

随机取向立方粒子光散射的数值分析^{*}

饶瑞中

(中国科学院安徽光学精密机械研究所, 合肥 230031)

(1998 年 3 月 2 日收到)

用离散偶极子近似法, 计算了立方粒子随机取向时在几种等效尺度参数下的光散射特性, 并与等效球形粒子的光散射特性进行了比较. 结果表明: 立方粒子和其他非球形粒子与其等效球形粒子光散射特性之间的差别大致相同, 说明对于随机取向的非球形粒子的光散射问题, 粒子的内在对称性和表面的突变不会带来明显的效果.

PACC: 4220; 9265; 0260

1 引 言

气溶胶粒子的光散射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. 实际粒子的形状千差万别, 它们的光散射特性也不尽相同. 由于非球形粒子散射的复杂性, 一般情况下总是将粒子作为球体来处理, 这样必然会带来各种误差. 因此各种方法被相继用来解决非球形粒子的散射问题^[1,2]. 大量的数值运算分析了随机取向的非球形粒子的散射与球形粒子的散射的差别^[3-8], 但这些数值分析大都针对具有旋转对称性且表面平缓变化的粒子, 如椭球粒子、Chebyshev 粒子等. 然而实际粒子可以具有各种可能的形态, 旋转对称且表面平缓变化的粒子, 其光散射特性能否代表一般形态的非球形粒子的光散射特性, 需要进行研究. 我们选择立方粒子为研究对象, 原因在于两个方面: 立方粒子不具备旋转对称性, 而且表面存在着突变; 立方粒子的光散射问题特别适宜用离散偶极子近似(DDA)^[9]法来处理, 而具有旋转对称性的粒子的光散射问题, 通常用 T 矩阵方法^[10]来解决.

2 计算方法

DDA 法的基本思想是: 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的总和构成散射场. 设将散射体离散为 N 个点, 每个点的极化率为 α_j , 坐标为 $\mathbf{r}_j$ ($j=1, 2, \dots, N$), 若该点处的电场为 $\mathbf{E}_j$, 则该点的极化强度 $\mathbf{P}_j$ 为

$$\mathbf{P}_j = \alpha_j \mathbf{E}_j. \quad (1)$$

^{*} 国家高技术研究发展计划激光技术青年基金(批准号: 95-14)资助的课题.

某点处的电场 $\mathbf{E}_j$ 为入射场 $\mathbf{E}_j^{\text{inc}}$ 与其他 $N-1$ 个点的极化场的总和:

$$\mathbf{E}_j = \mathbf{E}_j^{\text{inc}} + \sum_{k \neq j} \mathbf{A}_{jk} \mathbf{P}_k, \quad (2)$$

系数 $\mathbf{A}_{jk}$ 为一个 3×3 矩阵:

$$\mathbf{A}_{jk} = \frac{\exp(\mathbf{i} k \mathbf{r}_{jk})}{r_{jk}} \left[k^2 (\mathbf{r}_{jk} \mathbf{r}_{jk} - \mathbf{I}_3) + \frac{\mathbf{i} k r_{jk} - 1}{r_{jk}^2} (3 \mathbf{r}_{jk} \mathbf{r}_{jk} - \mathbf{I}_3) \right] \quad j \neq k, \quad (3)$$

式中 $k = 2\pi/\lambda$, λ 为入射光波长, $\mathbf{r}_{jk} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|$, $\mathbf{r}_{jk} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)/r_{jk}$, $\mathbf{I}_3$ 为 3×3 单位矩阵.

若定义 $\mathbf{A}_{jj} \equiv \alpha_j^{-1}$, 则极化强度 $\mathbf{P}_j$ 满足 $3N$ 复线性方程组:

$$\sum_{k=1}^N \mathbf{A}_{jk} \mathbf{P}_k = \mathbf{E}_j^{\text{inc}}. \quad (4)$$

远场 $\mathbf{r}$ 处的散射场为

$$\mathbf{E}_{\text{sca}} = \frac{k^2 \exp(\mathbf{i} k \mathbf{r})}{r} \sum_{j=1}^N \exp(-\mathbf{i} k \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_j) (\mathbf{r} \mathbf{r} - \mathbf{I}_3) \mathbf{P}_j. \quad (5)$$

显而易见,合理地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.因此利用这种方法进行数值运算的困难在于,离散偶极子数目随散射体的尺度参数指数增加.当尺度参数较大时,进行随机取向的运算非常耗时.因此我们只考虑粒子尺度与光波长可相比拟的情况.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.本文将粒子的等效尺度参数(即与立方粒子具有相同体积的球形粒子的尺度参数) $\mathbf{X}_{\text{eqv}}$ 选择为 1, 2, 4 和 8.

