

УДК 535.434, 535.21

ОПТИЧЕСКОЕ ПОЛЕ В ЦЕНТРЕ СФЕРЫ

Н. Н. Белов, Н. Г. Белова*

Научно-исследовательская компания АТЕСН КФТ, 1126 Будапешт, Венгрия

* ТОО “Аэрозоль Технология”, 119285 Москва

Приведена точная формула для определения интенсивности оптического поля в центре сферической частицы любого радиуса, полученная раскрытием неопределенности типа 0/0 теории Ми для компонентов электрического поля в центре сферы. Формула справедлива для произвольных значений комплексного показателя преломления материала частицы и длины волны падающего излучения. Найдены аппроксимация для больших частиц и две аппроксимации для частиц размером менее 10^{-4} см. Полученное решение для интенсивности оптического поля в центре малых частиц совпадает с классической формулой Лоренца для локального поля.

Теория Ми не позволяет рассчитать интенсивность оптического поля в центре сферической частицы, так как в этом случае в рядах Ми возникает неопределенность типа 0/0. В работе [1] получены точные соотношения для расчета интенсивности оптического поля в центре сферической частицы с использованием сферических функций Риккати — Бесселя первого и третьего рода первого порядка и их производных.

В настоящей работе предлагается точное решение указанной проблемы с использованием только элементарных тригонометрических функций и алгебраических соотношений. Найдены аппроксимации зависимости интенсивности оптического поля в центре частицы от ее радиуса, показателя преломления и длины волны падающего излучения. Показано, что в пределе полученное решение совпадает с формулой Лоренца для локального поля в случае малых частиц.

В работе [1] показано, что интенсивность I_{i0} оптического поля в центре сферической частицы, отнесенная к интенсивности падающей волны, имеет вид

$$I_{i0} = E_0^{-2} |C|^2, \quad (1)$$

где

$$C = im / [\xi_1(\rho)\psi_1'(m\rho) - m\xi_1'(\rho)\psi_1(m\rho)]; \quad (2)$$

$$\psi_1(m\rho) = \frac{\sin(m\rho)}{m\rho} - \cos(m\rho), \quad \psi_1'(m\rho) = -\sin(m\rho) \left(\frac{1}{(m\rho)^2} - 1 \right) + \frac{\cos(m\rho)}{m\rho}, \quad (3)$$

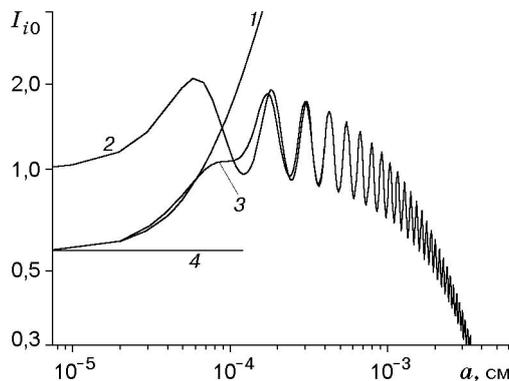
$$\xi_1(\rho) = -(1 - i/\rho) \exp(-i\rho), \quad \xi_1'(\rho) = -(i/\rho^2 - 1/\rho - i) \exp(-i\rho),$$

$m = n - i\kappa$ — комплексный показатель преломления материала сферической частицы; $\rho = 2\pi a/\lambda$ — параметр дифракции частицы; a — радиус частицы; λ — длина волны излучения, падающего на частицу; $\psi(z)$, $\xi(z)$, $\psi'(z)$, $\xi'(z)$ — сферические функции Риккати — Бесселя первого и третьего порядка и их производные.

