

复杂烟尘凝聚粒子的光散射特性研究

类成新¹ 吴振森² 冯东太¹

(¹ 山东理工大学理学院, 山东 淄博 255049
² 西安电子科技大学理学院, 陕西 西安 710071)

摘要 利用离散偶极子近似方法对粘附不同粒径、不同化学成分大粒子的复杂凝聚粒子的光散射特性进行了研究,数值计算了复杂凝聚粒子的散射强度和线偏振度随散射角的分布规律,分析了大粒子的粒径、化学成分对整个凝聚粒子光散射特性的影响。研究表明,凝聚粒子中大粒子的粒径和化学成分对整个凝聚粒子的光散射特性影响较大,此影响随着大粒子粒径的增大变得更加明显。

关键词 物理光学;光散射特性;离散偶极子近似方法;烟尘凝聚粒子

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/LOP48.102601

A Study of Light Scattering Properties of Complex Soot Aggregates

Lei Chengxin¹ Wu Zhensen² Feng Dongtai¹

(¹ School of Science, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255049, China)
² School of Science, Xidian University, Xi'an, Shaanxi 710071, China)

Abstract The discrete dipole approximation (DDA) method is used to study the light scattering properties of a soot cluster which adheres to a large particle with different sizes and material composition. The numerical results of the scattering intensity and the degree of linear polarization for a wide variety of complex soot aggregates in random orientation are illustrated, and the effects of the material composition and the size of the large particle on light scattering properties of complex soot aggregates are analyzed. It is shown that the material composition and the size of the large particle can strongly influence or even dominate the overall light scattering properties of the aggregates.

Key words physical optics; light-scattering characteristics; discrete dipole approximation method; soot aggregates

OCIS codes 260.2110; 260.5430; 290.5825; 290.5855

1 引言

大自然中存在着许多由微小粒子组成的形状不规则的凝聚粒子,如大气中的气溶胶粒子、星际尘埃粒子和烟幕粒子等。在环境监测、大气遥感、烟幕消光机理、通信、目标探测以及对星际空间的认识等方面,研究这些凝聚粒子对光波的散射特性具有非常重要的学术意义和应用价值。因此,凝聚粒子的散射特性是近年来研究的一个重要方向,随着军事的高科技化、人们对于环境保护越来越重视、生物医学的发展以及通信、遥感、雷达目标识别技术的发展,团簇粒子散射特性的研究不断地被推向新的阶段。对随机分布的团簇粒子的研究可以掌握烟尘团簇粒子的散射特性,进而研究其形成机理以及形态特性,达到人为地利用其有利方面,控制、监测其不利方面的目的。同时,对于团簇粒子的研究还可以进一步推动大气光学的进展和对尘埃粒子散射特性的研究^[1],这对于人们加深对星际空间的认识也起到巨大的促进作用。

大气中的烟尘粒子是由大量粒度非常小的基本粒子随机组成的具有分形结构的凝聚粒子^[2]。形成凝聚粒子的基本粒子的粒径范围比较窄^[3],为简单起见,以往学者均将凝聚粒子看作是由同一粒径的基本粒子组成的群聚粒子^[4~6]。然而,自然界中的气溶胶粒子在运动过程中会碰到粒径比较大的粒子,这时它们会粘附

收稿日期: 2011-05-03; **收到修改稿日期**: 2011-05-25; **网络出版日期**: 2011-08-06

基金项目: 国家自然科学基金(60771038)资助课题。

作者简介: 类成新(1976—),男,硕士,讲师,主要从事目标激光散射特性方面的研究。E-mail: xdpostgraduate@163.com

在一起形成比较复杂的凝聚粒子,对于此类粒子的光散射特性的研究目前还未见报道。为此,本文利用离散偶极子近似(DDA)方法对粘附不同粒径、不同化学成分大粒子的复杂凝聚粒子的光散射特性进行了研究,给出了复杂凝聚粒子的散射强度和线偏振度随散射角变化的分布规律,深入探讨了复杂凝聚粒子中大粒子的粒径、化学成分对整个凝聚粒子光散射特性的影响。

