

Моделирование пространственного распределения интенсивности рассеянного излучения атомарным аргоном

М.В. Сапронов^{1,А}, Н.М. Скорнякова^{2,А}

Национальный исследовательский университет «МЭИ»

¹ ORCID: 0000-0002-8600-2036, maks-sapronov@yandex.ru

² ORCID: 0000-0002-2919-6428, nmskorn@mail.ru

Аннотация

В работе представлена разработанная программа моделирования рассеяния света на атомах одноатомного вещества, например, аргона в рамках теории Г. Ми. Представлена динамика 3D-модели индикатрисы рассеяния лазерного излучения на сферической частице, параметры которой выбраны так, что ее можно считать моделью атома аргона. На основе 3D-модели индикатрисы рассеяния разработан алгоритм расчета пространственного распределения интенсивности излучения, рассеянного ансамблем атомов. Целью моделирования является построение распределения интенсивности рассеянного излучения по плоскости изображения приемной оптической системы, которая, в свою очередь, совпадает с плоскостью ПЗС-матрицы. Для того, чтобы найти мощность рассеянного излучения, которое попадает на один пиксель ПЗС-матрицы, необходимо просуммировать мощность излучения, рассеянного частицами, находящимися в вокселе, соответствующем данному пикселю, с учетом пространственного распределения интенсивности зондирующего излучения по вокселю. Представлены результаты моделирования эксперимента по регистрации мощности Рэлеевского рассеянного излучения.

Ключевые слова: рассеяние Рэлея, компьютерное моделирование, 3D-визуализация, рассеяние ансамблем монодисперсных частиц.

1. Введение

Интерес к рассеянию Рэлея вызван возможностью создания на его основе новых оптических методов диагностики потоков, которые могут быть использованы для экспериментального решения задач тепло- и массообмена в газах, жидкости и плазме. Подобные задачи возникают, например, при анализе эффективности работы систем, сжигающих топливо, при тестировании моделей летательных аппаратов, при изучении атмосферных явлений, а также в ходе других исследований в различных сферах науки и производства.

Задача полного теоретического расчета рассеяния света на атомах и молекулах газа требует квантово-волнового подхода и является весьма сложной и до настоящего времени не имеет завершеного решения [1]. Однако, для количественного и качественного описания рассеяния Рэлея подходит модель рассеяния электромагнитной волны на малых однородных и изотропных сферических частицах. Задача рассеяния света на прозрачных и слабо поглощающих сферических частицах в общем виде была решена в 1908 г. голландским физиком Г. Ми, который получил аналитические выражения для амплитудных функций рассеяния. Теория Г. Ми и сейчас используется в исследованиях атмосферной оптики и большинстве оптических методов исследования потоков, основанных на явлении рассеяния света [2].

Моделирование явления рассеяния света на молекулах и атомах является важным этапом исследования рассеяния Рэлея, которое приобретает все большую актуальность в последние несколько лет. Это вызвано тем, что, благодаря технологическому развитию мощных когерентных источников излучения и матричных фотоприемников с высокой чувствительностью, экспериментальная регистрация рассеянного излучения малыми частицами стала осуществима [3, 4]. Также в последнее время стали появляться новые методики расчёта рассеяния Рэлея, например, граничный метод интегрального уравнения [5]. В работе [6] представлен метод граничных элементов с эрмитовой интерполяцией для решения задач рассеяния света на двумерных наночастицах. В серии работ Шаповалова К.А. получены формулы и выполнено моделирование индикатрис рассеяния в приближении Рэлея-Ганса-Дебая. Так в первых его работах [7, 8] представлены выражения для расчета амплитуды и сечения светорассеяния оптически «мягкими» гексагональными цилиндрическими частицами конечной длины в приближении Рэлея-Ганса-Дебая. Проведено численное сравнение индикатрисы светорассеяния для бесконечно длинного кругового цилиндра (строгое решение) и для конечных кругового и гексагонального цилиндров в приближении Рэлея-Ганса-Дебая. Получены приближенные формулы сечений светорассеяния кругового и гексагонального цилиндров в приближении Рэлея-Ганса-Дебая для малых дифракционных параметров $ka < 1$, $kH < 1$ (где k , H , a – волновое число, высота и радиус цилиндра соответственно). Результаты были получены Шаповаловым К.А. для случаев строгой и хаотичной ориентации частиц.