Подставляя (3) в (2) и приводя подобные члены, получаем

$$C = im / [C_1 \sin(\rho m) + C_2 \cos(\rho m)]; \quad (4)$$

$$C_1 = -1 + \frac{1/m^2 - 1}{\rho^2} + i \frac{1 - 1/m^2}{\rho^3}, \quad C_2 = im - \frac{1 - i/\rho}{m\rho} + im \frac{1 - 1/\rho}{\rho}. \quad (5)$$



Расчет относительного оптического поля излучения с длиной волны 3,4483 мкм в центре частиц воды ($n = 1,4 - 0,0124i$):

1 — аппроксимация (9), (10) для малых частиц; 2 — аппроксимация (1), (6) для больших частиц; 3 — расчет по теории Ми вблизи центра частицы и по формулам (1), (4), (5); 4 — результаты расчета оптического поля в объеме малых частиц по формулам (1), (7)

Формула (1) с коэффициентами (4), (5) дает точное решение для интенсивности оптического поля в центре частиц любого радиуса без ограничений на значения комплексного показателя преломления материала частицы и длины волны падающего лазерного излучения.

Для проверки правильности полученного соотношения выполнены расчеты оптического поля по теории Ми в точке, находящейся на расстоянии от центра менее 0,1 нм. Оказалось, что такого малого отклонения от центра достаточно для того, чтобы теория Ми могла быть применена для расчета компонентов электромагнитного поля без опасности возникновения неопределенности типа 0/0. Очевидно, что смещение расчетной точки от центра на расстояние, равное 0,1 нм, не приведет к изменению интенсивности оптического поля.

На рисунке представлено решение, полученное по формулам (1), (4), (5) (кривая 3). Следует отметить, что расчет по теории Ми в точке, находящейся на расстоянии от центра 10^{-8} см, также описывается кривой 3. Сравнение результатов расчетов по теории Ми и формулам (1), (4), (5) проводилось для различных материалов аэрозольных частиц (оксид бериллия, нитрометан, этанол, золото, оксид алюминия, кварц, серебро, хлорофилл, нефть) в широком диапазоне размеров (от нескольких нанометров до сотен микрометров) для разных длин волн излучения (от ультрафиолетового диапазона до дальней области инфракрасного излучения). Во всех случаях результаты расчетов по формулам (1), (4), (5) совпадают с результатами вычислений по теории Ми с точностью до четырех знаков.

Аппроксимацию для определения интенсивности оптического поля в центре крупных частиц можно найти, если в выражениях (5) оставить только первые члены ($C_1 = -1$, $C_2 = im$), что означает пренебрежение членами $1/\rho \ll 1$. Тогда (4) имеет вид

$$C = im / [-\sin(\rho m) + im \cos(\rho m)]. \quad (6)$$

Выражение (1) с коэффициентом (6) достаточно точно определяет интенсивность оптического поля в центре большой частицы (радиус частицы больше длины волны). На рисунке эта аппроксимация представлена кривой 2, которая совпадает с результатами расчетов по теории Ми для больших частиц.

Аппроксимацию для малых частиц можно получить, если в (3) оставить члены с $1/\rho \gg 1$:

$$\psi_1(m\rho) = \frac{(m\rho)^2}{3}, \quad \psi'_1(m\rho) = \frac{2m\rho}{3}, \quad \xi_1(\rho) = \frac{i}{\rho} \exp(-i\rho), \quad \xi'_1(\rho) = -\frac{i}{\rho^2} \exp(-i\rho).$$

Тогда выражение (2) примет вид

$$C = 3/(m^2 + 2). \quad (7)$$

Относительная интенсивность в центре малой частицы, вычисленная по (1) и (7), представлена на рисунке кривой 4.

Сечение поглощения частицы σ_p определяется произведением интенсивности излучения внутри частицы (предполагается, что интенсивность не изменяется при переходе от одной точки к другой), объема частицы V_p и коэффициента поглощения материала частицы $\alpha_p = 4\pi n\kappa/\lambda$ [2]:

$$\sigma_p = I_{i0}\alpha_p V_p = \left(\frac{3}{m^2 + 2}\right)^2 \frac{4\pi n\kappa}{\lambda} V_p = \frac{36\pi n\kappa}{(m^2 + 2)^2} \frac{V_p}{\lambda}. \quad (8)$$

Формула (8) для сечения поглощения излучения частицей, размер которой существенно меньше длины волны, полученная из соотношений (1), (4), (5), аналогична формуле, полученной в работе [3, с. 86] для малых частиц.

