

О.М. Коростина, В.В. Розанов

### ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУХСЛОЙНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ К ВАРИАЦИЯМ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ЯДРА И ОБОЛОЧКИ

Получены аналитические выражения, позволяющие вычислять оптические характеристики двухслойных сферических частиц и их производные по вещественной и мнимой части показателя преломления. Результаты сравнивались с данными численного дифференцирования. Проведено сравнение чувствительности оптических характеристик к вариациям показателя преломления ядра и оболочки для двухслойных частиц и равновеликих однородных частиц с эффективным показателем преломления для широкого диапазона размеров частиц и отношения радиусов ядра и оболочки.

Несмотря на значительные успехи, достигнутые в теоретическом исследовании оптических характеристик ансамблей сферических полидисперсных частиц [1–3], в настоящее время продолжается, с одной стороны, разработка различных аналитических приближенных методов вычислений [4, 5], а с другой стороны, усовершенствование и модификация известных численных алгоритмов расчета оптических характеристик сферических однослойных и двухслойных частиц [3, 5, 8]. Так, например, в [8] предложены простые выражения, позволяющие в рамках алгоритма [7] получать одновременно с оптическими характеристиками однослойных сферических частиц их производные по комплексному показателю преломления. В дальнейшем это позволило сформулировать и реализовать комплексный подход к восстановлению функции распределения частиц по размерам и комплексного показателя преломления ансамбля сферических частиц на основе оптических измерений [9].

Однако в целом ряде практически важных случаев, как показано в [1–3, 6], оптические характеристики реальных частиц более адекватно описываются на основе приближения двухслойной сферической частицы. В связи с этим в настоящей работе, которая является логическим продолжением работы [8], предлагается алгоритм вычисления производных от оптических характеристик двухслойных частиц по комплексному показателю преломления вещества ядра и оболочки.

Полученные в работе выражения используют лишь те вспомогательные функции, которые необходимы для определения самих оптических характеристик и поэтому для их расчета не требуется больших дополнительных затрат машинного времени. Это обстоятельство может быть весьма существенным при решении обратных задач оптики светорассеивающих сред на ансамблях двухслойных сферических частиц.

1. Зависимость оптических характеристик двухслойных сферических частиц от показателей преломления ядра и оболочки определяется через коэффициенты  $a_n$  и  $b_n$  рядов Ми [3], поэтому для вычисления производных от оптических характеристик достаточно построить алгоритм вычисления производных от этих коэффициентов.

Запишем производные  $a_n$  и  $b_n$  по вещественной части показателя преломления ядра  $m_1 = n_1 - i\chi_1$  и оболочки  $m_2 = n_2 - i\chi_2$  в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{da_n}{dn_1} &= \frac{m_3}{m_2} \frac{dT_a}{dn_1} \frac{[Z_n^1(x_4) \cdot B_a - Z_n^3(x_4) \cdot A_a]}{B_a^2}, \\ \frac{db_n}{dn_1} &= \frac{m_2}{m_3} \frac{dT_b}{dn_1} \frac{[Z_n^1(x_4) \cdot B_b - Z_n^3(x_4) \cdot A_b]}{B_b^2}, \\ \frac{da_n}{dn_2} &= \frac{m_3}{m_2} \left[ \frac{dT_a}{dn_2} - \frac{1}{m_2} \cdot T_a \right] \frac{[Z_n^1(x_4) \cdot B_a - Z_n^3(x_4) \cdot A_a]}{B_a^2}, \\ \frac{db_n}{dn_2} &= \frac{m_2}{m_3} \left[ \frac{dT_b}{dn_2} - \frac{1}{m_2} \cdot T_b \right] \frac{[Z_n^1(x_4) \cdot B_b - Z_n^3(x_4) \cdot A_b]}{B_b^2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $m_3$  — показатель преломления окружающей частицу среды;  $x_4 = \frac{2\pi r}{\lambda}$ ;  $r$  — внешний радиус частицы;  $\lambda$  — длина волны;  $A_a, A_b, B_a, B_b$  — числитель и знаменатель соответственно выражений для  $a_n$  и  $b_n$  вычисляемых в основном алгоритме [3]; остальные обозначения соответствуют использованным в [3] для описания основного алгоритма.

