

**Четырнадцатая Международная научно-техническая конференция
«Оптические методы исследования потоков»
Москва, 26 – 30 июня 2017 г.**

УДК 535.36

М.В. Сапронов, Н.М. Скорнякова

*Московский энергетический институт (технический университет), Россия,
111250, Москва, Красноказарменная ул., 14, E-mail: omfi@tpei.ac.ru*

**КОМПЬЮТЕРНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ
ИНДИКАТРИС РАССЕЯНИЯ В ДИНАМИКЕ**

АННОТАЦИЯ

Исследована зависимость индикатрис рассеяния электромагнитных волн на сферических однородных и изотропных частицах от параметров центров рассеяния методами компьютерного моделирования. Составлен алгоритм расчета двухмерных и трехмерных индикатрис рассеяния на основе теории Ми. Визуализирована динамика индикатрис рассеяния плоско поляризованного излучения при изменении радиуса частиц и их показателя преломления.

РАССЕЯНИЕ МИ, КОМПЬЮТЕРНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ, КОМПЬЮТЕРНОЕ 2D- И 3D-МОДЕЛИРОВАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Рассеяние и поглощение света – фундаментальные процессы взаимодействия излучения с веществом, которые лежат в основе всех оптических явлений. Проблема строгого расчета рассеяния света на атомах, молекулах и других неоднородностях приобрела актуальность в середине XIX в., но значительный прорыв в расчете рассеяния произошел лишь в 1908 г., когда Г. Ми получил строгие выражения расчета безразмерных комплексных амплитуд функций рассеяния света на сферических изотропных частицах произвольного размера [1]. Теория расчета рассеяния Ми обобщила существующие в то время методы расчета индикатрис рассеяния света на малых по отношению к длине волны частичках (приближение Рэлея), на частичках больших размеров (приближение Рэлея – Ганса) и на больших частичках (приближение больших частиц) [2]. Не смотря на то, что теория Ми разработана для упругого рассеяния света на сферических частичках, она с высокой точностью описывала результаты экспериментов по рассеянию света, что дало толчок к созданию методов диагностики флуктуаций и неоднородностей в материальных средах.

Эффект упругого рассеяния света диэлектрическими и слабо поглощающими частичками активно используется в оптических методах диагностики оптически прозрачных сред и в настоящее время. К ним относятся, например, методы лазерной доплеровской анемометрии [3, 4] и анемометрии по изображению частиц (PIV) [5]. В последние годы развиваются методы определения размеров наночастичек на основе результатов измерения параметров рассеянного ими излучения [6, 7].

Во всех приведенных методах рассеяние света может быть описано в приближении Рэлея–Ганса или приближении больших частиц. Полное теоретическое и экспериментальное исследование рассеяния на частичках малых по сравнению с длиной волны излучения не

закончено и является актуальным. Физики первой половины XX в. не исследовали вопрос рассеяния Рэлея, поскольку не было возможности прямого экспериментального подтверждения правильности теоретического расчета. Этот тип рассеяния исследовался лишь в прикладных науках, а интерес проявлялся к численным результатам [1]. К середине XX в. таких результатов накопилось достаточно много, и на их основе в 1957 г. голландский физик Г. ван де Хюльст в монографии «Рассеяние света малыми частицами» изложил физические основы рассеяния Рэлея.

Современный уровень развития вычислительной техники, мощных когерентных источников и высокочувствительных приемников излучения создает возможность экспериментального исследования Рэлеевского рассеяния и вновь открывает широкое поле для научной деятельности.

Необходимым этапом каждого экспериментального исследования является разработка экспериментального макета установки и подбор ее параметров, в частности, для исследования рассеяния света необходимо знать каким образом исследуемый тип рассеивающих центров влияет на характеристики рассеянного излучения, чтобы правильно выбрать подходящий источник зондирующего излучения и приемник излучения, несущего информацию о среде. Зависимость интенсивности рассеяния от направления наблюдения называется индикатрисой, которая и помогает правильно спроектировать макет установки.

Моделирование 2D- и 3D-индикатрис рассеяния по формулам Ми позволяет сделать оценку параметров экспериментальной установки для регистрации упруго рассеянного света, исследовать зависимость свойств детектируемого излучения от таких параметров рассеивающих центров, как характерный размер, оптическая плотность и поглощение. Кроме того, 3D-модели индикатрис помогают визуализировать и более полно понять физическую природу рассеяния.

