

Моделирование индикатрис рассеяния лазерного излучения малыми сферическими поглощающими частицами

М.В. Сапронов¹, Н.М. Скорнякова¹

maks-sapronov@yandex.ru|nmskorn@mail.ru

¹Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, Россия;

Рассмотрены явление упругого рассеяния света на сферических поглощающих частицах и способ его количественного описания в рамках теории Г. Ми. Разработан алгоритм расчета величины относительной интенсивности рассеянного излучения в произвольном направлении и получена программа моделирования 3D-индикатрис рассеяния. Представлены модели 3D-индикатрис рассеяния лазерного линейно поляризованного излучения на прозрачных и поглощающих сферических частицах. Проведен анализ влияния поглощения света на форму относительного углового распределения интенсивности рассеянного излучения на частицах различного размера. Визуализирована динамика формы 3D-индикатрисы рассеяния на поглощающей частице при изменении ее радиуса. Определены потенциальные области практического применения программы и выявлены факторы, ограничивающие ее использование для расчета рассеяния на системах реальных частиц.

Ключевые слова: рассеяние Рэлея, индикатриса рассеяния, компьютерное 3D-моделирование, визуализация динамики.

The Laser Radiation Scattering by the Small Spherical Absorbing Particles Modelling

M.V. Sapronov¹, N.M. Skornyakova¹

maks-sapronov@yandex.ru|nmskorn@mail.ru

¹National Research University «Moscow Power Engineering Institute», Moscow, Russia;

The paper deals with the elastic light scattering on spherical absorbing particles phenomenon and the method of its quantitative description in the framework of the theory of G. Mi. An algorithm for calculating the scattered radiation relative intensity in an arbitrary direction has been developed and a modeling 3D scattering indicatrices program has been obtained. The models of 3D indicatrix scattering laser linearly polarized radiation on transparent and absorbing spherical particles are presented. The analysis of the light absorption effect on the relative angular distribution shape of the scattered radiation intensity on particles of various sizes has been carried out. The dynamics of the scattering 3D indicatrix shape on an absorbing particle as its radius changes has been visualized. The potential areas of the program practical application have been identified. The factors limiting to use program for calculations of scattering on real particles systems has been revealed.

Keywords: Rayleigh scattering, scatter indicatrices, computer 3D modeling, dynamics visualization.

1. Введение

Эффект рассеяния света на молекулах и атомах вещества до сих пор мало изучен и не имеет завершеного теоретического описания несмотря на его повсеместность и фундаментальную значимость в оптике. Для строго теоретического анализа этого явления требуется использовать квантово-волновой подход, что является весьма трудоемкой задачей, которая до настоящего времени осложнялась еще и тем, что экспериментальное исследование рассеяния Рэлея не представлялось возможным по технологическим причинам [3].

Улучшение параметров компонентов оптико-электронной базы в результате ее непрерывного технического развития, в частности, величины энергии, переносимой импульсом излучения современных твердотельных лазеров, и чувствительности приемников оптического излучения, делает возможным экспериментальное исследование рассеяния Рэлея и открывает широкое поле для научной деятельности [5].

Практический интерес к упругому молекулярному рассеянию обоснован перспективами создания оптического метода диагностики потоков плазмы и разогретого газа с целью определения полей концентрации вещества и температуры. Доступные средства подобных измерений в газовых средах при высокой температуре сильно ограничены или вовсе отсутствуют. Высокий потенциал идеи использования эффекта Рэлеевского рассеяния в основе принципа работы метода диагностики связан главным образом с существованием прямой

пропорциональной зависимости между относительной интенсивностью рассеянного излучения и температурой рассеивающего центра, возведенной в 4-ую степень [2]. Столь резкая температурная зависимость ведет к увеличению точности количественной диагностики, в то время как точность существующих методов уменьшается. К остальным преимуществам метода можно отнести дифференциальный характер измерений, отсутствие необходимости искусственного ввода рассеивающих центров в измерительный объем и простую оптическую схему.

