

采用 Matlab 语言的计算机仿真微球体消光率特性研究

代光辉¹,任智斌²

(1. 重庆工商大学(南岸区) 计算机科学与信息工程学院,重庆 400067;
2. 中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所 应用光学国家重点实验室,吉林 长春 130033)

摘要:采用 Matlab 语言进行仿真并对 Mie 理论中消光率(归一化消光截面)的数学性质进行理论分析与数值计算,讨论了消光率曲线的波纹结构与尺寸参数 x 的关系以及波纹结构的峰值与 Mie 散射振幅 $a_n(x, m)$ 、 $b_n(x, m)$ 的对应关系。研究了消光率曲线波纹结构的近似周期与相对折射率 m 的关系,并给出了计算机仿真运行结果。结果表明,消光率随 x 的变化曲线具有波纹结构,当相对折射率 m 增大时,这一现象变得不明显;当 m 为实数,且 $m \leq 2$ 时,消光率曲线的波纹结构具有单一周期性,并且波纹结构的峰值出现的位置与 $\text{Re}[a_n(x, m)]$ 、 $\text{Re}[b_n(x, m)]$ 的峰值出现的位置相对应;当 m 为复数时,只要满足 $|\text{Im}(m)| < 0.01$,波纹结构仍具有相同的近似周期,只是振荡的振幅减小了, $|\text{Im}(m)|$ 越大,波纹结构的振荡振幅越小。计算机仿真结果可为微球体光学性质的研究提供参考。

关键词:计算机仿真模拟; Mie 理论; 光散射; 消光率

中图分类号:O43 **文献标识码:**A **文章编号:**1007-2276(2004)03-0231-04

Study of microsphere extinction efficiency by Matlab language computer simulation

DAI Guang-hui¹, REN Zhi-bin²

(1. Computer Science and Information Engineering College, Chongqing Technology and Business University, Chongqing 400067, China;
2. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics Fine Machine and Physics,
Chinese Academy of Science, Changchun 130033, China)

Abstract: The mathematical character of the extinction efficiency (normalized extinction cross section) is analysed and the numerical computation by Matlab language computer simulation is studied. The relationships between the ripple structure of the extinction efficiency and the size parameter x , the peak value of the ripple structure and the amplitude of Mie scattering $a_n(x, m)$, $b_n(x, m)$ are discussed. The relationship between the approximate periodicity of the ripple structure and relative refractive index m is also discussed. The result shows that the relation curve of the extinction efficiency and the size parameter x has ripple structure, which becomes faint as x is large; when the relative index m is real and $m \leq 2$, the ripple structure has single periodicity, and positions of the peak values of the ripple structure are corresponding to the positions of peak values of $\text{Re}[a_n(x, m)]$ and $\text{Re}[b_n(x, m)]$. When m is complex and $|\text{Im}(m)| < 0.01$, the ripple structure also has the same periodicity, however, the oscillation amplitude of the ripple structure

收稿日期:2003-10-20; 修订日期:2003-11-12

作者简介:代光辉(1965-),男,黑龙江绥化市人,硕士,目前主要从事计算机及计算软件应用研究工作。

becomes weaker. The larger $|Im(m)|$ is, the weaker the oscillation amplitude of the ripple structure is. The computer simulation results of this paper can provide reference for further study of microsphere.

Key words: Computer simulation; The Mie theory; Light scattering; Extinction efficiency

0 引言

对口径接近入射光波长的光学元件进行分析时,入射光在透镜表面的衍射引起幅度和相位的变化,以至影响到透镜的聚焦性能,因此标量衍射理论与矢量衍射理论都不能对透镜的光学性质进行分析。

目前,在直径与光波长数量级相同的光学元件分析中用得最多的理论是 Mie 球理论。G. Mie 在 1908 年发表的一篇论文^[1]中,在电磁理论的基础上,对平面单色波被一个位于均匀媒质中具有任意直径及任意成分的均匀球衍射得出了严格解。以后,很多学者^[2~9]把 Mie 球理论在各个领域中完善、扩展,解决各自领域的相关问题,至今人们对 Mie 球理论的研究仍在进一步深入。

