随机取向双层椭球粒子偏振散射特性研究*

孙贤明[†] 王海华 申 晋 王淑君 (山东理工大学电气与电子工程学院,淄博 255049)

(2011年3月21日收到;2011年3月25日收到修改稿)

基于 T 矩阵方法,给出了随机取向、轴对称、含核椭球粒子的散射计算方法.散射体的核和外壳均可为非球形 粒子,整个粒子具有轴对称性.以含核椭球粒子为模型,计算了含有吸收性内核(黑炭,black carbon)的水凝物气溶 胶的散射特性,分析了核的大小、形状对消光系数、散射系数、吸收系数、不对称因子、单次散射反照率以及 Muller 矩阵等的影响.

关键词:光散射,T矩阵,Muller矩阵,椭球粒子 PACS: 42.25.Fx, 42.25.Bs

1. 引 言

自然界中的很多粒子都是非球形,且非均一成 分构成的;含核粒子也极为常见,比如细菌、红细 胞、海藻、融化中的冰晶、含有凝结核的雾滴、云滴 等^[1-3].在以往的研究中,很多研究者利用同心球模 型模拟了含核粒子的光散射^[4,5],这种理想化模型 很难准确模拟出真实含核粒子的散射特性.本文利 用T矩阵方法模拟了随机取向时轴对称含核粒子 的光散射特性,分析了核对整个粒子散射的影响.

T矩阵方法^[6]已被广泛地用于非球形粒子散射 特性的计算中,尽管这种方法可以应用于任意形状 粒子的散射特性计算,但是利用其对轴对称粒子 (或者称为旋转对称体)的研究更为普遍.T矩阵方 法在计算随机分布的非球形粒子散射特性方面具 有优势,因为转换矩阵(即所谓的T矩阵)与粒子的 形状、构成以及大小有关,而与入射光方向无关,因 此仅需要计算一次T矩阵.这种方法不需要对所有 的粒子取向进行平均,Mishchenko等^[7]给出了一种 解析、精确、高效的取向平均计算方法.尽管T矩阵 方法已经被广泛地应用于非球形粒子的散射计算 中,但是应用于含核非球形粒子散射的研究很少. 在不需要计算粒子的取向平均时,分离变量法^[8]、 几何光学方法^[9]以及一些数值算法,如有限差分

©2011 中国物理学会 Chinese Physical Society

法、有限元法以及矩量法等在计算含核粒子的散射 时都很有效.但是当粒子的取向为随机取向时,计 算其平均散射特性,这些方法就会显得低效和耗时.

本文以含核椭球粒子为模型,模拟了以黑炭为 核的水凝物气溶胶在可见光波段的吸收和散射特 性,分析了核的大小和形状对整个粒子的散射特性 影响.

2. 理 论

基于 T 矩阵方法,任何粒子的入射场、内场和 散射场都可以被矢量球谐函数展开^[6],即

$$\boldsymbol{E}_{\text{inc}}(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left[a_{mn} \operatorname{Rg} \boldsymbol{M}_{mn}(kr) + b_{mn} \operatorname{Rg} \boldsymbol{N}_{mn}(kr) \right], \qquad (1)$$

$$\boldsymbol{E}_{sca}(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} [p_{mn}\boldsymbol{M}_{mn}(kr) + q_{mn}\boldsymbol{N}_{mn}(kr)], \qquad (2)$$

$$\boldsymbol{E}_{int}(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left[c_{mn} \operatorname{Rg} \boldsymbol{M}_{mn}(m_{r} k r) + d_{mn} \operatorname{Rg} \boldsymbol{N}_{mn}(m_{r} k r) \right], \qquad (3)$$

其中, E_{inc} , E_{sca} 和 E_{int} 分别为入射场、散射场和内场. a_{mn} 和 b_{mn} 为入射场的展开系数, p_{mn} 和 q_{mn} 为散射场的展开系数, c_{mn} 和 d_{mn} 为内场展开系数. m_r 为粒子内部的折射率.

^{*}山东省自然科学基金(批准号:ZR2009AQ013)资助的课题.