Оптическая диагностика процессов тепло- и массообмена применяется для анализа и повышения эффективности работы, например, двигателей сгорания, реактивных двигателей, сжигающих топливо установок и прочих систем, в работе которых предусмотрено наличие высоких температур. Все вышеперечисленное показывает актуальность исследований в области упругого рассеяния света на молекулах и атомах.

В данной работе представлены модели 3D-индикатрис рассеяния света на резких сферических неоднородностях среды, малых или сравнимых по размеру с длиной волны зондирующего излучения. Выполнение моделирования, как правило, является предварительным этапом экспериментального исследования, позволяет оценить результаты измерений и выбрать наиболее оптимальную конфигурацию экспериментальной установки, при которой вероятность успешного завершения планируемой научно-исследовательской работы самая высокая.

2. Физические основы расчета интенсивности рассеянного излучения

Для правильного понимания представленных в следующих главах результатов моделирования целесообразно раскрыть физическую суть процесса рассеяния оптического излучения на малых частицах, что и сделано в данной главе. Дальнейшие рассуждения являются в большей степени качественными, стоит оговорить, что хотя они и основаны на классическом представлении о строении вещества и природе света, но не имеют логических противоречий с квантовым подходом.

Физические причины рассеяния связаны с наличием зарядов в атомах и молекулах, которые под действием внешнего переменного электромагнитного поля совершают колебательное движение. Осцилляции зарядов приводят к тому, что они излучают вторичные электромагнитные волны, причем даже при небольших расстояниях от поверхности частицы можно приближенно считать форму их фронта сферической.

Часть падающей электромагнитной энергии преобразуется в другие формы энергии, например, в энергию теплового движения молекул. Такое преобразование энергии называется поглощением и имеет место всегда, даже если доля поглощенной энергии ничтожно мала. Если частота вторичных световых волн совпадает с частотой зондирующего излучения, то рассеяние света называется упругим, а если не совпадает – неупругим.

Физика процесса рассеяния света отдельной частицей проиллюстрирована на рис. 1. Частица мысленно разбита на множество областей, в каждой из которых падающая электромагнитная волна наводит диполь, излучающий вторичную волну. Все источники вторичных волн излучают когерентно по отношению друг к другу. Суммарное поле рассеянной волны определяется суперпозицией вторичных волн, причем сложение необходимо проводить с учетом фазово-амплитудных соотношений. Это означает, что интенсивность рассеянного излучения зависит от направления рассеяния [1].

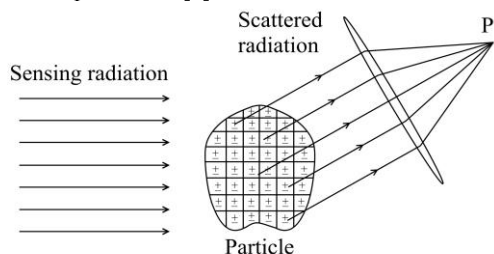


Рис. 1. Рассеяние света отдельной частицей [1].

Характер рассеяния сильно зависит от соотношения размера частицы и длины волны падающего излучения. Если частица очень мала по сравнению с длиной волны, то суммарное поле определяется суперпозицией вторичных волн с учетом только их амплитудных соотношений, а фазовый сдвиг между осцилляциями любых двух вторичных источников ничтожно мал. При таких условиях говорят о рассеянии в приближении Рэлея.

Если размер частицы сопоставим с длиной волны излучения, то рассеяние соответствует приближению Рэлея-Ганса. В этом приближении колебания вторичных источников сдвинуты по фазе друг относительно друга в общем случае, причем величина сдвига тем больше, чем больше проекция расстояния между двумя вторичными источниками на направление распространения волны. Влияние фазовых эффектов на результат суперпозиции вторичных волн приводит к асимметрии относительного

углового распределения интенсивности рассеянного излучения, в частности, рассеяние в направлении распространения зондирующей волны сильно преобладает над обратным рассеянием.