РАСЧЕТ БЕЗРАЗМЕРНЫХ КОМПЛЕКСНЫХ АМПЛИТУДНЫХ ФУНКЦИЙ РАССЕЯНИЯ

Размеры используемых на практике рассеивающих центров гораздо меньше, чем размер фронта зондирующей волны, поэтому можно считать что на отдельный рассеиватель падает плоская волна. Для расчета индикатрис рассеяния необходимо определить направление падения зондирующей волны, плоскость наблюдения и ориентацию вектора напряженности электрического поля. На рис. 1 изображена схема единичного акта рассеяния плоской линейно поляризованной волны. Для определенности введена трехмерная система декартовых координат (x, y, z) . Зондирующее излучение распространяется в направлении оси y и поляризовано в плоскости yOz . Измерение интенсивности рассеянного излучения проводится в точке M , удаленной от центра рассеяния на расстояние R .

Плоскость P , образованная точкой наблюдения M и волновым вектором зондирующего излучения \mathbf{k} , называется плоскостью рассеяния. Волновой вектор \mathbf{k}_s рассеянного излучения лежит в плоскости P и направлен под углом θ к вектору \mathbf{k} .

Для энергетического расчета рассеяния необходимо отдельно рассматривать рассеяние параллельной и перпендикулярной плоскости P составляющих вектора напряженности электрического поля. Тогда вектор Джонса для падающей волны может быть представлен выражением (1)

$$\begin{bmatrix} E_{\perp}(y, t) \\ E_{\parallel}(y, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{\perp} \\ A_{\parallel} \end{bmatrix} \cdot \exp\{-i \cdot (\omega t - ky)\}, \quad (1)$$

где знаки \parallel и \perp отмечены составляющие электрического вектора поля, лежащие соответственно в плоскости рассеяния и в плоскости, перпендикулярной к ней.

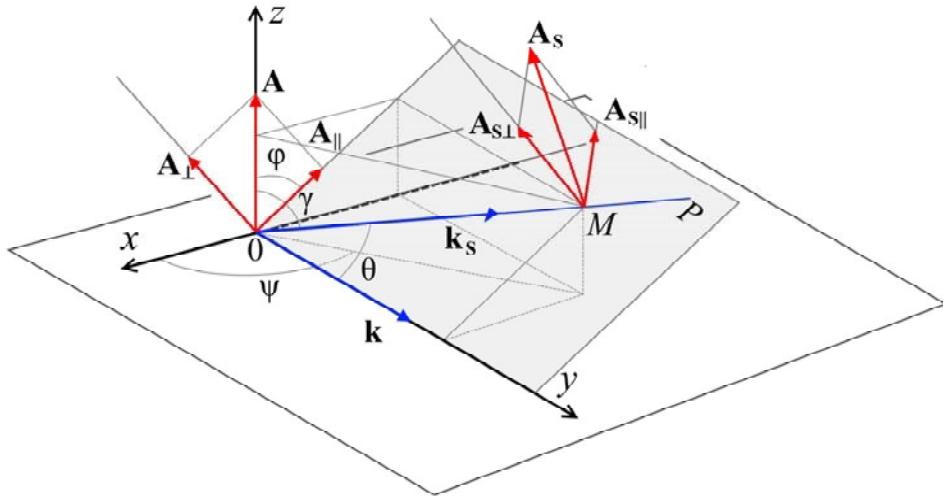


Рис. 1. Схема рассеяния плоской линейно поляризованной волны

Электрический вектор рассеянной волны в точке наблюдения M на достаточно большом расстоянии R от центра рассеяния ($R \gg r^2 / \lambda$, r – радиус частицы, λ – длина волны излучения) можно представить следующим вектором Джонса (2)

$$\begin{bmatrix} E_{S\perp}(t) \\ E_{S\parallel}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{S\perp} \\ A_{S\parallel} \end{bmatrix} \cdot \exp\{-i \cdot (\omega t - kz)\}. \quad (2)$$

Соотношения между комплексными амплитудами компонент рассеянного поля и комплексными амплитудами компонент падающего поля в линейном приближении можно представить в виде (3)

$$\begin{bmatrix} A_{S\perp} \\ A_{S\parallel} \end{bmatrix} = \frac{\exp\{ikR\}}{ikR} \cdot [S] \cdot \begin{bmatrix} A_\perp \\ A_\parallel \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где $[S]$ – матрица рассеяния, которая в системе отсчета, связанной с плоскостью рассеяния, имеет диагональный вид (4)

$$[S] = \begin{bmatrix} S_\perp & 0 \\ 0 & S_\parallel \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где S_\perp и S_\parallel – безразмерные комплексные амплитудные функции рассеяния для составляющих, перпендикулярной и параллельной плоскости рассеяния. Общие выражения для S_\perp и S_\parallel в виде рядов (5) были получены Ми (G. Mie) в 1908 г.:

$$S_\perp = S_\perp(m, x, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} \cdot (a_n \pi_n + b_n \tau_n); \quad (5)$$