[†] E-mail:xianming_sun@yahoo.com.cn

$$\boldsymbol{M}_{mn}(kr) = (-1)^{m} d_{n} \mathbf{h}^{(1)}(kr) \boldsymbol{C}_{mn}(\vartheta) \exp(\mathrm{i} m \phi),$$
(4)

$$N_{mn}(kr) = (-1)^{m} d_{n} \left\{ \frac{n(n+1)}{kr} \mathbf{h}_{n}^{(1)}(kr) \boldsymbol{P}_{mn}(\vartheta) + \frac{1}{kr} [kr \mathbf{h}_{n}^{(1)}(kr)]' \boldsymbol{B}_{mn}(\vartheta) \right\} \exp(im\phi), (5)$$

$$\boldsymbol{B}_{mn}(\vartheta) = \vartheta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta} d^{n}_{0m}(\vartheta) + \phi \frac{\mathrm{i}m}{\mathrm{sin}\vartheta} d^{n}_{0m}(\vartheta), \qquad (6)$$

$$\boldsymbol{C}_{mn}(\vartheta) = \vartheta \frac{\mathrm{i}m}{\mathrm{sin}\vartheta} d^n_{0m}(\vartheta) - \phi \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta} d^n_{0m}(\vartheta), \qquad (7)$$

$$\boldsymbol{P}_{mn}(\vartheta) = \boldsymbol{r} d_{0m}^n(\vartheta) / r, \qquad (8)$$

$$d_n = \left[\frac{2n+1}{4\pi n(n+1)}\right]^{1/2},$$
(9)

其中 $d_{lm}^n(\vartheta)$ 为 Winder *d*-function,

$$d_{lm}^{n}(\vartheta) = A_{lm}^{n}(1 - \cos\vartheta)^{(l-m)/2}(1 + \cos\vartheta)^{-(l+m)/2} \\ \times \frac{d^{n-m}}{(d\cos\vartheta)^{n-m}} [(1 - \cos\vartheta)^{n-l} \\ \times (1 + \cos\vartheta)^{n+l}], \qquad (10)$$

当

 $n \ge n^* = \max(|l|, |m|), d_{lm}^n(\vartheta) = 0, (11)$ 当 n < n^{*} 时,

$$A_{lm}^{n} = \frac{(-1)^{n-m}}{2^{n}} \left[\frac{(n+m)!}{(n-l)!(n+l)!(n-m)!} \right]^{1/2},$$
(12)

(4)和(5)式中的球 Hankel 函数 $h_n^{(1)}$ 用球 Bessel 函数 j_n 代替即为 $\operatorname{Rg} M_{mn}(kr)$ 和 $\operatorname{Rg} N_{mn}(kr)$.

我们可以将散射系数和入射系数简单表示为[10-12]

$$\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix};$$
 (13)

入射场和内场的线性关系为

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix};$$
(14)

散射场和内场的线性关系为

$$\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix};$$
(15)

因此T矩阵可以简单表示为

$$\boldsymbol{T} = -\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{A}^{-1}. \tag{16}$$

对于内层(核)折射率为 m_1 ,外层折射率为 m_2 的双层的粒子^[13,14],

$$\boldsymbol{T} = -\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{A}^{-1} = - [\boldsymbol{B}_2 + \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}_2 \times (-\boldsymbol{B}_1 \times \boldsymbol{A}_1^{-1})]$$

× $[A_2 + AA_2 \times (-B_1 \times A_1^{-1})]^{-1}$, (17) 其中 $-B_1 \times A_1^{-1} = T_1$ 为核的 T 矩阵,计算方法与均 一构成粒子的计算方法相同. 计算时内层粒子的相 对折射率取 m_1/m_2 , 外层的相对折射率取 1, 人射波 数为 $2\pi/\lambda_0m_2$, λ_0 为真空中的入射波长, 即相当于 内核存在于折射率为 m_2 的媒质中. 计算矩阵 A_2 和 B_2 时,整个粒子的相对折射率取 m_2 , 媒质折射率为 1, 入射波数为 $2\pi/\lambda_0$, $-B_2 \times A_2^{-1}$ 为均一构成无核 粒子的 T 矩阵;矩阵 BB_2 和 AA_2 的计算条件与 A_2 , B_2 类似, 但是在计算时, 宗量为 kr 的第一类 Bessel 函数需要用 Hankel 函数替代.