本文针对 Mie 球理论中消光率(归一化消光截面)这一重要参数的数学性质进行了理论分析与数值计算,讨论了消光率曲线的波纹结构与尺寸参数 x 的关系以及波纹结构的峰值与 Mie 散射振幅 $a_n(x, m)$ 、 $b_n(x, m)$ 的对应关系。还研究了消光率曲线波纹结构的近似周期与相对折射率 m 的关系。

1 消光率曲线性质的理论与数值分析

电磁波被真空中或均匀非吸收介质中的球状颗粒的散射可以 Mie 散射理论形式给出^[3~5],该理论的精确解可通过矢量球谐波展开形式得到。消光率公式为:

$$Q_{ext}(x, m) = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}[a_n(x, m) + b_n(x, m)] \quad (1)$$

式中 $a_n(x, m)$ 、 $b_n(x, m)$ 为 Mie 散射振幅,其计算公式为:

$$a_n(x, m) = \frac{m\psi_n(mx)\psi'(x) - \psi_n(x)\psi'_n(mx)}{m\psi_n(mx)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\psi'_n(mx)} \quad (2)$$

$$b_n(x, m) = \frac{m\psi_n(x)\psi'(mx) - \psi_n(mx)\psi'_n(x)}{m\xi_n(x)\psi'_n(mx) - \psi_n(mx)\xi'_n(mx)} \quad (3)$$

式中 $\psi_n(x)$ 和 $\xi'_n(x)$ 是 Riccati-Bessel 函数; m 是球与介质之间的相对折射率; x 是球的尺寸参数, $x = kr = 2\pi r/\lambda$, r 是球的半径, λ 是入射光波在真空中的波长。

光波被球状颗粒散射的消光率的一个重要性质是消光曲线上会出现波纹结构,而且该结构呈现出一定的周期性,如图 1 所示。

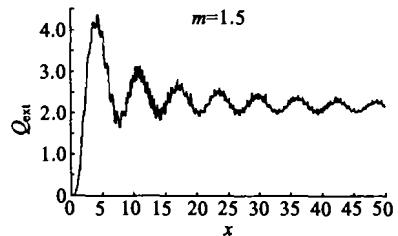


图 1 消光率与尺寸参数 x 的关系

Fig. 1 Relationship between the extinction efficiency and the size parameter x

1.1 消光率曲线波纹结构的峰值

这种波纹结构可用归一化消光截面的 Mie 分波展开式(公式(1))来解释。因为只有 $a_n(x, m)$ 和 $b_n(x, m)$ 的实部在公式(1)中出现,所以波纹结构产生的原因是 $a_n(x, m)$ 和 $b_n(x, m)$ 的实部出现了极值。因此,波纹结构在特定的尺寸参数 x 位置的狭窄尖峰是由散射系数 $a_n(x, m)$ 和 $b_n(x, m)$ 的实部在特定的 x 的狭窄尖峰决定的。这样的狭窄尖峰称为谐振。

由于能量守恒, $a_n(x, m)$ 和 $b_n(x, m)$ 的实部是以 1 为界的^[6]:

$$0 \leqslant \operatorname{Re}[a_n(x, m)] \leqslant 1 \quad (4)$$

$$0 \leqslant \operatorname{Re}[b_n(x, m)] \leqslant 1 \quad (5)$$

公式(4)、(5)中的相对折射率 m 是实数。因此谐振的峰值就出现在 $\operatorname{Re}(a_n(x, m))=1$ 或 $\operatorname{Re}(b_n(x, m))=1$ 的位置,如图 2 所示。