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

Формулы для расчетов коэффициентов Ми a_n и b_n , а также выраженных через полиномы Лежандра и их производные коэффициентов π_n и τ_n , приведены в монографии [8]. Амплитудные функции рассеяния S_{\perp} и S_{\parallel} зависят лишь от трех параметров: m – комплексного показателя преломления частицы относительно окружающей ее среды ($m = m_1 / m_2$, где m_1 – показатель преломления частицы, m_2 – показатель преломления среды), $x = kr$ – относительного размера частицы радиуса r ($k = 2\pi / \lambda = 2\pi m_2 / \lambda_0$), угла рассеяния θ между волновыми векторами падающей и рассеянной волн. Предполагается, что среда, в которой распространяется излучение, прозрачна или слабо поглощает, следовательно, m_2 – действительная величина или комплексная, но с преобладающей действительной частью.

Векторы Джонса комплексных амплитуд падающей и рассеянной волн удобно представить в нормированном виде

$$\begin{bmatrix} A_{\perp} \\ A_{\parallel} \end{bmatrix} = a \cdot \begin{bmatrix} \sin(\phi) \cdot \exp(i\alpha_{\perp}) \\ \sin(\phi) \cdot \exp(i\alpha_{\parallel}) \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} A_{S\perp} \\ A_{S\parallel} \end{bmatrix} = a_S \cdot \begin{bmatrix} \sin(\varphi_S) \cdot \exp(i\alpha_{S\perp}) \\ \sin(\varphi_S) \cdot \exp(i\alpha_{S\parallel}) \end{bmatrix}, \quad (6)$$

где $a = \sqrt{a_{\perp}^2 + a_{\parallel}^2}$, $a_S = \sqrt{a_{S\perp}^2 + a_{S\parallel}^2}$.

Углы ϕ и φ_S определяются соотношениями

$$\phi = \arctg \left(\frac{a_{\perp}}{a_{\parallel}} \right), \quad \varphi_S = \arctg \left(\frac{a_{S\perp}}{a_{S\parallel}} \right). \quad (7)$$

Практически рассеяние принято описывать безразмерными функциями, показывающими относительное угловое распределение интенсивности рассеянного света [9], – индикаторисами (8).

$$\xi(\theta, \phi) = S_{\perp} S_{\perp}^* \cdot \sin^2(\phi) + S_{\parallel} S_{\parallel}^* \cdot \cos^2(\phi) \quad \text{и} \quad Y(\theta, \phi) = \lg(S_{\perp} S_{\perp}^* \cdot \sin^2(\phi) + S_{\parallel} S_{\parallel}^* \cdot \cos^2(\phi)). \quad (8)$$

Поскольку формулы Ми (5) включают сумму бесконечного ряда, то редко представляется возможным получить аналитическое выражение, описывающее индикаторисы рассеяния. Поэтому сумму ряда ищут, используя рекурсию и ограничившись конечным числом членов, с заданной точностью ε . Для построения алгоритмов рекурсии используются рекуррентные формулы расчета коэффициентов a_n , b_n , π_n и τ_n [8].

КОМПЬЮТЕРНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ИНДИКАТРИС РАССЕЯНИЯ

Для визуализации трехмерных индикаторис рассеяния необходимо охватить весь диапазон возможных направлений наблюдения, и, следовательно, использовать трехмерную систему координат, которая не может быть связана с плоскостью рассеяния P , ведь сама эта плоскость, определяемая точкой наблюдения M и вектором \mathbf{k} , будет вращаться вокруг оси, содержащей вектор \mathbf{k} , с перемещением точки M в пространстве. Весьма удобной для представления индикаторис является сферическая система координат (ξ, ψ, γ) или (Y, ψ, γ) , где широта ψ – угол, отсчитываемый от оси x в плоскости $x0z$, долгота γ – угол, отсчитываемый от оси z , а ξ и Y – значение индикаторис в заданном углами ψ, γ направлении в обычном и логарифмическом масштабах соответственно.

На анимации 1 представлены 2D-индикаторисы рассеяния линейно-поляризованного излучения с длинной волны $\lambda = 355$ нм на диэлектрических частицах с показателем преломления $m = 1,4$ при изменении их радиуса r в диапазоне от 3 до 15 нм в плоскости поляризации (а), (в) и ортогональной ей (б), (г) в декартовой и полярной системах координат.

a)

б)

в)

г)

Анимация 1. Динамика 2D-индикатрис рассеяния при изменении r от 3 до 15 нм ($\lambda = 355$ нм, $m = 1,4$):

а) в плоскости поляризации в декартовых координатах, б) в плоскости, ортогональной поляризации в декартовых координатах, в) в плоскости поляризации в полярных координатах, г) в плоскости, ортогональной поляризации в полярных координатах

На анимации 2 представлена 3D-индикатриса рассеяния линейно-поляризованного излучения с длинной волны $\lambda = 355$ нм на диэлектрических частицах с показателем преломления $m = 1,4$ при изменении их радиуса r в диапазоне от 3 до 15 нм в сетке с постоянным масштабом (а) и с переменным масштабом (б). Два способа задания сетки обоснованы тем, что анимация 2а наглядно отражает изменение средней интенсивности рассеянного излучения, а анимация 2б показывает изменение характера распределения интенсивности по направлениям рассеяния.