根据 Mishchenko 的研究结果^[7],在求得 T 矩阵 以后,随机取向的非球形粒子的散射特性可以通过 解析形式直接求得,而不需要对所有的取向求解然 后取平均.这种方法的计算速度相比于取向数值平 均的方法可提高几十倍.其中散射截面和消光截 面为

$$C_{\text{ext}} = -\frac{2\pi}{k^2} \text{Re} \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} \sum_{m=-n}^{n} \left[T_{\text{mnmn}}^{11} + T_{\text{mnmn}}^{12} \right], \quad (18)$$

$$C_{\text{sca}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=n}^{n} \sum_{m'=-m'=-n'}^{n'} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} |T^{ij}_{\text{mmm'n'}}|^2 .(19)$$

Muller 矩阵描述了散射体对入射光的散射影响,入射光和散射光可以由 Stokes 矢量来描述,它们的关系由 Muller 矩阵描述^[15],即

$$\boldsymbol{I}_{\rm S} = \frac{C_{\rm sca}}{4\pi R^2} \boldsymbol{F}(\theta) \boldsymbol{I}_i \qquad (20)$$

其中, I_s 和 I_i 为 Stokes 矢量, 是一个由 I, Q, U, V 四 个参数组成的列向量, R 为散射体到观测点的距 离. 对于轴对称的非球形粒子, Muller 矩阵只有 6 个 相互独立的元素^[13]

$$\boldsymbol{F}(\theta) = \begin{bmatrix} F_{11}(\theta) & F_{12}(\theta) & 0 & 0\\ F_{12}(\theta) & F_{22}(\theta) & 0 & 0\\ 0 & 0 & F_{33}(\theta) & F_{34}(\theta)\\ 0 & 0 & -F_{34}(\theta) & F_{44}(\theta) \end{bmatrix},$$
(21)

其中 F₁₁ 为单次散射相函数,满足归一化条件

$$\frac{1}{2} \int_{0}^{\pi} F_{11}(\theta) \sin(\theta) d\theta = 1.$$
 (22)
不对称因子

$$g = \langle \cos\theta \rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \cos(\theta) F_{11}(\theta) \operatorname{dcos}(\theta),$$

反映了粒子散射的各向异性程度, g = 0 为各向同性散射.

3. 计算结果与讨论

本文的计算中,含核粒子内核为黑炭,外壳为

水,入射波长在真空中为448 nm,黑炭在真空中的 相对折射率为1.75+0.44i^[16],水的真空相对折射 率为1.33.我们讨论了整个粒子的尺寸参数(size parameter)为10时,内核的大小和形状对整个粒子 散射特性的影响.

椭球粒子为旋转对称体,在球坐标系下,其方 程为

 $r(\theta, \phi) = r_{eq} \varepsilon^{1/3} [\varepsilon^2 \cos^2 \theta + \sin^2 \theta]^{-1/2},$ (23) 其中 r_{eq} 为等体积球的半径, $\varepsilon = b/a$ 为纵横比,其中旋转轴的长度为 *a*.

图 1 给出了尺寸参数为 10 的双层椭球粒子, *ε* 分别等于 0.7,0.8,0.9 和 1.0(同心球)时,随机取向的双层椭球粒子的消光系数、散射系数、吸收系

数以及单次散射反照率随内核半径和外壳半径比 q= r_{core}/r_{shell} 的变化关系.从图中可以看出,当 q 较小 时,不同纵横比的椭球粒子的消光系数和散射系数 差别较大;但是当 q 较大时,其差别较少;当 q = 0时,吸收系数等于 0,即散射系数和消光系数相等, 这是因为当 q = 0 时,整个粒子为无核粒子,而外层 为非吸收性粒子.不同纵横比的椭球粒子的吸收系 数差别很小,随着 q 的增大吸收系数总体上呈上 升趋势,这是因为 q 的增大,内核所占比重更大, 而内核是有吸收性的黑炭;另外单次散射反照率 随着 q 的增大呈下降趋势,当q 接近于 1 时有所提 高,这是因为当q = 1 时,整个粒子变成了均一成 分粒子.



