

В.Н. Лопатин, Н.В. Шепелевич

МЕТОД ВЕНЦЕЛЯ-КРАМЕРСА-БРИЛЛЮЭНА (ВКБ) КАК ОСНОВНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ РАССЕЯНИЯ СВЕТА «МЯГКИМИ» ЧАСТИЦАМИ

На основании проведенного исследования доказано, что аппроксимации Рэлея, Рэлея-Ганса-Дебая, аномальной дифракции, дифракции Фраунгофера являются следствиями интегрального волнового уравнения в приближении ВКБ. В качестве примера рассмотрен случай однородного шара.

Аппроксимационные методы решения задачи светорассеяния находят широкое применение в оптике коллоидов, взвесей гидрозольных и биологических частиц. Они основаны на использовании известных физических механизмов и гораздо более просты для анализа, чем точное решение. Недостатком последних, однако, является ограниченная область их корректного применения.

В связи с этим существует необходимость в разработке и применении методов, сочетающих достаточную простоту решения с возможностью использования их в более широких оптических диапазонах.

Целью настоящей работы является исследование волнового уравнения в приближении ВКБ в областях законности наиболее известных аппроксимаций для «мягких» частиц (Рэлея, Рэлея-Ганса-Дебая (РГД), аномальной дифракции (АД), дифракции Фраунгофера (ДФ)).

Остановимся на интегральном представлении амплитуды рассеяния как на одном из инструментов получения аппроксимационных решений [1–6].

Используя свойства вектора Герца [2], можно получить выражение для рассеянного поля частицы в дальней зоне:

$$\mathbf{E}^s(\mathbf{r}) = \mathbf{f}(\mathbf{o}, \mathbf{i})(e^{ikR}/R); \quad (1)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{o}, \mathbf{i}) = \frac{k^2}{4\pi} \int_V -\{\mathbf{o} \times [\mathbf{o} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}')]\} [m^2(\mathbf{r}') - 1] \exp(-ik\mathbf{r}'\mathbf{o}) dV, \quad (2)$$

где $kR \gg 1$, $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число дисперсионной среды; R – расстояние от точки наблюдения до частицы вдоль направления рассеяния; \mathbf{i} и \mathbf{o} – единичные векторы направления распространения падающего и рассеянного излучения; m – относительный показатель преломления; $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ – независимая от времени составляющая электрического поля внутри частицы.

Соотношение (2) является точным интегральным выражением амплитуды рассеяния через поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ внутри частицы. В общем случае $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ не известна и не дает замкнутого описания $\mathbf{f}(\mathbf{o}, \mathbf{i})$. Однако часто, исходя из физических соображений, $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ можно приближенно заменить известной функцией и таким образом получить полезное аппроксимационное решение.

Рассмотрим ВКБ-приближение, для которого $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ внутри частицы аппроксимируется распространяющейся волной с волновым вектором, соответствующим веществу частицы. Предполагается также, что направление и амплитуда волны не изменяются при прохождении рассеивателя.

С учетом вышесказанного

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}') = \mathbf{e}_i \exp\{ikr_1 \cdot \mathbf{i} + ik \int_{Z_1}^{Z'} m(z') dz'\}, \quad (3)$$

где \mathbf{e}_i – вектор поляризации; $Z_1 = (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{i})$ – входная координата поверхности частицы для волны, проходящей через точку \mathbf{r}_1 , $Z' = (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{i})$.

Подстановка (3) в (1) с небольшими переобозначениями и перегруппировками дает

$$\mathbf{f}(\mathbf{o}, \mathbf{i}) = (k^2/4\pi) \{-\mathbf{o} \times [\mathbf{o} \times \mathbf{e}_i]\} VF(\mathbf{o}, \mathbf{i}), \quad (4)$$

$$F(\mathbf{o}, \mathbf{i}) = \frac{1}{V} \int_V [m^2 - 1] \exp(i\mathbf{k}_s \mathbf{r}') \exp\left\{ik \int_{Z_1}^{Z'} (m - 1) dz'\right\} dV',$$

где $\mathbf{k}_s = k \cdot \mathbf{i}_s = k(\mathbf{i} - \mathbf{o})$ и имеет направление вдоль биссектрисы дополнительного угла рассеяния; $|\mathbf{i}_s| = 2\sin(\theta/2)$; θ – угол рассеяния, или угол между \mathbf{i} и \mathbf{o} .

