

# 单分散长椭球形气溶胶粒子的散射相函数研究

邵士勇 黄印博 魏合理 饶瑞中

(中国科学院安徽光学精密机械研究所, 大气光学中心, 安徽 合肥 230031)

**摘要** 选取冰晶、沙尘和碳黑等典型气溶胶粒子为例, 应用 T 矩阵方法, 探讨了单分散长椭球形气溶胶粒子的散射相函数随纵横比、尺度参数和折射率的变化规律。折射率虚部为 0 时, 以纵横比为 0.4 的冰晶粒子和等表面积的球形冰晶粒子为例, 将两者的相函数比值  $\rho$  划分为 5 个数值区域: 1)  $0^\circ$  附近的前向散射  $\rho \approx 1$ , 2) 从  $5^\circ$  左右到  $30^\circ$  左右  $\rho > 1$ , 3) 从  $30^\circ \sim 35^\circ$  到  $80^\circ \sim 110^\circ$   $\rho < 1$ , 4) 从  $80^\circ \sim 110^\circ$  到  $150^\circ \sim 160^\circ$   $\rho \gg 1$ , 5)  $160^\circ$  以后  $\rho \ll 1$ 。同等条件下, 由于折射率的变化, 沙尘粒子  $\rho < 1$  对应的范围扩大至更大角度, 而  $\rho \gg 1$  和  $\rho \ll 1$  对应的角度区域均相应减小, 而碳黑粒子的  $\rho \gg 1$  和  $\rho \ll 1$  对应的角度区域则消失,  $\rho$  演变为 3 个数值区域。上述长椭球形粒子散射相函数的结论为气溶胶粒形检测和分析提供了理论依据。

**关键词** 大气光学; 散射相函数; 纵横比; 尺度参数; 折射率

中图分类号 P415.3 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20092901.0108

## Phase Function of Prolate Spheroidic Mono-Disperse Aerosol Particles

Shao Shiyong Huang Yinbo Wei Heli Rao Ruizhong

(Center for Atmospheric Optics, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China)

**Abstract** Typical particles such as ice crystal, dust and black carbon are selected. to study the changing tendency of scattering phase function with prolate spheroidic mono-disperse aerosol particles with different aspect ratio, size parameter and refractive index by T - matrix. When the imaginary part of refractive index is neglected, for ice crystal with aspect ratio of 0.4 and spherical particle with the same surface area, their phase function ratio,  $\rho$ , is divided into five regions: 1)  $\rho \approx 1$ , the region of nearly direct forward scattering, 2)  $\rho > 1$ , from about  $5^\circ$  to  $30^\circ$ , 3)  $\rho < 1$ , from about  $30^\circ \sim 35^\circ$  to  $80^\circ \sim 110^\circ$ , 4)  $\rho \gg 1$ , from about  $80^\circ \sim 110^\circ$  to  $150^\circ \sim 160^\circ$ , 5)  $\rho \ll 1$ , the field after  $160^\circ$ . In the same circumstances, for the change of refractive index, the field of  $\rho < 1$  for dust spreads to a larger angle region, but that corresponding to the fields of  $\rho \gg 1$  and  $\rho \ll 1$  all shrinks, however the number of  $\rho$ -value regions of carbon reduces to 3 since the regions of  $\rho \gg 1$  and  $\rho \ll 1$  disappear. Theoretical foundation is provided with measurement of aerosol to distinguish prolate spheroidic particles.

**Key words** atmospheric optics; scattering phase function; aspect ratio; size parameter; refractive index

## 1 引 言

散射相函数反映了气溶胶粒子散射光强度的空间分布<sup>[1,2]</sup>, 包含颗粒大小和形状的信息, 是研究粒子与光束相互作用的重要途径之一<sup>[3~5]</sup>。基于

此, 提出“气溶胶粒形和散射分析仪”的新方法<sup>[6,7]</sup>: 气溶胶粒子在进样系统控制下垂直单粒直线飞行, 经过黑色中空球形散射腔腔心时, 在水平方向激光束的照射下发生单次散射, 利用光纤导出散射腔 36 个角度处的散射光, 获得散射光强度的排布情况,

