

基于衍射且适用于粒径分布反演的半经验公式*

戴 兵 贺安之^a 包志华

(南通工学院 ,南通 ,226007) (^a南京理工大学 ,南京 ,210094)

摘要: 基于 Fraunhofer-Diffraction 提出了一种更为确当的适用于粒子尺寸分布反演的半经验公式,在前向小角范围内与精确的 Mie 解相吻合,其精确度比 Fymat A L and Mease K D 的近似在不同的范围有了不同程度的提高,特别在粒径很小时有了很大的提高。给出了在此半经验公式下实现粒子尺寸分布反演的两种方法。

关键词: Fraunhofer-Diffraction 粒子尺寸分布 Mie 解 反演

Semiempirical formula based on Fraunhofer-Diffraction and fitted with particle size distribution inversion

Dai Bing , He Anzhi^a , Bao Zhizhua

(Nantong institute of Technology ,Nantong ,226007)

(^aNanjing University of Science and Technology ,Nanjing ,210049)

Abstract: Fraunhofer-Diffraction has not only theoretical but also practical meanings. The measurement of particle size is an important application of Fraunhofer-Diffraction. In order to precisely calculate the particle size ,it is necessary to make the results of Fraunhofer-Diffraction unlimitedly to close to Mie solution. But the considerable difference between results of Fraunhofer-Diffraction and Mie solution exists ,if the particle size parameter x ,defined as $x = d/\lambda$,closes by one. This paper proposed a more exact semiempirical formula to fit with the particle size distribution inversion. According to the semiempirical formula ,the calculation results are exactly coincident with Mie 's solution at small forward angles. Comparing with the approximation of Fymat A L and Mease K D ,the formula gives much higher precise of measurement of particle size distribution for all the range ,especially for minute particles. Also ,this paper presented two methods to perform the particle size distribution inversion.

Key words: Fraunhofer-Diffraction particle size distribution Mie 's solution inversion

引 言

Fraunhofer-Diffraction 有重要的理论意义及实用价值,基于 Fraunhofer-Diffraction 的粒度测试就是其一种重要的应用,该方法具有简单易行、算法简单、速度快等优点^[1,2]。实现 F-D 粒度测试的关键是对粒子尺寸分布进行反演计算,如以环行光电管阵列为接受器件的矩阵反演算法^[3,4]及以 CCD 为接受器件的 Shifrin 变换反演算法^[5,6]等。为了能精确地反演出粒子尺寸分布,必须要求 F-D 的结果无限接近于 Mie 解,然而 Fraunhofer-Diffraction 只是在粒径参数 $x \gg 1$ ($x = d/\lambda$) 的前向小角范围内 Mie 散射的一种近似,对于 $x \approx 1$ 的微小粒子 F-D 的结果与 Mie 解则存在较大差别^[7],为了在像这样的范围仍然采用 F-D 粒度测试方法,Penndorf and Shifrin-Punina 首先对 F-D 强度提出了 PSP 修正近似,其结果能在一定的范围内与 Mie 解

* 南通市中青年科技骨干研修项目资助。

很好的吻合^[8],但在其它的某些范围则显得较差。为此,Fymat A L and Mease K D 提出了 FM 修正近似^[9],其结果较 PSP 近似有了较大的改进,但在一些范围仍然不很理想,特别在 $m = 1.33, x = 0.5 \sim 1; m = 1.5(1.6), x = 0.5 \sim 3$ 的范围内仍然存在较大的误差。鉴于此,我们提出了一种更为确当的半经验公式,以使精确度能得到进一步的提高。

1 对 Fraunhofer-Diffraction 强度修正的半经验公式

球形粒子在前向散射方向($\theta = 0$)的 Mie 解可表示成

$$I_M(0) = k^2 \{ [\text{Re } S(0)] + [\text{Im } S(0)] \} \tag{1}$$

式中, I_M 为 Mie 散射强度相对于入射强度的比值, S 为 Mie 的复振幅函数, Re 和 Im 分别代表其实部和虚部, k 为波数。有 $\text{Re } S(0) = (x^2/4) Q_{\text{ext}}$ (2)