В представленном случае на анимациях 1 и 2 в индикатрисе отсутствуют интерференционные лепестки, что говорит о Рэлеевском характере рассеяния. Динамика индикатрисы демонстрирует две характерных особенности. Средняя интенсивность рассеянного излучения нелинейно возрастает с увеличением размера частицы (шаг изменения размера постоянен на каждой анимации). Выбранный диапазон радиусов хорошо демонстрирует предел применимости Рэлеевского рассеяния, ведь если для $r = 3$ нм интенсивности рассеянного излучения вперед и рассеянного излучения назад еще слабо отличаются по величине, то при $r = 15$ нм рассеяние вперед значительно преобладает.

a)

б)

Анимация 2. Динамика 3D-индикатрисы рассеяния при изменении r от 3 до 15 нм ($\lambda = 355$ нм, $m = 1,4$):
а) в сетке с постоянным масштабом, б) в сетке с переменным масштабом

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе компьютерного моделирования индикатрис рассеяния плоской линейно поляризованной волны на сферических частицах из диэлектрика был алгоритм расчета

значений безразмерных комплексных амплитудных функций рассеяния в заданном углами ψ , γ направлении. Разработана программа в среде MathCAD 14, которая позволяет строить двухмерные и трехмерные индикаторы рассеяния и визуализировать их изменение в динамике при изменении радиуса и показателя преломления рассеивающих центров или длины волны.

Компьютерное моделирование рассеяния света на основе теории Мie позволяет исследовать влияние параметров частиц и параметров зондирующего пучка света на величину сигнально излучения, что дает возможность подбора оптимальных параметров приемной оптической системы для экспериментального исследования рассеяния и условий проведения эксперимента.

БЛАГОДАРНОСТИ

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **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.
2. **Mie G.** Beitra .ge zur Optik tru ber Medien speziell kolloidaler Goldlo sungen (contributions to the optics of diffuse media, especially colloid metal solutions) // Ann Phys, 1908. 25:377 – 445.
3. **Ринкевичюс Б.С.** Лазерная диагностика потоков. М.: Изд-во МЭИ, 1990.
4. **Дубнищев Ю.Н., Ринкевичюс Б.С.** Методы лазерной доплеровской анемометрии. М.: Наука, 1982. 303 с.
5. **Raffel M., Willert C.E., Kompenhans J.** Particle image velocimetry. A practical guide. Corrected 3rd printing. Springer, Germany, Berlin. 2013.
6. **Зобов К.В.** Особенности измерения размеров частиц в гидрозолях нанопорошка диоксида кремния оптическими методами / К.В. Зобов, В.В. Сызранцев, С.П. Бардаханов // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Серия: Физика. 2016. Т.11. №4. С. 68 – 77.
7. **Голубенко Ю.В.** Применимость метода динамического рассеяния света для анализа диапазона размеров наночастиц золота и меди, полученных при помощи лазерной абляции твердых тел в жидкости / Ю.В. Голубенко [и др.] // Наука и Образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2014. № 10. С. 15 – 28.
8. **Дейрменджан Д.** Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами / Пер.с англ.: Под ред. К.Н. Кондратьева. М.: Мир, 1971. 165 с.
9. **Смирнов В.И., Янина Г.М.** Расчет и проектирование лазерных анемометров. М.: Моск. энерг. ин-т., 1996. – 84 с.

N.M. Skornyakova, M.V. Sapronov

*Moscow Power Engineering Institute (technical university), Russia,
111250, Moscow, Krasnokazarmennaya st., 14, E-mail: omfi@mpei.ac.ru*

**COMPUTER VISUALIZATION
OF DYNAMICS OF SCATTERING INDICATRIX**

The dependence of the indicatrix of the scattering of electromagnetic waves on spherical homogeneous and isotropic particles on the parameters of the scattering centers by computer simulation methods is studied. An algorithm is developed for calculating two-dimensional and three-dimensional scattering indicatrix based on the Mie theory. The dynamics of the indicatrix of the scattering of plane-polarized radiation is visualized with a change in the radius of the particles.

SCATTERING G. MIE, COMPUTER VISUALIZATION, COMPUTER 2D- AND 3D-MODELING