图 1 双层同心椭球粒子的消光系数、散射系数、吸收系数、单次散射反照率随 q 的变化曲线

图 2 给出了内核粒子为球形,外壳为椭球形粒 子的消光系数、散射系数和吸收系数以及单次散射 反照率随着 q 的变化曲线. 曲线总的趋势和图 1 相 似,但是在 q 接近于 1 时,各个参数随着外壳粒子的

纵横比 ε 的变化较大,这点不同于同心的双层椭球

粒子.



图 2 内核为球形,外壳为椭球形含核粒子的消光系数(a)、散射系数(b)、吸收系数(c)、单次散射反照率(d)随 q 的变化曲线



图 3 不对称因子随 q 的变化曲线 (a)为同心椭球粒子;(b)内核为球,外壳为椭球



图 4 $\varepsilon = 0.8$ 时同心椭球粒子的 Muller 矩阵各元素随散射角的变化曲线

图 3(a) 给出了同心双层椭球粒子的不对称因 子,图 3(b) 为外层为椭球,内层为球形粒子的单次 散射不对称因子.从图中可以看出,不对称因子随 着 q 的增大呈上升趋势,当接近于1时又有所下降, 这是因为当 q 增大时,粒子的非均一性增大,当接近 于1时,粒子又接近于均匀,因此不对称因子又 变小.

图 4 给出了尺寸参数为 10,纵横比 ε = 0.8 时, 不同 q 的同心双层椭球粒子的 Muller 矩阵. 从图中 可以看出,当q接近于1时,单次散射相矩阵 $F_{11}(\theta)$ 更平缓,只有在前向0°到40°范围内的振荡较大; 而 q 较小时, $F_{11}(\theta)$ 的振荡较大. 理论上, 球形粒子 在所有的散射角度上 $F_{22}/F_{11} \equiv 1$. 从图中可以看出 当 q=1,即单层椭球粒子时, F_{22}/F_{11} 近似等于 1;另 外对于所有的q,在小于80°范围内近似等于1,大 于80°的范围内, F₂₂/F₁₁的大小随着角度的变化出 现振荡,并且偏离1较大.对于球形粒子, $F_{33} \equiv F_{44}$, 因此 F₃₃ 和 F₄₄ 是否相等可以作为是否球形的指示 器.从图中可以看出当θ较小时, F₃₃/F₁₁ 和 F₄₄/F₁₁ 也近似等于1;当球形粒子在 θ = 180°时, F_{33}/F_{11} 和 F44/F11 应恒等于 - 1. 从图中可以看出,非球形粒 子会偏移-1,随着内核比例的变化甚至变成了正 值,这也可以作为球形和非球形的判据,并可以利 用后向进行粒子尺寸和形状的反演. 当 q 较小时,

 [1] Wang Y W, Lei H N, Bu M, Han G C 2009 Chin. J. Lasers 36
 2629 (in Chinese) [王亚伟、雷海娜、卜 敏、韩广才 2009 中 国激光 36 2629]

- [2] Sun X M, Han Y P 2006 Acta Phys. Sin. 55 682 (in Chinese) 「孙贤明、韩一平 2006 物理学报 55 682]
- [3] Quirantes A 1999 J. Quant. Spectroscopy & Radiat. Trans. 63 263
- [4] Wu Z S, Guo L X, Ren K F, Gouesbet G, Grehan G 1997 Appl. Opt. 36 5188
- [5] Sun X M, Shen J, Wei P Y 2009 Acta Phys. Sin. **58** 6222 (in Chinese) [孙贤明、申 晋、魏佩瑜 2009 物理学报 **58** 6222]
- [6] Waterman P C 1971 Phys. Rev. D 3 825
- [7] Mishchenko M I, Travis L D, Mackowski D W 1996 JQSRT 55 535
- [8] Han Y P, Wu Z S 2000 Acta Phys. Sin. 49 57 (in Chinese) 「韩一平、吴振森 2000 物理学报 49 57]