收稿日期: 2008-04-03; 收到修改稿日期: 2008-06-23

基金项目: 国家 863 计划(2007AA0239)资助课题。

作者简介: 邵士勇(1979-), 男, 博士研究生, 主要从事气溶胶光学特性方面的研究。E-mail: anguangsuo@163.com

导师简介: 饶瑞中(1963-), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事激光大气传输前沿物理问题、光辐射和图像的大气传播、大气湍流的光学特征及其光学测量方法等方面的研究。E-mail: rao@aiofm.ac.cn

可反演气溶胶粒子形状并统计分类。

将多通道散射反演粒形的方法推向应用,掌握常见形状气溶胶粒子的散射相函数特性是必备因素。经典米散射理论虽然解决了球形粒子的散射相函数,但实际气溶胶粒子的形状各种各样,真正的球形粒子是极少的。为了研究问题方便,经常采用一些简化模型<sup>[8]</sup>。椭球形粒子是最典型的简化模型之一,只需纵横比一个因子就可以很好的描述其形状。椭球形粒子不仅在自然和人造环境中的含量比较丰富,也是很多复杂形状粒子的基本组成单元,因而其散射特性的研究备受关注。Zakharova<sup>[9]</sup>计算了椭球形粒子的散射矩阵,指出椭球形粒子和球形粒子的散射行为存在较大差异,且极端纵横比(水平旋转轴与垂直旋转轴之比)的椭球形粒子和近球形粒子的散射特性差别较大;Schulz<sup>[10]</sup>探讨了椭球粒子形状与光学特性的关系;Mishchenko<sup>[11]</sup>论述了弱吸收条件下椭球形粒子散射相函数随纵横比和尺度参数的转化趋势。

应用 T 矩阵方法计算纵横比为 0.1, 0.4, 0.8 的长椭球形粒子和等表面积球形粒子的散射相函数,给出其散射相函数随纵横比、尺度参数和折射率的变化规律。以纵横比为 0.4 的冰晶粒子为例,阐述忽略折射率虚部时,长椭球形粒子和球形粒子两者相函数数值存在的区域性差异,并描述了折射率变化对数值差异区域的影响。

## 2 T 矩阵与散射相函数简介

T 矩阵以麦克斯韦方程为出发点,由于其扩展边界条件的高速、高精度运算,使得 T 矩阵方法适用于旋转对称小粒子的散射光计算;由于该方法对于小粒子计算结果的准确性,经常作为校正标准来使用<sup>[12]</sup>。

任意方向、旋转对称微粒的散射可通过无量纲斯托克斯散射矩阵表示:

$$\mathbf{F}(\theta) = \begin{bmatrix} a_1(\theta) & b_1(\theta) & 0 & 0 \\ b_1(\theta) & a_2(\theta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_3(\theta) & b_2(\theta) \\ 0 & 0 & -b_2(\theta) & a_4(\theta) \end{bmatrix}, \quad (1)$$

其中  $\theta$  为散射角,定义为入射光线和散射光线之间的夹角。散射矩阵描述的是入射光斯托克斯矢量到散射光斯托克斯矢量的转换。

散射矩阵的 8 个非零矩阵元中,有 6 个是相互独立的。将散射矩阵元转化为扩展因子与归一化球

函数乘积的累加运算,通过求解扩展因子间接得到散射矩阵元的结果,这样原则上可以较为容易的在较短时间内计算出任意数量散射角的散射矩阵元。

散射矩阵元  $a_1(\theta)$  即散射相函数,描述的是粒子散射光能量的空间分布,其物理意义上的表达式为

$$a_1(\theta, \varphi) = \frac{dE}{d\Omega} \quad (2)$$

其中  $\theta$  为散射角,  $\varphi$  为方位角,  $E$  为入射光的能量,  $\Omega$  为散射立体角。换言之,散射相函数描述的是空间单位立体角内散射光能量与入射光能量的关系。如果所要计算的粒子为旋转对称结构,则散射相函数与方位角无关,即简化为上述  $a_1(\theta)$ ,它满足归一化条件<sup>[13]</sup>




$$\frac{1}{2} \int_0^\pi a_1(\theta) \cdot \sin \theta \cdot d\theta = 1. \quad (3)$$

## 3 散射相函数随纵横比、尺度参数和折射率的变化

表 1 列出了纵横比为 0.1, 0.4 和 0.8 时若干个等表面积的单分散长椭球形粒子的尺度参数  $x_s = (2\pi r_s)/\lambda$ 。为了对比,表 1 同时列出了相应的等体积单分散长椭球粒子的尺度参数  $x_v = 2\pi r_v/\lambda$ , 以及各自沿水平旋转轴和垂直旋转轴的尺度参数  $x_a = 2\pi r_a/\lambda$  和  $x_b = 2\pi r_b/\lambda$ 。