Рассеяние соответствует приближению больших частиц, если на оптический путь зондирующего излучения в частице умещается значительное количество длин волн. Отличительной особенностью такого рассеяния является наличие выраженных максимумов и минимумов в относительном угловом распределении интенсивности рассеянного излучения, которые образуются вследствие интерференции вторичных волн [8].

В основу расчета интенсивности рассеянного излучения в заданном направлении положена теория Г. Ми, разработанная голландским физиком в 1908 г. Модели индикатрис рассеяния линейной поляризованной волны [7] и визуализация их динамики на прозрачных сферических частицах при изменении их радиуса представлены в работе [6].

Схема единичного акта рассеяния электромагнитной волны изображена на рис. 2. Для определенности на рисунке введена система координат xyz , начало отсчета которой связано с рассеивающей частицей. Волновой вектор \mathbf{k} падающей волны направлен вдоль оси Oz , комплексная амплитуда вектора напряженности электрического поля \mathbf{A} направлена вдоль оси Oz . Волновой вектор рассеянного излучения \mathbf{k}_S направлен к точке наблюдения M , A_S – комплексная амплитуда напряженности электрического поля рассеянной волны. Плоскость P , которая образована прямой, содержащей вектор \mathbf{k} , и точкой M , называется плоскостью рассеяния, а угол θ – углом рассеяния.

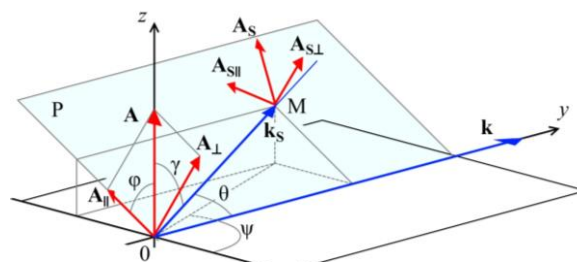


Рис. 2. Схема элементарного акта рассеяния.

Амплитуда A_S определяется по принципу суперпозиции (1) как геометрическая сумма комплексных амплитуд компонент напряженности поля рассеянной волны $A_{S||}$ и $A_{S\perp}$, параллельной и перпендикулярной плоскости рассеяния соответственно.

$$A_S = \sqrt{A_{S||}^2 + A_{S\perp}^2}, \quad \varphi_S = \frac{A_{S\perp}}{A_{S||}}, \quad (1)$$

где φ_S – угол между A_S и $A_{S||}$.

Величину каждой из компонент $A_{S||}$ и $A_{S\perp}$ возможно найти, используя выражение (2), по известным значениям комплексных амплитуд аналогичных компонент напряженности поля падающей волны $A_{||}$ и A_{\perp} и безразмерных комплексных амплитудных функций рассеяния $S_{||}$ и S_{\perp} .

$$\begin{bmatrix} A_{S\perp} \\ A_{S||} \end{bmatrix} = \frac{\exp\{ikR\}}{ikR} \begin{bmatrix} S_{\perp} & 0 \\ 0 & S_{||} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{\perp} \\ A_{||} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где R – расстояние от центра рассеяния до точки наблюдения.

Общие выражения для S_{\parallel} и S_{\perp} (3), (4) получены Г. Ми в виде суммы бесконечного ряда членов, которые показывают, что S_{\parallel} и S_{\perp} зависят от приведенного радиуса частицы $x = 2\pi r/\lambda$, ее комплексного показателя преломления m и угла рассеяния θ .

$$S_{\perp} = S_{\perp}(m, x, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} \cdot (a_n \pi_n + b_n \tau_n), \quad (3)$$

$$S_{\parallel} = S_{\parallel}(m, x, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} \cdot (b_n \pi_n + a_n \tau_n). \quad (4)$$

Формулы для расчетов n -ых коэффициентов Ми a_n и b_n , а также угловых коэффициентов π_n и τ_n приведены в монографии [4].

