«Оптика атмосферы и океана», **17**, № 5–6 (2004)

УДК 535.36

Л.Е. Парамонов, В.А. Шмидт

Оптическая классификация изотропных ансамблей «мягких» эллипсоидальных частиц

Красноярский государственный технический университет

Поступила в редакцию 12.01.2004 г.

Проводится классификация изотропных ансамблей «мягких» эллипсоидальных частиц. Результаты иллюстрируются численными расчетами угловой зависимости элементов матрицы рассеяния хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц.

Введение

Предложенная в статье классификация изотропных ансамблей «мягких» эллипсоидальных частиц основана на оптической эквивалентности ансамблей «мягких» хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц [1] в приближении Рэлея–Ганса–Дебая [2]. Согласно [1] хаотически ориентированные эллипсоидальные частицы оптически эквивалентны трем различным полидисперсным ансамблям хаотически ориентированных сфероидальных частиц и полидисперсным сферическим частицам. Показано, что оптическая эквивалентность имеет более широкую область применения, если расчеты интегрального ядра проводить с использованием строгих методов – теории Ми и метода Т-матриц. Формулируется и проверяется рабочая гипотеза – эквивалентные ансамбли частиц имеют близкие по значениям оптические характеристики. Правомерность такой классификации подтверждается расчетами угловой зависимости элементов матрицы рассеяния с использованием строгих методов. Обсуждается решение обратных задач на классах эквивалентности.

1. Оптическая эквивалентность

Следуя [1], рассмотрим однократное рассеяние света ансамблем независимых хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц в приближении Рэлея–Ганса–Дебая (РГД). В этом случае хаотически ориентированные эллипсоидальные частицы оптически эквивалентны:

1) трем различным (за счет перестановок a, b, c) ансамблям полидисперсных хаотически ориентированных сфероидальных частиц:

$$< Z_{11}(\theta;a,b,c) > = \frac{2a^2b^2}{\pi}\int_a^b d\hat{a} < Z_{11}(\theta;\hat{a},\hat{a},c) > \times$$

$$\times \frac{\hat{a}^{-3}}{\sqrt{(b^2-\hat{a}^2)(\hat{a}^2-a^2)}}, \qquad (1)$$

где a, b, c – полуоси эллипсоидальной частицы; $< Z_{11}(\theta;a,b,c) >$ – интенсивность рассеянного излучения хаотически ориентированными эллипсоидальными частицами при неполяризованном падающем излучении единичной интенсивности, скобки $< >$ означают усреднение по ансамблю;

2) полидисперсным сферическим частицам с весовой функцией, инвариантной относительно перестановки a, b, c:

$$\rho_{eq}(r) = \Theta(c-r)\Theta(r-a)\frac{2a^2b^2c^2}{\pi r^5}\times$$

$$\times \int_a^{\min(r,b)} d\hat{a}\, \frac{\hat{a}}{\sqrt{-(b^2-\hat{a}^2)(a^2-\hat{a}^2)(c^2-\hat{a}^2)(r^2-\hat{a}^2)}}. \quad (2)$$

Здесь $\Theta(x)$ – функция Хевисайда.

Полученный интеграл после соответствующей подстановки $x = \hat{a}^2$ сводится к полному эллиптическому интегралу 1-го рода в форме Лежандра [3].

Непосредственная проверка показывает, что все рассматриваемые эквивалентные ансамбли частиц имеют равные усредненные по ансамблю: 1) объемы $<V>$; 2) площади проекций $<S>$ на плоскость, ортогональную направлению падающего излучения, а так как частицы являются выпуклыми телами, то и площади поверхностей, равные $4<S>$ [4]*; 3) квадраты объемов $<V^2>$.*

2. Классификация изотропных ансамблей оптически «мягких» эллипсоидальных частиц

В настоящем разделе рассматривается задача определения наиболее значимых параметров микроструктуры ансамбля частиц, определяющих угловую зависимость элементов матрицы рассеяния с целью классификации изотропных ансамблей оптически «мягких» хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц.

Авторы работы [5] утверждают, что основными параметрами распределения сферических частиц по размерам, которые определяют угловую зависимость элементов матрицы рассеяния, являются второй, третий и четвертый центральные моменты распределения, а тип распределения не столь важен. Следуя такому подходу, можно провести классификацию полидисперсных сферических частиц, если ввести отношение эквивалентности как равенство отмеченных моментов распределения, тогда в один класс попадут ансамбли частиц с тремя равными моментами распределения, в общем случае с различными распределениями по размерам. Однако отсутствует «мостик», связывающий сферические и несферические частицы.

