

ОПТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И БАЗЫ ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ
ОБ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

УДК 535.36

**О применимости закона Бугера–Ламберта–Бера
для оценки коэффициента поглощения лучей света
в облаке диспергированной жидкости****А.В. Загнитко¹, Н.П. Зарецкий¹, Л.И. Меньшиков^{1,2} ✉, П.Л. Меньшиков^{1,2*}**¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123098, г. Москва, пл. Академика Курчатова, 1*² *Московский физико-технический институт (государственный университет)
141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9*Поступила в редакцию 27.06.2022 г.;
после доработки 2.08.2022 г.;
принята к печати 23.09.2022 г.

В виде аналитической формулы установлены условия применимости закона Бугера–Ламберта–Бера для аэрозольных облаков с частицами, диаметры которых намного превышают длину волны фотонов. Оцениваются поправки к этому закону, обусловленные дифракционным рассеянием и геометрией измерительного прибора. Полученная формула полезна для обработки однократных опытов, которые по каким-либо причинам нельзя повторить.

Ключевые слова: рассеяние света, оптическая плотность, индикатриса, аэрозоль, коэффициент поглощения, закон Бугера–Ламберта–Бера, геометрическая оптика, длина свободного пробега, дифракция; light scattering, optical density, scattering phase function, aerosol, absorption coefficient, Bouguer–Lambert–Beer law, geometrical optics, mean free path, diffraction.

Введение

Измерения параметров облаков аэрозолей фотометрическими методами (см., например, [1–11] и рис. 1) основаны на законе Бугера–Ламберта–Бера, согласно которому интенсивности параллельного монохроматического пучка света I_0 и I , испущенного источником T и дошедшего до приемника D при расстоянии L между ними, связаны соотношением

$$\frac{I}{I_0} = \exp(-kL), \quad (1)$$

где $k = \frac{1}{l}$ – коэффициент рассеяния света,

$$l = \frac{1}{\sum_A n_A \sigma_A} = \frac{4}{\gamma T} \quad (2)$$

– средняя длина свободного пробега фотонов в облаке. Подразумевается, что аэрозоли разбиты на группы $A = 1, 2, \dots, G$ в соответствии с их радиусами R_A , n_A – концентрация аэрозоля вида A

(число капель в единице объема). $\sigma_A = \gamma_A \pi R_A^2$ – эффективное сечение рассеяния света каплей вида A ; S – удельная поверхность аэрозольных частиц, т.е. суммарная площадь поверхности аэрозолей в единице объема облака, имеющая размерность $1/\text{м}$; γ_A и γ – коэффициенты невидимости капель.

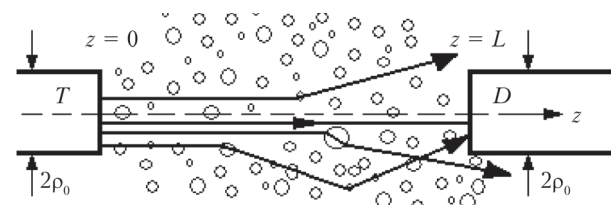


Рис. 1. Принципиальная схема оптрона для измерения удельной поверхности аэрозольных частиц в облаке диспергированной жидкости: T – источник фотонов с круглым окном радиусом ρ_0 , D – светоприемник с входным окном того же радиуса. Параллельный монохроматический пучок света движется вдоль оси z

В данной работе речь идет о часто встречающихся на практике облаках с большими каплями диаметром

$$d \gg \lambda, \quad (3)$$

где λ – длина волны света. В этом случае применимы законы геометрической оптики, согласно которым характер углового рассеяния света каплями

* Александр Васильевич Загнитко (zagnitko_av@nrcki.ru); Николай Пантелеевич Зарецкий (zaretskiy_np@nrcki.ru); Леонид Иеронимович Меньшиков (mleonid1954@mail.ru); Петр Леонидович Меньшиков (menshikov2005@mail.ru).

(индикатриса рассеяния) не зависит от их радиусов, если не принимать во внимание дифракционное рассеяние, которое в рассматриваемых нами случаях несущественно (см. ниже).

Вопрос о применимости закона (1) не возникает в тех случаях, когда имеется возможность предварительных калибровочных измерений или сравнения поглощения в исследуемом образце с каким-то стандартным поглощением, для которого величина S заранее известна. Часто ни то ни другое невозможно, поэтому для обработки результата измерения необходимо заранее иметь представление о применимости закона (1).