При выполнении

$$|m - 1| \ll 1, \quad |m - 1| \rho_{\max} \ll 1, \quad (5)$$

где ρ_{\max} – максимальный дифракционный параметр рассеивателя,

$$\exp\left\{ik \int_{Z_1}^{Z'} (m - 1) dz'\right\} \simeq 1 \quad (6)$$

и выражение (4) совпадает с таковым для РГД:

$$F(\mathbf{o}, \mathbf{i}) = \frac{1}{V} \int_V (m^2 - 1) \exp(i\mathbf{k}_s \mathbf{r}') dV' \quad (7)$$

Таким образом, ВКБ-приближение является обобщением аппроксимации РГД, учитывающим фазовый сдвиг – «предысторию» луча, пришедшего в точку \mathbf{r}' .

Заметим, что в основе физической схемы построения механизма светорассеяния РГД лежит обычное рэлеевское излучение: каждый элемент объема частицы рассматривается как независимый рэлеевский рассеиватель – диполь. Так как излучения разных элементов при этом когерентны, то волны, рассеянные ими, интерферируют между собой и частично гасят друг друга из-за различия положения элементов в пространстве. Уравнение (4) строится на совершенно иных принципах (3), давая при условии (5) тот же результат, что и физическая схема.

Отметим также, что принцип Фурье-преобразования внутреннего поля, фрагмент которого используется в (4), применяется и при построении строгого решения [7].

Для «мягких» частиц, размер которых много меньше длины волны,

$$\exp(i\mathbf{k}_s \mathbf{r}') \simeq 1. \quad (8)$$

С учетом (6) получаем $\mathbf{E}(\mathbf{r}') = \mathbf{e}_i$. Подстановка (6), (8) в (4) приводит к результатам, совпадающим с результатами приближения Рэлея [8], полученными методами электростатики:

$$|\mathbf{f}| = (k^2/2\pi) |m - 1| V \sin\chi, \quad (9)$$

где χ – угол между \mathbf{e}_i и \mathbf{o} . Погрешность использования (9) в сравнении с формулами электростатики в предельных случаях асферичности ($\varepsilon = 0, \infty$) не превышает соответственно – 15,5 и 12,7% для $m < 1,14$ и уменьшается с уменьшением m и несферичности частиц [9].

Используя свойства «мягкости» частицы и непрерывности $m(\mathbf{r}')$ и делая небольшие перегруппировки, выражение (4) можно записать иначе, а именно:

$$F(\mathbf{o}, \mathbf{i}) = \frac{2}{ikV} \int_S \int_Z \exp[F(z)] \exp[i\mathbf{k}_s \mathbf{r}'] dF(z) dS', \quad F(z) = ik \int_{Z_1}^{Z'} (m - 1) dz'. \quad (10)$$

Согласно принятым обозначениям и схеме расчета

$$\mathbf{k}_s = k_{s1}\mathbf{x} + k_{s2}\mathbf{y} + k_{s3}\mathbf{z}, \quad (11)$$

где

$$k_{s1} = -k \sin\theta \cos\phi;$$

$$k_{s2} = -k \sin\theta \sin\phi;$$

$$k_{s3} = k(1 - \cos\theta) = 2k \sin^2(\theta/2). \quad (12)$$

Заметим, что (θ, ϕ) образует плоскость рассеяния, тождественную (\mathbf{i}, \mathbf{o}) , относительно плоскости падения $(\mathbf{i}, \mathbf{e}_i)$.

Как видно из (11)–(12), для

$$2kz \sin^2(\theta/2) \ll 1, \quad \theta \ll 1 \quad (13)$$

$$\mathbf{k}_s \mathbf{r}' \simeq k_{s1}x' + k_{s2}y', \quad (14)$$

т.е. не зависит от z . Отсюда из (10) получаем

$$F(\mathbf{o}, \mathbf{i}) = \frac{2i}{kV} \int_S \{1 - \exp[ik \int_{Z_1}^{Z_2'} (m(\mathbf{r}') - 1) dz']\} \exp(i\mathbf{k}_s \mathbf{r}') dS'. \quad (15)$$

Здесь Z_2 – выходная координата поверхности частицы для волны, прошедшей через точку радиуса-вектора \mathbf{r}' .