Аппроксимацию поля в центре малой частицы $\rho|m-1| \ll 1$ можно также найти по формулам для фактора эффективности поглощения излучения частицей [4]. Для этого используем соотношение [4]

$$I_{i0} = 3Q_p/(4\alpha_p a), \quad (9)$$

где $Q_p = Q_e - Q_s$ — фактор эффективности поглощения лазерного излучения; Q_e, Q_s — относительные факторы эффективности ослабления и рассеяния. Для расчетов используем следующие соотношения для Q_e и Q_s [2]:

$$Q_e = 4\rho \operatorname{Im} \left\{ \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \left[1 + \frac{\rho^2}{15} \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \frac{m^4 + 27m^2 + 38}{2m^2 + 3} \right] \right\} + \frac{8}{3} \rho^4 \operatorname{Re} \left\{ \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right)^2 \right\}, \quad (10)$$

$$Q_s = (8\rho^4/3) |(m^2 - 1)/(m^2 + 2)|^2.$$

На рисунке кривая 1 является аппроксимацией для малых частиц, рассчитанной по формулам (9), (10). Видно, что эта аппроксимация хорошо согласуется с результатами расчетов по соотношениям (1), (4), (5) для частиц радиусом менее 1 мкм.

В заключение следует отметить, что вычисления по формулам (1)–(5), (9), (10) при $\rho|m-1| \ll 10^{-2}$ лучше производить с двойной точностью (например, Real*8, Complex*16). Это гарантирует высокую точность расчетов независимо от входных данных. В случае расчетов с невысокой точностью представления машинного числа, например Real*4, при малых радиусах частиц появляются случайные выбросы, сопоставимые с решением.

В работах [5, 6] показано, что в объеме малой аэрозольной частицы, находящейся в поле лазерного излучения, интенсивность оптического поля может изменяться в широком диапазоне. Некоторая часть материала частицы нагревается до температуры, существенно превышающей его температуру кипения, в то время как основная часть материала может оставаться сравнительно холодной. При этом для оценки теплового взрыва всей частицы необходимо определить характерную интенсивность оптического поля для основной части материала частицы. Значение оптического поля в центре частицы является удовлетворительной оценкой этого параметра. Таким образом, полученные результаты

позволяют оценить вероятность теплового взрыва основной части вещества частицы. Такие оценки важны для развития аэрозольной масс-спектрометрии, в которой используются мощные импульсные лазеры для испарения капель в ионизационной камере [7].

Авторы выражают благодарность Томасу Баеру за внимание к работе и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Белов Н. Н., Маслов В. А.** Оптическое поле в центре сферической частицы // Оптика и спектроскопия. 1991. Т. 71, вып. 2. С. 332, 333.
2. **Борен К., Хафман Д.** Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М: Мир, 1986.
3. **Шифрин К. С.** Рассеяние света в мутной среде. М.; Л.: Гос. изд-во физ.-техн. лит., 1951.
4. **Белов Н. Н.** Неоднородность электромагнитного поля 10,6 мкм внутри частиц атмосферного аэрозоля // Оптика и спектроскопия. 1986. Т. 61, вып. 6. С. 1331–1336.
5. **Druger S. D., Bronk V. Y.** Internal and scattered electric fields in the discrete dipole approximation // J. Opt. Soc. Amer. 1999. V. 16, N 12. P. 2239–2246.
6. **Белов Н. Н.** Дробление кварцевых частиц в лазерном пучке // Коллоид. журн. 1987. Т. 49, № 5. С. 987–990.
7. **Belov N. N., Belova N. G., Baer T.** CO₂-laser energy density along particle trajectory in ionizing chamber of two laser single particle mass spectrometer // Proc. of Air quality res. conf., Raleigh, North Caroline, USA, 12–15 March 2001. Raleigh: Congress Center, 2001. P. 8.

Поступила в редакцию 6/VIII 2001 г.