На рис. 2 приведены результаты одного из таких наших опытов. Данные снимались с двух установленных в разных местах лазерных анализаторов аэрозолей («оптронов»), описанных в [12]. Значения S были найдены по измеренным значениям I_0/I с использованием формул (1) и (2). Однако сразу же возникает вопрос: как, глядя на рис. 2, понять, применим ли был для обработки данных закон Бугера–Ламберта–Бера?

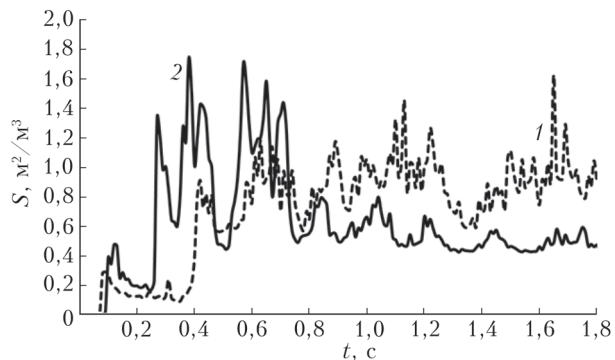


Рис. 2. Зависимость от времени удельной поверхности S в облаке дизельного топлива, полученного путем импульсного диспергирования. Кривые 1 и 2 получены в разных точках облака

В работах [5, 11] для облака из конкретного вещества и для конкретной измерительной установки эмпирическим путем установлены границы применимости формулы (1). Эти границы, однако, соответствуют конкретным условиям опытов [5, 11]. В произвольном случае необходимо иметь соответствующий критерий *в аналитическом виде*. Нам не удалось отыскать такой критерий в имеющейся литературе по рассеянию света. Его нахождение и является целью статьи.

Вероятность ухода фотона из основного потока после прохождения пути dL равна dL/l , поэтому интенсивность луча изменяется на величину $dI = -I dL/l$, откуда и следует формула (1). Ушедшие после первого рассеяния из луча фотоны могут испытать еще одно или несколько актов рассеяния и после этого все-таки попасть в светоприемник. Таким образом, возникает первый вопрос: как видоизменяет закон (1) перерассеяние фотонов на каплях? Второй вопрос: чему равен параметр γ_A , который показывает, насколько полное эффективное сечение рассеяния фотонов σ_A на капле отличается

от ее геометрического сечения πR_A^2 ? В литературе в предельном случае (3) рекомендуется использовать $\gamma_A = 2$ [1, 10], поскольку рассеяние происходит как в результате геометрического отражения и преломления лучей, так и в результате дифракции света на краях капель. Однако для больших капель характерный угол дифракции $\chi_d \sim \lambda/d$ мал, поэтому дифракция приводит к уходу фотона из луча только в том случае, когда $\chi_d \geq \Phi_D$, где $\Phi_D \sim \frac{\rho_0}{L}$ — характерный угол, под которым видно окно светоприемника. Данное условие выполняется при больших длинах L , когда наблюдают, например, атмосферные явления. В лабораторных или полевых измерениях справедливо противоположное условие $L \ll \frac{\rho_0 d}{\lambda}$. При этом дифракция не приводит к потере лучей, что соответствует $\gamma_A = 1$. Ниже будет показано, что в реальном приборе этот параметр не равен единице, хотя и близок к ней: он зависит от показателя преломления n света в веществе капель, а также от отношения ρ_0/L .

Распространение лучей в облаке идеально отражающих аэрозолей

Рассмотрим случай полного и изотропного отражения лучей от капель, как если бы они состояли из идеально проводящего материала, что соответствует $n = \infty$. В этом случае $\gamma_A = \gamma = 1$.

Испущенный свет пересекает объем измерительного прибора за малое по сравнению с характерным временем существенного изменения расположения капель время:

$$\frac{L}{c} \ll \frac{2\rho_0}{V_d},$$

где c — скорость света; V_d — характерная скорость капель. По этой причине капли можно считать неподвижными.