表 1 等表面积尺度参数  $x_s$ , 等体积尺度参数  $x_v$  及沿水平和垂直旋转轴的尺度参数  $x_a$  和  $x_b$

Table 1 Equal-surface-sphere size parameter  $x_s$ , equal-volume-sphere size parameter  $x_v$  and size parameters along the horizontal axis,  $x_a$ , and vertical axis,  $x_b$

	$x_s$	$x_v$	$x_a$	$x_b$	shape
$a/b = 0.1$	0.1	0.0773	0.0359	0.3589	
	1	0.7733	0.3589	3.5893	
	2	1.5466	0.7179	7.1786	
	4	3.0932	1.4357	14.3572	
$a/b = 0.4$	0.1	0.0942	0.0693	0.1735	
	1	0.9418	0.6939	1.7348	
	2	1.8836	1.3879	3.4696	
	4	3.7672	2.7757	6.9393	
	6	5.6909	4.1636	10.4100	
	9	8.4763	6.2454	15.6135	
$a/b = 0.8$	12	11.3017	8.3272	20.8180	
	0.1	0.0996	0.0924	0.1155	
	1	0.9957	0.9244	1.1554	
	2	1.9915	1.8487	2.3109	
	4	3.9829	3.6974	4.6218	
	6	5.9744	5.5461	6.9326	
	9	8.9615	8.3192	10.3989	
	12	11.9487	11.0922	13.8653	

冰晶、沙尘和碳黑是研究气溶胶光学特性的三类典型粒子。冰晶是卷云中固态颗粒的主要形式,研究冰晶粒子的散射特性有助于探讨激光在高空大气中的传输问题。可见光条件下,冰晶的典型折射率为  $1.311+i0.0$ ; 沙尘是近地层气溶胶的重要来源,常用折射率为  $1.53+i0.008$ <sup>[11]</sup>; 碳黑气溶胶是大气气溶胶中最主要的吸光物质,取其折射率为  $1.6+i0.3$ <sup>[14]</sup>。

尽管实际大气中细长气溶胶粒子并非理想的长椭球形状,但很多情况下,做简化模型处理是合理

的。当纵横比为 1.0 时,粒子为球形,当纵横比为 0.1 时,粒子过渡到针形。随着纵横比的减小,  $T$  矩阵对等表面积粒子计算的收敛越来越难,运算量的激增导致所能计算尺度参数的范围越来越有限,因此纵横比为 0.1 的长椭球粒子只给出了  $x_s \leq 4$  的散射相函数。