2 基本理论

2.1 离散偶极子近似方法

DDA方法由 Purcell 等^[7]于1973年首次提出,经过 Draine 等^[8,9]的进一步改进,逐步发展成一种成熟的算法,并广泛应用于分析星际灰尘和大气气溶胶的光散射特性。DDA方法的基本思想是: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。若将散射体离散为 N 个点,每个点的极化率为 α_j ,坐标为 \mathbf{r}_j ,所处的电场为 \mathbf{E}_j ,则该点的偶极矩 \mathbf{P}_j 为

$$\mathbf{P}_j = \alpha_j \mathbf{E}_j = \alpha_j (\mathbf{E}_{\text{inc},j} - \sum_{l \neq j} \mathbf{A}_{jl} \mathbf{P}_l), \quad (1)$$

式中 \mathbf{E}_j 是入射场 $\mathbf{E}_{\text{inc},j}$ 与其他 $N-1$ 个偶极子的散射场的总和,系数 \mathbf{A}_{jl} 为一个 3×3 矩阵:

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

式中 $k = 2\pi/\lambda$, λ 为入射波长; $r_{jl} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l|$, $\mathbf{r}_{jl} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l)/r_{jl}$, \mathbf{I}_3 为 3×3 单位矩阵。

若定义 $A_{jj} = \alpha_j^{-1}$, 则偶极矩 \mathbf{P}_j 满足 $3N$ 个复线性方程

$$\sum_{l=1}^N \mathbf{A}_{jl} \mathbf{P}_l = \mathbf{E}_{\text{inc},j}. \quad (3)$$

由(3)式可解出 \mathbf{P}_l , 解出 \mathbf{P}_l 后就可得到烟尘凝聚粒子的一切散射特征量。其中粒子散射光矢量平行于散射平面的分量的光强(即平行散射强度) I_1 、垂直于散射平面的分量的光强(垂直散射强度) I_2 以及线偏振度 P 分别表示为^[10]

$$I_1 = M_{11} + M_{12}, \quad (4)$$

$$I_2 = M_{11} - M_{12}, \quad (5)$$

$$P = -\frac{M_{12}}{M_{11}} = \frac{I_2 - I_1}{I_2 + I_1}, \quad (6)$$

式中 M_{11} 既能反映粒子尺寸参数的总体信息,又能反映入射强度在散射发生前后的变化情况; M_{12} 表示平行于垂直极化波的去极化特征。

2.2 计算模型

文中的凝聚粒子是由分形结构的团簇粒子与粒径较大的单个球形粒子组成的,如图1所示,其中分形结构的团簇粒子是在 Cluster-Cluster Aggregation 模型^[11]的基础上利用计算机进行模拟而成。团簇粒子的分形结构可以表示为^[11]

$$N = k_f (R_g/a)^{D_f}, \quad (7)$$

式中 N 为团簇粒子包含的原始微粒的数量, k_f 为分形因子, D_f 为分形维数, a 为原始微粒半径, R_g 为团簇粒子的平均回转半径。文中表征团簇粒子分形结构的参数——分形维数和分形前向因子的取值分别为 1.8 和 5.8^[12~15]。

大气中的烟尘凝聚粒子空间取向是随机的,其光散射特性参数采用下式进行数值计算^[8]

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} Q(\beta, \theta, \phi) d\beta d(\cos \theta) d\phi, \quad (8)$$

式中 $\langle Q \rangle$ 为烟尘凝聚粒子某散射特征量的统计平均值; $Q(\beta, \theta, \phi)$ 为系统坐标中某特定取向时烟尘凝聚粒子散射特征量;理论上,方位角的取值应取尽所有的值,即 $\beta \in [0, 2\pi)$, $\theta \in [0, \pi)$, $\phi \in [0, 2\pi)$, 但是,由于受到计算资源的限制,只要所取的方位角个数能够满足要求即可。研究表明^[14],方位角的选取在 $n_\beta, n_\theta, n_\phi$ 分别