Рассеяние принято описывать безразмерными функциями, показывающими относительное угловое распределение интенсивности рассеянного света [8], – индикатрисами $\xi(\vartheta, \varphi)$ или $Y(\vartheta, \varphi)$ в обычном (5) или логарифмическом (6) масштабах соответственно:

$$\xi(\vartheta, \varphi) = S_{\perp} S_{\perp}^* \cdot \sin^2(\varphi) + S_{\parallel} S_{\parallel}^* \cdot \cos^2(\varphi), \quad (5)$$

$$Y(\vartheta, \varphi) = \lg(S_{\perp} S_{\perp}^* \cdot \sin^2(\varphi) + S_{\parallel} S_{\parallel}^* \cdot \cos^2(\varphi)). \quad (6)$$

Поскольку формулы (3), (4) включают сумму бесконечного ряда, то редко представляется возможным получить аналитическое выражение, описывающее индикатрису рассеяния. Поэтому сумму ряда принято искать, используя рекурсию и ограничившись конечным числом членов при достижении заданной точности ϵ . Для построения алгоритмов рекурсии используются рекуррентные формулы расчета коэффициентов a_n , b_n , π_n и τ_n [4].

Для построения моделей 3D-индикатрис рассеяния необходимо охватить весь диапазон возможных направлений наблюдения и, следовательно, использовать трехмерную систему координат. Весьма удобной для представления индикатрис является сферическая система координат (ξ, ψ, γ) или (Y, ψ, γ) , где широта ψ – угол, отсчитываемый от оси x в плоскости xOz , долгота γ – угол, отсчитываемый от оси z , а ξ или Y – относительное значение интенсивности в заданном направлении в прямом и логарифмическом масштабе соответственно.

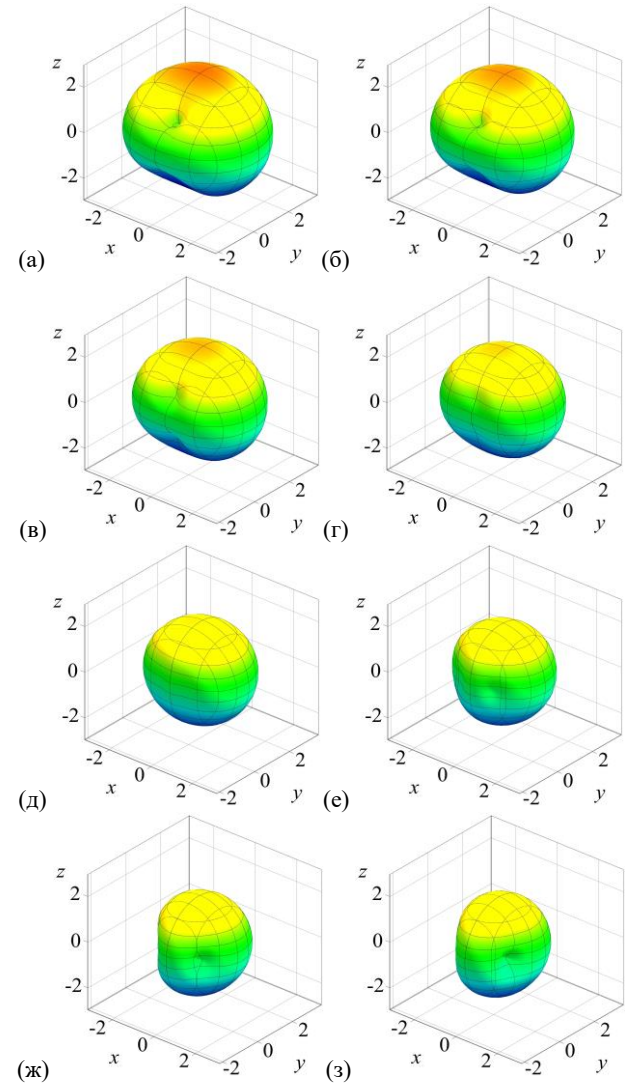
3. Динамика 3D-моделей индикатрис при увеличении поглощающих свойств рассеивающих центров

