

# H<sub>2</sub>O/C 复合微粒子的光学截面及 红外发射率光谱的计算\*

汤大新

(吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林, 长春, 130023)

田贵财

(通化师范学院物理系, 吉林, 通化, 134002)

武志坚

(中国科学院长春应用化学研究所, 吉林, 长春, 130022)

在文献[1]的基础上, 利用 A. L. Aden 和 M. Kerker 复合粒子 Mie 散射理论, 计算了 H<sub>2</sub>O/C 复合微粒子的散射、吸收、消光截面及发射率光谱, 并与 C/H<sub>2</sub>O 和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/C 复合微粒子的结果进行比较和讨论。

关键词: 复合微粒子, 光学截面, 发射率。

## 1 引言

大气中各种类型的悬浮微粒子能引起对辐射的吸收和散射。随着工业的发展, 越来越多的复合型微粒子出现在大气中, 因此对复合微粒子光学性质的研究近年来引起人们的极大注意。在文献[1]中, 我们曾利用 A. L. Aden 和 M. Kerker 理论<sup>[2]</sup>研究了 C/H<sub>2</sub>O 复合微粒子的红外光学性质。考虑到形成雾与云的水滴半径一般分布在 1.0~15 μm 之间, 而大气中悬浮着的碳等固体气溶胶粒度分布则十分广泛, 凝固核的半径可以小到不足 10<sup>-3</sup> μm。因此, 悬浮在大气中的碳粒子与大气中的水蒸气相迁时, 除了形成以碳为凝聚核的 C/H<sub>2</sub>O 复合微粒子外<sup>[1]</sup>, 还形成以水滴为凝聚核的 H<sub>2</sub>O/C 复合微粒子。因此, 研究 H<sub>2</sub>O/C 复合微粒子的光学性质同样是非常必要的。

## 2 理论

设 H<sub>2</sub>O/C 复合微粒子为理想同心球结构, 如图 1 所示。平面偏振光沿轴正向传播, 入射到一个同心的复合介质球上, 1 区为纯水介质, 2 区为纯碳介质, 3 区为空气, 入射电场  $\vec{E}_i$  方向选为  $x$  轴正向。

本文 1990 年 3 月 20 日收到, 修改稿 1990 年 7 月 7 日收到。

\* 国家自然科学基金资助项目。

根据这一模型, A. L. Aden 和 M. Kerker<sup>[2]</sup> 在 Mie 散射理论基础上, 分别给出了复合球形微粒子的散射截面  $Q_s$ 、吸收截面  $Q_a$  和消光截面  $Q_e$ :

$$Q_s = \frac{2\pi}{K_3^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) R_n(a_n^2 + b_n^2); \quad (1)$$

$$Q_a = \frac{2\pi}{K_3^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n^2| + |b_n^2|); \quad (2)$$

$$Q_e = Q_s - Q_a; \quad (3)$$

式(1)~(3)中  $K_3$  为 3 区的波矢量,  $a_n^2$  代表电多极系数,  $b_n^2$  代表磁多极系数, 具体表达式见参考文献[2].

由发射率的定义, 进而可以推导出复合粒子的发射率表达式<sup>[4, 5]</sup>:

$$\varepsilon = Q_a / \pi R^2, \quad (4)$$

式(4)中  $\pi R^2$  为复合粒子的几何截面.

根据式(4), 我们运用与文献[1]中相同的程序, 研究了  $H_2O/C$  复合微粒子的散射截面、吸收截面、消光截面和发射率光谱对粒子粒度、复合层厚度和入射波长的依赖关系.

### 3 $H_2O/C$ 复合微粒子的消光截面与吸收截面

图 2(a)和图 2(b)是入射电磁波波长  $\lambda$  为  $1.0 \mu m$  和  $5.0 \mu m$ , 碳膜厚度  $\tau$  为  $1.0 \mu m$ 、 $2.0 \mu m$  和  $3.0 \mu m$  时,  $H_2O/C$  复合微粒子的消光截面与吸收截面与水核心粒子半径的关系曲线. 图中横坐标  $r$  为水滴半径, 纵坐标为光学截面, “a”曲线为吸收截面曲线( $Q_a$ ), “e”曲线为消光截面曲线( $Q_e$ ).