Число фотонов в элементе объема d^3r , летящих в направлении телесного угла $d\Omega_n$, равно $\delta N = F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t) d\Gamma$, где $d\Gamma = d^3r d_n$, $F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t)$ — функция распределения фотонов, \mathbf{n} — единичный вектор, направленный вдоль их движения, \mathbf{r} — радиус-вектор данного элемента объема. Кинетическое уравнение для функции распределения фотонов $F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t)$ имеет вид [1–6, 8–11]:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + c(\mathbf{n}\nabla_{\mathbf{r}})F = -\Lambda F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t) + \frac{\Lambda}{4\pi} \int F(\mathbf{r}, \mathbf{n}', t) G(\cos\chi) d\Omega_{n'} + J(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t), \quad (4)$$

где χ — угол рассеяния, т.е. угол между векторами \mathbf{n}' и \mathbf{n} ; $G(\cos\chi)$ — индикатриса рассеяния луча на капле, нормированная условием $(1/2) \int_{-1}^1 G(x) dx = 1$

(в рассматриваемом в разделе случае $G(x) = 1$);

$$\Lambda = \pi n_d c \int_0^\infty dR R^2 h(R) = \frac{c}{4} \sum_A n_A \pi R_A^2 = \frac{1}{4} c S, \quad n_d = \sum_A n_A \times$$

$\times \pi R_A^2$, $h(R)$ – функция распределения капель

по радиусам, нормированная условием $\int_0^\infty dR h(R) = 11$;

$J(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t)$ – источник фотонов. Первое слагаемое в правой части (4) описывает уход фотонов с направления. Величина $J(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t) d\Gamma dt$ представляет собой число фотонов, испускаемых (в случае $J < 0$ – поглощаемых) в элементе объема d^3r за время dt в телесный угол $d\Omega$.

Рассмотрим точечный источник, испускающий I_0 фотонов в единицу времени в положительном направлении оси z , которое определяется единичным вектором $\hat{\mathbf{z}}$: $J(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t) = I_0 \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{n} - \hat{\mathbf{z}})$. По определению для произвольной функции углов $g(\mathbf{n})$ выполняется соотношение $\int d_n g(\mathbf{n}) \delta(\mathbf{n} - \hat{\mathbf{z}}) = g(\hat{\mathbf{z}})$.

С учетом стационарности $\partial F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, t) / \partial t = 0$ уравнение (4) принимает вид

$$c(\mathbf{n} \nabla_{\mathbf{r}}) F = -\Lambda F(\mathbf{r}, \mathbf{n}) + \frac{\Lambda}{4\pi} N(\mathbf{r}) + I_0 \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{n} - \hat{\mathbf{z}}). \quad (5)$$

Здесь $N(\mathbf{r}) = \int F(\mathbf{r}, \mathbf{n}) d\Omega_n$ – плотность фотонов. Из (5) для Фурье-компоненты $F(\mathbf{p}, \mathbf{n}) = \int d^3r F(\mathbf{r}, \mathbf{n}) \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r})$ получаем выражение $F(\mathbf{p}, \mathbf{n}) = F_1(\mathbf{p}, \mathbf{n}) + F_2(\mathbf{p}, \mathbf{n})$, где

$$F_1(\mathbf{p}, \mathbf{n}) = I_0 \frac{\delta(\mathbf{n} - \hat{\mathbf{z}})}{\Lambda + icp_z},$$

$$F_2(\mathbf{p}, \mathbf{n}) = I_0 \frac{\Lambda}{4\pi(\Lambda + icp_z)(\Lambda + ic\mathbf{p}\mathbf{n})f(p)},$$

$$f(p) = 1 - \frac{\Lambda}{cp} \arctg\left(\frac{cp}{\Lambda}\right).$$

Плотность потока фотонов задается вектором

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \int d\Omega_n F(\mathbf{r}, \mathbf{n}) c\mathbf{n} = \mathbf{j}_1(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_2, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_1(\mathbf{r}) &= I_0 \int d\Omega_n c\mathbf{n} \delta(\mathbf{n} - \hat{\mathbf{z}}) \times \\ &\times \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})}{\Lambda + icp_z} = z \delta^{(2)}(\boldsymbol{\rho}) \theta(z) \exp\left(\frac{-z}{l}\right) I_0, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\theta(z \geq 0) = 1$ и $\theta(z < 0) = 0$. Введена двумерная составляющая $\boldsymbol{\rho}$ трехмерного радиус-вектора $\mathbf{r} = (\boldsymbol{\rho}, z)$, перпендикулярная оси z . Далее,

$$\mathbf{j}_2(\mathbf{r}) = I_0 \int d\Omega_n c\mathbf{n} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\Lambda \cdot \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})}{4\pi(\Lambda + icp_z)(\Lambda + ic\mathbf{p}\mathbf{n})f(p)}.$$