С небольшой погрешностью (15) остается справедливым, если (13) заменить на менее жесткое условие:

$$2kZ_3 \sin^2(\theta/2) < 0.5, \quad (16)$$

где $Z_3 = \max\{|Z_1|, |Z_2|\}$. Условию (16) удовлетворяют углы рассеяния, в которых для больших частиц сосредоточена практически вся рассеянная энергия [8].

Таким образом, имеем

$$K_{\text{осл}} = (4\pi/k) \text{Im} \mathbf{f}(\mathbf{i}, \mathbf{i}') \cdot \mathbf{e}_i = 2\text{Re} \int_S \{1 - \exp[ik \int_{Z_1}^{Z_2'} [m(\mathbf{r}') - 1] dz']\} dS', \quad (17)$$

$$|\mathbf{f}(\mathbf{o}, \mathbf{i})| = \frac{k}{2\pi} \int_S \{1 - \exp[ik \int_{Z_1}^{Z_2'} [m(\mathbf{r}') - 1] dz']\} \exp(i\mathbf{k}_s \mathbf{r}') dS', \quad \theta \ll 1. \quad (18)$$

Выражения (17)–(18) идентичны таковым аномальной дифракции соответственно для поперечника ослабления и амплитуды малоуглового рассеяния [8], которые базируются на совершенно отличных механизмах рассеяния. В АД-приближении выражения (17)–(18) получаются на основе использования принципа Гюйгенса в интерпретации Френеля для проекции частицы, перпендикулярной зондирующему излучению, с учетом фазовых сдвигов соответствующих лучей, дошедших до нее.

Для крупных частиц, удовлетворяющих условию

$$|m - 1| \ll 1, \quad k \int_{Z_1}^{Z_2'} [m(\mathbf{r}') - 1] dz' = \Psi(x, y) \neq \text{const} \gg 1, \quad k\Delta x, \quad k\Delta y \gg 1, \quad (19)$$

для большинства рассеивателей реальных форм интегралы в (17)–(18) от второго члена много меньше, чем от первого, так как второй член является осциллирующей знакопеременной функцией, не превосходящей по модулю единицы, а первый есть единица.

Таким образом, для малоуглового рассеяния с учетом (19) имеем

$$|\mathbf{f}(\mathbf{o}, \mathbf{i})| = \frac{k}{2\pi} \int_S \exp(i\mathbf{k}_s \mathbf{r}') dS' = \frac{k}{2\pi} SG; \quad G = \frac{1}{S} \int_S \exp(i\mathbf{k}_s \mathbf{r}') dS'. \quad (20)$$

Выражение (20) с учетом (14) есть модуль амплитудной функции Френеля и соответствует дифракции Фраунгофера [8].

Продемонстрируем законность отмеченных общих выводов на частном примере светорассеяния однородного шара.

В работе [10] в приближении ВКБ для шара получено выражение

$$|\mathbf{f}(\mathbf{o}, \mathbf{i})| = \sin\chi(k^2/2\pi)(m-1) |F(\theta)|; \quad (21)$$

$$F(\theta) = \frac{4\pi a^2}{k_3} \int_0^1 J_0(\rho \sin\theta \sqrt{1-t^2}) \sin[\rho(m-\cos\theta)t] \exp(it\Delta/2) t dt,$$

где

$k_3 = k(m - \cos\theta)$; $J_0(x)$ – функция Бесселя нулевого порядка.

Реальная часть интеграла (21) сводится к интегралу Сонина, что дает

$$\text{Re}[F(\theta)] = (2\pi a^2/k_3) \{(B_1/U_1^3) [\sin(U_1) - U_1 \cos(U_1)] - (B_2/U_2^3) [\sin(U_2) - U_2 \cos(U_2)]\}, \quad (22)$$

где

$$B_1 = \Delta/2 + \rho(m - \cos\theta); \quad B_2 = \rho(\cos\theta - 1); \quad U_1 = \sqrt{\rho^2 \sin^2\theta + B_1^2}; \quad U_2 = \sqrt{\rho^2 \sin^2\theta + B_2^2}.$$

Очевидно, что реальная часть амплитуды светорассеяния (21) вносит основной вклад при малом фазовом сдвиге, т.е. в области РГД. При этом из (22) следует

$$B_1 \approx -B_2, \quad U_1 \approx U_2 = 2\rho \sin(\theta/2), \quad (23)$$

т.е. амплитуда светорассеяния равна

$$|\mathbf{f}(\mathbf{o}, \mathbf{i})| = \sin\chi 2(m-1)\rho^2 a [(1/U_2^3)(\sin U_2 - U_2 \cos U_2)], \quad (24)$$

что соответствует РГД амплитуде светорассеяния.