为 10,7,7 时,即 490 个方位角足以满足计算要求。所有计算结果均采用此方案。

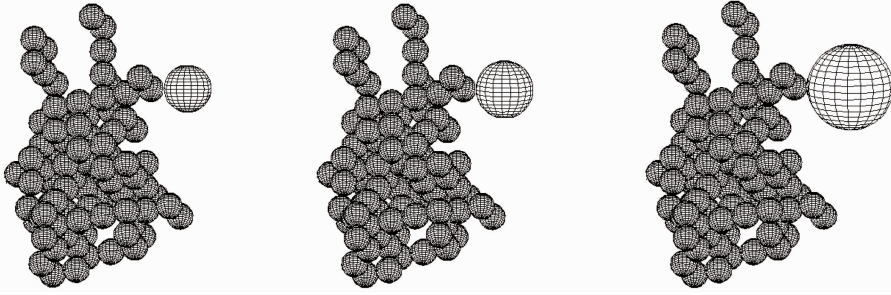


图 1 粘附于不同大小气溶胶粒子的烟尘凝聚粒子

Fig.1 Aggregates formed by fractal soot clusters attached to a larger aerosol particle with different sizes

3 数值结果与分析

计算中,团簇粒子中基本粒子数目 $N=100$,原始微粒半径 $a=20$ nm,对应的等效半径(等体积球形粒子的半径)为 92.83 nm,入射波长 $\lambda=0.628$ μm ,对应的烟尘、硫酸盐、尘埃粒子的复折射率分别为 $1.75+i0.435^{[16]}$, $1.44^{[17]}$, $1.53+i0.008^{[17]}$ 。

图 2 给出复杂烟尘凝聚粒子以及单个大粒子的平行散射强度 I_1 、垂直散射强度 I_2 和线偏振度的角分布曲线。图 2(a1)~(a3)表示复杂烟尘凝聚粒子的平行、垂直散射强度以及线偏振度散射角分布随单个烟尘大粒子粒径的变化,其中大粒子的半径分别取为 0.05 μm 和 0.10 μm 。由图 2(a1)~(a3)可知,随着大粒子粒径的增大,烟尘凝聚粒子的平行散射强度在前向和后向散射区域均增强,前向散射增强的幅度明显大于后向散射,而在侧向散射区域(散射角 90° 附近),大粒子的影响不明显。垂直散射强度随着大粒子粒径的增大而整体增大,同样前向散射强度显著增强。大粒子对烟尘凝聚粒子的线偏振度的影响主要表现在侧向散射区域,随着粒径的增大,线偏振度的峰值幅度减小,同时峰值点向大散射角度方向移动,这与单个球形粒子的散射特性相似。图 2(b1)~(b3)给出了复杂烟尘凝聚粒子的平行、垂直散射强度以及线偏振度与单个大粒子相应散射特征量的对比,其中大粒子的半径为 0.10~0.30 μm 。通过对比,可以非常清楚地看到随着大粒子粒径的增大,复杂凝聚粒子的光散射特性与单个大粒子的光散射特性的差别逐渐减小。总之,随着大粒子粒径的逐渐增大,单个大粒子的散射在整个凝聚粒子散射中所占的比重逐渐增大;当大粒子半径大于团簇粒