式中, Q_{ext} 是耗散因子。当 $\text{Re } S(0) \gg \text{Im } S(0)$ 时, Penndorf^[10]对(1)式提出了一种近似公式

$$I_P = (x^4/4k^2) \times (Q_{\text{ext}}^2/4) \tag{3}$$

我们知道在 Fraunhofer 近似中其相应的强度可表示成

$$I_F(\theta) = [x^2 J_1(x \sin \theta)] / (k^2 \sin^2 \theta) \tag{4}$$

式中, J_1 是第一级 Bessel 函数。在近前向 $\sin \theta \approx \theta$, 当 $\theta \rightarrow 0$ 时, 上式成为

$$I_F(0) = x^4 / (4k^2) \tag{5}$$

这样,(3)式与(5)式的关系为 $I_P(0) = I_F(0) (Q_{\text{ext}}/4)$ (6)

因此,当 $\theta > 0$ 时, Penndorf, Shifrin 和 Punina^[8,10]提出了如下近似公式

$$I_{\text{PSP}}(\theta) = I_F(\theta) (Q_{\text{ext}}/4) \tag{7}$$

正如文献[9]所述,(7)式虽然在一定的范围内($m = 1.33, x > 21; m = 1.5, x > 14; m = 1.6, x > 12$)与 Mie 解吻合得很好,但其它某些范围的误差还是比较大的,为此,Fymat 和 Mease^[9]提出了对(7)式的修正公式 $I_{\text{FM}}(\theta) = I_F(\theta) (Q_{\text{ext}}/4) f_1 f_2$ (8)

这里

$$f_1^{-1} = \begin{cases} 1 - J_0^2[(m-1)x] & (m-1)x > a \text{ or } b & (m-1)x < c \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$f_2^{-1} = \begin{cases} 1 - J_0^2[2(m-1)x] & 2(m-1)x > d \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

式中, a, b, c, d 是与粒子折射率 m 有关的常数。(8)式虽然大部分地解决了(7)式的问题,但我们检查发现,对应于某些 x ,其结果仍不很理想,如在 $m = 1.6, x = 5$ 时,相对误差为 10.63%;在 $m = 1.5, x = 6$ 时,相对误差为 9.6%;而当 x 更小时,则变得很不理想,如在 $m = 1.6$ 时,对应于 $x = 1.0, x = 2.25$ 相对误差分别为 63.9%和 12.3%;在 $m = 1.5$ 时,对应于 $x = 1.5, x = 2.5$ 相对误差分别为 32.6%和 14.4%。为此,作者提出了一种半经验公式如下

$$I_{\text{DHB}} = g I_{\text{PSP}} = g (Q_{\text{ext}}^2/4) I_F \tag{9}$$

式中,

$$g^{-1} = \begin{cases} \{1 - J_0^2[0.78(m-1)x - 0.78a]\} \times \{1 - 0.363(mb-x)/(m-1)\} & x > mb \\ 1 - J_0^2[1.21(m-1)x - 1.21c + 2.4] & mb < x < c/(m-1) \\ 1 - J_0^2[1.74(m-1)x - 1.74c + 2.4] & c/(m-1) < x < d/(m-1) \\ 1 - J_0^2[2.08(m-1)x - 2.08e + 8.65] & e/(m-1) < x < f/(m-1) \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