Для вычисления производных от функций  $T_a$  и  $T_b$ , входящих в формулы (1), используются следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z_n^1(x_i)} \frac{d}{dx_i} \eta_n^1(x_i) &= \frac{n(n+1)}{x_i^2} - 1 - \frac{1}{x_i} \frac{\eta_n^1(x_i)}{Z_n^1(x_i)}, \\ \frac{1}{Z_n^1(x_i)} \frac{d}{dx_i} \eta_n^3(x_i) &= -\frac{1}{x_i} \frac{\eta_n^3(x_i)}{Z_n^1(x_i)} + \left[ \frac{n(n+1)}{x_i^2} - 1 \right] \frac{Z_n^3(x_i)}{Z_n^1(x_i)}, \\ \frac{1}{Z_n^1(x_i)} \frac{d}{dx_i} Z_n^3(x_i) &= \frac{\eta_n^3(x_i)}{Z_n^1(x_i)} - \frac{1}{x_i} \frac{Z_n^3(x_i)}{Z_n^1(x_i)}, \\ \frac{1}{Z_n^1(x_i)} \frac{d}{dx_i} Z_n^1(x_i) &= \frac{\eta_n^1(x_i)}{Z_n^1(x_i)} - \frac{1}{x_i}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\text{где } x_1 = \frac{2\pi r_1}{\lambda} \cdot \frac{m_1}{m_3}, \quad x_2 = \frac{2\pi r_1}{\lambda} \cdot \frac{m_2}{m_3}, \quad x_3 = \frac{2\pi r}{\lambda} \cdot \frac{m_2}{m_3}, \quad x_4 = \frac{2\pi r_1}{\lambda},$$

$r_1$  — радиус ядра;  $\eta_n^1(x_i)/Z_n^1(x_i)$ ,  $\eta_n^3(x_i)/Z_n^1(x_i)$  и  $Z_n^3(x_i)/Z_n^1(x_i)$  — вычисляются по рекуррентным формулам в основном алгоритме [3].

Полученные выражения дают возможность вычислять производные от коэффициентов  $a_n$  и  $b_n$  по вещественной части показателя преломления. Производная по мнимой части получается в соответствии с условием Даламбера—Эйлера.

Формулы для расчета производных от соответствующих оптических характеристик получают простым дифференцированием рядов Ми, т.е. так же, как и для случая однородной частицы [8].

Для проверки устойчивости точных, в рамках алгоритма [3], выражений для производных (ТФ) проводилось сравнение величин производных, полученных по формулам (1, 2), с результатами численного дифференцирования (ЧД). В табл. 1 представлены результаты расчетов монодисперсных производных от факторов эффективности ослабления  $Q_e$  и обратного рассеяния  $Q_\pi$  по вещественной части показателя преломления ядра ( $n_1$ ) и оболочки ( $n_2$ ) для различных значений параметра дифракции  $\rho = \frac{2\pi r}{\lambda}$  и отношений  $r_1/r$ .

Таблица 1

**Производные от  $Q_e$  и  $Q_\pi$  по  $n_1, n_2$ , рассчитанные по точным формулам (ТФ) и с помощью численного дифференцирования (ЧД) для  $m_1 = (1,52 - i \cdot 0,0)$  и  $m_2 = (1,33 - i \cdot 0,0)$  (расстояние между соседними узлами по  $n_1, n_2 - 0,001$ )**

$r_1/r$	$\rho$	Способ расчета	$\frac{dQ_e}{dn_1}$	$\frac{dQ_\pi}{dn_1}$	$\frac{dQ_e}{dn_2}$	$\frac{dQ_\pi}{dn_2}$
0,1	0,2	ТФ	.93694—06	.13928—05	.98032—03	.14428—02
		ЧД	.11040—05	.14000—05	.98079—03	.14436—02
0,5	0,4	ТФ	.20699—02	.29673—02	.14909—01	.20281—01
		ЧД	.20709—02	.29692—02	.14649—01	.20301—01
0,4	4,0	ТФ	.49824	.23163	.11596+02	.52433
		ЧД	.49880	.23252	.11363+02	.51443
3,25	8,0	ТФ	— .43413	.19263	— .86211+01	.57441+01
		ЧД	— .43480	.19246	— .85126+01	.56916+01

Из сравнения результатов, представленных в табл. 1, следует, что расхождение между двумя методами расчета не превышает  $\sim 1\%$ . Это говорит о хорошей вычислительной устойчивости полученных выражений для расчета производных.

2. В качестве приложения рассмотрим чувствительность факторов эффективности ослабления и обратного рассеяния отдельных частиц к вариациям вещественной части показателя преломления яд-

ра и оболочки, В табл. 2 приведены исходные данные о параметрах двухслойных частиц, для которых проводились расчеты производных.

