

C/H₂O 复合微粒子的光学截面 及发射率光谱计算*

汤大新 武志坚** 潘守甫

(吉林大学原子与分子物理所, 长春, 吉林, 130023)

摘要——使用 A. L. Aden 和 M. Kerker 理论计算了 C/H₂O 复合微粒子在 1.0~10.0 μm 红外波段的吸收、散射、消光截面及发射率光谱, 给出了吸收、消光截面与碳粒子半径和水层厚度关系曲线, 研究了发射率与碳粒子半径和水层厚度的关系。

关键词——微复合粒子, 光学截面, 发射率。

1. 基本理论

本文研究 C/H₂O 复合微粒子的吸收截面、消光截面和发射率光谱与核心碳粒子半径及水层厚度的关系。

早在 1908 年, Mie 就解决了单一介质的孤立球状粒子对电磁波的散射问题。1951 年, A. L. Aden 和 M. Kerker^[1] 又独立地给出了球形复合微粒子的散射截面和消光截面, 分别为

$$Q_{sca} = \frac{2\pi}{K_3^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n^s| + |b_n^s|)^2, \quad (1)$$

$$Q_{ext} = \frac{2\pi}{K_3^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) R_e(a_n^s + b_n^s). \quad (2)$$

式中, K_3 是电磁波在空气中的波矢量, a_n^s 和 b_n^s 是散射波的系数, 分别有

$$b_n^s = -\frac{\eta_n^{(1)}(\nu) A_1 + Y_3 Z_n^{(1)}(\nu) A_2}{\eta_n^{(3)}(\nu) A_1 + Y_3 Z_n^{(3)}(\nu) A_2}, \quad (3)$$

$$a_n^s = -\frac{Z_n^{(1)}(\nu) A_3 + Y_3 \eta_n^{(1)}(\nu) A_4}{Z_n^{(3)}(\nu) A_3 + Y_3 \eta_n^{(3)}(\nu) A_4}. \quad (4)$$

其中 $Y_l = \sqrt{\frac{\epsilon_l}{\mu_l}}$, $l=1, 2, 3$ 代表电磁波所在区域(核心粒子为第 1 区, 复合层为第 2 区, 复

* 本文 1989 年 8 月 23 日收到, 修改稿 1989 年 12 月 11 日收到。

** 国家自然科学基金资助课题。

** 中国科学院长春应用化学研究所, 吉林, 长春, 130022。

合粒子以外为第 3 区), ε 是介电常数, μ 是磁导率, A_1 、 A_2 、 A_3 和 A_4 是与复变量第一类球贝塞尔函数及第一类球汉克尔函数相关的函数^[1], 并有

$$\begin{cases} \eta_n^{(1)}(\nu) = (\nu Z_n^{(1)}(\nu))' / \nu, \\ \eta_n^{(3)}(\nu) = (\nu Z_n^{(3)}(\nu))' / \nu. \end{cases} \quad (5)$$

这里撇号代表导数, $Z_n^{(1)}(\nu)$ 是第一类球贝塞尔函数, $Z_n^{(3)}(\nu)$ 是第一类球汉克尔函数。

由能量守恒, 得吸收截面

$$Q_{\text{obs}} = Q_{\text{ext}} - Q_{\text{scat}}. \quad (6)$$

从发射率基本定义可推出 $\varepsilon = Q_{\text{obs}} / \pi b^2$ ^[2], 这里 b 是整个复合微粒子半径, πb^2 是复合粒子的几何截面。

由于 A.L. Aden 和 M. Kerker 理论涉及大量的计算, 因此在电子计算机问世以后才得以应用。为了检验程序的正确性, 我们复算了 A. B. Pluchino 单个水滴^[3] 和 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{C}$ 复合微粒子^[3] 的发射率光谱, 结果完全相符。本工作中复折射率是重要的物理量, 取自文献[4]和[5]。

2. 结果与讨论

2.1 吸收、消光截面与碳粒子半径及水层厚度的关系

图 1 (a)~(d) 是入射波长 λ 在 1.0、3.0、5.0 和 7 μm 及水层厚度 τ 分别为 1.0、2.0 和 3.0 μm 时碳-水复合微粒子的吸收、消光截面与碳粒子半径的关系曲线。图中虚线为消光截面, 实线为吸收截面。在这些曲线中, 可以总结出以下规律:

(1) 在固定水层厚度及波长情况下, 随着碳粒子半径的增加, 吸收、消光截面呈上升趋势, 且消光截面总是大于相应的吸收截面;

