

关于大颗粒 Mie 散射与 Fraunhofer 衍射问题的分析比较

杨 晔 张镇西 蒋大宗

(西安交通大学生物医学工程研究所, 西安, 710049)

摘要: 利用 Mie 散射与 Fraunhofer 衍射理论的数值计算, 对球形颗粒的 Mie 散射和 Fraunhofer 衍射做了大量的计算和分析比较, 提出了大颗粒的 Fraunhofer 衍射近似替代 Mie 散射的判据。

关键词: Mie 散射 Fraunhofer 衍射 分析比较

Comparison and analysis of Mie scattering and Fraunhofer diffraction of large particles

Yang Ye, Zhang Zhenxi, Jiang Dazong

(Institute of BME, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049)

Abstract: In this paper, based on Mie scattering and Fraunhofer diffraction theory, we utilize the numerical calculation to compare and analyze the Mie scattering and Fraunhofer diffraction of large particles and point out that at a proper range, Fraunhofer diffraction of large particles can approximately replace Mie scattering.

Key words: Mie scattering Fraunhofer diffraction comparison and analysis

引 言

当光线通过不均匀介质时, 会发生偏离其直线传播方向的散射现象, 它是由吸收、反射、折射、透射和衍射的共同作用引起的。散射光形式中包含有散射体大小、形状、结构以及成分组成和浓度等信息。因此, 利用光散射技术可以测量颗粒的尺寸与折射率大小, 还可以测量颗粒群的浓度分布^[1]。这一技术现已被广泛运用于工业、农业、天文和医学等领域。

大颗粒散射是指散射的微粒直径远大于入射光波长 λ 的散射问题, 也就是微粒的尺寸参数 $\alpha (= \pi D / \lambda, D$ 为微粒的直径) $\gg 1$ 时的散射问题。描述光散射的严格的理论是 Mie 散射理论, 它是从麦克斯韦电磁波方程组在一定的边界条件下经过严格的数学推导得到的关于颗粒散射的精确解。由于 Mie 理论所给出的数学表达式比较复杂, 其数值计算的工作量很大, 且随颗粒直径的增大而增大。一些学者^[2,3] 早就提出当 $\alpha \gg 1$ 时, 不透光的平面小圆盘的 Fraunhofer 衍射可近似代替 Mie 散射。然而, 他们只给出了一个定性的结论, 没有令人满意的判据及误差分析。文献[4,5] 直接把 Fraunhofer 衍射理论应用于大颗粒直径的测量。英国的 Malvern 公司也研制了基于 Fraunhofer 衍射理论的粒度分析仪, 受到了世界各国的欢迎。然而, 由于其理论模型的限制, 不可避免地在某些粒度范围内存在误差。为了从理论和实践中得到衍射式测粒仪的误差, 以便对其进行改进, 本文利用 Mie 理论与 Fraunhofer 衍射理论的数值计算, 对 Mie 散射和 Fraunhofer 衍射作了大量的计算和分析, 提出了 Fraunhofer 衍射理论的应用范围。

一、Mie 散射与 Fraunhofer 衍射的理论基础

1. Mie 散射

根据 Mie 理论, 球形微粒的散射光强取决于微粒的直径和相对折射率、入射光的光强、波长和偏振度以及相对观察方向(散射角)^[2,6]。

当光强为 I_0 , 在颗粒周围介质中波长为 λ' ($\lambda' = \lambda_0/n_2$, λ_0 为光在真空中的波长, n_2 为介质的折射率)的自然光平行照射到一直径为 D 的均匀球形颗粒上时, 在散射角为 θ , 距离散射体 r 处的散射光强为:

$$I_s = [\lambda'^2 / (8\pi^2 r^2)] I_0 (i_1 + i_2) \quad (1)$$

散射光一般是部分偏振光。散射光方向和入射光方向构成的平面称为散射面。散射光垂直偏振光矢量(其矢量垂直于散射面)的强度 I_{\perp} 和平行偏振光矢量(其矢量平行于散射面)的强度 I_{\parallel} 分别为:

$$I_{\perp} = [\lambda'^2 / (8\pi^2 r^2)] I_0 \cdot i_1 \quad (2)$$

$$I_{\parallel} = [\lambda'^2 / (8\pi^2 r^2)] I_0 \cdot i_2 \quad (3)$$

散射光的偏振度

$$p = (I_{\perp} - I_{\parallel}) / (I_{\perp} + I_{\parallel}) \quad (4)$$

式中,

$$i_1 = S_1(m, \theta, \alpha) \times S_1^*(m, \theta, \alpha) \quad (5a)$$

$$i_2 = S_2(m, \theta, \alpha) \times S_2^*(m, \theta, \alpha) \quad (5b)$$

i_1, i_2 为散射光的强度函数, S_1, S_2 为散射光的振幅函数, S_1^*, S_2^* 分别为 S_1, S_2 的共轭复数, 它们的解是由 m, α 的贝塞耳函数和 θ 的勒让德函数组成的无穷级数^[2]; $m = n_1/n_2$ (n_1 为球形颗粒的折射率)为球形颗粒的相对折射率; α 为尺寸参数。