Как показывает настоящее исследование, для оптически «мягких» частиц наиболее значимыми являются второй, третий и шестой центральные моменты распределения. Для изотропных ансамблей несферических частиц под вторым, третъим и шестым моментами распределения будем понимать среднюю площадь проекции частиц на плоскость, ортогональную направлению падающего излучения, средний объем и средний квадрат объема соответственно.

Эти параметры будем называть параметрами микроструктуры взвеси (ансамбля) частиц, и именно они будут использованы для классификации изотропных ансамблей эллипсоидальных частиц с относительными показателями преломления, соответствующими биологическим частицам.

Равенство трех отмеченных параметров микроструктуры является отношением эквивалентности и разбивает все изотропные ансамбли на классы эквивалентности. *Изотропные ансамбли частиц, принадлежащие одному классу, будем называть эквивалентными.*

В качестве представителя, характеризующего класс, используем степенное распределение. Обозначим

$$< S >= \int_a^b \pi r^2 f(r)dr;\; < V >= \int_a^b \frac{4\pi}{3} r^3 f(r)dr,$$

$$< V^2 >= \int_a^b \frac{16\pi^2}{9} r^6 f(r)dr$$

— второй, третий и шестой моменты распределения частиц по размерам с плотностью $f(r)$ соответственно; $[a, b]$ — диапазон изменения размеров сферических частиц.

Если $<S>$, $<V>$, $<V^2>$ известны, то можно найти в явном виде параметры степенного распределения частиц с финитной функцией плотности вида

$$f(r) = K r^{-5},\; r_{\min} \le r \le r_{\max}. \tag{3}$$

Заметим, что эта функция не удовлетворяет условию нормировки, коэффициент K рассматривается как концентрация частиц.

В дальнейшем для распределений, отличных от вышеотмеченного степенного распределения, будем находить моменты распределения и соответствующее им степенное распределение с такими же равными тремя моментами, а результаты расчета оптических характеристик этих ансамблей сравнивать.

Под оптически «мягкими» частицами будем подразумевать частицы с относительным показателем преломления, близким к единице, которые при хаотической ориентации имеют матрицу рассеяния с четырьмя независимыми элементами, т.е. такую же структуру матрицы рассеяния, как и у сферических частиц.

Для выполнения второго условия необходимо и достаточно, чтобы нормированные элементы матрицы рассеяния F_{22} и F_{11} незначительно отличались по значениям, тогда как следствие неравенства $|F_{33} - F_{44}| \le |F_{11} - F_{22}|$ и нормированные элементы матрицы рассеяния F_{33} и F_{44} также незначительно отличаются друг от друга.

В настоящем разделе рассматриваются оптические характеристики эквивалентных хаотически ориентированным эллипсоидальным частицам ансамблей, а именно: трех различных ансамблей полидисперных сфероидальных частиц (1) и двух ансамблей полидисперсных сферических частиц с весовой функцией (2) и эквивалентным степенным распределением (3). Формально существует $6 = 3!$ перестановок в тройке размеров полуосей (a, b, c), однако расчеты согласно формуле (1) не зависят от перестановки первых двух чисел. Таким образом, имеем три различных эквивалентных ансамбля полидисперсных сфероидальных частиц. Это полидисперсные вытянутые частицы $(a < c,\ b < c)$, сжатые частицы $(c < a,\ c < b)$ и ансамбль, включающий сжатые и вытянутые частицы $(a < c < b$ или $b < c < a)$. Следует отметить, что перестановка (или изменение координатных осей) размеров полуосей не влияет на окончательный результат, от нее зависит выбор эквивалентного ансамбля полидисперсных сфероидальных частиц.

Все отмеченные ансамбли частиц являются эквивалентными, и оптические свойства каждого из них можно рассматривать как оценку оптических характеристик эллипсоидальных частиц.

Последующие расчеты проводятся для относительного показателя преломления частиц, равного 1,05. Эллипсоидальная частица характеризуется размерами полуосей относительно длины волны падающего излучения:

$$\rho_a = \frac{2\pi a}{\lambda},\; \rho_b = \frac{2\pi b}{\lambda},\; \rho_c = \frac{2\pi c}{\lambda}.$$

На рис. 1—4 представлена угловая зависимость элементов нормированной матрицы рассеяния для пяти отмеченных эквивалентных ансамблей частиц, имеющих следующую нумерацию: *1* — полидисперсные вытянутые, *2* — сжатые сфероидальные частицы, *3* — ансамбль, состоящий из вытянутых и сжатых сфероидальных частиц, *4* — полидисперсные сферические частицы (формула (2)) и *5* — эквивалентный ансамбль сферических частиц со степенным распределением.