其中, a, b, c, d, e, f 是随 m 作微小变化的常数,表 1 给出了 $m = 1.33, m = 1.5, m = 1.6$ 时的各常数值。

2 和 Mie 解的一致性及其它几种近似的比较

为了表明半经验公式的结果,取 $\theta = 0; r = 0.6328\mu\text{m}; m = 1.5, 1.33, 1.6; a, b, c, d, e, f$ 由表 1 给出,我们按(9)式求出了不同的粒径参数 x 对应的 I_{DHB} 值,并以 $(I_M - I_{\text{DHB}})/I_M$ 为纵坐标、 x 为横坐标作出了相对误差随 x 的关系曲线(DHB)如图 1 所示,为了和其它几种近似比较,图中还给出了 Fraunhofer (F) 及 Fymat-Mease (FM) 近似的结果。图中显示,F-近似存在着相当大的误差;F-M 曲线在 x 不太小时 ($m = 1.33, x > 1; m = 1.5$ 或 $1.6, x > 3$) 能较好地贴近横轴(Mie 解);而 D-H-B 曲线在所有考虑的 x 范围不仅能且较 F-M 曲线要更加贴近横轴。这说明作为 Fraunhofer-Diffraction 强度的修正近似,我们的结果能在广泛的粒径范围($x > 0.5$)更好地和 Mie 解相一致。

Table 1 Constants in semiempirical formula for several refractive indices

	a	b	c	e	e	f
$m = 1.33$	0.114	0.936	2.21	4.01	5.54	7.05
$m = 1.5$	0.115	1.05	2.29	4.10	5.60	7.11
$m = 1.6$	0.114	1.06	2.28	4.08	5.58	7.09

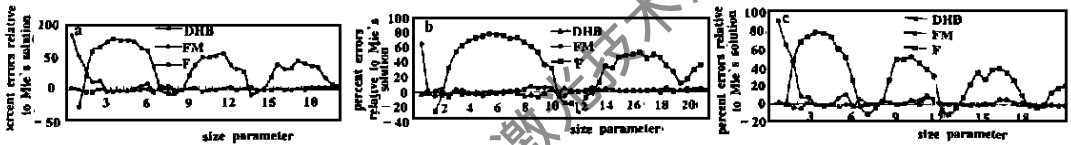


Fig. 1 Percentage of relative errors of the F, F-M and D-H-B approximations relative to Mie's solution as a function of the size parameter in $\theta = 0$, results in a, b and c are illustrated for $m = 1.5, 1.33$ and 1.6

Table 2 The maximum and average percentage of relative errors of the F-M and D-H-B approximations relative to Mie's solution for different size parameter in several refractive indices

	maximum error		average error	
	FM	DHB	FM	DHB
$m = 1.33$	$0.5 < x < 1$	64.9 %	33.5 %	2.9 %
	$1 < x < 14$	7.5 %	3.3 %	2.2 %
	$14 < x < 21$	4.3 %	1.6 %	1.0 %
$m = 1.5$	$0.5 < x < 3$	85 %	33.4 %	2.7 %
	$3 < x < 11$	9.6 %	3.2 %	1.8 %
	$11 < x < 18$	4.9 %	1.8 %	1.6 %
$m = 1.6$	$0.5 < x < 3$	89.4 %	34.3 %	2.4 %
	$3 < x < 9$	10.6 %	2.7 %	1.7 %
	$9 < x < 16$	9.5 %	2.9 %	2.8 %

表 2 对 F-M 近似和 D-H-B 近似在几种粒径范围内的最大相对误差和平均相对误差的具体数值进行了比较。它表明我们的结果较 F-M 近似在不同的范围有了不同程度的提高,特别在 $m = 1.33, x > 1; m = 1.5, x > 3; m = 1.6, x > 3$ 的范围内有了很大的提高。

通过以上的讨论可以看出,在散射角为 0 时,我们的结果与 Mie 解吻合得很好,为了进一步说明在其它散射角 ($\theta < 10$) 的情况,同时也为了和 F-M 的结果作对比,取 $m = 1.44; r = 0.6328\mu\text{m}; x = 1.5, 5, 14$; 各常数

取值分别是 $a = 0.115, b = 1.05, c = 2.28, d = 4.09, e = 5.60, f = 7.10$,部分引用文献[9,10]的结果,我们由(9)式求出了不同的散射角 θ 对应的 I_{DHB} 值,并以 $(I_M - I_{\text{DHB}})/I_M$ 为纵坐标、 θ 为横坐标作出了 D-H-B 近似与 Mie 解的相对误差随 θ 的关系曲线(DHB),如图 2 所示。图中还给出了 F-近似和 F-M 近似的结果。图 2 显示,F-近似的相对误差比较大,F-M 近似在 x 不