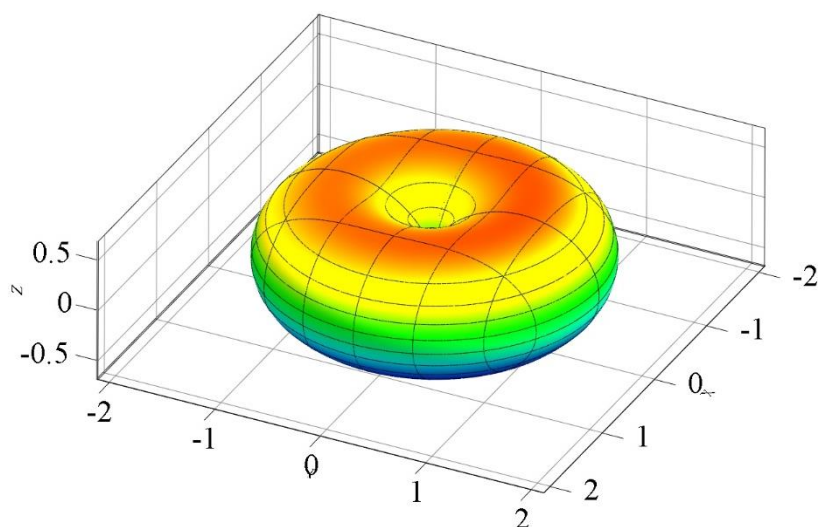
Возможность практического использования рассеяния Рэлея для диагностики расширяют дальнейшие опубликованные работы Шаповалова К.А., в которых представлены расчеты индикатрис рассеяния для цилиндрических частиц с произвольными торцами [9], осесимметричных частиц [10], гексагональной пирамиды и иглоподобного столбика [11]. Все больше практических применений методов диагностики на основе рассеяния Рэлея встречается в литературных источниках. Например, исследование температурных полей в потоках турбомашин [12], высокоселективное определение рецептора эпидермального фактора роста [13] и многие другие.

2. Рассеяние света на отдельной малой сферической частице

Проводимое компьютерное моделирование является подготовительным этапом к экспериментальному исследованию рассеяния Рэлея, поэтому в данной работе будет рассмотрено рассеяние плоской линейно поляризованной монохроматической и когерентной волны на отдельной частице и ансамбле монодисперсных частиц, что соответствует условиям разрабатываемой экспериментальной установки.

Амплитудные функции рассеяния представлены в виде сумм членов бесконечных последовательностей, которые не представляется возможным вычислить аналитически в общем случае. Поэтому для компьютерного моделирования используются рекуррентные формулы вычисления членов бесконечных последовательностей, полученные Д. Дейрменджаном и представленные в его работе [14], которые позволяют провести расчеты значений амплитудных функций рассеяния с заданной точностью.

Динамика индикатрисы рассеяния света с длиной волны 355 нм на отдельной диэлектрической сферической частице с показателем преломления 1,4 при изменении ее радиуса от 3 нм до 15 нм представлена в работе [15]. На анимации 1 представлена динамика 3D-модели индикатрисы рассеяния электромагнитного излучения с длиной волны 355 нм на сферической частице с показателем преломления $n = 1,0003$, соответствующем показателю преломления аргона, при изменении ее радиуса от $r = 0,1$ нм до $r = 1$ нм.

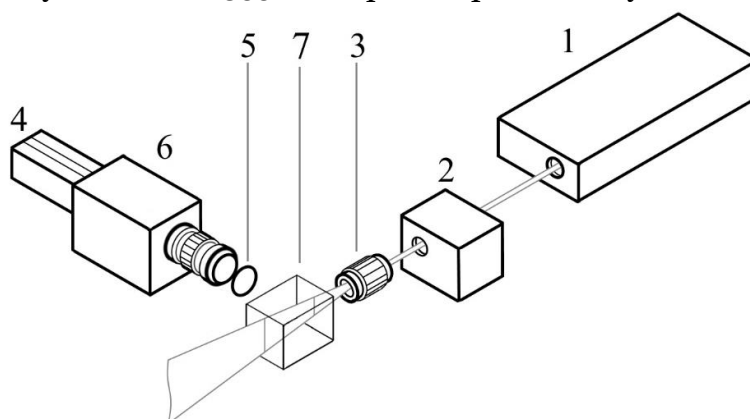


Анимация 1. Модель 3D-индикатрис рассеяния излучения с длиной волны $\lambda = 355$ нм на сферической частице с показателем преломления $n = 1,0003$ при изменении радиуса от $r = 0,1$ нм до $r = 1$ нм

Такие параметры излучения и рассеивающих центров выбраны потому, что в экспериментальном исследовании планируется использовать в качестве падающей волны третью гармонику излучения YAG:Nd лазера. Радиус частицы может варьироваться, т.к. определяется эффективным сечением рассеяния атома аргона, которое в свою очередь зависит от температуры газа в исследуемом объеме.