消光系数 K_e , 散射系数 K_s 和吸收系数 K_a 可由下式计算:

$$K_e = (2/\alpha^2) \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}(a_n + b_n)$$

$$K_s = (2/\alpha^2) \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2)$$

$$K_a = K_e - K_s \quad \text{与 F} \quad (6)$$

式中, Re 表示取复数的实部; a_n, b_n 为 Mie 系数, 其求法见文献[2]。

2. Fraunhofer 衍射

光的衍射是光波在传播过程中遇到障碍物时, 偏离其原来的传播方向弯入障碍物的几何影区内, 并在障碍物后的观察屏上呈现光强分布的不均匀现象。光源和观察屏距离衍射物都相当于无限远时的衍射即为 Fraunhofer 衍射, 其衍射场可在透镜的后焦面上观察到。设透镜的焦距为 f , 圆孔的直径为 D , 入射光在颗粒周围介质中的波长为 λ' , 则在透镜后焦面上的圆孔的衍射光强为^[3]:

$$\begin{aligned} I &= [\pi^2 D^2 / (16f^2 \lambda'^2)] \cdot I_0 \cdot [2J_1(\alpha \sin \theta) / (\alpha \sin \theta)]^2 \\ &= I_0 \cdot [\mathcal{N}(2\pi f)]^2 \cdot [\alpha \cdot J_1(\sin \theta \cdot \alpha) / \sin \theta]^2 \\ &= I_0 \cdot [\mathcal{N}(2\pi f)]^2 \cdot |S_d|^2 = I_0 \cdot [\mathcal{N}(2\pi f)]^2 \cdot [(i_1 + i_2) / 2] \end{aligned} \quad (7)$$

式中, I_0 为入射光强度, α 为圆孔尺寸参数, S_d 为衍射光振幅函数, i_1, i_2 为衍射光强度函数 ($i_1 = i_2$), J_1 为一阶贝塞耳函数, θ 为衍射角。

根据巴比涅互补原理^[7], 除中心点外, 平面不透光圆屏的衍射光强分布与相同大小的圆

孔衍射光强分布完全相同。因此,在一定区域内,可由圆孔的 Fraunhofer 衍射得到微粒的 Fraunhofer 衍射光强值。对于 Fraunhofer 衍射,总的消光系数 $K_e = 2^{[2]}$ 。

二、Mie 散射和 Fraunhofer 衍射的分析比较

用精确公式 Mie 理论和近似公式 Fraunhofer 衍射理论分别详细计算了球形颗粒的散射形式,并对两者进行了分析比较。为简单起见,并不失一般性,计算仅对单个颗粒进行。图 1,图 2,图 4 以 α, m 域内的误差等高线图表示两者相符程度。其中区域 iv 表示 Mie 理论与 Fraunhofer 衍射理论误差在 30% 以内的 α 和 m 域;在区域 ⑤中,两者误差在 30%~100% 之间;区域 ⑥中两者误差大于 100%。在区域 ⑦和 ⑧中,分别有一些两者误差小于 30% 和 100% 的小区域。

图 1 为折射率 m 一定时,不同 α 的微粒的 Mie 散射与 Fraunhofer 衍射的强度函数(i

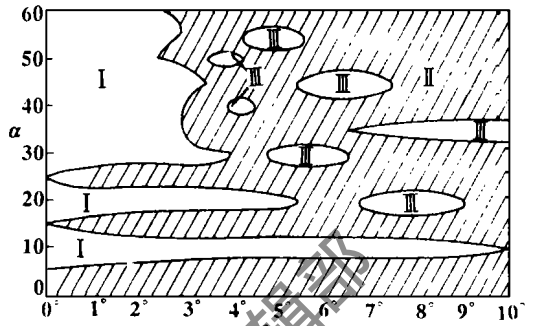


Fig. 1 The contour chart showing the relative error vary with the change of scattering angle θ , of relative error between intensity functions of Fraunhofer diffraction and Mie scattering. In region iv, error < 30%, in region ⑤, error < 100%, in region ⑥ error > 100%

$= (i_1 + i_2) / 2$) 间相对误差随散射角 θ 变化的等高线图。微粒的相对折射率 m 为 1.33, 散射角从 $0^\circ \sim 10^\circ$, 散射微粒尺寸参数 α 从 0~60。从图中可以看出,当 $\alpha \geq 30, \theta \leq 2.5^\circ$ 时, Mie 散射与 Fraunhofer 衍射的强度函数间的相对误差 < 30%。

当 m 等于其它值 ($|m| > 1.1$) 时,相应的误差等高线图 1 很相似(图略)。

图 2 为散射角 θ 一定时,不同 α 的微粒的 Mie 散射和 Fraunhofer 衍射的强度函数 i 相对误差随折射率 m 变化的等高线图。 θ 等于 $1^\circ, \alpha$ 从 0~60, m 从 1~2 (m 为实数)。当 $m = 1$ 时,强度函数等于零,即在均匀的单相介质中不存在散射现象。从图中可以看出,当 $\rho = 2\alpha(m - 1) > 40, m > 1.1$ 时,两者之间