Для теоретического описания распространения света в поглощающих средах используют комплексный показатель преломления m . Действительная часть показателя преломления $\text{Re}(m)$ определяет во сколько раз скорость распространения света в среде меньше, чем в вакууме, мнимая часть показателя преломления $\text{Im}(m)$ определяет уменьшение интенсивности световой волны. Для демонстрации отличительных особенностей рассеяния излучения на поглощающих и прозрачных частицах получены модели 3D-индикатрис, при расчете которых величина $\text{Re}(m)$ сохранялась постоянной, а величина $\text{Im}(m)$ увеличивалась.

На рис. 3 представлены модели 3D-индикатрис в логарифмическом масштабе (6) рассеяния света с длиной волны $\lambda = 355$ нм на изотропных сферических частицах радиусом $r = 30$ нм и с действительной частью показателя преломления $\text{Re}(m) = 1,6$, комплексная часть показателя преломления $\text{Im}(m)$ изменяется в диапазоне $[0; 1,4]$ с шагом 0,2.

Значения Y относительной интенсивности рассеяния в логарифмическом масштабе были увеличены на 3, чтобы все

они были положительны. Такой прием использован исключительно для удобства графического представления результатов. Логарифмический масштаб выбран исходя из того, что при заданном соотношении радиуса частицы и длины волны относительная интенсивность рассеяния принимает значения, которые отличаются на несколько порядков в зависимости от направления. Центр рассеяния находится в начале координатной сетки. Зондирующее излучение распространяется вдоль оси Oy и поляризовано в плоскости $OyOz$.



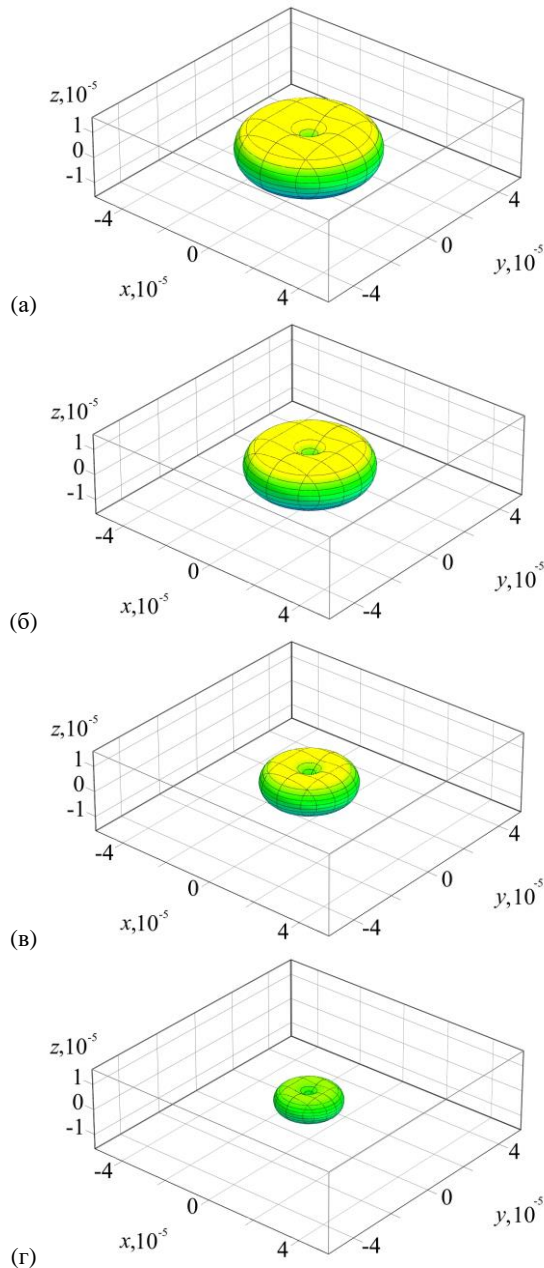
(а) $m = 1,6 - 0i$; (б) $m = 1,6 - 0,2i$; (в) $m = 1,6 - 0,4i$;
(г) $m = 1,6 - 0,6i$; (д) $m = 1,6 - 0,8i$; (е) $m = 1,6 - 1,0i$;
(ж) $m = 1,6 - 1,2i$; (з) $m = 1,6 - 1,4i$.