(2) 在同一波长, 在碳粒子半径不变的情况下, 消光截面随水层厚度增加而增大, 而吸收截面仅当波长大于 1.0 μm 时才有上述规律; 图 2 是放大的波长为 1 μm 、碳粒子半径为 0.1~2.3 μm 时的吸收截面, 可看出水层厚度为 3.0 μm 的吸收截面小于水层厚度为 1.0 μm 的吸收截面;

(3) 消光截面有振荡现象出现, 并且这种振荡现象随波长增大逐渐消失, 而吸收截面则没有;

(4) 在入射波长与水分子特征吸收峰(3.0、6.2 μm)一致时, 没有上述振荡现象, 此时吸收截面的起始值很高, 并随碳粒子半径的增加上升很快, 在水分子特征振动频率之外没有发现这种情况。

2.2 发射率光谱

图 3 是复合粒子半径均为 3.0 μm 时的发射率与波长的关系曲线, 为便于比较, 也计算了半径为 3.0 μm 的单个碳粒子和单个水滴的发射率曲线。在以下各发射率光谱中, b 表示整个复合粒子半径, a 表示核心碳粒子半径, τ 表示复合水层厚度。从图 3 中可以看出, 当碳粒子表面的复合水层较薄时(例如 $\tau = 0.05 \mu\text{m}$ 和 $\tau = 0.1 \mu\text{m}$), 水的特征(主要表现为特征峰)并不很明显, 曲线显示的基本上是碳的特征, 只是在 3.0 μm 附近略微显示出水的特征峰的迹象, 此时发射率较碳有所增高。随着水层增厚, 水的特征逐渐明显, 特征峰变得愈来愈