很小 ($x > 2$) 时, 在前向小角范围 (< 6.5) 内能与 Mie 解相吻合, 而 D-H-B 近似对应于不同的 x 在前向小角范围内 (< 6.5) 都能与 Mie 解相吻合, 图 2a 说明了在 $x = 1.5$ 时, D-H-B 近似较 F-M 近似的精确度有了很大的提高。从图 2 还可知, 在 x 较小时各种近似的相对误差随的变化不大, 而随着 x 的增大这种变化越来越明显, 但是我们看出, 即使在 x 增大到 14 时, 也仅在 > 7.5 之后, D-H-B 近似和 F-M 近似一样与 Mie 解的一致性才会出现一定的下降, 当 x 继续增大超过 16.1 (由 $f / (m - 1)$ 给出) 时 D-H-B 近似与 P-S-P 近似完全相同, 文献 [8] 给出了 P-S-P 近似的结果。

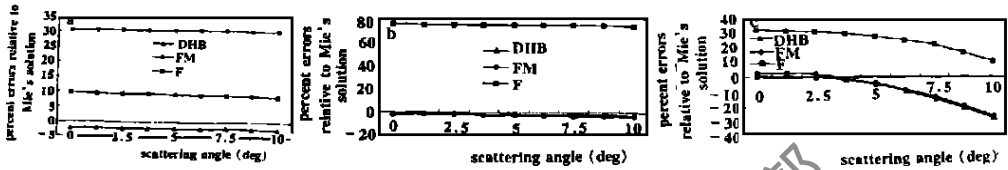


Fig. 2 Percentage of relative errors of the F, F-M and D-H-B approximations relative to Mie's solution as scattering angle (< 10), results in a, b and c are illustrated for $x = 1.5, 5$ and 14

3 粒子尺寸分布反演的实现方法

为了基于 Fraunhofer-Diffraction 对粒子尺寸分布进行测试, 需要对粒径分布进行反演, 其反演方法主要有 80 年代后期的以环形光电管阵列为接受器件的矩阵方法和近几年发展起来的以 CCD 为接受器件的 Shifrin 变换方法。如果我们在本文的近似下仍能实现这两种反演变换, 那么在更广泛的范围内精确地重建粒子尺寸分布将成为可能。为此, 我们令

$$(m, x) = g(m, x) \cdot Q_{ext}^2(m, x) / 4 \tag{10}$$

由于我们的结果与 Mie 解有很好的—致性, 则由 (9) 式有

$$I_{DHB}(m, x) = (m, x) \cdot I_F(m, x) \quad I_M(m, x) \tag{11}$$

当以环形光电管阵列为接受器件时, 粒径参数为 x_j 的粒子在第 i 环上产生的能量为

$$E_{ij} = \int_i^{i+1} I_M(m, x_j) dx = \int_i^{i+1} I_{DHB}(m, x_j) dx = \int_i^{i+1} (m, x_j) \cdot I_F(m, x_j) dx$$

代入 (4) 式积分可得

$$E_{ij} = C \cdot (m, x_j) \cdot x_j^2 \cdot \{ [J_0^2(X_{ji}) + J_1^2(X_{ji})] - [J_0^2(X_{ji+1}) + J_1^2(X_{ji+1})] \} \tag{12}$$

式中, $X_{ji} = x_j s_i / f_m, X_{ji+1} = x_j s_{i+1} / f_m, f_m$ 是透镜的焦距, s_i 和 s_{i+1} 分别是第 i 环的内外半径, C 为与光源的波长、功率和探测器敏感程度有关的常数, J_0 和 J_1 分别为零阶 Bessel 函数和一阶 Bessel 函数, 若粒径参数为 x_j 的粒子数目是 N_j , 则第 i 环接受的总能量为

$$E_i = \sum_{j=1}^M \{ C \cdot (m, x_j) \cdot N_j \cdot x_j^2 [J_0^2(X_{ji}) + J_1^2(X_{ji}) - J_0^2(X_{ji+1}) - J_1^2(X_{ji+1})] \} \tag{13}$$