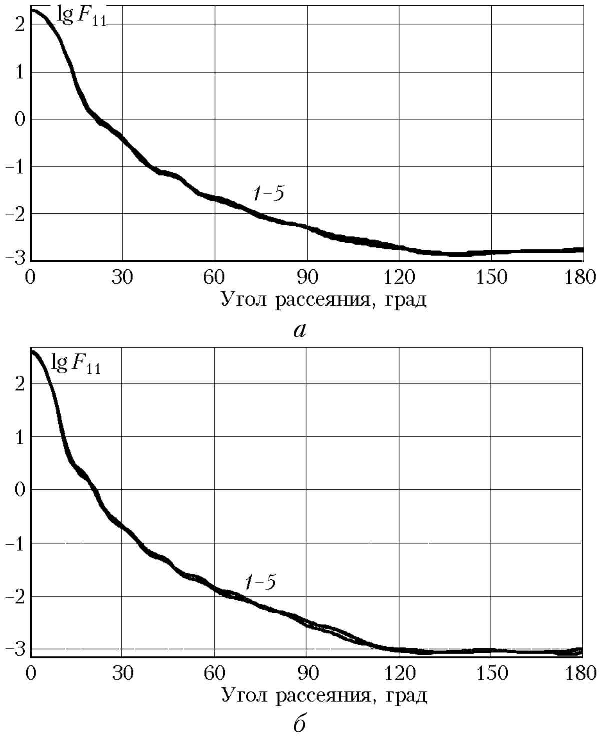

Рис. 1. Угловая зависимость элемента F_{11} — индикатрисы рассеяния эквивалентных ансамблей частиц. Значения приводятся в логарифмическом масштабе: $\rho_a = 10$, $\rho_b = 15$, $\rho_c = 20$ (*а*), $\rho_a = 150$, $\rho_b = 20$, $\rho_c = 30$ (*б*)

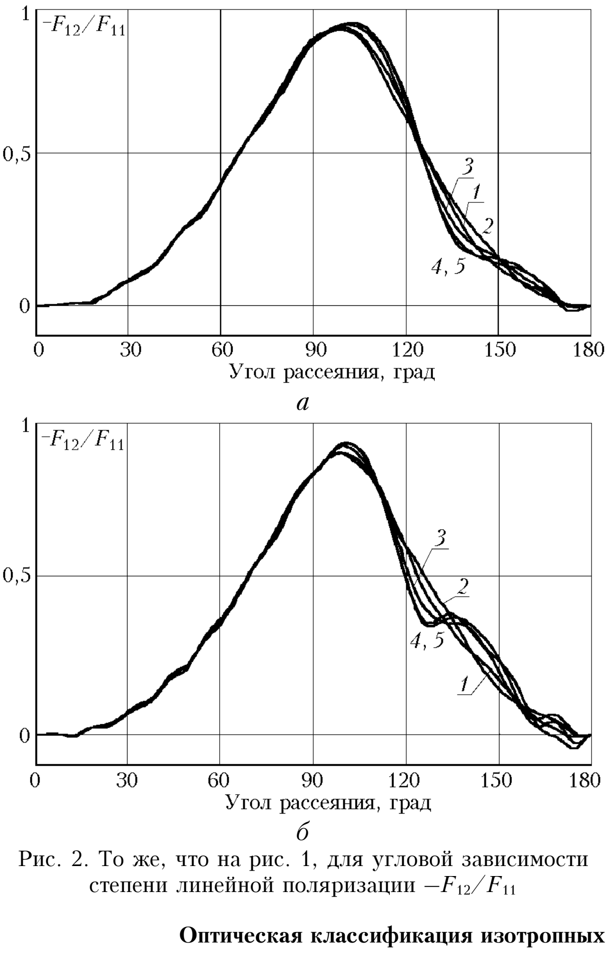

Рис. 2. То же, что на рис. 1, для угловой зависимости степени линейной поляризации $-F_{12}/F_{11}$