依次类推,以后的波纹结构的峰值分别对应着 b_{17} 、 a_{17} 、 b_{18} 、 a_{18} ……。

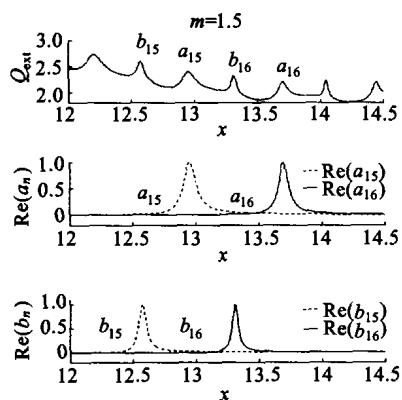


图 2 $m=1.5$ 时, $\text{Re}(a_{15})$ 、 $\text{Re}(b_{15})$ 、 $\text{Re}(a_{16})$ 、 $\text{Re}(b_{16})$ 的峰值分别对应着消光率波纹结构的 4 个峰值

Fig. 2 Peaks of $\text{Re}(a_{15})$ 、 $\text{Re}(b_{15})$ 、 $\text{Re}(a_{16})$ 、 $\text{Re}(b_{16})$ are corresponding to the four peaks of the ripple structure of the extinction efficiency, when $m=1.5$

1.2 消光率曲线波纹结构的近似周期与相对折射率 m 的关系

1.2.1 m 为实数且 $m \leq 2$ 时的情形

在 $x \gg 1$ 且 $m-1 \ll 1$ 时, Van de Hulst 推导出消光率的近似表达式^[2]:

$$\begin{aligned} Q_{\text{ext}}(x, m) \approx & 2 \left\{ 1 - \frac{\sin[2x(m-1)]}{x(m-1)} \right\} + \\ & \frac{1 - \cos[2x(m-1)]}{x^2(m-1)^2} \end{aligned} \quad (6)$$

当 x 足够大时, 公式(6)中含有 x^{-2} 的项可以忽略, 那么消光率随 x 变化曲线的周期振荡由 $\sin[2x(m-1)]$ 项决定, 振荡周期为:

$$\Delta x = \frac{\pi}{m-1} \quad (7)$$

这与消光率的精确表达式(1)的数值计算结果相符。Van de Hulst^[2]指出消光率随 x 变化曲线的周期振荡的极大值与极小值序列是由入射光的直线传播的那部分光波与被介质球衍射的那部分光波相互干涉的结果。因此, 消光率随 x 变化曲线的结构称为干涉结构, 公式(6)能正确地说明消光率的干涉结构及其周期。由于公式(6)是以 $m-1 \ll 1$ 为前提的, 因此它不适用于大的相对折射率 m , 然而在实际应用中, 只要满足 $m < 2.0$, 公式(6)的近似结果还是比较理想的。

当 $x \gg n^2/2$ 时, $\text{Re}(a_n(x, m) + b_n(x, m))$ 可用渐近表达式^[9]表示:

$$\text{Re}[a_n(x, m) + b_n(x, m)] \sim$$

$$\frac{(m+1)^2}{m^2+1} \sin^2[(m-1)x] + \frac{(m-1)^2}{m^2+1} \sin^2[(m+1)x] + 2 \left(\frac{m^2-1}{m^2+1} \right)^2 \sin[(m-1)x] \sin[(m+1)x] \cos 2mx$$

$$1 - \left(\frac{m^2-1}{m^2+1} \right)^2 \cos^2 2mx \quad (8)$$

$$\text{Re}[a_n(x, m)] \sim \frac{(\sin mx \cos x - m \cos mx \sin x)^2}{\sin^2 mx + m^2 \cos^2 mx} \quad (9)$$

$$\text{Re}[b_n(x, m)] \sim \frac{(m \sin mx \cos x - \cos mx \sin x)^2}{m^2 \sin^2 mx + \cos^2 mx} \quad (10)$$