在大气气溶胶光散射问题的实际应用中,我们不关心固定取向的粒子,而只关心随机取向的粒子.本文所有结果都是针对随机取向的立方粒子,选择实际气溶胶粒子的典型折射率为 $1.50 - 0.02\mathbf{i}$. 由于在大尺度参数下运算时间太长,我们适当放宽了运算的精度,同时减小了粒子取向的数目.运算所需的有关参数列于表 1.

表 1 DDA 数值运算的有关参数

$\mathbf{X}_{\text{eqv}}$	3D 离散点数	总离散点数	运算精度/%	3D 取向数	总取向数
1	16, 16, 16	4096	0.1	16, 16, 16	4096
2	16, 16, 16	4096	0.1	16, 16, 16	4096
4	16, 16, 16	4096	0.1	16, 16, 16	4096
8	32, 32, 32	32768	1.0	16, 9, 5	720

3 吸收、散射与消光效率

将随机取向的立方粒子的吸收、散射和消光效率分别定义为它们的吸收、散射和消光截面分别除以等效球形粒子的几何截面,记为 $\mathbf{Q}_{\text{abs}}$ (立方), $\mathbf{Q}_{\text{sca}}$ (立方), $\mathbf{Q}_{\text{ext}}$ (立方),等效球形粒子的吸收效率和消光效率分别记为 $\mathbf{Q}_{\text{abs}}$ (球形), $\mathbf{Q}_{\text{sca}}$ (球形), $\mathbf{Q}_{\text{ext}}$ (球形).4 个等效尺度参数下各效率因子的具体结果列于表 2.可以看出,各尺度参数下随机取向的立方粒子和等效球形粒子的吸收效率很接近.这与其他非球形粒子光散射的结果相符合,如

Chebeshhev 粒子,只有在 $X_{\text{eqv}} > 8$ 时,球形粒子与非球形粒子的吸收效率的差别才显著^[4].当 $X_{\text{eqv}} < 8$ 时,立方粒子和等效球形粒子的散射效率很接近, $X_{\text{eqv}} = 8$ 时,二者差别较大,立方粒子的散射效率高于等效球形粒子的散射效率.这也与其他非球形粒子光散射的结果类似^[4].综合考虑吸收效率和散射效率,在所考虑的尺度参数下,立方粒子的消光效率总是大于等效球形粒子的消光效率.由于我们计算的尺度参数很有限,尚不能就此得出一般的结论.

表 2 立方粒子和等效球形粒子的消光、散射和吸收效率

X_{eqv}	Q_{ext} (立方)	Q_{sca} (立方)	Q_{abs} (立方)	Q_{ext} (球形)	Q_{sca} (球形)	Q_{abs} (球形)
1	0.275	0.215	0.0595	0.270	0.212	0.0573
2	1.773	1.603	0.1697	1.827	1.657	0.1699
4	3.934	3.582	0.3519	3.892	3.540	0.3525
8	2.315	1.664	0.6509	1.987	1.346	0.6408

4 角散射特性

非球形粒子和球形粒子散射的差别更主要地表现在角散射特性上.由于在大尺度参数下球形粒子的角散射图像存在剧烈的振荡,将取向平均的非球形粒子的角散射图像与某一特定的等效尺度参数的球形粒子的相应结果作比较是不恰当的.要获得非球形粒子与球形粒子光散射之间差别的一般结果,应通过尺度平均平滑球形粒子角散射的振荡,为此我们对尺度参数为 x 的球形粒子的散射光学量在以 x 为中心的 $0.1x$ 范围内的 101 个点进行了微尺度平均^[4].