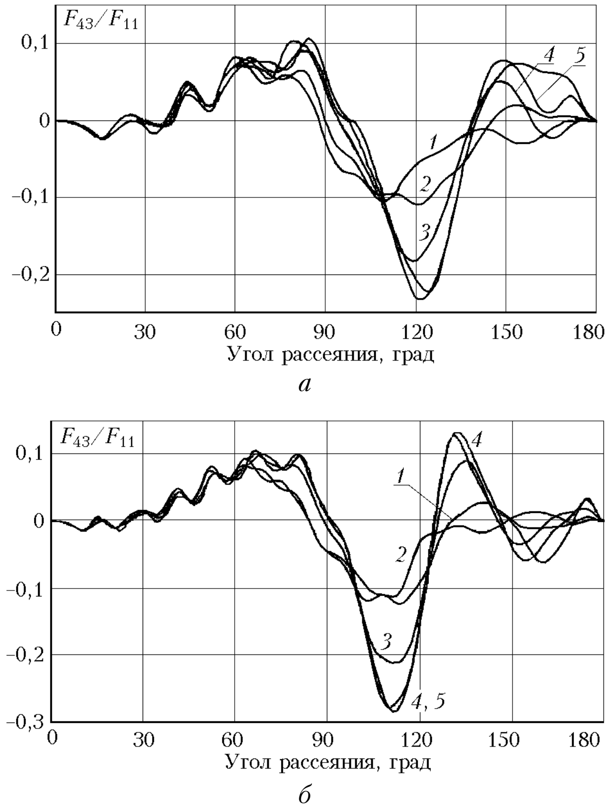

Рис. 3. То же, что на рис. 1, для угловой зависимости F_{43}/F_{11}

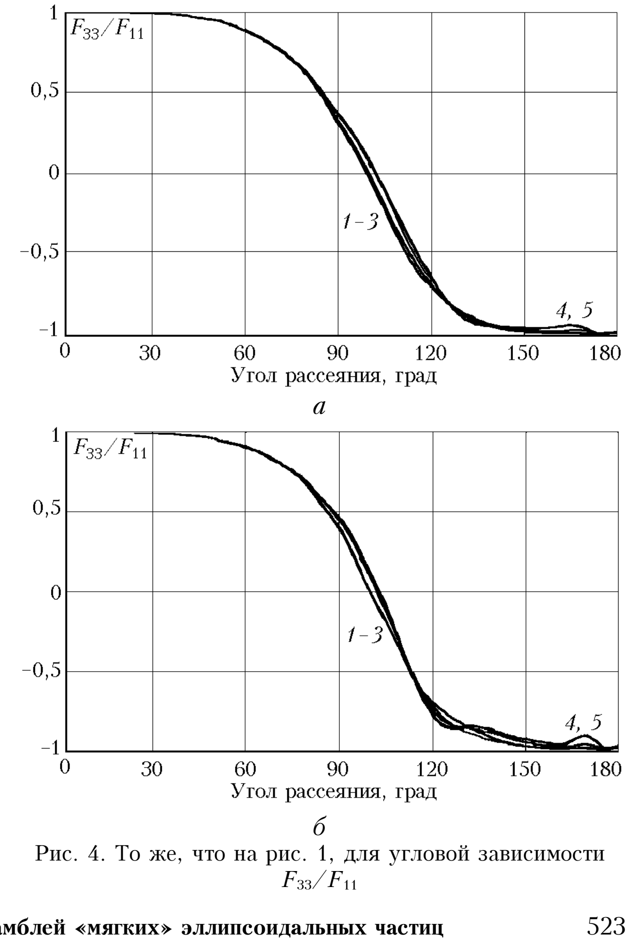

Рис. 4. То же, что на рис. 1, для угловой зависимости F_{33}/F_{11}

Представителем этого класса эквивалентности являются и соответствующие хаотически ориентированные эллипсоидальные частицы.

Представленный иллюстративный материал подтверждает рабочую гипотезу о значимости трех моментов распределения, определяющих угловую зависимость индикатрисы рассеяния «мягких» эллипсоидальных частиц, согласованность результатов для пяти различных распределений также дает основание полагать, что и истинные значения индикатрисы рассеяния эллипсоидальных частиц согласуются с результатами расчетов.

Заметим, что такое совпадение угловой зависимости индикатрисы возможно только для семейства эллипсоидальных частиц, так как сфероидальная и эллипсоидальная частицы могут быть получены из сферической частицы с помощью линейного преобразования. В то же время для цилиндрических частиц такая классификация не приводит к аналогичному результату, индикатриса рассеяния этих частиц имеет локальные экстремумы в отличие от сглаженной индикатрисы сфероидальных частиц.