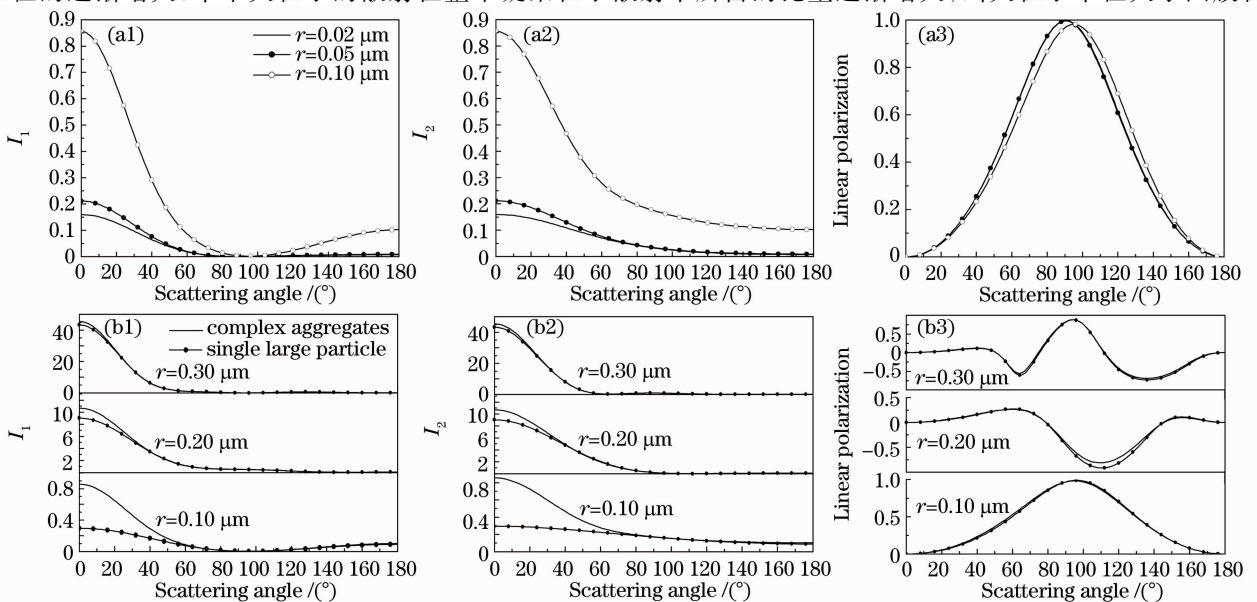


图 2 复杂烟尘凝聚粒子、单个大粒子的散射强度(I_1, I_2)和线偏振度角分布曲线

Fig.2 Scattering intensity and linear polarization of complex aggregates and single large particle

子的等效半径 3 倍时,其散射在整个凝聚粒子的散射中占主导地位,此时整个凝聚粒子可以用单个大粒子替代来研究其散射特性。

自然界中的烟尘团簇粒子在运动过程中,可能粘附不同化学成分组成的大粒子,例如硫酸盐、尘埃、不定型碳、石墨粒子等。当然大粒子的化学成分的变化对复杂凝聚粒子的光散射特性产生重要的影响。图 3 给出不同类型复杂凝聚粒子的平行散射强度 I_1 ,垂直散射强度 I_2 和线偏振度随散射角变化分布曲线,其中图 3(a1)~(a3)所示大粒子的半径为 $0.05 \mu\text{m}$,图 3(b1)~(b3)为 $0.1 \mu\text{m}$,图中大粒子均为硫酸盐、尘埃以及烟尘粒子。由图 3 可以发现,大粒子粒径比较小时,其化学成分对复杂凝聚粒子的散射光强度的影响主要分布在前向散射区域,对后向散射几乎不产生影响,线偏振度不受大粒子化学成分的影响。随着大粒子粒径的增大,化学成分对复杂凝聚粒子的光散射特性的影响逐渐增强,对散射光强度的影响以前向散射尤为明显。大粒子粒径较小时,其散射特性对整个凝聚粒子的散射特性影响不大,主要以烟尘团簇粒子的散射为主;随着粒径的增大,大粒子的散射在整个凝聚粒子的散射中所占的比重逐渐增大,因此,大粒子粒径较大时,其化学成分的变化对整个凝聚粒子的散射特性的影响比较明显。