 F_{33} 和 F_{44} 的差别变大. 从图中可以看出,线性极化 率随着 θ 的变化非常剧烈,且随着 q的变化也很大, 当 q = 0.8和 1.0时, F_{12}/F_{11} 在大部分角度范围内 是小于 0的,而当 q较小时, F_{12}/F_{11} 在大部分角度 范围内为正值. F_{34}/F_{11} 随着 θ 以及 q的变化也很 大,不过变化关系和 F_{12}/F_{11} 相反. 从整个图中可以 看出, Muller 矩阵中的很多元素具有相同的特点,在 $\theta = 0^{\circ}$ 时, F_{22}/F_{11} , F_{33}/F_{11} , F_{44}/F_{11} 都等于 1, F_{12}/F_{11} 和 F_{34}/F_{11} 等于 0; $\theta = 180^{\circ}$ 时, $F_{22}/F_{11} = 1$, $F_{33}/F_{11} = -1$, $F_{44}/F_{11} = -1$, $F_{12}/F_{11} = 0$, F_{34}/F_{11} = 0.

4. 结 论

利用T矩阵方法计算了随机取向的含核椭球 粒子的偏振光散射特性,分析了消光系数、散射系 数、吸收系数、单次散射反照率以及不对称因子随 着纵横比以及内核和外壳的半径比的变化关系;分 析了纵横比等于0.8的椭球粒子其Muller矩阵元素 随着内核和外壳半径比的变化关系.从有限的计算 结果中很难得到通用性的结论,但是我们的计算结 果反映了内核的尺寸,以及形状对整个粒子散射特 性的影响.该结果对于研究含核非球形粒子的散射 具有一定的应用价值.

- [9] Sun X M, Wang H H, Liu W Q, Shen J 2009 Chin. Phys. B 18 1040
- [10] Tsang L T, Kong J A, Shin R T 1984 Radio Sci. 19 629
- [11] Mishchenko M I, Travis L D, Lacis A A 2002 Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles (Cambridge: Cambridge University Press)
- [12] Barber P W, Hill S C 1990 Light Scattering by Particles: Computational Methods (Singapore: World Scientific)
- [13] Peterson B, Strom S 1974 Phys. Rev. D 10 2670
- [14] Quirantes A 2005 J. Quantit. Spectroscopy & Radiat. Trans. 92 373
- [15] Bohren C B, Huffman D R 1983 Absorption and Scattering of Light by Small Particles (New York: Wiley)
- [16] D' Almeida G A, Koepke P, Shettle E P 1991 Atmospheric Aerosols: Global Climatology and Radiative Characteristics (Hampton, VA: A. Deepak)

Scattering of polarized light by randomly oriented coated spheroidal particle^{*}

Sun Xian-Ming[†] Wang Hai-Hua Shen Jin Wang Shu-Jun

(School of Electrical and Electronic Engineering, Shandong University of Technology, ZiBo 255049, China) (Received 21 March 2011; revised manuscript received 25 March 2011)

Abstract

A computer method is described to calculate the light-scattering properties of randomly oriented, axially symmetric coated particles, in the framework of the T-matrix theory. Both the core and the shell can be axially symmetric nonspheroidal particles. Based on the coated spheroidal particle model, light scattering characteristics of water aerosols with an absorptive core (black carbon) are calculated. The effects of cores with different sizes and shapes are analyzed on extinction efficiencies, scattering efficiencies, absorption efficiencies, single scattering albedos, asymmetric parameters.

Keywords: light scattering, T-matrix, Muller matrix, spheroid particle PACS: 42.25. Fx, 42.25. Bs

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2009AQ013).

[†] E-mail: xianming_sun@ yahoo. com. cn