图 1 示出入射光偏振方向平行于散射平面的散射光强度 I_1 和入射光偏振方向垂直于散射平面的散射光强度 I_2 与散射角的关系.从图 1 可以看出一些明显的特征:

- 1)立方粒子与等效球形粒子角散射强度的差别随尺度参数的增大而迅速增大,在角散射强度的极值点附近尤为明显.
- 2)立方粒子角散射强度随散射角的振荡与球形粒子角散射强度随散射角的振荡存在着十分明显的同步性,然而振荡幅度大为减弱,变化相对平缓.这主要因为在大部分极小值附近立方粒子散射强度高于球形粒子散射强度.同时随着尺度参数的增大,两种振荡的同步性变差,出现明显的错位.
- 3)立方粒子与球形粒子角散射的明显差别主要发生在侧后向,即散射角约大于 60° 的范围内.
- 4)在后向(散射角在 $150^\circ\text{--}180^\circ$),立方粒子的散射强度低于球形粒子的散射强度.对于一般的非球形粒子,这个区域是与球形粒子光散射差别最显著的地方.这对于利用后向散射信号进行大气探测的光雷达具有十分重要的意义.
- 5)在前向(散射角在 $0^\circ\text{--}10^\circ$),立方粒子与球形粒子角散射的差别较不明显,随尺度参数的增大稍微增大.并且立方粒子的散射强度总是大于球形粒子的散射强度,根据光学定理,这与前述立方粒子的消光效率总是大于等效球形粒子的消光效率的结果一致.

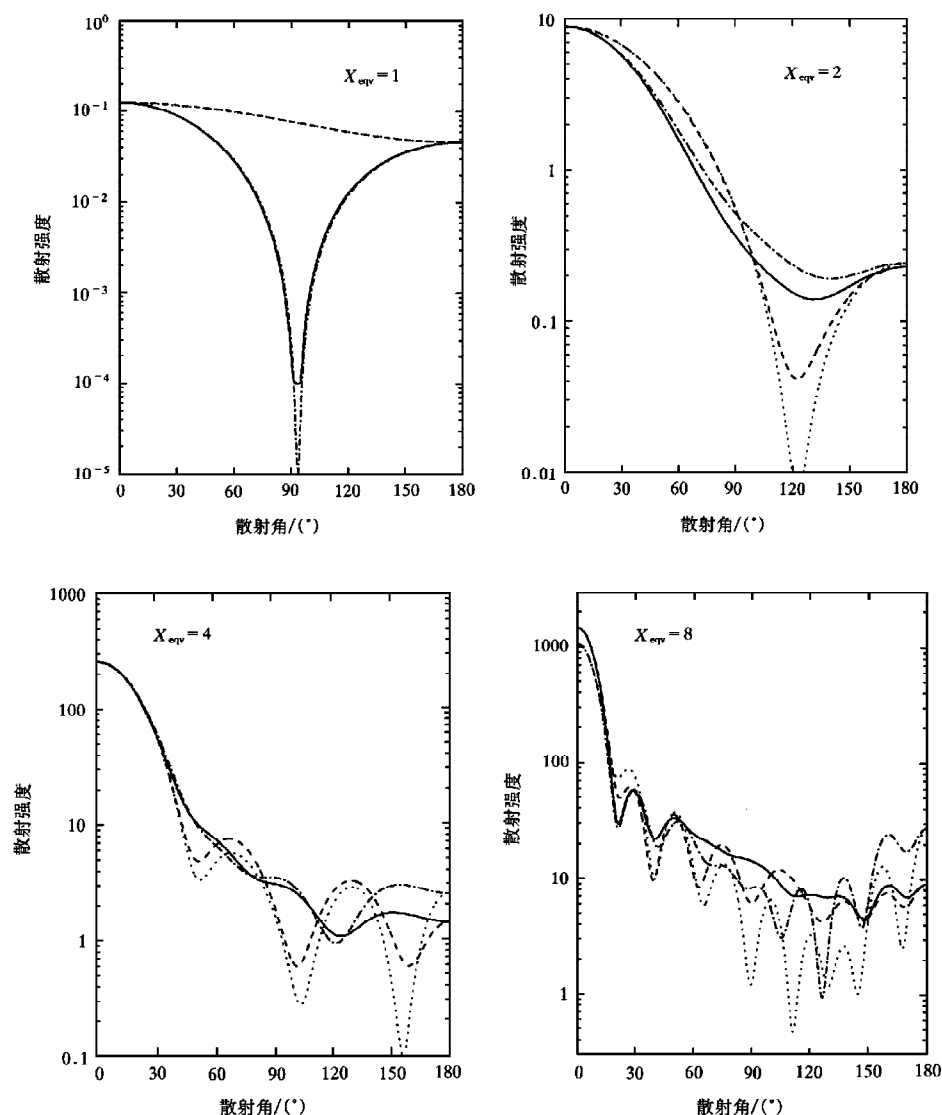


图1 4种尺度参数下随机取向立方粒子和等效球形粒子的角散射强度 ——为 I_1 (立方);- - -为 I_1 (球形);...为 I_2 (立方);· · ·为 I_2 (球形)

上述这些特征与 Chebyshev 粒子光散射的结果很相近,然而由于我们所考虑的尺度参数的有限性,其他非球形粒子光散射的一些特征尚未观察到,如球形粒子与 Chebyshev 粒子角散射图像差别的双 S 形结构^[5].此外我们的结果表明:在后向散射区域内,立方粒子的角散射强度比球形粒子的变化趋势要平缓得多,这与大部分实验结果相符,而与 Chebyshev 粒子不尽相同.