图 1 用不同线型代表不同尺度参数的粒子,展示了不同折射率下,粒子的散射相函数随纵横比和尺度参数的变化关系,其中横纵坐标分别表示散射角度和散射强度。

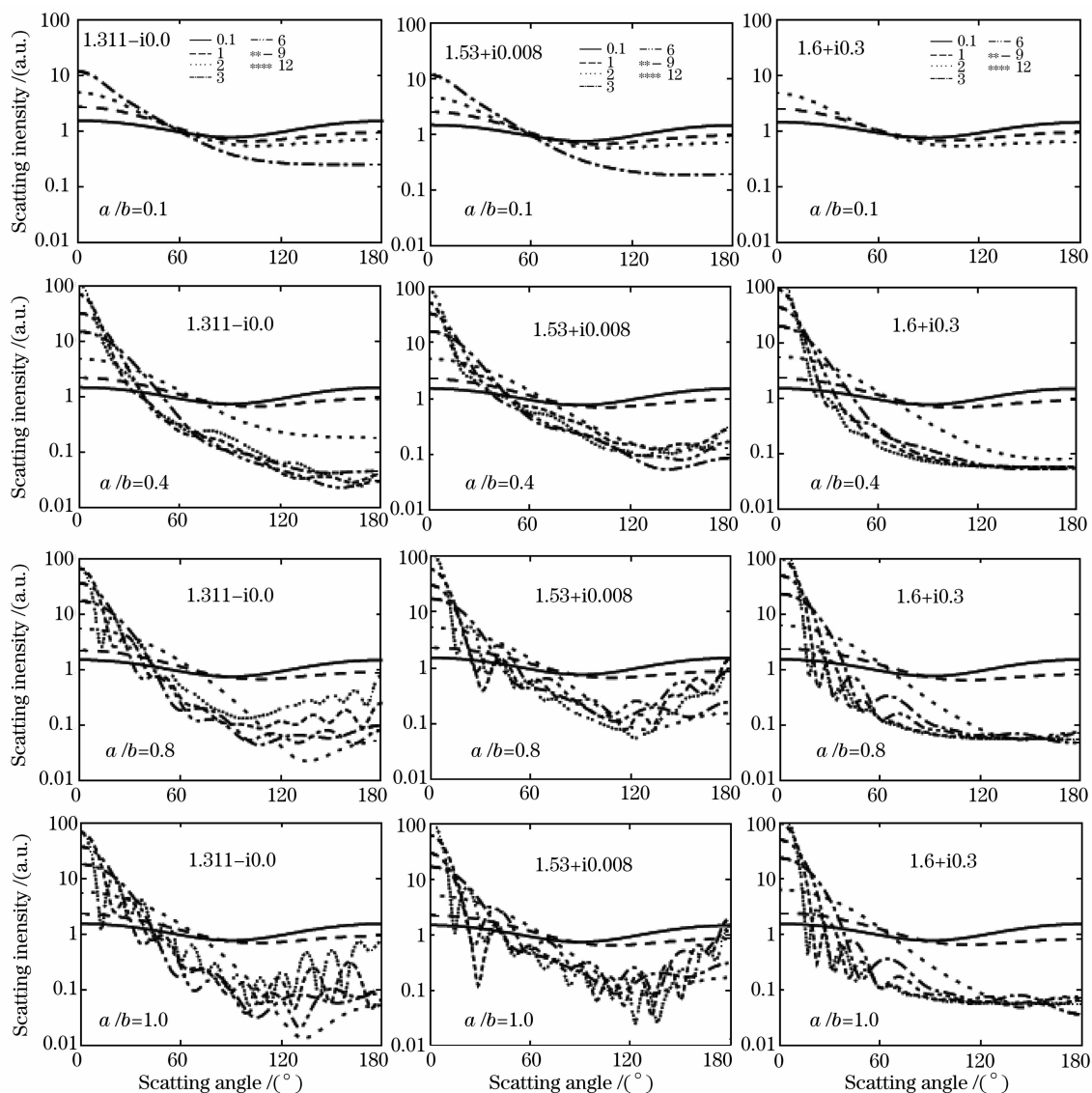


图 1 不同折射率的长椭球粒子在不同纵横比和尺度参数下的散射相函数

Fig. 1 Scattering phase function of prolate spheroids with different aspect ratios and size parameters under different refractive indexes

图 1 所示曲线关于  $90^\circ$  散射角对称的为瑞利散射,前向散射强度明显高于相应的侧向和后向散射的为米散射。以冰晶粒子为例,纵横比为 0.1, 粒子

的尺度参数为 2 时可以近似看作瑞利散射,而纵横比为 0.4 时,尺度参数为 2 的相函数已经具有较多米散射的特征,且粒子越接近球形,这种特征越显著。

因此，随着纵横比的递增，瑞利散射所涵盖的尺度参数区域略有减小。与纵横比为 0.4 的情况相比， $x_s \geq 4$  的 4 种冰晶粒子在纵横比为 0.8 时相函数曲线的振荡显著起来，相互差异的加大尤其是后向散射差异的加大使粒子的区分一目了然；到纵横比为 1.0 的球形冰晶时，相函数的振荡进一步加剧，振荡峰的数量增多，幅度明显增大，两者之间的差异更为明显。总之，随着纵横比的增加，冰晶越接近球形，其米散射区域的粒子散射相函数的变化就越剧烈。

同等条件下，尽管沙尘、碳黑的瑞利散射曲线 ( $x_s = 0.1, 1$ ) 和冰晶相比几乎没有差异，但米散射区域 ( $x_s = 4, 6, 9, 12$ ) 对应的曲线出现明显不同，沙尘相函数曲线振荡峰的数量未变动，不过侧向和后向散射峰的幅度略有减小，后向散射部分的数值稍有增大，但两者之间的差异减小；碳黑相函数的后向振荡峰则完全消失，相互差异比沙尘小得多，以至总体趋势的雷同使得相函数相互重叠在一起。因此，随着折射率虚部的增加，同等纵横比和尺度参数的长椭球形粒子米散射相函数的侧向和后向散射对应的振荡逐渐弱化并最终消失，使得相函数的侧向和后向相互交叠，粒子只有通过前向散射才能