从上述曲线可知, 在固定碳膜厚度( $\tau$ )和入射电磁波波长  $\lambda$  情况下, 随水滴半径的增加, 吸收截面及消光截面均增大, 而且消光截面总是大于相应的吸收截面; 这是由于消光截面中除了有吸收截面的贡献之外, 还有散射截面的贡献. 当固定水滴半径及入射电磁电波波长时, 随碳膜厚度增加, 吸收截面和消光截面也增大.

A. B. Pluchino 在对  $Al_2O_3/C$  复合微粒子的研究中曾发现<sup>[3]</sup>, 在碳膜厚度与粒子半径相比很簿的情况下, 复合粒子的发射率曲线呈现出周期性的共振现象, 并根据 Mie 理论分析认定, 周期性共振强峰与弱峰分别是由吸收截面表达式中的磁多极系数和电多极系数产生的. 并且有人在实验中也观测到此类现象. 为此, 我们分别选取碳膜厚度  $\tau = 0.005 \mu m$  和  $0.01 \mu m$  两种情况作了计算, 其结果如图 2(c)、(d)所示, 图 2(d)中 D 为 C 的局部放大图. 我们对图 2(c)和 2(d)与图 2(a)和 2(b)进行比较, 发现有较大差异. 首先, 在图 2(c)和 (d)中虽然两个复合层厚度相差近一个数量级(在图 2(a)、(b)中复合层厚度仅差  $1 \mu m$ ), 但在各入射波长下, 它们的吸收截面与消光截面分别十分靠近, 不象  $\tau = 1.0, 2.0$  和  $3.0 \mu m$  时, 这些曲线明显地分开. 这说明, 当碳复合层厚度簿到一定程度时, 碳复合层对光学截面的影响变得不重要了. 其次值得注意的是, 在入射电磁波波长从  $9.0 \mu m$  变到  $1.0 \mu m$  时, 消光截面不呈指数式增长, 而呈起伏式增长趋势, 但其吸收截面变化趋势没有明显变化(见