各尺度参数下的散射相函数(没有进行归一化),即入射光偏振方向平行于散射平面的散射光强度 I_1 和入射光偏振方向垂直于散射平面的散射光强度 I_2 的平均,示于图 2.

由图 2 可以更明显地看出上述一些角散射特征,如在大尺度参数下,两种粒子的后向散射的差别十分明显,并且立方粒子的散射强度低于球形粒子.此外还可看到,随尺度参数的增大,在侧向上越来越大的范围内两种粒子的散射强度出现差别.

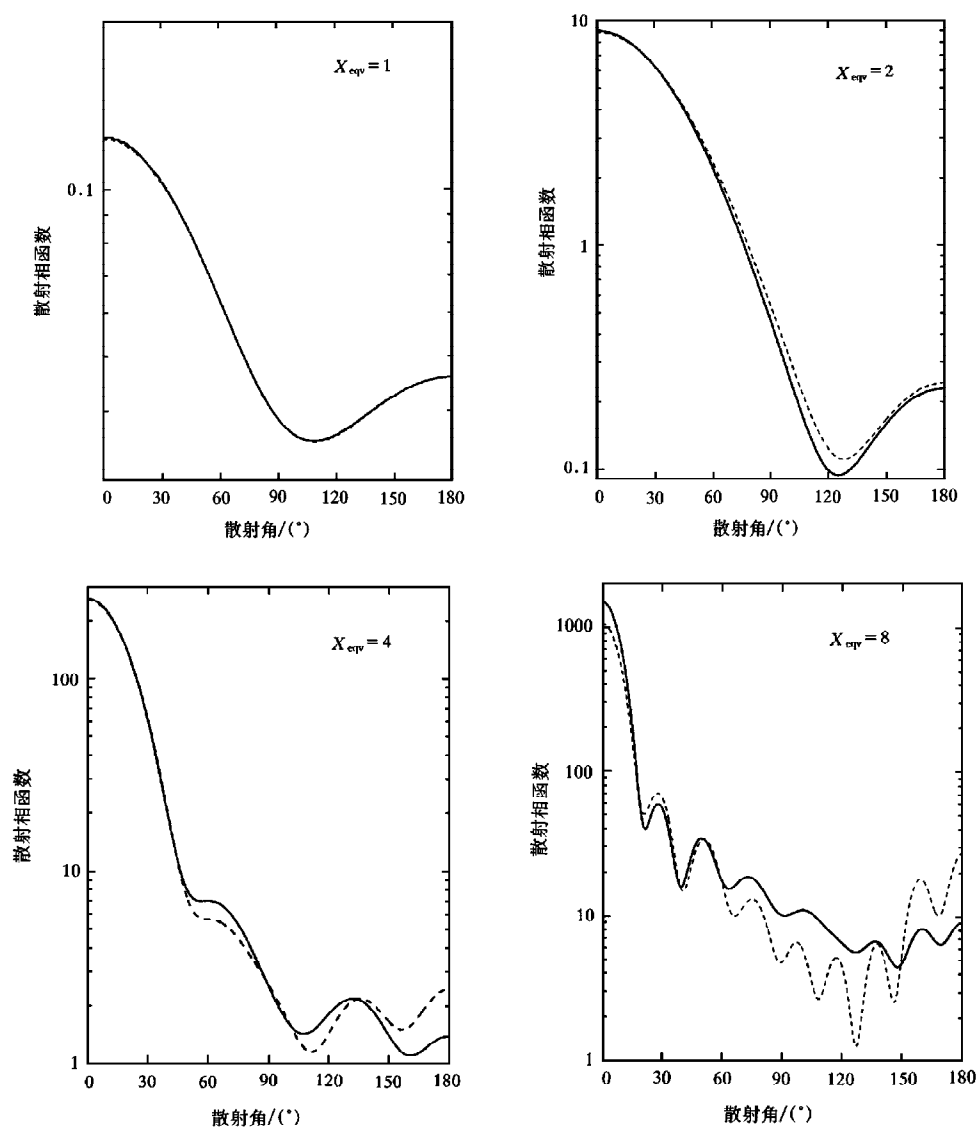


图 2 4 种尺度参数下随机取向立方粒子和等效球形粒子的散射相函数 ——为立方粒子;---为等效球形粒子

5 偏振特性

图 3 示出无偏振入射光的线偏振度 P 与散射角的关系.从图 3 可以看出以下特征:

- 1)除 $X_{\text{eqv}}=1$ 外,立方粒子与等效球形粒子的偏振特性的差别都很明显,而在偏振度的极值点附近尤为明显;
- 2)立方粒子的偏振度随散射角的振荡与等效球形粒子的偏振度随散

射角的振荡存在十分明显的同步性,振荡幅度稍微减弱,变化较平缓.同时随尺度参数的增大,二者的同步性变差,出现明显的错位;3)立方粒子与等效球形粒子偏振特性的差别发生在除前、后向的所有散射方向上;4)在前、后向上,立方粒子的偏振度与等效球形粒子完全一致,都为零.

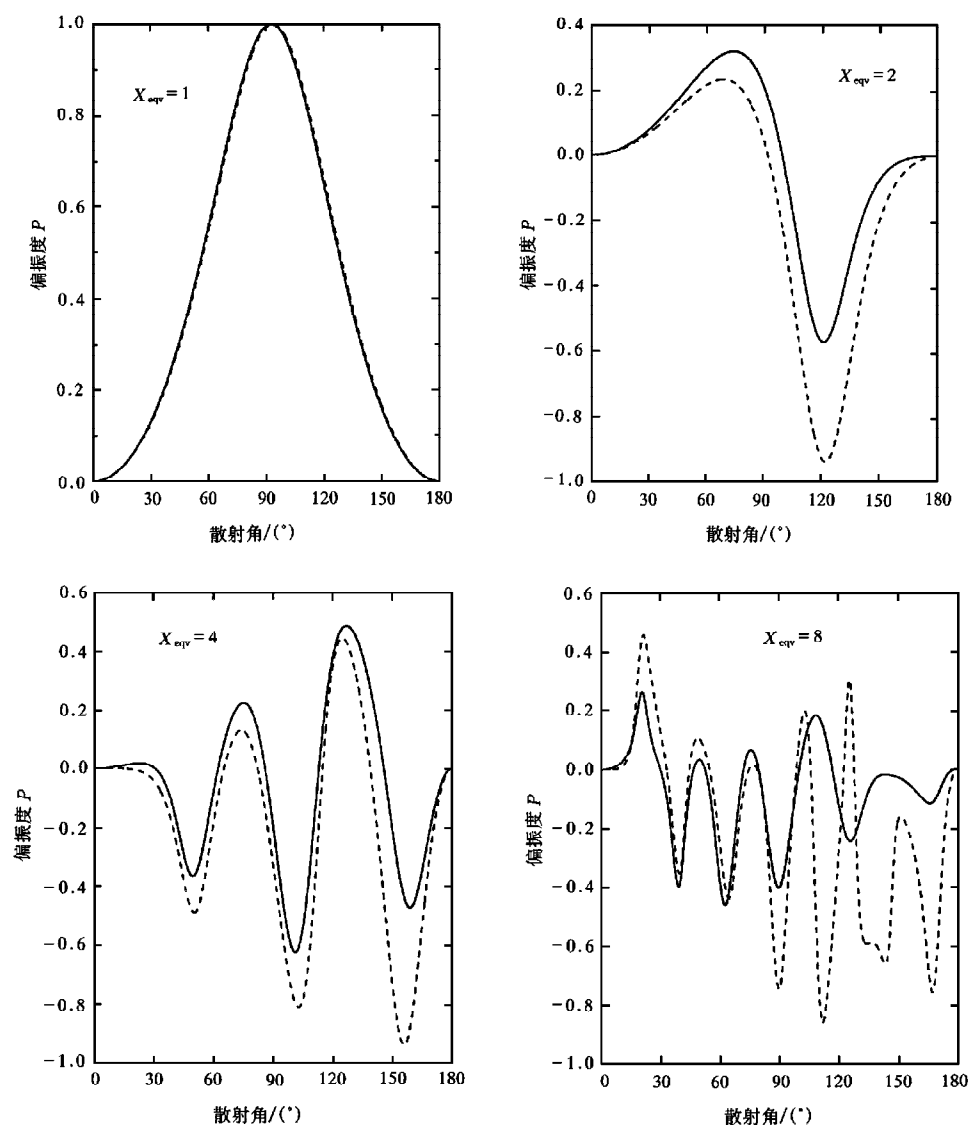


图3 4种尺度参数下随机取向立方粒子和等效球形粒子对无偏振入射光的线偏振度 P 与散射角的关系 —— 为立方粒子;---为等效球形粒子

图4示出线偏振入射光的退偏振度 Δ 与散射角的关系.立方粒子与球形粒子的差别在前向(散射角在 0° — 90°)很小,主要表现在侧后向上(散射角在 90° — 180°).随粒子尺度参数的增大,侧后向上的退偏振度迅速增大.

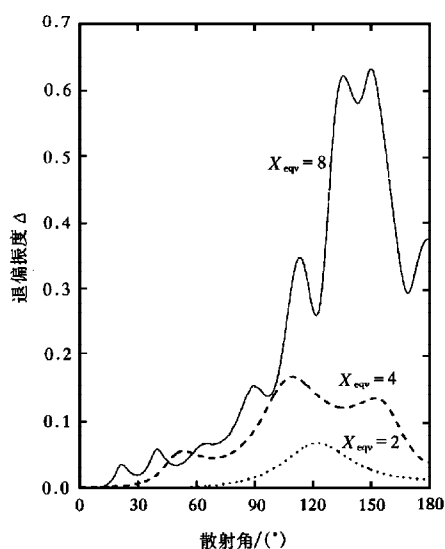


图 4 随机取向立方粒子线偏振光的退偏振度 Δ 与散射角的关系

6 小 结

本文用数值计算方法分析了立方粒子的光散射和吸收特性,虽然只考虑了有限的尺度参数,但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.在本文所考虑的几种尺度参数下,随机取向的立方粒子的光散射特性与其他非球形粒子的光散射特性相似.这说明对于随机取向的非球形粒子的光散射问题,粒子的内在对称性和表面的突变不会带来明显的效果.更一般的分析应针对多分散系粒子的散射问题,它包含了大范围的尺度参数,但由于大尺度参数下 DDA 的运算十分耗时,更详尽的工作有待进一步研究.

Princeton University Observatory 的 B. T. Draine 博士向作者提供了他的 DDA 程序,特向他表示谢意.

- [1] C. F. Bohren, D. Huffman, Absorption and Scattering of Light by Small Particles (John Wiley & Sons, New York, 1983).
- [2] C. F. Bohren, S. B. Singham, *J. Geophys. Res.*, **96D**(1991), 5269.
- [3] S. Asano, M. Sato, *Appl. Opt.*, **19**(1980), 962.
- [4] A. Mugnai, W. J. Wiscombe, *Appl. Opt.*, **25**(1986), 1235.
- [5] W. J. Wiscombe, A. Mugnai, *Appl. Opt.*, **27**(1988), 2405.
- [6] A. Mugnai, W. J. Wiscombe, *Appl. Opt.*, **28**(1989), 3061.