得到区分。

### 4 长椭球粒子和球形粒子散射相函数数值的区域性差异

定义纵横比为 0.4 的长椭球形粒子和球形粒子的散射相函数之比为  $\rho$ 。以冰晶粒子为例，分析图 2 可知，当折射率虚部为零时，除瑞利散射部分外， $\rho$  值分为较典型的 5 个区域，随着散射角的递增，它们分别为，1)  $\rho \approx 1$ ，集中在  $0^\circ$  附近小范围内的前向散射，该区域对粒子的形状不敏感，主要原因在于前向散射主要来源于衍射，而衍射取决于粒子的几何投影面积，对于等表面积的粒子，几何投影面积是相等的；2)  $\rho > 1$ ，从  $5^\circ$  左右扩展到  $30^\circ$  左右，该区域随着纵横比的减小而明显；3)  $\rho < 1$ ，从  $30^\circ \sim 35^\circ$  扩展到  $80^\circ \sim 110^\circ$ ，该区域随着纵横比的减小而变窄；4)  $\rho \gg 1$ ，从  $80^\circ \sim 110^\circ$  扩展到  $150^\circ \sim 160^\circ$ ，该区域随着纵横比的减小而加宽，表明长椭球粒子的侧向散射较球形粒子大大加强；5)  $\rho \ll 1$ ，主要包括  $160^\circ$  以后的范围内， $170^\circ$  以后尤为明显，该区域以后向散射为主。

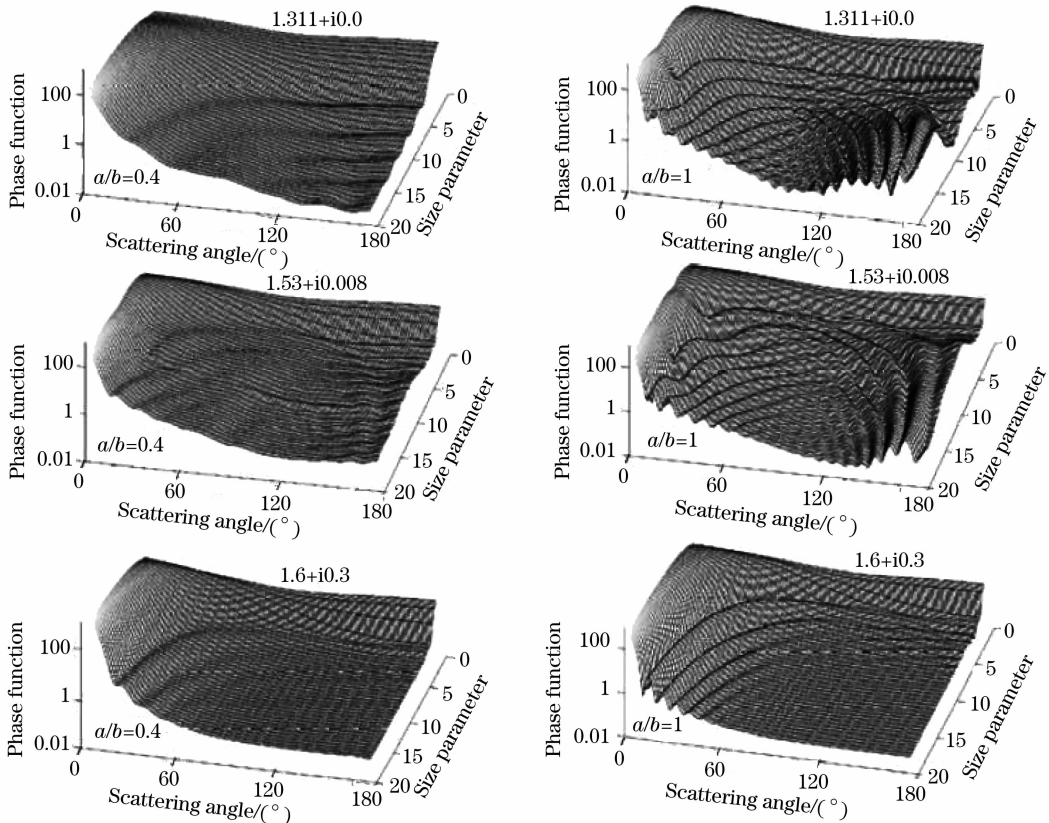


图 2 长椭球粒子和等表面积的球形粒子的相函数随散射角、尺度参数和折射率的变化

Fig. 2 Phase function of prolate spheroids and spheres with equivalent surface area versus scattering angle, size parameter and refractive index