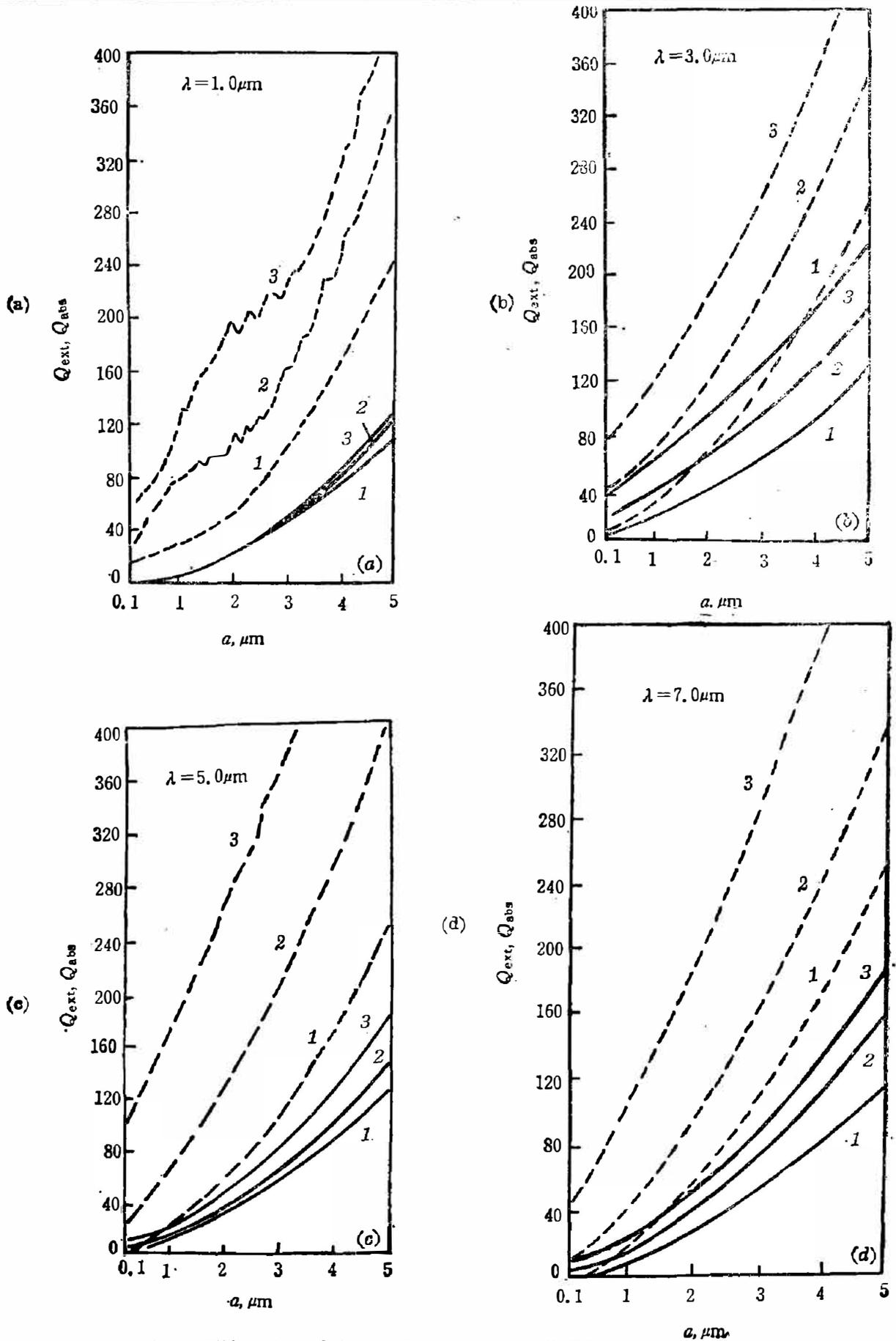


图 1 不同波长下碳-水复合粒子的消光和吸收截面与碳粒子半径的关系
(曲线 1、2、3 分别对应 $\tau=1.0, 2.0, 3.0 \mu\text{m}$)

Fig. 1 Extinction and absorption cross sections for water-carbon composite particles as a function of radius of carbon particle.

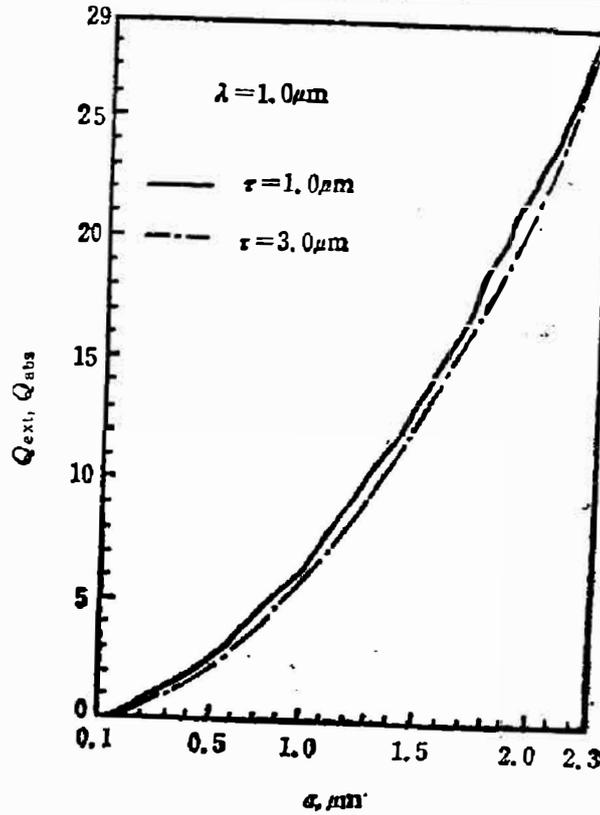


图 2 碳-水复合粒子的吸收截面与碳粒子半径关系局部放大
 Fig. 2 Absorption cross section enlarged for water-carbon composite particles as a function of carbon particle radius.