令 $\alpha = \frac{(m+1)^2}{m^2+1}$, $\beta = \frac{(m-1)^2}{m^2+1}$, $\gamma = \left(\frac{m^2-1}{m^2+1} \right)^2$, 则公式(8)可简化为:

$$\begin{aligned} \text{Re}[a_n(x, m) + b_n(x, m)] \sim & \\ \frac{\alpha \sin^2[(m-1)x] + \beta \sin^2[(m+1)x] + 2\gamma \sin[(m-1)x] \sin[(m+1)x] \cos 2mx}{1 - \gamma \cos^2 2mx} \end{aligned} \quad (11)$$

α 、 β 、 γ 的比例关系如图 3 所示。由图 3 可知, 当 $0.5 \leq m \leq 2$ 时, $\beta/\alpha \leq 0.2$, $\gamma/\alpha \leq 0.2$, 即 $\alpha \gg \beta$, $\alpha \gg \gamma$, 则公式(11)可简化为 $\text{Re}[a_n(x, m) + b_n(x, m)] \sim \alpha \sin^2[(m-1)x]$ 。因此, 只要满足 $0.5 \leq m \leq 2$, 消光曲线的波纹结构都是以 $\Delta x = \pi/(m-1)$ 为近似周期的, 如图 4 所示。

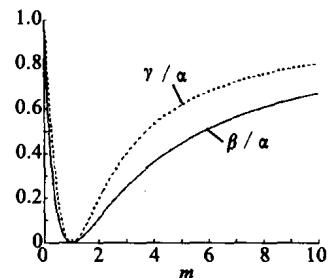


图 3 β/α 与 γ/α 的比例关系

Fig. 3 Ratio relation of β/α and γ/α

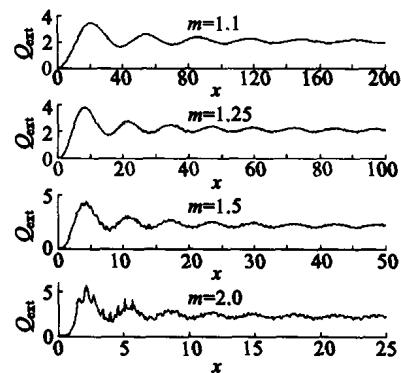


图 4 $m \leq 2$ 时, 消光率曲线的波纹结构都是以 $\Delta x = \pi/(m-1)$ 为近似周期的

Fig. 4 Periodicities of the ripple structure of the extinction efficiency are all $\Delta x = \pi/(m-1)$, when $m \leq 2$

1.2.2 m 为实数且 $m > 2$ 时的情形

当 $m > 2$ 时, 系数 α, β 不能忽略, 当相对折射率 m 增大时, 波纹峰值之间的距离会变小, 波纹结构会失去单一的周期性, 而变得粗糙杂乱, 峰值与凹陷会变得更尖锐。当 $m = \infty$ 时, $\text{Re}[a_n(x, m) + b_n(x, m)] = \sin^2 x + \cos^2 x = 1$, 消光率曲线没有干涉结构, 只能对光完全反射, 这与计算结果一致, 如图 5 所示。

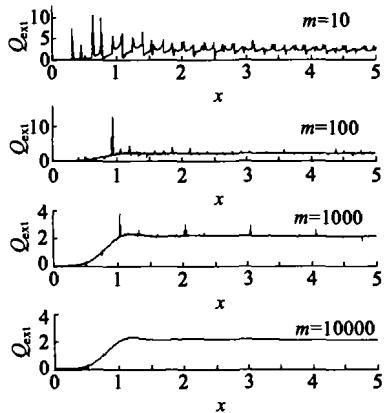


图 5 $m > 2$ 时, 消光率波纹结构没有单一的周期, m 越大, 振荡的振幅越小

Fig. 5 Ripple structures of the extinction efficiency have no single periodicity, when $m > 2$. The larger m is, the smaller the oscillation amplitudes are