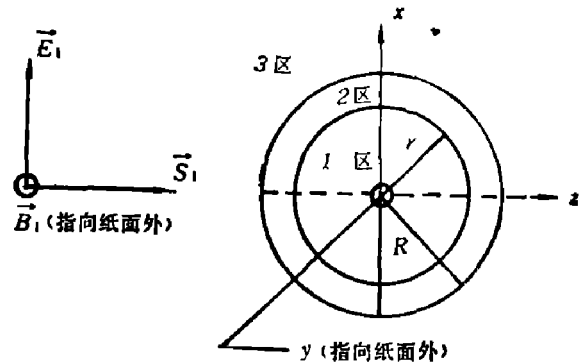


图 1 理想同心球结构图

Fig.1 The sphere structure with an ideal concentric spherical shell

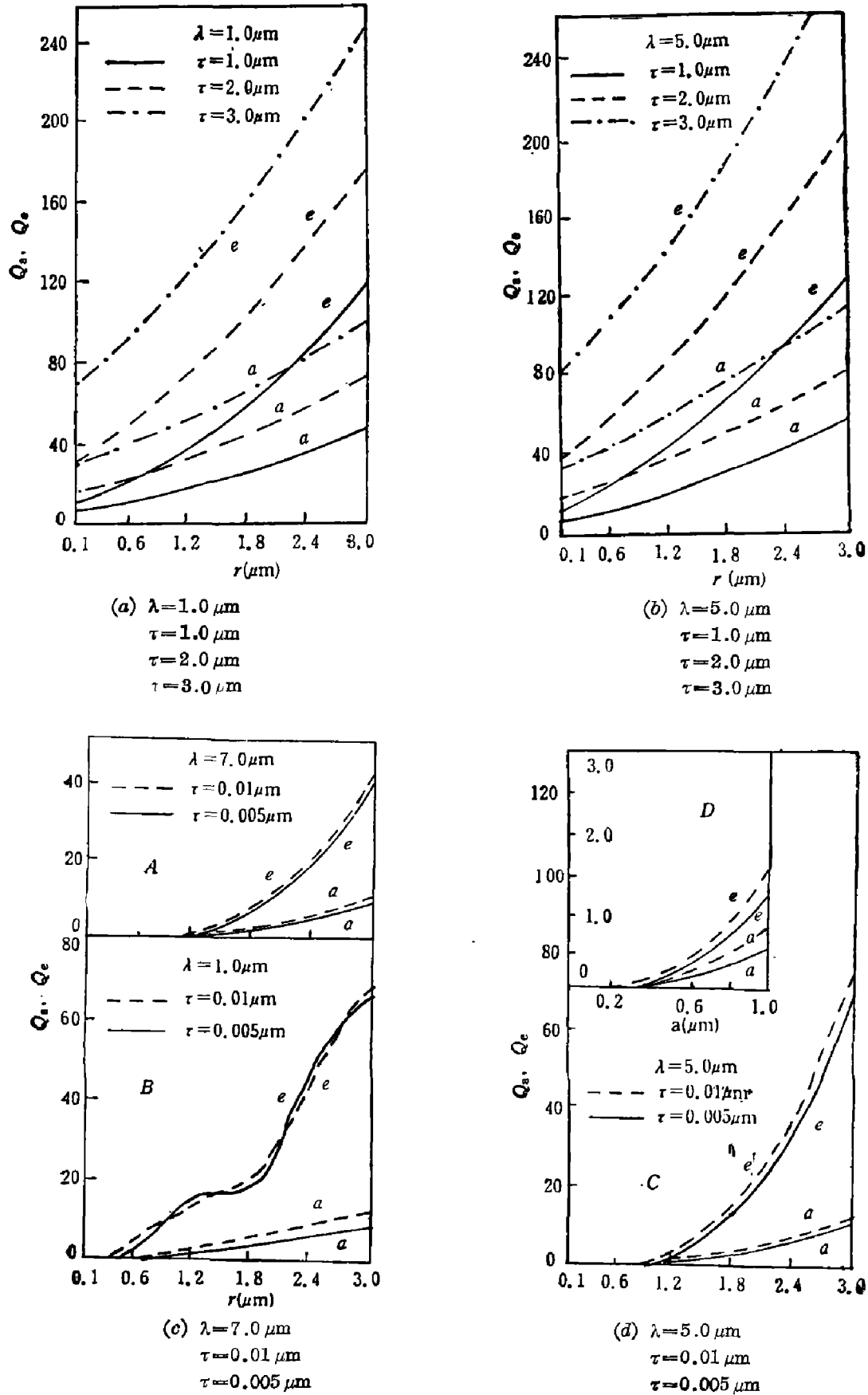


图 2.  $H_2O/C$  复合微粒子的吸收截面和消光截面与核心水滴半径的关系曲线  
 Fig.2 The curves of dependence of absorption cross section( $Q_a$ ) and extinction cross section( $Q_e$ ) on central water drop radius

图 2(c)B 中的曲线 e)。考虑到  $Q_e = Q_a + Q_s$ , 说明此时散射截面变得复杂。此外, 在  $H_2O$  核心粒子半径  $r = 0.8, 1.5, 2.3$  和  $2.8 \mu m$  处, 两条 e 的截面曲线相交, 即两者有相同的消光截面(见图 2(c)B)。

#### 4 $H_2O/C$ 复合微粒子的红外发射率光谱

图 3 是  $H_2O/C$  复合微粒子半径 ( $R = 3.0 \mu m$ ) 不变, 而改变碳膜厚度  $\tau$  的情况下, 得到的发射率与波长之间的关系曲线。为了便于比较, 计算了半径为  $3.0 \mu m$  的碳和水滴的发射光谱(见图 3 中 C 和  $H_2O$  光谱曲线)。从图 3 中可见, 当碳膜较薄时, 凝聚核水的特征比较明显, 其发射率较单个水滴的发射率有明显增加, 水的两个特征峰 ( $3.05 \mu m$  和  $6.1 \mu m$ ) 强度较单个水滴有所减小。随碳层厚度增加, 以上特征愈加明显, 当  $\tau > 0.7 \mu m$  时, 水的特征全部消失, 全部变成碳的特征。