由于 (m, x) 与 x 无关, 则可令 $N_j^* = (m, x_j) \cdot N_j$, 并把上式写成矩阵形式 $E = TN^*$ (14) 式中

$$E = [E_1, E_2, \dots, E_i, \dots, E_L]^T_{L \times 1}$$

$$N^* = [N_1^*, N_2^*, \dots, N_j^*, \dots, N_M^*]^T_{M \times 1}$$

$$T = [T_{ij}]_{L \times M}$$

$$T_{ij} = C \cdot x_j^2 [J_0^2(X_{ji}) + J_1^2(X_{ji}) - J_0^2(X_{ji+1}) - J_1^2(X_{ji+1})]$$

解方程 (14) 可求得 N_j^* , 即可求得 N_j 。至于该方程的计算方法有函数限制解法和独立模式解

法,具体可参见文献[3],[4],[14]等。

目前,国内许多光学粒度测试装置^[2,12,13,14]都是基于 Fraunhofer-Diffraction 以上面的矩阵反演方法进行设置的,我们的半经验公式为这种装置提高微小粒子粒度测试的精度提供了一种很好的方法。

当以 CCD 为接受器件时,设粒径参数为 x 的粒子数是 $N(x)$,则在散射角 θ 方向上散射的光强 $I(\theta)$ 为

$$I(\theta) = C \cdot \int_0^{\infty} I_M(\theta, x) \cdot N(x) dx = C \cdot \int_0^{\infty} I_{DHB}(\theta, x) \cdot N(x) dx$$

$$= C \cdot \int_0^{\infty} (m, x) \cdot I_F(\theta, x) \cdot N(x) dx$$

代入(4)式,上式成为

$$I(\theta) = \frac{C}{k^2} \int_0^{\infty} (m, x) \cdot x^2 \cdot J_1^2(x) \cdot N(x) dx \quad (15)$$

像上面一样,令

$$N^*(x) = (m, x) \cdot N(x) \quad (16)$$

由 Shifrin 变换可得

$$N^*(x) = \frac{C_1}{x^2} \cdot \int_0^{\infty} x' \cdot J_1(x') \cdot Y_1(x') \cdot \frac{d}{dx'} I(\theta) dx' \quad (17)$$

式中, C_1 为与光源的波长及功率有关的常数, J_1 和 Y_1 分别是第一类和第二类的一阶 Bessel 函数,解方程(17)可求得 $N^*(x)$,即可求得 $N(x)$ 。至于该方程的计算方法,国外许多学者进行了研究,具体可参见文献[6],[15],[16]等。

近几年来,国外发展了以 Shifrin 变换为反演方法的粒度测试实验装置^[16,17],我们的结果对这类装置提高微小粒子粒度的测试精度有一定的指导意义。在以上两种方法中, Q_{ext} 可由 Mie 程序、其它近似公式或查表给出。

4 结 论

(1)作为对 Fraunhofer-Diffraction 强度的修正,我们的结果较 F-M 近似在不同的范围有了不同程度的提高,特别在粒径很小时有了很大的提高。(2)在前向小角范围内,我们的结果能在广泛的粒径范围($x < 0.5$)很好的与 Mie 解相吻合。(3)应用我们的半经验公式,由矩阵反演方法和 Shifrin 变换反演方法,可以在广泛的粒径范围($x < 0.5$)精确地重建粒子尺寸分布。(4)我们的半经验公式对基于 Fraunhofer-Diffraction 的粒子尺寸分布的测试有一定的指导意义和相当的应用价值。