В случае приближения АД в малоугловой области ($\theta \ll 1$)

$$B_2 \approx -\rho \theta^2/2 \ll 1, \quad B_1 \approx \Delta \quad (25)$$

и амплитуда светорассеяния имеет вид

$$f(\mathbf{o}, \mathbf{i}) = \rho a \left\{ \int_0^1 J_0(\rho \sin\theta \sqrt{1-t^2}) \sin(\Delta t) t dt + i \int_0^1 J_0(\rho \sin\theta \sqrt{1-t^2}) [1 - \cos(\Delta t)] t dt \right\}, \quad (26)$$

что соответствует формуле для АД, приведенной в [8], если принять $t = \sin\tau$.

Остановимся более подробно на анализе мнимой части амплитуды рассеяния для $\Delta \gg 1$. Очевидно (см. (21), (22), (26)), что в этом случае реальная часть не будет оказывать существенного влияния на вид индикатрисы. Тогда интеграл (21) можно записать в виде

$$|F(\theta)| = (2\pi a^2/k_3) \int_0^1 \{\cos(B_2 t) - \cos(B_1 t)\} J_0(\rho \sin\theta \sqrt{1-t^2}) t dt. \quad (27)$$

Если воспользоваться разложением в ряд функции $\cos(Bt)$ по степеням Bt (отдельные члены ряда берутся с помощью первого интеграла Сонина), то получим

$$|F(\theta)| = \frac{2\pi a^2}{k_3} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{J_{n+1}(z)}{z^{n+1}} \frac{1}{(2n-1)!!} \{B_2^{2n} - B_1^{2n}\}, \quad (28)$$

где $z = \rho \sin\theta$.

В случае малых углов $\theta \ll 1$ последний ряд вырождается в ряд, предложенный в [8] для АД:

$$|F(\theta)| = \frac{2\pi a^2}{k_3} \left\{ \Delta^2 \frac{1}{z^2} J_2(z) - \frac{\Delta^4}{1 \cdot 3} \frac{1}{z^3} J_3(z) + \frac{\Delta^6}{1 \cdot 3 \cdot 5} \frac{1}{z^4} J_4(z) \dots \right\}. \quad (29)$$

Выражение (27) можно представить и в виде другого ряда, если воспользоваться разложением в ряд функции Бесселя $J_0(\rho \sin\theta \sqrt{1-t^2})$. При этом получим

$$|F(\theta)| = \frac{2\pi a^2}{k_3} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z^2/4)^n}{n!} \{(B_2/2)^{-n-1/2} H_{n+3/2}(B_2) - (B_1/2)^{-n-1/2} H_{n+3/2}(B_1)\}, \quad (30)$$

где H_ν – функция Струве [11].

При условии $\Delta \gg 1$ и $\rho(1 - \cos\theta) \ll 1$ последний ряд можно свести к простому выражению

$$|F(\theta)| = \frac{2\pi a^2}{k(m-1)} \left\{ \frac{J_1(z)}{z} + \frac{1}{4} (K(B_1) - 2) \right\}, \quad (31)$$

$$K(B_1) \approx K(\Delta) = 2 - \frac{4 \sin \Delta}{\Delta} + \frac{4}{\Delta^2} (1 - \cos \Delta).$$

Отметим, что $K(\Delta)$ является фактором эффективности ослабления для непоглощающих частиц. Отсюда, в частности, видно, что малоугловая индикатриса изменяется от Δ подобно фактору эффективности светорассеяния.

При $\Delta \rightarrow \infty$ $K_{\text{ОСЛ}} = 2$ и, следовательно,

$$f(\mathbf{0}, \mathbf{i}) = \frac{i\rho a}{2} \left(2 \frac{J_1(\rho \sin\theta)}{\rho \sin\theta} \right), \quad (32)$$

что соответствует дифракции Фраунгофера.