С учетом формулы $\int d\Omega_n \frac{\mathbf{n}}{\Lambda + ic\mathbf{p}\mathbf{n}} = \frac{4\pi\mathbf{p}}{icp^2} f(p)$ получаем

$$\mathbf{j}_2(\mathbf{r}) = \frac{\Lambda I_0}{i} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{p} \cdot \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})}{4\pi p^2 (\Lambda + icp_z)}. \quad (8)$$

При условии

$$\frac{\Lambda r}{c} = \frac{r}{l} \gg 1 \quad (9)$$

основной вклад в интеграл (8) происходит от сингулярности подынтегрального выражения при $p = 0$. С учетом этого обстоятельства получаем

$$\mathbf{j}_2(\mathbf{r}) = I_0 \frac{\mathbf{r}}{4\pi r^3} \left\{ 1 + O\left[\exp\left(\frac{-r}{l}\right)\right] \right\}. \quad (10)$$

Слагаемое (7) в формуле (6) определяет закон Бугера–Ламберта–Бера и описывает фотоны, не испытавшие столкновений с каплями и дошедшие до светоприемника. В свою очередь, $\mathbf{j}_2(\mathbf{r})$ соответствует фотонам, которые испытали $\frac{r}{l} \gg 1$ столкновений

с каплями, после чего они «забывают» свое начальное направление и начинают распространяться равномерно по всем направлениям. Интересен вопрос о средней скорости V движения этого расширяющегося диффузионным образом облака фотонов. Поскольку в интегралы, подобные (8), основной вклад вносит область $p \sim 1/r$ ($r \sim L$), то из (9) заключаем, что $\frac{pc}{\Lambda} \sim \frac{c}{\Lambda r} = \frac{l}{r} \ll 1$. Тогда для плотности расширяющегося фотонного облака в точке \mathbf{r} получаем:

$$n_2(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} F_2(\mathbf{p}, \mathbf{n}) \cdot \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) \approx \frac{3I_0}{16\pi^2 l c r}.$$

Отсюда следует соотношение $V = \frac{j_2}{n_2} = \frac{4\pi l}{3r} c \ll c$.

Согласно (6), (7) и (10), полный поток фотонов, попавших в светоприемник, равен $I = I_1 + I_2$, где $I_1 = I_0 \exp\left(-\frac{SL}{4}\right)$, $I_2 = I_0 \frac{\pi \rho_0^2}{4\pi L^2} = I_0 \frac{\rho_0^2}{4L^2}$.

Из приведенного точного решения заключаем, что перерассеянием фотонов можно пренебречь при условии

$$\frac{I}{I_0} \gg \frac{\rho_0^2}{4L^2}. \quad (11)$$

Теперь приближенно учтем поглощение света в веществе капель. В сплошном веществе, из которого состоят капли, интенсивность луча света затухает по закону $\exp(-k_D z)$, где k_D – коэффициент поглощения фотонов в сплошном веществе. Это значит, что у интенсивности упомянутого выше расширяющегося сферического облака появится дополнительный множитель $\exp(-\xi k_D L)$, где $\xi = \sum_A n_A \left(\frac{4\pi R_A^3}{3}\right)$ – доля объема, занятого каплями.

С учетом (11) получаем условие применимости закона Бугера–Ламберта–Бера в окончательном виде:

$$\frac{I}{I_0} \gg \frac{\rho_0^2}{4L^2} \exp(-\xi k_D L). \quad (12)$$

Выражение (12) было получено для предельного случая (9). При $r \leq l$ левая часть (12) заведомо превосходит правую, поэтому (12) справедливо и при отказе от (9).

Обсуждение результатов

В качестве примера применения формулы (12) обсудим данные, приведенные, в частности, на рис. 2. Типичные параметры оптрона таковы:

$$L = 30 \text{ см}, \rho_0 = 0,7 \text{ см}, \frac{\rho_0^2}{2L^2} \sim 10^{-4}. \quad (13)$$

Для всех использованных нами диспергируемых жидкостей выполнялось соотношение $\exp(-\xi k_D L) \approx 1$. Из (12) и (13) заключаем, что закон (1) справедлив при длине свободного пробега фотонов $l \geq 3 \text{ см}$, что соответствует $S \leq 1 \text{ см}^{-1}$. Согласно рис. 2 характерные для опыта значения составляли $S \sim 1 \text{ м}^{-1} = 0,01 \text{ см}^{-1}$, что подтверждает предположение о применимости закона (1), принятое при обработке данных, приведенных на рис. 2.