3. Экспериментальная установка для регистрации рассеяния света системой монодисперсных частиц

Схема планируемого эксперимента представлена на рис. 1. Излучение мощного импульсного YAG:Nd лазера 1 с длиной волны $\lambda = 1064$ нм попадает в нелинейный кристалл, на выходе из кристалла в излучении преимущественно содержится третья гармоника с длиной волны $\lambda = 355$ нм. Из нелинейного кристалла излучение направляется на вращатель плоскости поляризации 2, а затем на оптическую систему 3 формирования лазерной плоскости, которая зондирует измерительный объем с системой монодисперсных частиц (кювета с атомарным аргоном 7). Рассеянное излучение регистрируется с помощью видеокамеры 4, перед которой установлены полосно-пропускающий светофильтр 5 на длину волны $\lambda = 355$ нм и фотон-фотонный усилитель 6.



1 – YAG:Nd лазер, 2 – вращатель плоскости поляризации, 3 – оптическая система формирования лазерной плоскости, 4 – видеокамера, 5 – светофильтр, 6 – фотон-фотонный усилитель, 7 – кювета с аргоном

Рис. 1. Схема экспериментальной установки для регистрации рассеянного Рэлеевского излучения

4. Моделирование экспериментальных результатов регистрации мощности Рэлеевского рассеянного излучения

На рис. 2 изображена схема регистрации рассеянного излучения. Линейно поляризованное лазерное излучение распространяется вдоль оси oy (волновой вектор \mathbf{k}), положение плоскости поляризации P определяется углом α между осью oz и вектором напряженности электрического поля волны \mathbf{E} . Сбор рассеянного излучения ведется в направлении оси ox . Измерительный объем показан голубым параллелепипедом, поле изображения считается прямоугольным, а не круглым, т.к. приемник излучения – ПЗС-матрица прямоугольной формы. Угол приема рассеянного излучения – телесный угол Ω при вершине желтого конуса, кругом радиуса R в основании конуса показан входной зрачок приемной оптической системы (ПОС), который удален от центра измерительного объема на расстояние L . Размеры измерительного объема по осям oy и oz гораздо меньше, чем расстояние L , поэтому можно считать, что угол приема рассеянного излучения одинаков для всех точек поля зрения ПОС.