上述特点与 A. B. Pluchino 计算过的  $Al_2O_3/C$  及我们计算过的  $O/H_2O$  复合微粒子均有较大差异。在  $Al_2O_3/C$  复合微粒子中, 碳层对发射率的影响比  $H_2O/C$  复合微粒子大得多。在  $Al_2O_3/C$  中, 当碳层厚度增加到  $0.01 \mu m$  时, 发射率就可提高 3~4 个数量级, 并且在发射率曲线上出现明显的周期共振峰。在我们计算过的  $O/H_2O$  复合微粒子中, 粒子的半径也是  $3.0 \mu m$ , 在水层厚度从  $1.3 \mu m$  改变到  $0.1 \mu m$  过程中, 始终能看到水分子的振动特征。

在图 3 中, 我们还发现, 在碳层厚度位于  $0.1 \sim 0.3 \mu m$  之间时,  $H_2O/C$  复合微粒子发射光谱在  $1.4 \mu m, 1.8 \mu m$  和  $7.2 \mu m$  等处出现新的峰值。随碳层增厚, 这些峰与水分子的特征振动峰逐步合并, 从而使整个辐射光谱基线升高。并且合并后的峰值位置向长波方向移动。当碳层厚度  $\tau = 1.3 \mu m$  时, 整个曲线与纯碳粒子非常相似。

图 4 为凝聚核水的半径 ( $r = 2.0 \mu m$ ) 不变, 而改变碳层厚度  $\tau$ , 所得到的发射率光谱。其特征与图 3 相类似。随着碳层厚度增加, 凝聚核水的光谱特征逐渐消失。与图 3 不同的是在  $\tau = 0.2 \sim 0.3 \mu m$  时, 在  $7.0 \sim 10.0 \mu m$  波段上发射率增加很快, 当  $\tau > 0.5 \mu m$  时, 又逐渐降下来。图 5 是碳层厚度不变, 水凝聚核半径为  $1.0, 2.0$  和  $3.0 \mu m$  时,  $H_2O/C$  复合微粒子的发射率光谱。由图 5 可见, 随着碳所占复合粒子比例的增加, 水的特征逐渐变得不明显, 碳的红外发射特征愈加显著, 并且整个发射率都在提高, 尤其在  $7.0 \sim 10 \mu m$  波段上更为明显。

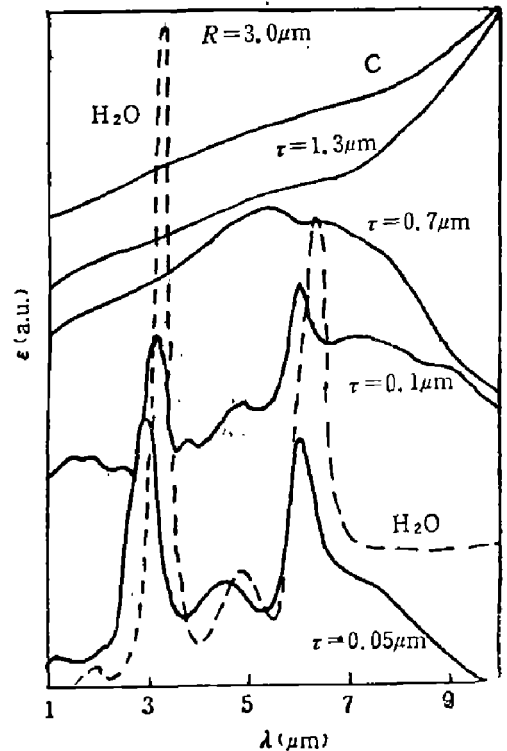
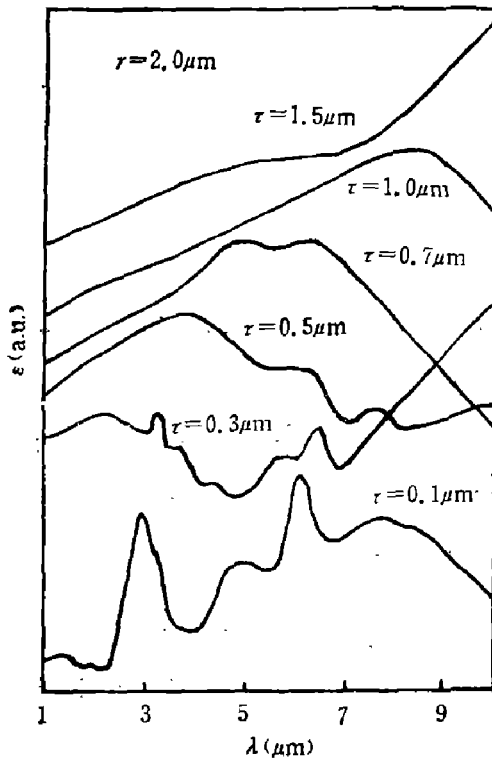