我们的工作得到南京理工大学测试计量技术和仪器学科尘埃粒子粒径测试课题组的帮助和支持,在此表示感谢。

参 考 文 献

- 1 杨 晔,张镇西,蒋大宗. 激光技术,1997;21(2):122~127
- 2 张志伟,郑 刚,虞先煌 *et al.* 中国激光,1995;22(10):742~746
- 3 应萱同. 计算物理,1996;13(2):190~194
- 4 张会生,高敦岳. 仪器仪表学报,1995;16(1):57~61
- 5 Fymat A L. Appl Opt,1978;17(11):1677~1678
- 6 Riley J B, Agrawal Y C. Appl Opt,1991;30(33):4800~4817
- 7 杨 晔,张镇西,蒋大宗. 激光技术,1998;22(1):18~21
- 8 Shifrin K S, Punina V A. Bulletin Izvestia of Academic Science. USSR Atmos Oceanic Phys,1968;4(7):450
- 9 Fymat A L, Mease K D. Appl Opt,1981;20(2):194~198
- 10 Penndorf R. J O S A,1962;52:797
- 11 米凤文,牟同声. 光学仪器,1995;17(4/5):8~11
- 12 张以漠,毛 义,田学飞. 光电工程,1990;17(1):1~8

单频可调谐 Cr^{3+} LiSrAlF_6 激光器的进展

赵卫疆 于俊华 张 华 赵旭光 周更夫

(哈尔滨工业大学光电子技术研究所,哈尔滨,150001)

摘要: 概述了近红外可调谐激光器的发展过程,对单频可调谐 Cr^{3+} LiSrAlF_6 激光器的发展现状进行了综述,并对其进一步的发展做了简要分析,展望了其广泛的应用前景。

关键词: Cr^{3+} LiSrAlF_6 二极管激光器 斜坡效率

Development of single frequency tunable Cr^{3+} LiSrAlF_6 laser

Zhao Weijiang, Yu Junhua, Zhang Hua, Zhao Xuguang, Zhou Gengfu

(Institute of Opto-Electronics, Harbin Institute of Technology, Harbin, 150001)

Abstract: This paper summarized the development of near infrared lasers, reviewed the present situation of single frequency tunable Cr^{3+} LiSrAlF_6 laser, and briefly analyzed the future development. Finally, it points out that the single frequency Cr^{3+} LiSrAlF_6 laser has wide application prospect.

Key words: Cr^{3+} LiSrAlF_6 diode laser slope efficiency

引 言

1989 年,美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室首先发现了 Cr^{3+} LiSrAlF_6 晶体,并研究了它的激光特性^[1]。 Cr^{3+} LiSrAlF_6 晶体属 colquiriite 结构,此类晶体的辐射与吸收光谱较宽。在近红外光谱区的辐射光谱范围为 760nm ~ 1010nm;在红光谱区,宽吸收带的峰值位置与二极管激光器(CaInP/AlGaInP)的 670nm 输出波长相重合,适于用二极管激光器直接泵浦。 Cr^{3+} LiSrAlF_6 晶体一经出现就受到普遍关注,在许多条件下已经实现了激光振荡,包括:闪光灯^[2]、二极管^[3]泵浦激光器,超短脉冲激光器^[4],单频可调谐振荡器^[5],调 Q 激光器^[6]等。对二极管激光器泵浦可调谐 Cr^{3+} LiSrAlF_6 激光器的研究,国内起步较晚。目前,只有西安光机所报道了脉冲式二极管激光器泵浦的 Cr^{3+} LiSrAlF_6 激光器^[7]。

13 毛 义,张以漠.天津大学学报,1993;2:15~20

14 郑 刚,张志伟,蔡小舒 *et al.* 中国激光,1998;25(3):285~288

15 Koo J H, Dan H, Hilleman E. Appl Opt, 1992;31(12):2130~2140

16 Nefedov A P, Petrov O F, Vaulina O S. Appl Opt, 1997;36:1357~1366

17 Coil M A, Farrell P V. Appl Opt, 1995;34(33):7771~7786

*

*

*

作者简介:戴 兵,男,1964 年 12 月出生。硕士研究生。从事大学物理的教学和激光微粒测试技术的研究工作。