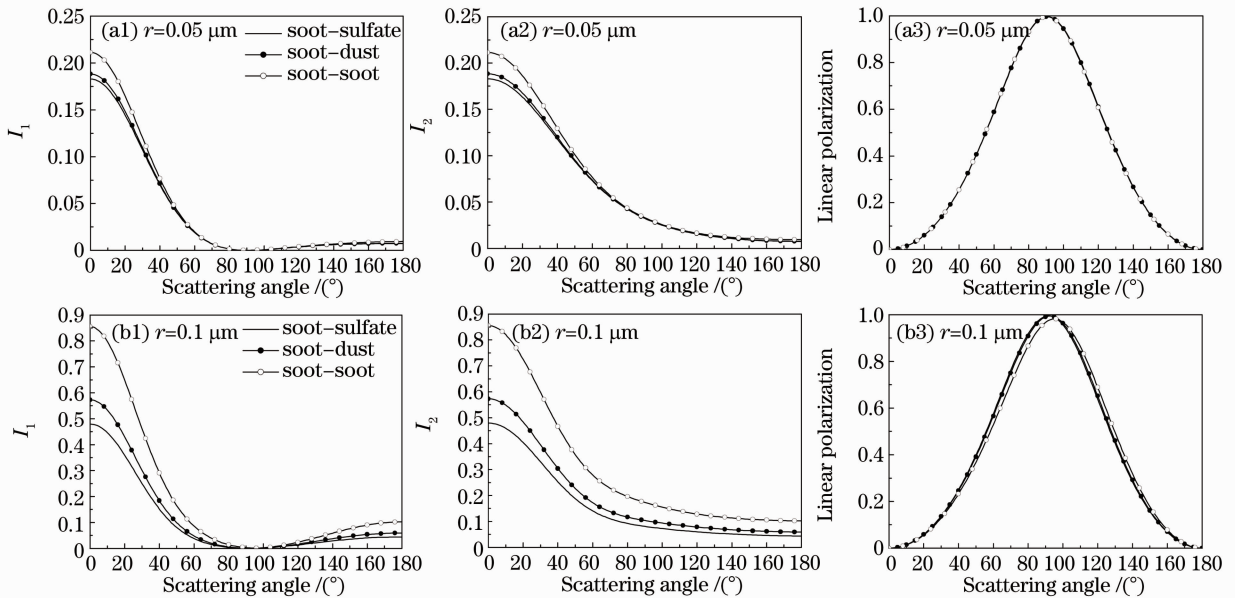


图 3 不同类型复杂烟尘凝聚粒子的散射强度 (I_1, I_2) 和线偏振度角分布曲线

Fig. 3 Scattering intensity and linear polarization of different complex aggregates

4 结 论

利用 DDA 方法对复杂凝聚粒子的光散射特性进行了研究,给出了凝聚粒子的平行、垂直散射强度和线偏振度随散射角的分布规律,分析了复杂凝聚粒子中大粒子的粒径、化学成分对整个凝聚粒子光散射特性的影响。研究表明:1) 随着凝聚粒子中大粒子粒径的增大,烟尘凝聚粒子的平行、垂直散射强度均整体增大,前向散射增大的幅度明显大于后向散射;线偏振度的峰值幅度逐渐减小,同时峰值点向大散射角度方向移动。2) 大粒子粒径比较小时,化学成分对复杂凝聚粒子的平行、垂直散射强度的影响主要集中在前向散射区域,并且对线偏振度角分布的影响不明显。随着粒径的增大,化学成分对复杂凝聚粒子的光散射特性的影响逐渐增强。总体来说,凝聚粒子中大粒子的粒径和化学成分对整个凝聚粒子的光散射特性影响较大,并且此影响随着大粒子粒径的增大会更加明显,当大粒子的半径大于团簇粒子等效半径 3 倍时,大粒子的光散射在整个凝聚粒子光散射中占统治地位,此时可以将凝聚粒子用单个大粒子替代来研究复杂凝聚粒子的光散射特性。