折射率是气溶胶基本物理参数之一<sup>[15]</sup>,对散射相函数有重大影响。相比于冰晶,沙尘折射率实部加大,其相函数对应的前向散射值升高同时保持 $\rho \approx 1$ ;  $\rho$  值仍然存在上述 5 个区域,但随着虚部的微小增加, $\rho < 1$  对应的角度范围向大角方向移动, $\rho \gg 1$  和  $\rho \ll 1$  对应的角度区域均相应地朝后向压缩。随着折射率实部和虚部继续增加,前向散射值保持增加且  $\rho \approx 1$ ,  $\rho < 1$  对应区域不断向大角移动以至  $\rho \gg 1$  和  $\rho \ll 1$  的区域不复存在,碳黑的相函数显示出这种变化趋势。

总之,当粒子的折射率虚部大于零时,折射率变化对瑞利散射区域的影响远远小于米散射。粒子的前向散射以衍射为主,主要受控于折射率实部,随着折射率实部的增加,前向散射逐渐增强。随着折射率虚部的增加,经过粒子内部的光线越来越多的被吸收,导致粒子的透射光含量越来越少,粒子的散射光越来越多的由衍射和反射组成,而在表面积相同的前提下,粒子的衍射和反射差别较小,因此随着折射率虚部的增加,球形粒子和长椭球形粒子的侧向和后向散射相函数的差别也越来越小,整体上趋于平滑。当粒子的折射率虚部较大时, $\rho \gg 1$  和  $\rho \ll 1$  对应区域的消失使得数值差异区域由 5 个减少为 3 个。

## 5 结 论

散射相函数是研究粒子与光束相互作用的重要途径之一。以典型的长椭球形粒子为例,论述了粒子的散射相函数随纵横比、尺度参数和折射率的变化关系:在长椭球形粒子由针形到球形的转化过程中,随纵横比的增大,同一折射率散射相函数的瑞利散射涵盖的尺度参数略有减小,但折射率变化对瑞利散射区域的影响很小。忽略折射率虚部时,米散射区域的散射相函数整体振荡逐渐加大,相同尺度参数差距的散射相函数的差异趋于明显。随着虚部的增加,相函数振荡逐渐减缓,整体上趋于一致。

当忽略折射率虚部时,除瑞利散射部分外,长椭球形和球形粒子的散射相函数数值比  $\rho$  分为较典型的 5 个区域。折射率虚部影响粒子侧向和后向的散射相函数,随着折射率虚部的增加,粒子散射相函数整体上趋于平滑, $\rho < 1$  对应的范围扩大至更大角度,而  $\rho \gg 1$  和  $\rho \ll 1$  对应的角度区域均相应减小以至消失。折射率变化对瑞利散射区域的影响较米散射小的多。粒子的前向散射主要受控于折射率

实部,随着折射率实部的增加,前向散射逐渐增强。

通过分析长椭球形粒子相函数随纵横比、尺度参数和折射率的转化规律,以及转化过程中长椭球形粒子和球形粒子相函数数值的比较,使实际气溶胶粒子的散射相函数问题的解决相对于经典的球形粒子米散射理论前进了一步。尽管实际大气中的细长气溶胶粒子并非理想的长椭球形状,但很多情况下,做简化模型处理是恰当的。该结论使长椭球形粒子散射相函数的变化规律以及长椭球形粒子和熟知的球形粒子的散射相函数的数值关系更清晰,为粒形和散射分析仪提供了分辨该类粒子的理论依据,为应用于实际模型时可能引起的误差分析及误差修正方法的探讨打下基础。

