

К.А. Шаповалов

ОБОБЩЕННЫЕ ПАРАМЕТРЫ ДЛЯ ПОЛИДИСПЕРСНОЙ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ИНДИКАТРИСЫ СВЕТОРАССЕЯНИЯ

Рассмотрены обобщенные параметры для интегральной индикатрисы светорассеяния полидисперсной взвеси сферических частиц. На основе полученных аналитических выражений полидисперсной интегральной индикатрисы в приближении Рэлея–Ганса–Дебая проанализированы возможности применения таких параметров для упрощения задачи до монодисперсной взвеси. Приведены результаты расчетов.

Особый интерес в различных областях астрономии, биофизики, химии, медицины представляет рассеяние света на оптически <мягких> частицах, т.е. частицах с показателем преломления, близким к показателю преломления окружающей их среды (относительный показатель преломления $m \rightarrow 1$, или $|m - 1| \ll 1$) [1–3]. Целый класс или группа, состоящая из <мягких> аномальных дифракций (АД), т. е. больших частиц (дифракционный параметр $\rho \gg 1$), достаточно подробно рассмотрена в [4]. В области РГД (Рэлея – Ганса – Дебая, малый фазовый сдвиг $\Delta \ll 1$, $\Delta = kd|m - 1|$, где d – максимальный размер частиц) практически нет работ с применением обобщенных параметров для полидисперсных взвесей сферических частиц.

Данная статья посвящена поиску обобщенных параметров для интегральной индикатрисы светорассеяния сферических частиц в приближении РГД. Под термином интегральная индикатриса понимается доля потока энергии, рассеянной в конус с углом раствора θ , относительно общего светорассеяния.

Используем выражение, которое получено в [5] для интенсивности, рассеянной в конус с углом раствора θ (для одной сферической частицы):

$$\frac{I_0}{\pi a^2} = I_0 |m - 1|^2 \left\{ A + 2\rho^2 + (4b^2 - 2A) \frac{\sin(4\rho b)}{4\rho b} + \left[\frac{\cos(4\rho b) - 1}{(4\rho b)^2} \right] (12b^2 - 2A) + \left(\frac{1}{2\rho^2} - 2 \right) S_1(4\rho b) \right\}, \quad (1)$$

где $A = 2 + b^2 - \frac{1}{2b^2}$; $S_1(x) = \int_0^x \frac{1 - \cos u}{u} du = \ln(x) + \gamma - Ci(x)$, $Ci(x) = \int_x^\infty \frac{\cos u}{u} du$ – интегральный косинус;

$b = \sin(\theta/2)$; $\gamma = 0,577216$ – постоянная Эйлера–Маскерони; a – радиус частицы. Из (1) можно получить выражение для фактора эффективности рассеяния K_p , так как угол раствора $\theta = \pi$, то $b = 1$, т.е.

$$K_p = \frac{k_p}{\pi a^2} = \frac{I_p}{I_0} = I_0 |m - 1|^2 \left\{ \frac{5}{2} + 2\rho^2 - \frac{\sin(4\rho)}{4\rho} + \frac{7}{16\rho^2} [\cos(4\rho) - 1] + \left(\frac{1}{2\rho^2} - 2 \right) S_1(4\rho) \right\}, \quad (2)$$

что совпадает с полученным еще Рэлеем выражением [2, 4, 6].

Интегральная индикатриса $F(2\rho b)$ для РГД-шара представляет собой отношение (1) к (2):

$$F[2\rho \sin(\theta/2)] = (I_\theta/k_p). \quad (3)$$

В дальнейшем используются плотности распределений следующего вида [4, 8]:

а) гамма

$$f(a) = \begin{cases} 0, & a < 0 \\ \frac{\beta^{\mu+1}}{\Gamma(\mu+1)} a^\mu \exp(-\beta a), & a \geq 0, \quad (\mu > -1, \beta > 0), \end{cases} \quad (4)$$

где $\beta = (\mu + 1)/\bar{a}$, (\bar{a} – средний радиус полидисперсной взвеси);
 б) степенное

$$f(a) = \begin{cases} 0, & \text{при } a < a_{\min} \text{ и } a > a_{\max}, \\ \frac{(v-1) a_{\min}}{1-R^{1-v}} a^{-v} = C_v a^{-v}, & \text{при } a_{\min} \leq a \leq a_{\max}, \end{cases} \quad (5)$$