Таблица 2

Параметры двухслойных частиц, использованные при расчетах производных факторов эффективности ослабления и обратного рассеяния

№	$r_1/r$	$m_1 = n_1 - i\chi_1$	$m_2 = n_2 - i\chi_2$
1	1/8	$1,52 - i \cdot 0,005$	$1,33 - i \cdot 0,0$
2	1/2	$1,52 - i \cdot 0,005$	$1,33 - i \cdot 0,0$
3	9/10	$1,82 - i \cdot 0,74$	$1,33 - i \cdot 0,0$
4	9/10	$1,33 - i \cdot 0,00$	$1,82 - i \cdot 0,74$

Первые две ситуации, представленные в табл. 2, соответствуют нерастворимому слабо поглощающему ядру с водной оболочкой различных размеров, третий и четвертый представляют собой сажевое ядро, покрытое тонкой водной оболочкой, и водное ядро, покрытое тонкой сажевой оболочкой.

Параллельно с расчетами производных от соответствующих факторов эффективности по показателям преломления ядра и оболочки вычислялись производные по эффективному показателю преломления однородной частицы с эффективным показателем  $\tilde{m} = \tilde{n} - i\tilde{\chi}$ , равным среднеобъемному показателю преломления исходной двухслойной частицы.

Примем в дальнейшем для сокращения следующие обозначения:  $Q'_{e1}, Q'_{e2}, Q'_e$  и  $Q'_{\pi 1}, Q'_{\pi 2}, Q'_\pi$ , где штрих соответствует тому, что рассматривается производная, индекс «e» или «π» соответствует факторам эффективности ослабления или обратного рассеяния, индексы 1 или 2 — производной по показателю преломления ядра или оболочки, величина без цифрового индекса характеризует производную для однородной частицы по эффективному показателю преломления.

Перейдем к обсуждению полученных результатов.

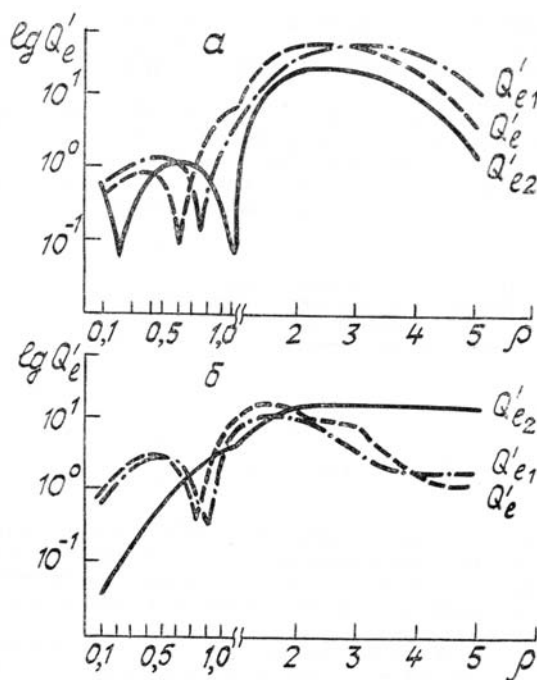


Рис. 1. Зависимости производных факторов эффективности ослабления двухслойной частицы по  $n_1(Q'_{e1})$  и  $n_2(Q'_{e2})$  и эффективной однородной частицы по  $\tilde{n}(Q'_e)$  от параметра дифракции  $\rho$ : а — тонкая сажевая оболочка (случай 4 табл. 2); б — тонкая водная оболочка (случай 3 табл. 2);  $r_1/r = 0,9$

Не останавливаясь на обсуждении результатов расчета самих факторов эффективности двухслойных частиц, которые находятся в соответствии с результатами работ [1. 3], рассмотрим полученные производные в зависимости от  $\rho$  для четырех случаев, приведенных в табл. 2.

Для производной от фактора эффективности ослабления в первых двух случаях имеет место очень похожее поведение в зависимости от  $\rho$  и близость самих величин  $Q'_e$  и  $Q'_{e2}$ . Величина произ-

водной  $Q'_{e1}$  при этом значительно меньше  $Q'_{e2}$ . В диапазоне  $\rho \in (0,1; 2)$  производные — монотонно возрастающие функции  $\rho$ , а при  $\rho > 2$  появляются небольшие осцилляции. Это указывает на то, что для рассмотренных двух случаев достаточно «толстой» оболочки приближение однородной эффективной частицы хорошо «работает» не только для самих факторов эффективности ослабления, но и для производной по вещественной части показателя преломления, определяемой в основном производной по оболочке.