## 参 考 文 献

- 1 Chen Xiuhong, Liu Qiang, Wei Heli. The treatment of scattering phase function in the multi-scattering radiative transfer calculation[J]. *The Journal of Light Scattering*, 2007, **19**(3): 283~289  
陈秀红,刘 强,魏合理. 多次散射辐射传输计算中的相函数处理[J]. *光散射学报*, 2007, **19**(3): 283~289
- 2 Zhu Ying, Ding Zhihua, M. Gelsler. Tissue scattering parameter estimation through scattering phase function measurements by goniometer[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2007, **5**(9): 531~533
- 3 Tang Hong, Sun Xiaoming, Yuan Guibin. Calculation method for particle mean diameter and particle size distribution function under dependent model algorithm[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2007, **5**(1): 31~33
- 4 Han Daowen, Liu Wenqing, Liu Jianguo *et al.*. Retrieval method for aerosol mass concentration vertical distribution[J]. *Chin. J. Lasers*, 2006, **33**(11): 1567~1573  
韩道文,刘文清,刘建国等. 气溶胶质量浓度空间垂直分布的反演方法[J]. *中国激光*, 2006, **33**(11): 1567~1573
- 5 Wang Mingjun, Wu Zhensen, Li Yingle *et al.*. Modeling and measuring the pulse laser scattering echo power from whole dimension target[J]. *Chin. J. Lasers*, 2006, **33**(11): 1557~1561  
王明军,吴振森,李应乐等. 全尺寸目标激光脉冲后向散射回波功率测定和建模[J]. *中国激光*, 2006, **33**(11): 1557~1561
- 6 Shao Shiyong, Yao Yongbang, Zhu Wenye *et al.*. Instrument to Convert Three-Dimensional Shape of Micro-Particles by Light Scattering of Optical Fibres [P]. Patent number: 200710022257.7  
邵士勇,姚永帮,朱文越等. 多通道散射反演微颗粒三维形状检测仪[P]. 专利号: 200710022257.7
- 7 Shao Shiyong, Huang Yinbo, Yao Yongbang *et al.*. Progress in shape measurement technology of micro-particles in atmosphere [J]. *Journal of Atmospheric and Environmental Optics*, 2008, **3**(1): 1~10  
邵士勇,黄印博,姚永帮等. 气溶胶粒形光学测量技术的研究进展[J]. *大气与环境光学学报*, 2008, **3**(1): 1~10
- 8 Han Yiping, Du Yungang. Electromagnetic scattering for a non-spherical aerosols with arbitrary shaped beam[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(4): 630~633  
韩一平,杜云刚. 非球形大气粒子对任意光束的电磁散射特性[J]. *光学学报*, 2006, **26**(4): 630~633
- 9 N. T. Zakharova, M. I. Mishchenko. Scattering properties of needlelike and plate-like ice spheroids with moderate size

- parameters[J]. *Appl. Opt.*, 2000, **39**(27): 5052~5057
- 10 F. M. Schulz, K. Stamnes, J. J. Stamnes. Shape dependence of the optical properties in size-shape distributions of randomly oriented prolate spheroids, including highly elongated shapes[J]. *J. Geophys. Res.*, 1999, **104**(8): 9413~9421
- 11 M. I. Mishchenko, L. D. Travis, A. A. Lacis. *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles* [M]. Edinburgh: Cambridge University Press, 2002, 279~359
- 12 M. I. Mishchenko, L. D. Travis. Capabilities and limitations of a current Fortran implementation of the T-matrix method for randomly oriented, rotationally symmetric scatterers [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 1998, **60**(3): 309~324
- 13 K. N. Liou. *An introduction to atmospheric radiation* [M]. 2rd ed. Beijing: China Meteorological press, 20004, 181~259
- 廖国男. 大气辐射导论[M]. 2 版. 北京: 气象出版社, 2004, 181~259
- 14 General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China. *Particle Size analysis-Laser Diffraction Method* GB/T19077. 1-2003 [S] Beijing: Standards Press of China, 2003, 27
- 中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局. 粒度分析/激光衍射法 GB/T19077. 1-2003 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2003, 27
- 15 Li Xuebin, Xu Qingshan, Hu Huanling. New method to deduce imaginary part of refractive index of aerosol with double-scattering angles laser optical particle counter[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(3): 391~394
- 李学斌, 徐青山, 胡欢陵. 双散射光学粒子计数器测量气溶胶折射率的新方法研究[J]. 光学学报, 2007, **27**(3): 391~394