В работе [8] для малоугловой области получено выражение, непосредственно следующее из (26):

$$\text{Im}[F(\theta)] = \frac{2\pi a^2}{k_3} \left\{ \frac{1}{z} J_1(z) + \frac{\Delta}{U^2} \sqrt{\frac{\pi U}{2}} N_{3/2}(U) + \frac{1}{\Delta^2} J_0(z) + \frac{1 \cdot 3}{\Delta^4} z J_1(z) + \dots \right\}, \quad (33)$$

где $U = \sqrt{\Delta^2 + z^2}$; $N_{3/2}(U)$ – функция Неймана.

Ограничиваясь двумя главными членами ($\Delta \gg 1$), получим

$$|F(\theta)| = \frac{2\pi a^2}{k_3} \left\{ \frac{1}{z} J_1(z) - \frac{\Delta}{U^2} \left(\sin(U) + \frac{\cos(U)}{U} \right) \right\}, \quad (34)$$

что практически совпадает с (31).

Отсюда видно, что с увеличением Δ ($\Delta \gg 1$) положения экстремумов на индикатрисе (в координатах $z = \rho \sin\theta$) совершают затухающие колебания относительно положений экстремумов, соответствующих ДФ.

Начальное стартовое положение экстремумов определяется аппроксимацией РГД (в частности, минимумы находятся в точках $z = 4,49; 7,73; \dots$), итоговое финишное – в точках, соответствующих ДФ (в частности, положения минимумов соответствуют $z = 3,83; 7,01, \dots$). При этом расстояние между соседними минимумами в координатах z остается практически неизменным и равно π .

Таким образом, на основании проведенного исследования доказано, что аппроксимации Рэлея, РГД, АД, ДФ являются следствиями интегрального волнового уравнения в приближении ВКБ. При этом общая схема структурообразования индикатрисы светорассеяния строится на базе схемы РГД, которая при увеличении Δ испытывает линейный соответствующий сдвиг в сторону схемы ДФ с последующими затухающими колебаниями относительно нее.

1. Колтон Д., Кресс Р. Методы интегральных уравнений в теории рассеяния. М.: Мир, 1987. 311 с.
2. Исимару А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. М.: Мир, 1981. Ч. 1. 280 с.
3. Хлебцов Н.Г. Интегральное уравнение для задач рассеяния света на частицах среды // Оптика и спектроскопия. 1984. Т. 57. Вып. 4. С. 658–611.
4. Шифрин К.С. Рассеяние света в мутной среде. М.; Л.: ГИТТЛ, 1951. 288 с.
5. Сахон D. S. Lectures on the Scattering of Light. Los Angeles: Univ. of California, 1955. (Sci. Report N 9 / Depart. Meteorology).
6. Shimizu K. Modification of Rayleigh-Debye-approximation // J. Opt. Soc. Amer. 1983. V. 73. N 4. P. 504–507.
7. Holt A.R., Usunoglu N.K., Evans B.G. An integral equation solution to the scattering of electromagnetic radiation by dielectric spheroids and ellipsoids // IEEE Trans. Antenn. Propag. 1978. V. 26. N 5. P. 706–712.
8. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 536 с.
9. Лопатин В.Н., Сидько Ф.Я. Введение в оптику взвесей клеток. Новосибирск: Наука, 1988. 250 с.
10. Лопатин В.Н., Шаповалов К.А. Интегральная индикатриса светорассеяния «мягких» сферических частиц в малоугловой области // Оптика и спектроскопия. 1995. Т. 78. Вып. 5. С. 817–821.
11. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Изд-во физ.-мат. лит., 1962. 1097 с.

Красноярский государственный университет,
Институт биофизики СО РАН, г. Красноярск,

Поступила в редакцию
26 января 1996 г.

V.N. Lopatin, N.V., Shepelevich N.V. **Corollaries of Integral Wave Equation in Ventzel-Kramers-Brillouin approximation (VKB).**

It is proved, that such approximation as Rayleigh, Rayleigh-Cans-Debye, anomalous diffraction, Fraunhofer diffraction are corollaries of integral wave equation in VKB approximation. The case of homogeneous sphere is considered as an example.