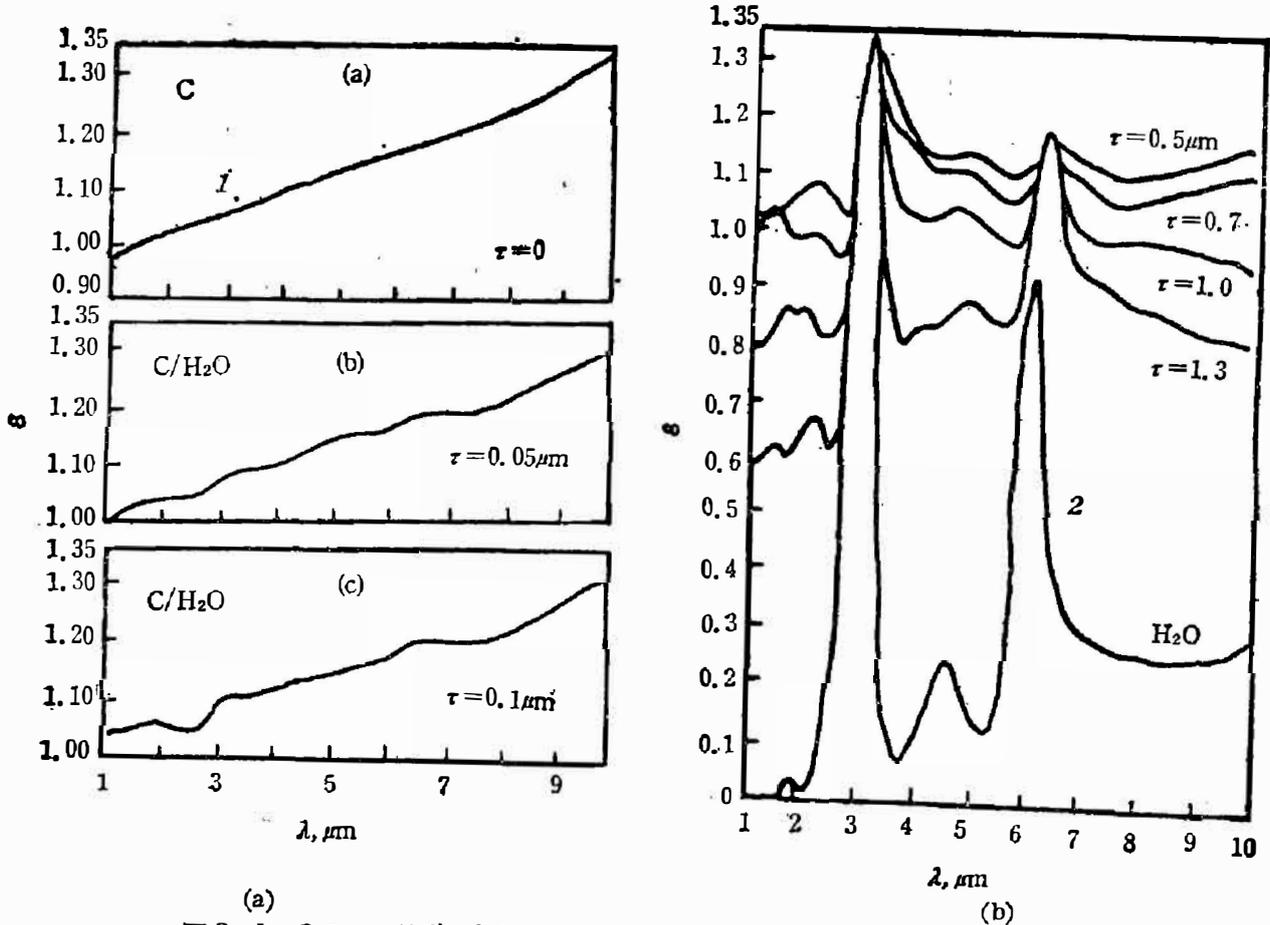


图 3 $b=3.0 \mu\text{m}$ 的碳-水复合粒子的发射率光谱(曲线 1 为纯碳, 2 为纯水)
 Fig. 3 Emissivity spectra for water-carbon composite particles with $b=3.0 \mu\text{m}$.

愈尖锐,整个发射率光谱与碳相比逐渐降低,但仍要比纯水高出许多。

图 4 是固定碳粒子半径 a 为 $2.0\mu\text{m}$, 水层厚度 τ 分别为 0.5 、 1.0 、 1.5 和 $2.0\mu\text{m}$ 时碳-水复合微粒子的发射率与波长的关系曲线。

图 5 是固定水层厚 τ 为 $1.0\mu\text{m}$, 碳粒子半径 a 分别为 1.0 、 2.0 和 $3.0\mu\text{m}$ 时的发射率与波长关系曲线。

在图 4、5 中存在与图 3 相似的特征。此外,在图 3、4、5 中有一个共同特点,即在 $1.0\sim 3.0\mu\text{m}$ 区间除了一个水的特征峰之外还出现了新的峰,其强度和位置与粒子尺寸和水层厚度有关。这是复合粒子与电磁波相互作用的结果。A. B. Pluchino^[3] 在 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{C}$ 复合微粒子的辐射光谱计算中,曾发现周期性振荡峰,他认为这些周期性振荡峰是由磁多极系数和电多极系数产生的。在 $\text{C}/\text{H}_2\text{O}$ 复合微粒子计算中,这种振荡仅出现在 $1.0\sim 3.0\mu\text{m}$ 区间,其主要原因是当 $\lambda > 3.0\mu\text{m}$ 时水有相当强的吸收,足以掩盖这种振荡,另一方面这种振荡的强度是随波长的增加而减弱的。