где $R = a_{\max}/a_{\min}$; a_{\min} , a_{\max} – минимальный и максимальный радиусы частиц взвеси. Для получения интегральной индикатрисы полидисперсной взвеси сферических частиц необходимо проинтегрировать выражения (1) и (2) с учетом плотности распределения и площади поперечного сечения частицы. Таким образом,

$$\langle F(\theta) \rangle = \frac{\pi \int_0^{\infty} I_{\theta} f(a) a^2 da}{\pi \int_0^{\infty} K_p f(a) a^2 da} = \frac{\langle I_{\theta} \rangle}{\langle k_p \rangle}. \quad (6)$$

Для получения интегральной индикатрисы $\langle F(\theta) \rangle$ достаточно вычислить в (6) $\langle I_{\theta} \rangle$, а $\langle k_p \rangle = \langle I_{\pi} \rangle$. Поэтому, используя (1) и (4), имеем

$$\langle I_{\theta} \rangle = \frac{\pi I_0 |m-1|^2 \beta^{\mu+1}}{k^{\mu+3} \Gamma(\mu+1)} \int_0^{\infty} \left[A \rho^2 + 2 \rho^4 + (2A - 4b^2) \frac{\sin(4\rho b)}{4b} \rho + \left(\frac{12b^2 - 2A}{16b^2} \right) \times \right. \\ \left. \times (\cos(4\rho b) - 1) + (1/2 - 2\rho^2) S_1(4\rho b) \right] \rho^{\mu} \exp(-\beta/k \rho) d\rho. \quad (7)$$

В (7) также осуществлена замена $\rho = ka$, т.е. интегрирование ведется по ρ , а не по радиусу a .

После интегрирования (7) окончательно получаем выражение для $\langle I_{\theta} \rangle$ в виде конечной суммы элементарных функций [5].

Аналогично можно получить интегральную индикатрису $\langle I_{\theta} \rangle / \langle k_p \rangle$ для степенного распределения (см. [5]).

В качестве обобщенных были выбраны 4 различных параметра. В данном случае для гамма-распределения они имеют вид

$$\begin{aligned} 1. \langle \rho \rangle &= (\mu + 1) (k/\beta) = t_1; \\ 2. \sqrt{\langle \rho^6 \rangle / \langle \rho^4 \rangle} &= \sqrt{(\mu + 5)(\mu + 6)} (k/\beta) = t_2; \\ 3. \sqrt{\langle \rho^4 \rangle / \langle \rho^2 \rangle} &= \sqrt{(\mu + 3)(\mu + 4)} (k/\beta) = t_3; \\ 4. (3/4) k \langle V \rangle / \langle S \rangle &= (\mu + 3) (k/\beta) = t_4, \end{aligned} \quad (8)$$

где k – волновое число.

Обобщенные координаты представлены как $t_i \theta$. Для степенного распределения обобщенные параметры аналогично гамма-распределению имеют вид

$$\begin{aligned} 1. \langle \rho \rangle &= \rho_{\min} \frac{(3-v)(R^{4-v}-1)}{(2-v)(R^{1-v}-1)} = t_1; \\ 2. \sqrt{\langle \rho^6 \rangle / \langle \rho^4 \rangle} &= \rho_{\min} \sqrt{\frac{(5-v)(R^{7-v}-1)}{(7-v)(R^{5-v}-1)}} = t_2; \\ 3. \sqrt{\langle \rho^4 \rangle / \langle \rho^2 \rangle} &= \rho_{\min} \sqrt{\frac{(3-v)(R^{5-v}-1)}{(5-v)(R^{3-v}-1)}} = t_3; \\ 4. (3/4) k \langle V \rangle / \langle S \rangle &= \rho_{\min} \frac{(3-v)(R^{4-v}-1)}{(4-v)(R^{3-v}-1)} = t_4. \end{aligned} \quad (9)$$

Сравнение проведено для наиболее распространенной в экспериментальных распределениях степени 4, а также диапазонов изменения размеров частиц ρ от 5 до 25 и от 5 до 15 [4, 8, 9].

Результаты сравнения показаны в таблице. Здесь сравниваются значения интегральной индикатрисы для одной частицы, рассчитанные по формуле (3), и для распределения сферических частиц, причем значения $t_i \theta$ не превосходят 3, т.е. рассматривается малоугловая область светорассеяния. Относительная погрешность вычисляется по формуле

$$(F_{\text{прибл}} - F_{\text{точен}}) * 100\% / F_{\text{точен}} \quad (10)$$

Из таблицы видно, что для $\langle \rho \rangle$ относительная погрешность в случае гамма-распределения уменьшается при возрастании μ , тем не менее в области $\langle \text{реальных} \rangle$ взвесей, где присутствуют частицы всех размеров, т.е. $\mu < 10$, погрешность достигает минус 60%.