致谢 特别感谢美国普林斯顿大学的 B. T. Draine 教授提供的 DDA 源程序 DDSCAT7.0.7。

参 考 文 献

- 1 S. Holler, J. C. Auger, B. Stout *et al.*. Observations and calculations of light scattering from clusters of spheres[J]. *Appl. Opt.*, 2000, **39**(36): 6873~6887
- 2 R. A. Dobbins, C. M. Megaridis. Morphology of flame generated soot as determined by thermophoretic sampling[J]. *Langmuir*, 1987, **3**(2): 254~259
- 3 C. M. Sorensen. Light scattering by fractal aggregates: a review[J]. *Aerosol Sci. Technol.*, 2001, **35**(2): 648~687
- 4 H. Kimura. Light-scattering properties of fractal aggregates: numerical calculations by a superposition technique and the discrete-dipole approximation[J]. *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2001, **70**(4-6): 581~594
- 5 D. W. Mackowski, M. I. Mishchenko. Calculation of the T matrix and the scattering matrix for ensembles of spheres[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1996, **13**(11): 2266~2278
- 6 Y. Okada, I. Mann, T. Mukai *et al.*. Extended calculation of polarization and intensity of fractal aggregates based on rigorous method for light scattering simulations with numerical orientation averaging[J]. *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2008, **109**(15): 2613~2627
- 7 E. M. Purcell, C. R. Pennypacker. Scattering and absorption of light by non-spherical dielectric grains[J]. *Astrophys. Journal*, 1973, **186**: 705~714
- 8 B. T. Draine. The discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains[J]. *Astrophys. Journal*, 1988, **333**: 848~872
- 9 B. T. Draine, P. J. Flatau. The discrete-dipole approximation for scattering calculations[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1994, **11**(4): 1491~1499
- 10 C. F. Bohren, D. R. Huffman. Absorption and Scattering of Light by Small Particles[M]. New York: Wiley, 1983. 63~69
- 11 R. Jullien, R. Botet. Aggregation and Fractal Aggregates[M]. Singapore: World Scientific Publishing, 1987. 46~50
- 12 Lei Chengxin, Zhang Huaifu, Liu Hanfa. Numerical calculation of Mueller matrices of randomly distributed soot cluster agglomerates[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, **58**(10): 7168~7175
类成新, 张化福, 刘汉法. 随机分布烟尘簇团粒子缪勒矩阵的数值计算[J]. *物理学报*, 2009, **58**(10): 7168~7175
- 13 Lei Chengxin, Wu Zhensen. A study of radiative properties of randomly distributed soot aggregates[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, **59**(8): 5692~5699
类成新, 吴振森. 随机分布烟尘团簇粒子辐射特性研究[J]. *物理学报*, 2010, **59**(8): 5692~5699
- 14 Lei Chengxin, Liu Hanfa, Zhang Huaifu. Research on laser scattering property by randomly oriented soot clustered agglomerates[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(3): 876~880
类成新, 刘汉法, 张化福. 随机取向烟尘团簇粒子激光散射特性研究[J]. *光学学报*, 2010, **30**(3): 876~880
- 15 Lei Chengxin, Zhang Huaifu, Liu Hanfa. Study of extinction characteristics of solar radiation by soot aerosols[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(12): 3373~3377
类成新, 张化福, 刘汉法. 煤烟气溶胶粒子对太阳辐射的消光特性研究[J]. *光学学报*, 2010, **30**(12): 3373~3377
- 16 J. S. Wu, S. S. Krishnan, G. M. Faeth. Refractive indices at visible wavelength of soot emitted from buoyant turbulent diffusion flames[J]. *ASME J. Heat Transfer*, 1997, **119**(2): 230~237
- 17 G. A. d'Almeida, P. Koepke, E. P. Shettle. Atmospheric Aerosols: Global Climatology and Radiative Characteristics [M]. Virginia: Hampton A Deepak, 1991. 291