图 3  $R = 3.0 \mu m$ , 碳层厚度  $\tau = 0.05, 0.10, 0.70$  和  $1.30 \mu m$  时  $H_2O/C$  复合微粒子的发射率光谱

Fig.3 Emissivity spectra of  $H_2O, C$  and  $H_2O/C$  composite particles with carbon layer thickness  $\tau = 0.05, 0.10, 0.70$  and  $1.30 \mu m$



4 当水凝聚核半径  $r=2.0 \mu\text{m}$ , 碳层厚度  $\tau=0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$  和  $1.5 \mu\text{m}$  时, H<sub>2</sub>O/C 复合微粒子的发射光谱

Fig. 4 Emissivity spectra of H<sub>2</sub>O/C composite microparticle with central water drop radius  $r=2.0 \mu\text{m}$  and carbon layer thickness  $\tau=0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$  and  $1.5 \mu\text{m}$

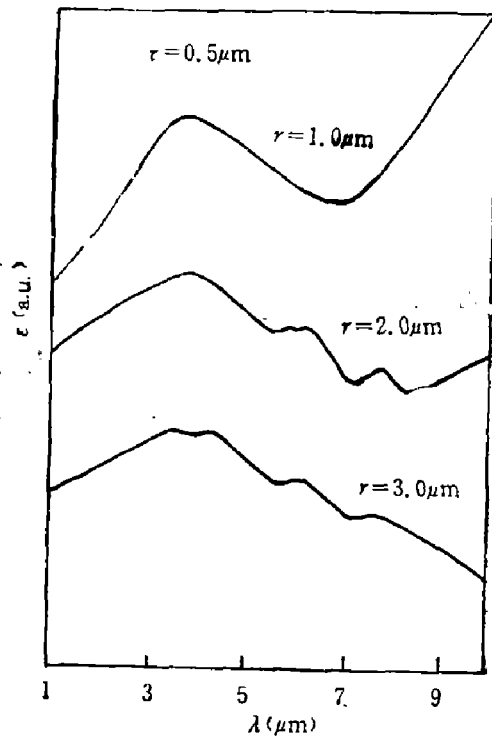


图5 碳层厚度  $\tau=0.5 \mu\text{m}$ , 凝聚核水的半径  $r=1.0, 2.0, 3.0 \mu\text{m}$  时 H<sub>2</sub>O/C 复合微粒子的发射率光谱

Fig. 5 Emissivity spectra of H<sub>2</sub>O/C composite microparticle with carbon layer thickness  $\tau=0.5 \mu\text{m}$  and central water drop radius  $r=1.0, 2.0$  and  $3.0 \mu\text{m}$

### 参 考 文 献

- 1 汤大新, 武志坚, 潘守甫. 红外研究, 1990; 9(6): 463
- 2 Aden A L, Kerker M. *Journal of Applied Physics*, 1951; 22: 1242
- 3 Pluchino A B. *Appl. Opt.*, 1981; 20(4): 531
- 4 Kattawar G W, Eisner M. *Appl. Opt.*, 1970; 9: 2685
- 5 Pluchino A B. *Appl. Opt.*, 1979; 18: 4065

# CALCULATION OF OPTICAL CROSS SECTIONS AND INFRARED EMISSIVITY SPECTRA OF H<sub>2</sub>O/C COMPOSITE MICROPARTICLE

TANG DAXIN

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

TIAN GUICHAI

*(Department of Physics, Tonghua Normal College, Tonghua, Jilin 134002, China)*

WU ZHIJIAN

*(Institute of Applied Chemistry, Academic Sinica, Changchun, Jilin 130022, China)*

Based on the previous paper of Tang Daxin et al. the extinction cross section, absorption cross section and emissivity spectra of H<sub>2</sub>O/C composite microparticles have been calculated by using Aden's and Kerker's theory of Mie scattering. The results are discussed and compared with those of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/C and C/H<sub>2</sub>O.

**Key words:** composite microparticles, optical cross sections, emissivity.