Для 2-обобщенного параметра $\sqrt{\langle \rho^6 \rangle / \langle \rho^4 \rangle}$ ситуация значительно лучше, здесь даже при $\mu = 7$ погрешность не более 12%. Естественно, при возрастании μ она уменьшается, и уже при $\mu = 10$ и тех же условиях погрешность не превосходит 8%.

Для 3-обобщенного параметра $\sqrt{\langle \rho^4 \rangle / \langle \rho^2 \rangle}$, выбранного из условия минимизации погрешности $\langle k_p \rangle$, при $\mu = 7$ погрешность менее минус 30%.

Для 4-обобщенного параметра $k \langle V \rangle / \langle S \rangle$, характеризующего отношение среднего объема к среднему сечению частиц взвеси, погрешность невелика: при $\mu < 10$ не более $-35 \div -30\%$, хотя при дальнейшем увеличении μ погрешность существенно не уменьшается.

Т а б л и ц а

Максимальная относительная погрешность интегральной индикатрисы одной частицы по сравнению с гамма- и степенным распределением сферических частиц в обобщенных координатах

Распределение	Обобщенный параметр			
	$\langle \rho \rangle$	$\sqrt{\langle \rho^6 \rangle / \langle \rho^4 \rangle}$	$\sqrt{\langle \rho^4 \rangle / \langle \rho^2 \rangle}$	$\frac{3}{4} k \langle V \rangle / \langle S \rangle$
Гамма				
$\mu = 7, \beta = 0,1$	- 59%	12%	- 30%	- 35%
$\mu = 10, \beta = 0,1$	- 49%	8%	- 24%	- 29%
Степенное				
$\nu = 4, \rho_{\min} = 5, \rho_{\max} = 25$	- 80%	+ 18%	- 51%	- 32%
$\nu = 4, \rho_{\min} = 5, \rho_{\max} = 15$	- 57%	+ 10%	- 33%	+ 17%

Для степенного распределения изменение относительной погрешности имеет аналогичный характер. Очевидно также, что при уменьшении ρ_{\max} , т.е. при стремлении к монодисперсной взвеси, погрешность существенно падает по абсолютной величине.

Таким образом, учитывая результаты сравнения, можно сказать, что только 2-обобщенный параметр $\sqrt{\langle \rho^6 \rangle / \langle \rho^4 \rangle}$ позволяет в малоугловой области достичь минимальной погрешности по сравнению с индикатрисой одной частицы, а самый $\langle \text{естественный} \rangle$ параметр $\langle \rho \rangle$ – средний размер частиц – дает грубое приближение. Однако надо заметить, что в ходе сравнения нигде не учитывается относительный показатель преломления (так как $m = 1$). Влияние последнего фактора приведет к существенному уменьшению относительной погрешности, что и позволит использовать в практических исследованиях средний размер частиц $\langle \rho \rangle$ с погрешностью около 30% [4].

1. Сидько Ф. Я., Лопатин В. Н., Парамонов Л. Е. Поляризационные характеристики взвесей биологических частиц. Новосибирск: Наука, 1990. 120 с.
2. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами. М.: Изд-во иностр. литературы, 1961. 536 с.
3. Гринберг М. Межзвездная пыль. М.: Мир, 1970. 199 с.
4. Лопатин В. Н., Сидько Ф. Я. Введение в оптику взвесей клеток. Новосибирск: Наука, 1988. 240 с.
5. Шаповалов К. А. Обобщенные параметры для полидисперсной интегральной индикатрисы светорассеяния в приближении Рэлея-Ганса-Дебая. Красноярск. 1993. 37 с. (Препринт/Ин-т биофизики СО РАН, N 199Б).
6. Шифрин К. С. Рассеяние света в мутной среде. М.; Л.: Гостехтеоретиздат, 1951. 288 с.
7. Керкер М. The scattering of light and other electromagnetic radiation/ N. Y.; London: Academy Press, 1969-666 P.
8. Шифрин К. С. Введение в оптику океана. Л.: Гидрометеониздат, 1983. 277 с.
9. Иванов А. Введение в океанографию. М.: Мир, 1978. 574 с.

Институт биофизики СО РАН,
г. Красноярск

Поступила в редакцию
29 июля 1993 г.

K.A. Shapovalov. Generalized Parameters for a Polydisperse Integral Scattering Phase Function.

Generalized parameters for integral scattering phase function of a polydisperse suspension of spherical particles are considered. A possibility of using such parameters to reduction of the problem to a monodisperse suspension is analyzed based on obtained analytical expressions for a polydisperse integral phase function in Rayleigh–Gans–Debye approximation. Some numerical results are presented.