Рис. 3. Модели 3D-индикатрис рассеяния излучения с длиной волны $\lambda = 355$ нм на сферических частицах радиусом $r = 30$ нм.

Рассеяние, для которого представлены модели на рис. 3, соответствует приближению Рэля-Ганса. В случае с диэлектрическими частицами [6] особенность такого рассеяния заключается в значительном преобладании рассеяния вперед (в направлении падающего излучения) над обратным рассеянием (в направлении противоположном направлению падающего излучения), при этом стоит отметить, что амплитуда волны одинакова в каждой точке внутри частицы. С увеличением значения $\text{Im}(m)$ форма индикатрисы изменяется. Несмотря на то, что действительная часть показателя преломления, следовательно, и распределение фазы волны внутри частицы

одинаковы для всех моделей на рис. 3, амплитуда волны уменьшается по мере ее распространения в поглощающем веществе частицы. Это приводит к изменению результата суперпозиции вторичных волн и объясняет изменение формы моделей на рис. 3. Кроме того, затухание амплитуды колебаний волны объясняет также уменьшение среднего размера 3D-индикатрисы как стереометрической фигуры.

На рис. 4 представлены модели 3D-индикатрис в прямом масштабе (5) рассеяния света с длиной волны $\lambda = 355$ нм на изотропных сферических частицах радиусом $r = 0,3$ нм и с действительной частью показателя преломления $\text{Re}(m) = 1,6$. Комплексная часть показателя преломления $\text{Im}(m)$ изменяется в диапазоне $[0; 0,6]$ с шагом $0,2$. Положение центра рассеяния, направление распространения и ориентация вектора напряженности электрического поля падающей волны выбраны такими же, как на рис. 3.



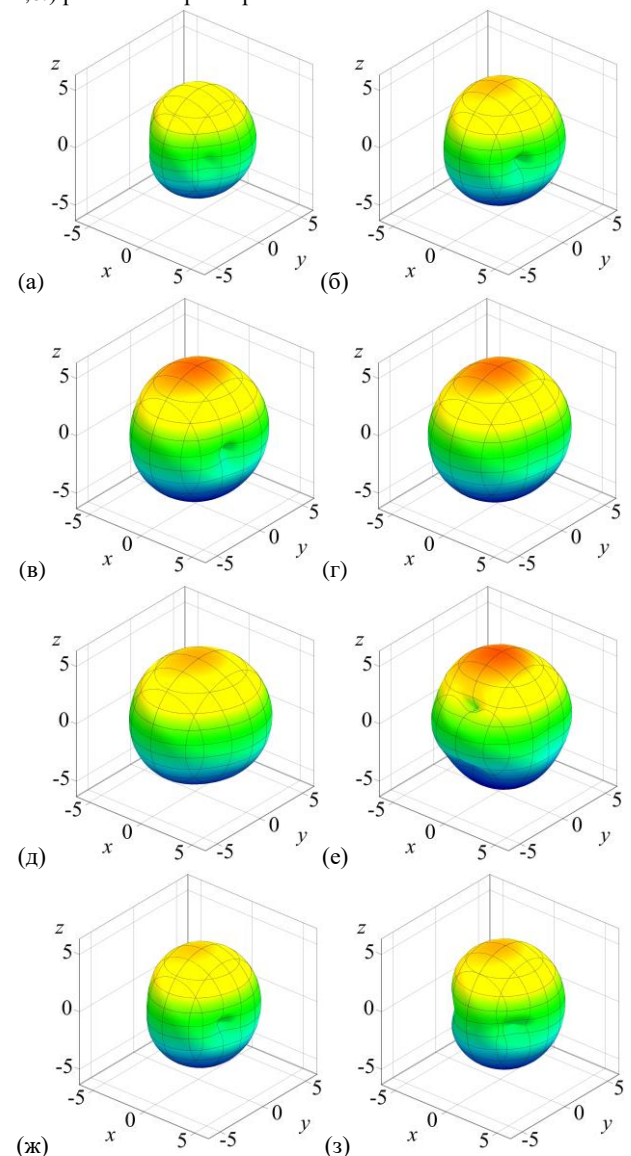
(а) $m = 1,6 - 0i$; (б) $m = 1,6 - 0,2i$;
(в) $m = 1,6 - 0,4i$; (г) $m = 1,6 - 0,6i$;