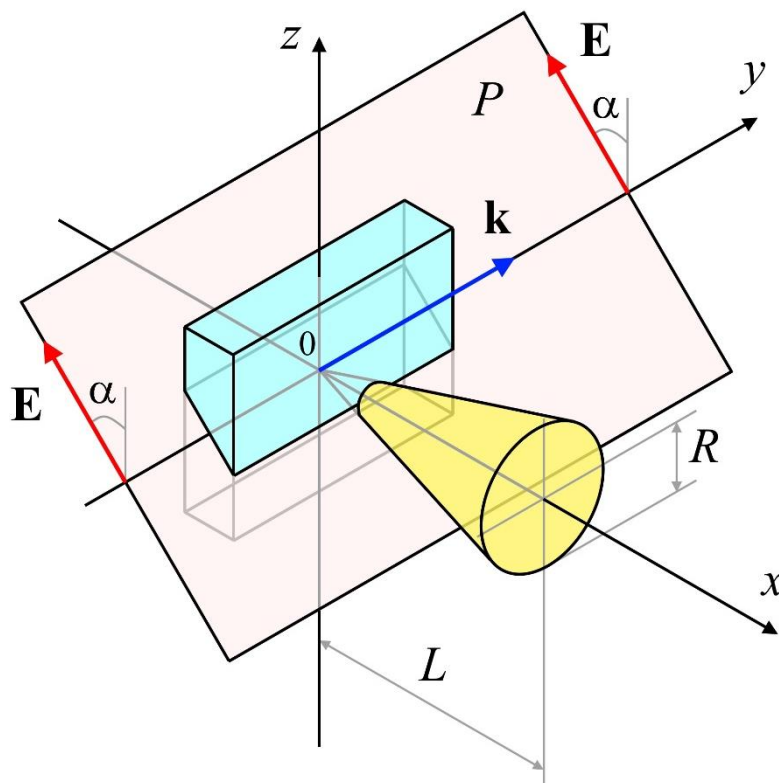


Рис. 2. Схема регистрации рассеянного излучения

Целью моделирования является построение распределения интенсивности рассеянного излучения по плоскости изображения ПОС, которая, в свою очередь, совпадает с плоскостью ПЗС-матрицы. Измерительный объем в плоскости yoz ограничен полем зрения камеры, а по оси x глубиной резкости объектива камеры и пространственным распределением объемной плотности энергии падающего лазерного излучения (лазерной плоскости). Предполагается, что толщина лазерной плоскости меньше, чем глубина резкости объектива камеры.

При давлении аргона, близком к атмосферному, моделирование можно проводить в приближении однократного рассеяния [16]. В то же время количество атомов в измерительном объеме все же велико, поэтому фазовые соотношения между рассеянным излучением каждым отдельным атомом можно не учитывать. В итоге задача моделирования сводится к суммированию интенсивности рассеянного излучения всеми ато-

мами с учетом пространственного распределения энергии падающего излучения в измерительном объеме и положения плоскости поляризации, концентрации рассеивающих центров и параметров приемной оптической системы.

Телесный угол приема рассеянного излучения может быть найден по формуле:

$$\Omega = \frac{\pi R^2}{L^2} \quad (1)$$

Мощность рассеянного отдельной частицей излучения, которая попадает в ПОС может быть определена по формуле:

$$P = I(x, y, z) \cdot \xi(\psi, \gamma) \cdot \Omega, \quad (2)$$

где $I(x, y, z)$ – интенсивность падающей волны в точке с координатами (x, y, z) , где находится рассеиватель, $\xi(\psi, \gamma)$ – относительное угловое распределение интенсивности рассеянного излучения отдельной частицей, ψ и γ углы сферической системы координат, под которыми виден центр входного зрачка ПОС. Начало отсчета сферической системы координат совпадает с центром рассеяния, угол ψ отсчитывается от направления распространения падающей волны (ось ou на рис. 2) в плоскости ортогональной направлению колебания напряженности электрического поля, а угол γ отсчитывается от направления колебаний напряженности электрического поля.

ПЗС-матрица является позиционно чувствительным фотоприемным устройством благодаря наличию множества отдельных чувствительных площадок – пикселей (рис. 3). Приемная оптическая система выбирается такой, чтобы ПЗС-матрица находилась в плоскости изображения, а измерительный объем – в плоскости предмета, тогда каждому пикселю ставится в соответствие некоторая площадка в плоскости предмета, с которой излучение собирается на пиксель. Но поскольку глубина резкости ПОС не бесконечно малая величина, то излучение на определенный пиксель собирается с некоторого соответствующего ему объема, который принято называть вокселем (volume of pixel).

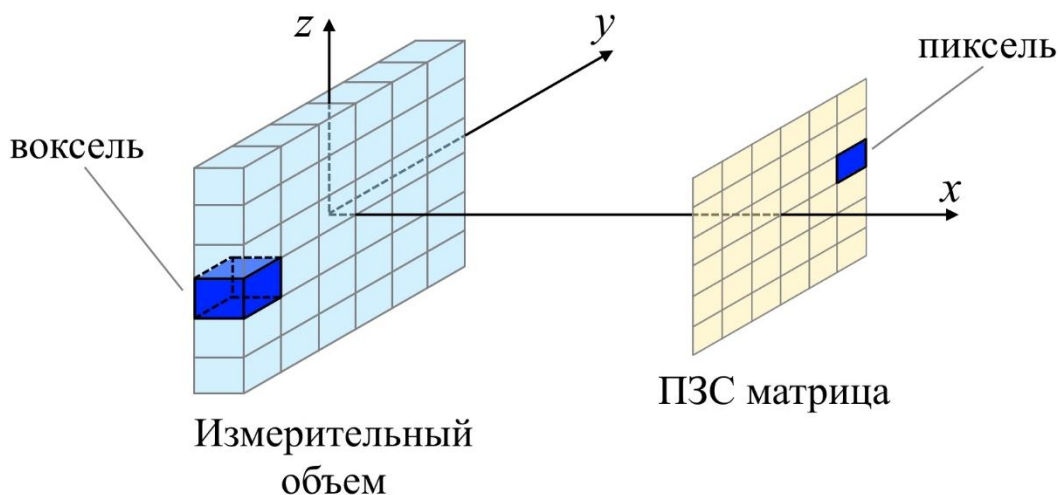


Рис. 3. Иллюстрация принципа работы позиционно чувствительного матричного фотоприемника