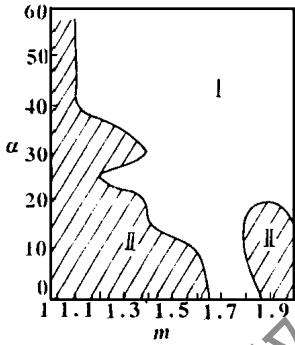


Fig. 2 Same as Fig. 1. Here, $\theta = 1^\circ, m$ is refractivity

相对误差 < 30%。在前向小角度 ($0^\circ \sim 2.5^\circ$) 的其它范围内,这种趋势是一致的(图略)。

这里 ρ 是通过颗粒直径方向的中心光线的相位与在没有颗粒阻挡时的相位之差,它与消光系数及散射系数间有密切关系^[2]。

图 3 为在前向小角度范

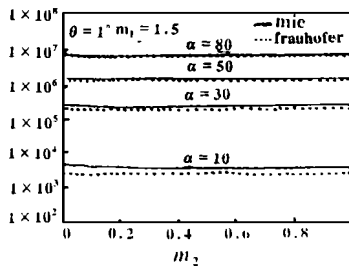


Fig. 3 Influence of the imaginary term in the refractive index on the intensity function i at forward scattering directions, $m_1 = 1.5$

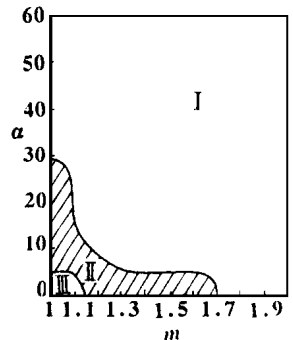


Fig. 4 Same as Fig. 1 for K_e

围内($0^\circ \sim 2.5^\circ$), 折射率 m 为复数时($m = m_1 - im_2$, 虚部不为零, 表示粒子有吸收), 不同 α 的微粒的 Mie 散射与 Fraunhofer 衍射的强度函数 i 随折射率虚数部分变化的曲线。微粒相对折射率的实数部分 m_1 为 1.5, 虚数部分 m_2 从 0~1.0。从中可以看出, 微粒的吸收指数变化对前向小角度内的散射强度影响很小。

图 4 为微粒的 Mie 散射与 Fraunhofer 衍射的消光系数 K_e 间相对误差随折射率 m 及尺寸参数 α 变化的等高线图。可以看到, 当 $\rho = 2\alpha(m - 1)$ 大于 7 时, 两者间的相对误差 $< 30\%$ 。

三、结 论

从上述计算和分析可以得出如下的结论:

1. Mie 理论给出的散射光强分布不仅与颗粒的大小有关, 而且还与颗粒的相对折射率有关。而 Fraunhofer 衍射仅与颗粒大小有关, 没有考虑到颗粒折射率的影响。
2. 当折射率 m 和颗粒大小 α 一定时, 随着散射角 θ 的减小, Mie 散射与 Fraunhofer 衍射的强度函数(即相对光强)之间的误差减小。亦即在前向小角度范围内, 微粒的散射光主要是衍射光。
3. 在前向小角度范围内, 当 m 一定时, Mie 散射与 Fraunhofer 衍射间误差随 α 增大而减小。
4. 在前向小角度范围内, 当 α 一定时, Mie 散射与 Fraunhofer 衍射间误差随 m 增大而减小。
5. 随着 $\rho = 2\alpha(m - 1)$ 的增大, Mie 散射与 Fraunhofer 衍射间的误差减小。
6. 在前向小角度范围内, 当 α 一定时, 微粒吸收指数的变化对散射强度影响很小。

我们还得到了 Fraunhofer 衍射近似替代 Mie 散射的判据, 其较为良好的适用范围是: $\alpha \geq 30$, $\theta \leq 2.5^\circ$, $\rho \geq 40$, $|m| > 1.1$, 此时 Mie 散射与 Fraunhofer 衍射的最大误差为 30%。而当散射角较大, 颗粒直径或相对折射率较小时, Fraunhofer 衍射与实际光散射理论之间存在着较大的差异。

参 考 文 献

- 1 Barth H G. Modern methods of particle size analysis. New York: John Wiley & Sons, 1984: 54
- 2 Van de Hulst H C. Light scattering by small particles. New York: Wiley Press, 1957: 103~ 200
- 3 Bom M, Wolf E. Principles of optics. Oxford, Pergamon Pr, 1975
- 4 Cornilkault J. Appl Opt, 1972; 11(2): 456~ 459
- 5 Swithenbank J. A laser diagnostic technique for the measurement of droplet and particle size distribution. AIAA Paper, 1976; 69-76: 896~ 901
- 6 Kerker M. The scattering of light and other electromagnetic radiation. New York: Academic Press, 1969: 20~ 346
- 7 梁铨廷 主编. 物理光学. 北京: 机械工业出版社, 1981: 101~ 143

作者简介: 杨 晔, 女, 1968 年 12 月出生。博士研究生。现主要从事医疗仪器新技术及光电检测等方面的研究。

收稿日期: 1996-09-10