Рис. 4. Модели 3D-индикатрис рассеяния излучения с длиной волны $\lambda = 355$ нм на сферических частицах радиусом $r = 0,3$ нм.

В данном случае характер рассеяния соответствует приближению Рэля. Фаза волны внутри частицы практически не изменяется, и при расчете поля рассеянной волны учитываются только амплитудные соотношения между вторичными колебаниями наведенных диполей. По этой причине, во-первых, форма представленных на рис. 4 моделей симметрична относительно центра рассеяния, а, во-вторых, она остается постоянной с увеличением мнимой части показателя преломления. Затухание колебаний падающей волны внутри частицы проявляется лишь в пропорциональном уменьшении 3D-индикатрисы.

4. Динамика 3D-моделей индикатрис при увеличении радиуса рассеивающего центра

Изменение формы 3D-индикатрисы рассеяния излучения на прозрачной частице с увеличением ее радиуса продемонстрировано в работе [6]. На рис. 5 представлены модели 3D-индикатрис рассеяния света длиной волны $\lambda = 355$ нм на сферических поглощающих частицах ($m = 1,6 - 1,0i$) различного размера.



(а) $r = 32,5$ нм; (б) $r = 35$ нм; (в) $r = 37,5$ нм;
(г) $r = 40$ нм; (д) $r = 42,5$ нм; (е) $r = 45$ нм;
(ж) $r = 47,5$ нм; (з) $r = 50$ нм.

Рис. 5. Модели 3D-индикатрис рассеяния излучения с длиной волны $\lambda = 355$ нм на сферических частицах с показателем преломления $m = 1,6 - 1,0i$.

Радиус центров рассеяния изменяется в диапазоне [32,5; 50] нм, индикатрисы рассеяния представлены в логарифмическом масштабе, значения Y относительной интенсивности рассеяния были увеличены на 5 для удобства графического представления 3D-моделей. Положение центра рассеяния, направление распространения и ориентация вектора напряженности электрического поля падающей волны выбраны такими же, как на рис. 3.

Индикатрисы на рис. 5 а соответствует рассеянию в приближении Рэлея-Ганса. Средний геометрический размер 3D-индикатрисы при увеличении радиуса сначала увеличивается (рис. 5 а – d), а затем уменьшается (рис. 5 е – h), аналогичный характер имеет изменение доли рассеиваемой интенсивности падающего излучения или, по-другому, коэффициента рассеяния при увеличении радиуса частицы. Анализ 3D-индикатрис, соответствующих частицам более широкого диапазона размеров, показал, что в общем случае зависимость коэффициента рассеяния от радиуса частицы имеет осциллирующий характер для приближения Рэлея-Ганса [6]. Кроме того, относительное угловое распределение интенсивности приобретает осциллирующий характер. Так проявляется интерференция вторичных волн при суперпозиции.