Для того чтобы найти мощность рассеянного излучения, которое попадает на один пиксель ПЗС-матрицы, необходимо просуммировать мощность излучения, рассеянного частицами, находящимися в вокселе, соответствующем данному пикселю, с учетом пространственного распределения интенсивности зондирующего излучения по воксе-

лю. Для этого каждый воксель разбивается на довольно малые кубические объемы размерами $\Delta x, \Delta y, \Delta z$, в каждом из которых можно считать, что интенсивность падающей волны практически не изменяется и принять ее равной интенсивности в центре данного малого объема. Тогда мощность излучения, рассеянного каждым таким малым объемом можно определить по формуле:

$$P = I(x, y, z) \cdot \xi(\psi, \gamma) \cdot \Omega \cdot \Delta x \Delta y \Delta z \cdot n, \quad (3)$$

где n – концентрация вещества, произведение $n \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ дает число рассеивателей в малом объеме.

Мощность излучения, попадающего на один пиксель можно найти следующим образом:

$$P = \xi(\psi, \gamma) \cdot \Omega \cdot \Delta x \Delta y \Delta z \cdot n \cdot \sum_{i,j,q} I(x_i, y_j, z_q) \quad (4)$$

где (x_i, y_j, z_q) – координаты центра малого кубического объема, а суммирование ведется по всем малым объемам рассматриваемого вокселя.

Найти распределение мощности рассеянного излучения по ПЗС-матрице можно, рассчитав по формуле (4) мощность для каждого пикселя.

5. Результаты моделирования

По описанным выше теоретическим формулам расчета мощности рассеянного излучения был составлен алгоритм моделирования распределения мощности излучения по пикселям ПЗС-матрицы, которая пропорциональна яркости пикселей моделируемого экспериментального изображения. При этом, известными считаются зависимость интенсивности от координат $I(x, y, z)$, ориентация плоскости поляризации и длина волны падающего линейно поляризованного излучения, концентрация вещества, эффективное сечение рассеяния, относительный показатель преломления рассеивающих центров, положение и радиус входного зрачка, поперечное увеличение и глубина резкости ПОС, количество и размер пикселей ПЗС-матрицы. В среде MathCAD была написана программа моделирования, результатом работы которой является распределение мощности рассеянного излучения по пикселям ПЗС-матрицы. В программе имеется возможность изменять входные данные и отслеживать динамику результатов моделирования, в частности, на анимации 2 показана динамика модели экспериментального изображения для различных углов α между плоскостью поляризации падающего излучения и осью z (рис. 2).

Как уже было отмечено, направление регистрации рассеянного излучения перпендикулярно направлению распространения волны, тогда в случае рассеяния Рэлея мощность рассеянного излучения зависит от положения плоскости поляризации падающей волны. Если плоскость поляризации параллельна плоскости yoz , то мощность рассеянного излучения в направлении регистрации максимальна, а если перпендикулярна – то минимальна. Результаты на анимации 2 полностью согласуются с этими утверждениями.



$$\alpha = 00^0$$

Анимация 2. Динамика модели экспериментального изображения при вращении плоскости поляризации падающего излучения

6. Заключение

Разработана программа моделирования экспериментальных результатов, которая позволяет варьировать входные параметры падающего излучения, рассеивающих центров и приемной оптической системы, тем самым обеспечивая возможность оптимального выбора параметров установки и условий проведения эксперимента по регистрации Рэлеевского рассеянного излучения.

