеяние света малыми частицами / Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. 536 с.
9. *Latimer P.* Light scattering by ellipsoids // J. Coll. Interface Sci. 1975. V. 53, N 1. P. 102–108.
10. *Колмогоров А.Н., Фомин С.В.* Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1972. 496 с.
11. *Парамонов Л.Е.* Рассеяние света эллипсоидальными частицами. I. Препр. / Институт физики СО РАН (Красноярск). 2003. № 826. 32 с.
12. *Варшавович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.* Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975. 439 с.
13. *Bhandari R.* Scattering coefficients for a multilayered sphere: analytical expressions and algorithms // Appl. Opt. 1985. V. 24, N 13. P. 1960–1967.
14. *Парамонов Л.Е., Шмидт В.А.* Оптическая классификация изотропных ансамблей «мягких» эллипсоидальных частиц // Оптика атмосф. и океана. 2004. Т. 17, N 5–6. С. 521–525.
15. *Парамонов Л.Е., Хромечек Е.Б., Абдулкин В.В., Шмидт В.А.* К решению обратных задач на классах эквивалентности // Оптика атмосф. и океана. 2004. Т. 17, № 5–6. С. 508–512.
16. *Зуев В.Е., Кабанов М.В.* Оптика атмосферного аэрозоля. Л.: Гидрометеониздат, 1987. 254 с.
17. *Шифрин К.С.* Введение в оптику океана. Л.: Гидрометеониздат, 1983. 278 с.

*L.E. Paramonov, O.V. Sorokina.* **Expansion of the phase function of randomly oriented optically “soft” ellipsoidal particles in Legendre polynomials.**

The efficient approach is used to calculate the phase function of randomly oriented optically “soft” inhomogeneous ellipsoidal particles. Expansion of the phase function in Legendre polynomials is derived. The method is based on the optical equivalence of randomly oriented ellipsoidal particles and polydisperse spherical particles in the Rayleigh–Gans–Debye (RGD) approximation. The results are illustrated by T-matrix, Mie and RGD computations.