- [7] F. Kuik, J. F. de Hann, J. W. Honenier, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **47**(1992), 477.
- [8] M. I. Mischchenko, L. D. Travis, *Appl. Opt.*, **33**(1994), 7206.
- [9] B. T. Draine, P. J. Flatau, *J. Opt. Soc. Am.*, **A11**(1994), 1491.
- [10] P. W. Barber, S. C. Hill, *Light Scattering by Particles: Computational Methods* (World Scientific Publishing, Singapore, 1990).

NUMERICAL ANALYSIS OF LIGHT SCATTERING BY RANDOMLY ORIENTED CUBIC PARTICLES*

RAO RUI-ZHONG

(*Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Hefei 230031*)

(Received 2 March 1998)

ABSTRACT

Numerical calculations were carried out on light scattering by randomly oriented cubic particles for several size parameters. The scattering properties were analyzed and compared with those of the equivalent spherical particles. Results show that the differences between the scattering properties of cubic and spherical particles are similar to those between other non-spherical and spherical particles. The results imply that the intrinsic symmetry and discontinuity of the normal direction of the particle surface have little effects on the scattering properties.

PACC: 4220; 9265; 0260

* Project supported by the Youth Foundation for Laser Technology of High Technology Research and Development Plan (Grant No. 95-14), China.