Условие (11) было получено для допускающего аналитическое решение случая идеально отражающих капель, что соответствует показателю преломления света $n = \infty$. Проверка применимости условия (12) к реальным жидкостям была проведена нами по методу Монте-Карло. Результаты представлены на рис. 3. Индикатрисы рассеяния света на каплях были рассчитаны в приближении геометрической оптики по методу работ [2, 10]. В оптроне с параметрами (13) рассчитывались траектории

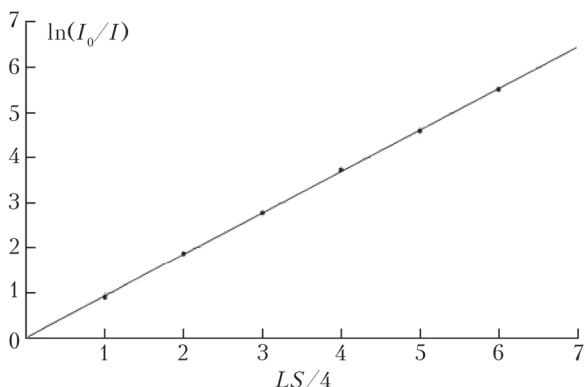


Рис. 3. Зависимость величины I_0/I от $LS/4$ в облаке из жидких аэрозолей с показателем преломления $n = 1,5$ (дизельное топливо, бензин, керосин, мазут)

A.V. Zagnitko, N.P. Zaretsky, L.I. Menshikov, P.L. Menshikov. On the applicability of the Beer–Lambert–Bouguer law for estimating the absorption coefficient of light rays in a cloud of dispersed liquid.

The conditions for applicability of the Bouguer–Lambert–Beer law for aerosol clouds with particles much larger than the photon wavelength are derived in the form of an analytical formula. The corrections to this law due to diffraction scattering and the geometry of a measuring device are estimated. The resulting formula is useful for processing single experiments that cannot be repeated for some reason.

$\sim 10^5$ фотонов, что обеспечивает относительную погрешность в найденной величине I_0/I порядка $1/\sqrt{10^5} \sim 0,3\%$.

Опыту, представленному на рис. 2, соответствует значение $LS/4 \sim 0,1$, которое, как видно из рис. 3, заведомо попадает в область применимости закона Бугера–Ламберта–Бера. Из наклона прямой, описывающей полученную при расчете зависимость, следует, что каплям с $n = 1,5$ и оптрону с параметрами (13) соответствует $\gamma = 0,92$. Для водяного облака ($n = 1,33$) расчет дал значение $\gamma = 0,87$. Отличие γ от единицы объясняется тем обстоятельством, что фотоны, пронизывающие каплю вблизи ее центра, меняют направление своего движения лишь на малый угол и поэтому все-таки попадают в окно светоприемника.

Заключение

Основным результатом данной статьи является соотношение (12). Оно определяет допустимые значения оптических плотностей $\lg(I_0/I)$, при которых удельную поверхность S аэрозолей в облаке можно находить, применяя закона Бугера–Ламберта–Бера (1). Условие (12) полезно в тех случаях, когда по каким-либо причинам невозможны повторные опыты.

Список литературы

1. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 723 с.
2. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами. М.: Иностран. лит., 1961. 537 с.
3. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Оптика. М.: Наука, 1980. 751 с.
4. Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. М.: Иностранная литература, 1953. 432 с.
5. Зуев В.Е., Кабанов М.В. Оптика атмосферного аэрозоля. Л.: Гидрометеиздат, 1987. 255 с.
6. Зуев В.Е. Распространение лазерного излучения в атмосфере. М.: Радио и связь, 1970. 226 с.
7. Розенберг Г.В. Луч света (К теории светового поля) // Успехи физ. наук. 1977. Т. 121, № 1. С. 97–138.
8. Иванов А.П. Оптика рассеивающих сред. Минск: Наука и техника, 1969. 592 с.
9. Mie G. Beitrage zur Optik truber Medien, speziell kolloidaler Metallosungen // Ann. Phys. 1908. V. 330. P. 377–445.
10. Шифрин К.С. Рассеяние света в мутной среде. М.: Л.: ГИЗТТЛ, 1951. 288 с.
11. Донченко В.А., Кабанов М.В., Самохвалов И.В. Отражение узких световых пучков рассеивающей средой // Изв. вузов СССР. Физика. 1974. Т. 4. С. 95–100.
12. Загитко А.В., Мацуков И.Д., Федин Д.Ю., Вельмакин С.М. Лазерный анализатор скорости аэрозольных частиц // ПТЭ. 2019. Т. 4. С. 158–159.