По результатам численных расчетов можно сделать важный с точки зрения практических приложений вывод. В условиях однократного рассеяния и при отсутствии ориентирующего частицы фактора решение некоторых обратных задач оптики биологических взвесей клеток с использованием эллипсоидальной формы частиц сводится к решению обратных задач на классах эквивалентности. Для хаотически ориентированных биологических частиц, когда одному классу принадлежат частицы различной формы, размера и с неизвестной концентрацией, если известен относительный показатель преломления, при обращении индикатрисы рассеяния можно определить только две величины: $<V>/<S>$, $<V^2>/<S>$. Для этого необходимо предварительно определить класс эквивалентности. Представителем класса будут полидисперсные сферические частицы со степенным распределением с параметрами $r_{\min}$, $r_{\max}$. Третий параметр K не важен, так как при однократном рассеянии индикатриса от концентрации частиц не зависит. Если угловая зависимость индикатрисы рассеяния «чувствительна» к относительному показателю преломления частиц, т.е. не выполняются условия приближения РГД, тогда может быть проведена оценка и показателя преломления частиц.

Дальнейшая дифференциация частиц возможна при использовании поляризационных характеристик и при наличии априорной информации о форме частиц.

Заключение

Предложен эффективный метод расчета оптических характеристик «мягких» хаотически ориентированных эллипсоидальных частиц, основанный на оптической эквивалентности хаотично ориентированных эллипсоидальных и полидисперсных сферических частиц в приближениях Рэлея—Ганса—Дебая и аномальной дифракции [1, 6], который позволяет оценку оптических свойств «мягких» эллипсоидальных частиц свести к более простым расчетам с использованием теории Ми.

Оптическая эквивалентность имеет более широкую область применения, если ядра интегральных операторов рассчитываются по точным методам — теории Ми и методу Т-матриц [7].

Предложена оптическая классификация изотропных ансамблей оптически «мягких» эллипсоидальных частиц по микроструктурным параметрам $<S>$, $<V>$, $<V^2>$. Необходимо отметить, что существует свобода выбора представителя класса эквивалентности, оптические характеристики которого и будут являться оценкой для класса в целом. В данном случае выбор эквивалентного степенного распределения продиктован математическими соображениями — параметры этого распределения находятся аналитически и в явном виде. Исходя, например, из физических соображений или априорной информации, эквивалентное распределение может быть равномерным, логнормальным и т.д. Правомерность такого подхода подтверждается численными расчетами угловой зависимости элементов матрицы рассеяния *полидисперсных* хаотически *ориентированных* сфероидальных частиц по точным методам.

Необходимое условие классификации — матрица рассеяния должна иметь четыре независимых элемента, т.е. линейная деполяризация рассеянного излучения близка к нулю.

Для ансамблей сферических частиц предложенная классификация имеет место и в случае, когда относительный показатель преломления соответствует аэрозолям минерального происхождения, и без ограничений на размер частиц.

Более подробные и систематические исследования необходимы для определения области корректного применения классификации изотропных ансамблей несферических частиц, в том числе и разбиения на подклассы с учетом поляризационных характеристик.

Классификация позволяет провести параметризацию обратной задачи и в области принятия рабочей гипотезы сводит ее решение к определению класса эквивалентности.

Расчеты элементов матрицы рассеяния проведены с использованием метода Т-матриц [7] по формулам и алгоритму работы [8].

1. *Парамонов Л.Е.* Рассеяние света эллипсоидальными частицами. I. Препр. / Ин-т физики СО РАН (Красноярск). 2003. № 826. 32 с.
2. *Борен К., Хафмен Д.* Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир, 1986. 660 с.
3. *Фихтенгольц Г.М.* Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 2. М.: Наука, 1970. 800 с.
4. *Vouk V.* Projected area of convex bodies // Nature (London). 1948. V. 162. P. 330—331.
5. *Hansen J.E., Travis L.D.* Light scattering in planetary atmospheres // Space Sci. Rev. 1974. V. 16. P. 527—610.

6. *Парамонов Л.Е.* Об оптической эквивалентности хаотически ориентированных эллипсоидальных и полидисперсных сферических частиц. Сечения ослабления, рассеяния и поглощения // Оптика и спектроскопия. 1994. Т. 77. № 4. С. 660–663.
7. *Waterman P.C.* Symmetry, unitarity and geometry in electromagnetic scattering // Phys. Rev. D. 1971. V. 3. P. 825–839.
8. *Шмидт В.А., Парамонов Л.Е.* Фурье-разложение элементов матрицы рассеяния хаотически ориентированных несферических частиц // Вопросы математического анализа. Вып. № 7. Красноярск: КГТУ, 2004. С. 154–164.

L.E. Paramonov, V.A. Schmidt. **Optical classification of isotropic ensembles of «soft» ellipsoidal particles.**

The classification of isotropic ensembles of «soft» ellipsoidal particles is considered. The results are illustrated by numerical calculations of the angular dependence of the scattering matrix elements for randomly oriented «soft» ellipsoidal particles.