Совершенно иная ситуация имеет место в случае тонкой оболочки. На рис. 1 представлены результаты расчетов  $Q'_e$ ,  $Q'_{e1}$  и  $Q'_{e2}$  для случаев 3 и 4 табл. 2. Как видно из результатов, представленных на рисунке, в случае сажевой оболочки все производные имеют различную зависимость от  $\rho$  и  $Q'_e$  не совпадает ни с  $Q'_{e1}$ , ни с  $Q'_{e2}$ .

Для тонкой водной оболочки  $Q'_e \approx Q'_{e1}$  при  $\rho \lesssim 0,6$ , при больших значениях  $\rho Q'_e$  может в несколько раз отличаться от  $Q'_{e1}$ , кроме того, при увеличении  $\rho$  увеличивается  $Q'_{e2}$ , так что при  $\rho \gtrsim 3$  она и является определяющей.

Таким образом, в случае тонкой сажевой или водной оболочки, несмотря на хорошее совпадение самих величин факторов эффективности ослабления двухслойной и однородной частиц, их производные ведут себя в зависимости от  $\rho$  различным образом.

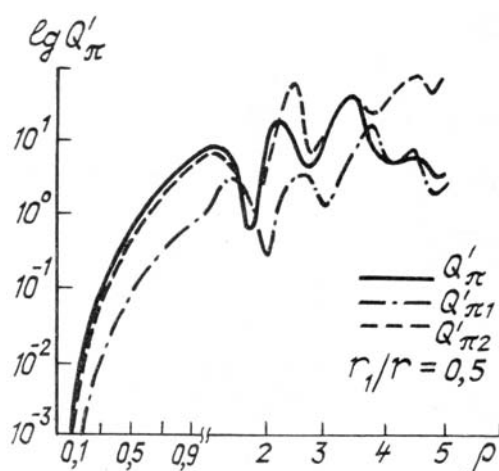


Рис. 2. Зависимости производных факторов эффективности обратного рассеяния двухслойной частицы по  $n_1(Q'_{\pi 1})$  и  $n_2(Q'_{\pi 2})$  и эффективной однородной частицы по  $\tilde{n}(Q'_\pi)$  от параметра дифракции  $\rho$  для случая 2 табл. 2 („толстая” оболочка  $r_1/r = 0,5$ )

Перейдем теперь к рассмотрению производных от фактора эффективности обратного рассеяния. На рис. 2, 3 приведены результаты расчета  $Q'_\pi$ ,  $Q'_{\pi 1}$  и  $Q'_{\pi 2}$  для случая „толстой” водной оболочки и тонкой оболочки из сажи (рис. 3,а) и воды (рис. 3,б). Из рисунков следует, что все производные при  $\rho < 1$  гладкие функции от  $\rho$ , причем  $Q'_\pi$  близко к  $Q'_{\pi 2}$  для „толстой” оболочки и  $Q'_\pi$  близко к  $Q'_{\pi 1}$  для тонкой оболочки. При  $\rho > 1$  все производные имеют осциллирующий характер, причем для случая тонкой водной оболочки зависимость  $Q'_\pi$  от  $\rho$  близка к зависимости  $Q'_{\pi 1}$ , хотя значения величин производных в ряде случаев не совпадают. Для тонкой сажевой оболочки при  $\rho > 1$   $Q'_\pi$  отличается как от  $Q'_{\pi 1}$  так и от  $Q'_{\pi 2}$ . Аналогичная ситуация, только с несколько меньшим числом осцилляции, имеет место и для производных в случае „толстой” водной оболочки в рассматриваемом диапазоне  $\rho$ . Как видно из рис. 2, в некоторых интервалах значений  $\rho Q'_\pi$  близко к  $Q'_{\pi 1}$ , а в некоторых к  $Q'_{\pi 2}$ . Таким образом, полученные результаты указывают на то, что для факторов эффективности обратного рассеяния приближение эффективной однородной частицы не является адекватным как для расчета самих этих факторов, так и производных по комплексному показателю преломления при  $\rho > 1$  для последних.

3. В работе приведены выражения, позволяющие в рамках алгоритма расчета оптических характеристик двухслойных сферических частиц вычислять их производные по комплексному показателю преломления вещества ядра и оболочки, проведена проверка их вычислительной устойчивости. Полученные выражения использованы для исследования производных от факторов эффективности ослабления и обратного рассеяния по вещественной части показателя преломления ядра и оболочки для нескольких типичных случаев. Использование предлагаемого в работе подхода для расчета производных может быть положено в основу формулировки комплексной обратной задачи определения микроразмерных характеристик ансамблей двухслойных сферических частиц, таких как комплексный показатель преломления и функция распределения по размерам ядра и оболочки.