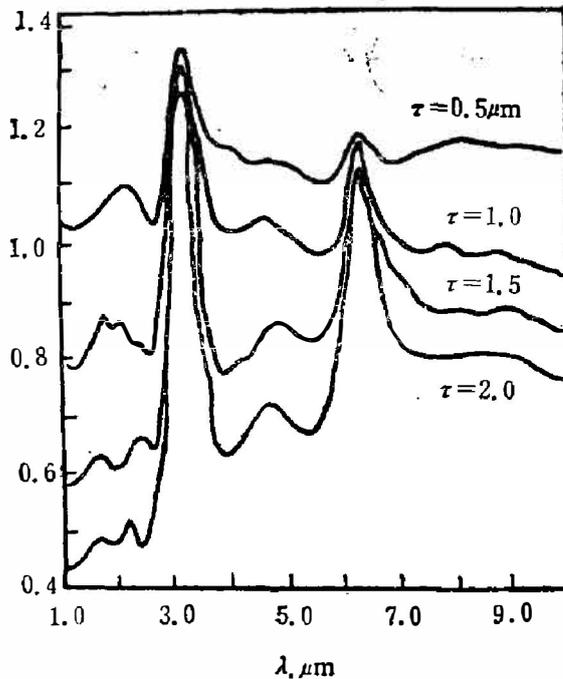


图 4 碳-水复合粒子发射率光谱

Fig. 4 Emissivity spectra for water-carbon composite particles.

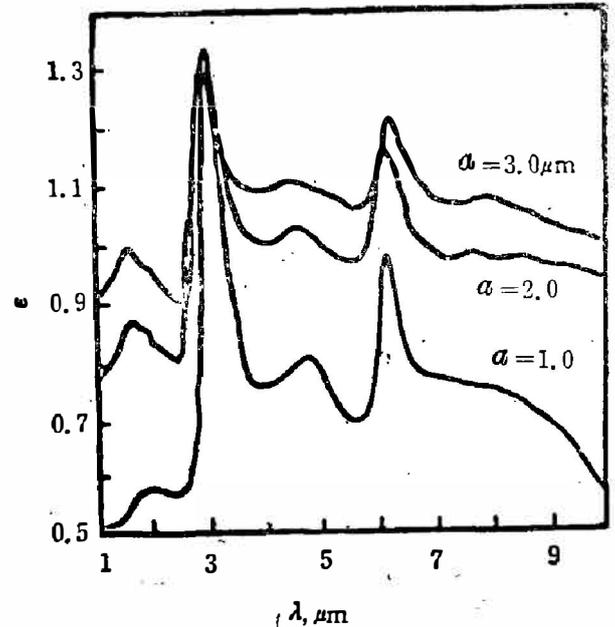


图 5 碳-水复合粒子发射率光谱

Fig. 5 Emissivity spectra for water-carbon composite particles.

参 考 文 献

- [1] Aden A. L. and Kerker M., *J. Appl. Phys.*, **22**(1951), 10: 1242.
- [2] Pluchino A. B., *Appl. Opt.*, **18**(1979), 4065.
- [3] Pluchino A. B., *Appl. Opt.*, **20**(1981), 531.
- [4] Jr. Whitson, M. E., *Handbook of the Infrared Optical Properties of Al₂O₃, Carbon, MgO and ZrO₂*, SAMSO-TR-75-131, 1975.
- [5] Hale G. M., Query M. R., *Appl. Opt.*, (1973), 555.

THEORETICAL CALCULATIONS OF OPTICAL CROSS SECTIONS AND EMISSIVITY SPECTRA FOR C/H₂O COMPOSITE MICROSCOPIC PARTICLE*

TANG DAXIN, WU ZHIJIAN**, PAN SHOUPU

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, 130023, Changchun, Jilin, China)

ABSTRACT

The absorption, scattering, extinction cross sections and emissivity spectra in the infrared range from 1.0~10.0 μ m for C/H₂O composite microscopic particles are calculated using Aden and Kerker's theory. Curves for absorption, extinction cross sections and emissivity as a function of carbon particle radius and water layer thickness are given. The analysis and discussion for them are presented.

* The project supported by National Natural Science Foundation of China.

** Changchun Institute of Applied Chemistry, Academia Sinica, Changchun, Jilin 130022 China.