1.2.3 m 为复数时的情形

当相对折射率 m 是复数时, 通过数值计算可以得出, 只要 m 的虚部足够小 ($|\text{Im}(m)| \leq 0.01$), 消光率曲线的干涉结构的周期与 m 为实数时基本相同。当 m 的虚部增大时, $\text{Re}[a_n(x, m)]$ 与 $\text{Re}[b_n(x, m)]$ 会变小, 因此, 干涉结构的振荡幅度也随之减小。说明 m 的虚部变大时, 小球对光的吸收增强了, 干涉现象随之减弱了, 如图 6、7 所示。

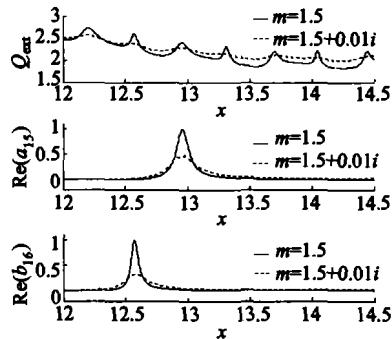


图 6 m 为复数 ($|\text{Im}(m)| \leq 0.01$) 时消光率的波纹结构的周期基本不变, 只是振荡的幅度变小

Fig. 6 Periodicity of ripple structure of the extinction efficiency does not change, but the oscillating amplitude is reduced, when m is complex and $|\text{Im}(m)| \leq 0.01$

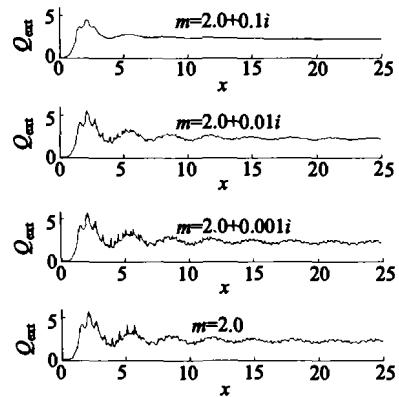


图 7 对应于不同的 m , 消光率与 x 的关系曲线

Fig. 7 The relation curves of extinction efficiency and x corresponding to different m

2 结论

由以上的分析可知, 当相对折射率 m 为实数, 且 $m \leq 2$ 时, 消光率曲线的波纹结构具有单一周期性, 并且波纹结构的峰值与 $\text{Re}[a_n(x, m)]$ 、 $\text{Re}[b_n(x, m)]$ 的峰值相对应。当 m 为复数时, 只要满足 $|\text{Im}(m)| < 0.01$, 波纹结构仍具有相同的近似周期, 只是振荡的振幅减小了, $|\text{Im}(m)|$ 越大, 波纹结构的振荡振幅越小。

参考文献:

- [1] Mie G. Beitrage zur optik truber medien speziell kolloidaler metallsolutions[J]. Ann Phys, 1908, 25: 377-445.
- [2] H C van de Hulst. Light Scattering by Small Particles[M]. New York: Dover, 1981.
- [3] Bohren C F, Huffman D R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles[M]. New York: Wiley, 1998.
- [4] Born M, Wolf E. Principles of Optics, 6th ed[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1980.
- [5] Sudiarta I W, Petr Chylek. Mie-scattering formalism for spherical particles embedded in an absorbing medium[J]. J Opt Soc Am(A), 2001, 6: 1275-1278.
- [6] Chylek P. Partial-wave resonance and the ripple structure in the Mie normalized extinction cross section[J]. J Opt Soc Am(A), 1976, 66: 285-287.
- [7] Chylek P. Asymptotic limits of the Mie-scattering characteristics[J]. J Opt Soc Am(A), 1975, 65: 1316-1318.
- [8] Chylek P. Resonance structure of Mie scattering: distance between resonance[J]. J Opt Soc Am(A), 1990, 7(9): 1609-1613.
- [9] Chylek P, Zhang J. Large sphere limits of the Mie scattering functions[J]. J Opt Soc Am(A), 1973, 63: 699-706.