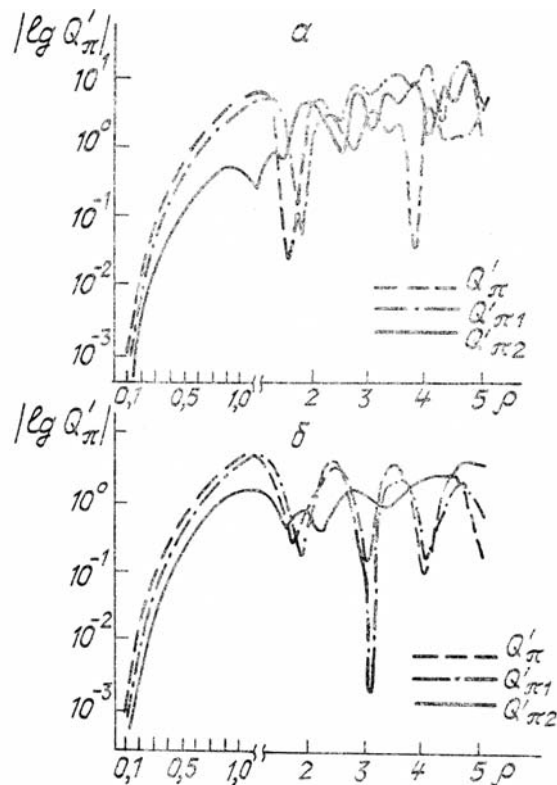


Рис. 3. Зависимости производных факторов эффективности обратного рассеяния двухслойной частицы по  $n_1(Q'_n)$  и  $n_2(Q'_n)$  и эффективной однородной частицы по  $\tilde{n}(Q'_n)$  от параметра дифракции  $\rho$ : *a* – тонкая сажевая оболочка (случай 4 табл. 2); *b* – тонкая водная оболочка (случай 3 табл. 2);  $r_1/r = 0,9$

В заключение авторы выражают свою благодарность Ю.М. Тимофееву за полезные замечания, высказанные при обсуждении результатов работы.

1. Пришивалко А.П., Бабенко В.А., Кузьмин В.Н. Рассеяние и поглощение света неоднородными и анизотропными сферическими частицами. Минск: Наука. 1984.
2. Зуев В.Е., Кабанов М.В. Оптика атмосферного аэрозоля. Л.: Гидрометиздат. 1987.
3. Креков Г.М., Рахимов Р.Ф. Оптико-локационная модель континентального аэрозоля. Новосибирск: Наука. 1982. 198 с.
4. Лопатин В.Н., Сидько Ф.Я. Поглощение электромагнитной радиации «мягкими» двухслойными частицами. //Изв. АН СССР. ФАО. 1987. Т. 23. № 4. С. 396–405.
5. Гюннинен Э.М., Кириллов В.В., Копейкин В.Н. Дифракция электромагнитной волны на шаре. Суммирование рядов Ми. //Известия вузов. Радиофизика. 1987. Т. 30. № 4. С. 522.
6. Ивлев Л.С., Коростина О.М. Оптическая модель физических механизмов роста аэрозольных частиц. //В кн.: II Всес. совещание по распространению лазерного излучения в дисперсной среде. Ч. I. Обнинск: ВНИИГМИ–МИД, 1982. С. 23–26.
7. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами. М.: Мир. 1972. 165 с.
8. Розанов В.В., Образцов С.П., Романов П.Ю. О чувствительности оптических характеристик полидисперсного аэрозоля к вариациям комплексного показателя преломления. //Изв. АН СССР. ФАО. 1987. Т. 23. № 4. С. 390–395.
9. Романов П.Ю., Розанов В.В., Тимофеев Ю.М. //Исследования Земли из космоса. 1987. № 3. С. 54.

Научно-исследовательский институт  
физики при ЛГУ

Поступила в редакцию  
26 мая 1988 г.

O. M. Korostina, V. V. Rozanov. **Sensitivity of Double-Layer Spherical Particle Optical Characteristics to Nucleus and Envelope Refractive Index Variations.**

Analytic expressions for calculating the optical characteristics of double-layer spherical particles and their derivatives with respect to the real and imaginary parts of the refractive index were derived. The results obtained were compared with numerical differentiation data. The sensitivity of the optical characteristics to the nucleus and envelope refractive index variations for double-layer and equivalent-size homogeneous particles was studied in a wide range of particle sizes and nucleus-to-envelope radii ratios.