5. Заключение

Получена программа, позволяющая рассчитывать модели 3D-индикатрис рассеяния на однородных и изотропных сферических частицах. Форма центров рассеяния является единственным ограничивающим фактором ее применения для расчета интенсивности рассеянного излучения на реальных системах частиц, несмотря на это результаты работы программы могут быть напрямую использованы для оценки величины интенсивности, которую стоит ожидать, например, в результате экспериментального исследования рассеяния света. Избавиться от данного ограничения возможно путем внесения поправки в результаты расчета интенсивности рассеянного излучения по формулам Г. Ми. Величина поправки зависит от отличия формы реальных рассеивателей от сферической [4].

С точки зрения допустимых вариаций входных данных программа является универсальной, поскольку позволяет рассчитывать модели 3D-индикатрис рассеяния излучения произвольной длины волны на частицах, радиус которых может быть как много больше или много меньше заданной длины волны, так и сопоставим с ней. Широкий спектр значений действительной и мнимой части комплексного показателя преломления, при которых могут быть получены трехмерные модели, также указывает на универсальность программы. На примере моделей индикатрис, представленных на рис. 3 – 5, а также моделей, представленных в работе [6], в частности, демонстрируется возможность проследить динамику формы индикатрисы рассеяния и величины относительной интенсивности рассеянного излучения с изменением оптической плотности и поглощающих свойств частицы, ее размера и длины волны падающего излучения. На основе динамики моделей возможно сделать вывод о диапазонах размеров рассеивателей, в котором рассеяние соответствует приближению Рэлея, Рэлея-Ганса или больших частиц.

Более важным практическим применением программы является моделирование результатов экспериментального исследования рассеяния лазерного излучения при его распространении в газообразных средах, в частности, на частицах продуктов горения, плазмы, молекулах и атомах высокотемпературных газов. Подобное моделирование является необходимым этапом исследований, целью которого является подбор оптимальных параметров

экспериментальной установки и поиск оптимальных условий проведения эксперимента.

6. Благодарности

Работа выполнялась при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект 3.8009.2017/БЧ).

7. Литература

- [1] Борен К., Хафмен Г. Поглощение и рассеяние света малыми частицами (перевод) / М.: «Мир». – 1986. – 331 с.
- [2] Борн М., Вольф Э. Основы оптики / Пер. с англ.: Главная редакция физико-математической литературы. – М.: Изд-во «Наука», 1973. – 716 с.
- [3] Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами / Пер. с англ.: Под ред. В.В. Соболева. – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. – 536 с.
- [4] Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами / Пер. с англ.: Под ред. К.Н. Кондратьева. – М.: Мир, 1971. – 165 с.
- [5] Коломиец С.Ф. Современное состояние моделей рассеяния электромагнитных волн на частицах разреженных сред // Научный вестник МГТУ ГА, 2013. – №189. – С. 104 – 109.
- [6] Сапронов М.В., Скорнякова Н.М. Компьютерная визуализация индикатрис рассеяния Рэлея в динамике // Научная визуализация. – М.: Изд-во НИЯУ МИФИ, 2017. – Т. 9. – № 3. – С. 42 – 53.
- [7] Сапронов М.В., Скорнякова Н.М. Программа моделирования трехмерных индикатрис рассеяния света на сферических прозрачных или слабо поглощающих частицах / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019612144.
- [8] Смирнов В.И., Янина Г.М. Сапронов М.В. Расчет и проектирование лазерных доплеровских анемометров: учеб. пособие / М.: Изд-во МЭИ, 2018. – 52 с.

Об авторах

Скорнякова Надежда Михайловна, к.т.н., доцент кафедры физики им. В.А. Фабриканта института радиотехники и электроники Национального исследовательского университета «МЭИ». E-mail: nmskorn@mail.ru.

Сапронов Максим Васильевич, аспирант кафедры физики им. В.А. Фабриканта института радиотехники и электроники Национального исследовательского университета «МЭИ». E-mail: maks-sapronov@yandex.ru.