7. Список литературы

1. Коломиец С.Ф. Современное состояние моделей рассеяния электромагнитных волн на частицах разреженных сред // Научный вестник МГТУ ГА, №189, 2013, С. 104 – 109.
2. Mie. G. Contributions to the optics of turbid media, particularly colloidal metal solutions // Annalen der Physik, No.25, 1908, pp. 377 – 445.
3. Kempema N.J., Long M.B. Quantitative Rayleigh thermometry for high background scattering applications with structured laser illumination planar imaging // Applied Optics, Vol. 53, No. 29, 2014, pp. 6688–6697.
4. Fischer. A. Imaging Flow Velocimetry with Laser Mie Scattering // Applied Sciences 2017, 7, 1298.
5. Liang, J., Liu, Z., Huang, L., Yang, G. The indirect boundary integral equation method for the broadband scattering of plane P, SV and Rayleigh waves by a hill topography // Engineering Analysis with Boundary Elements, 98, 2019, pp. 184-202.
6. Зимовец С.В., Гешев П.И. Метод граничных интегральных уравнений для расчета рассеяния света на двумерных наночастицах // Журнал технической физики. 2006. Т. 76. Вып. 3. С. 1-6.
7. Шаповалов К.А. Рассеяние света частицами цилиндрической формы в приближении Рэлея-Ганса-Дебая. 1. Строго ориентированные частицы // Оптика атмосферы и океана. 2004. Т. 17. №4. С. 350-353.
8. Шаповалов К.А. Рассеяние света частицами цилиндрической формы в приближении Рэлея-Ганса-Дебая. 2. Хаотически ориентированные частицы // Оптика атмосферы и океана. 2004. Т. 17. № 8. С. 627-629.

9. Шаповалов К.А. Рассеяние света цилиндрической капсулой с произвольными торцами в приближении Рэлея–Ганса–Дебая / К.А. Шаповалов // Наука и Образование: научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. Журн. – 2015. – № 5. С. 309–318.
10. Шаповалов К.А. Рассеяние света осесимметричными частицами в приближении Рэлея–Ганса–Дебая // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Математика и физика. 2012. Т. 5. С. 586–592.
11. Шаповалов К.А. Рассеяние света гексагональной пирамидой и иглоподобным столбиком в приближении Рэлея–Ганса–Дебая // Естественные и Технические науки. – №1. – 2016. С. 9–14.
12. Doll, U., Dues, M., Bacci, T., Picchi, A., Stockhausen, G., Willert, C. Aero-thermal flow characterization downstream of an NGV cascade by five-hole probe and filtered Rayleigh scattering measurements // Experiments in Fluids, 59 (10), 2018, Paper № 150.
13. Li, J., Yang, Y., Zhang, X., Zhang, B., Chang, H., Wei, W. Resonance Rayleigh scattering assay for EGFR using antibody immobilized gold nanoparticles // Luminescence, 33 (8), 2018. pp. 1326-1332.
14. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами / Пер.с англ.: Под ред. К.Н. Кондратьева. М.: Мир, 1971. 165 с.
15. Сапронов М.В., Скорнякова Н.М. Компьютерная визуализация индикатрис рассеяния Рэлея в динамике // Научная визуализация, 9 (3), 2017, С. 42 – 53.
16. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами / Пер. с англ.: Под ред. В.В. Соболева. м.: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. 536 с.

Modeling of the spatial distribution of the scattered radiation intensity by atomic argon

M.V. Sapronov^{1,A}, N.M. Skornyakova^{2,A}

National Research University "MPEI"

¹ ORCID: 0000-0002-8600-2036, maks-sapronov@yandex.ru

² ORCID: 0000-0002-2919-6428, nmskorn@mail.ru

Abstract

The paper presents a developed program for modeling the light scattering by atoms of a monatomic substance, for example, argon based on the theory of G. Mie. The dynamics of the 3D model of the laser scattering indicatrix on a spherical particle whose parameters are chosen so that it can be considered a model of the argon atom is presented. Based on the 3D model of the scattering indicatrix, an algorithm for calculating the spatial distribution of the radiation intensity scattered by an ensemble of atoms is developed. The purpose of the simulation is to build the intensity distribution of the scattered radiation on the image plane of the receiving optical system, which, in turn, coincides with the plane of the CCD matrix. In order to find the power of the scattered radiation that falls on one pixel of the CCD matrix, it is necessary to sum the power of the radiation scattered by the particles in the voxel corresponding to the pixel, taking into account the spatial distribution of the probe radiation intensity over the voxel. The results of simulation of experiment on registration of power of Rayleigh scattered radiation are received.

Keywords: rayleigh scattering, computer modeling, 3D-visualization, scattering by an ensemble of monodisperse particles

References

1. Kolomiets S.F. Present state of wave scattering model on distributed particles of rarified media // Civil Aviation High TECHNOLOGIES, №189, 2013, p. 104–109.
2. Mie G. Contributions to the optics of turbid media, particularly colloidal metal solutions // Annalen der Physik, No.25, 1908, pp. 377 – 445.
3. Kempema N.J., Long M.B. Quantitative Rayleigh thermometry for high background scattering applications with structured laser illumination planar imaging // Applied Optics, Vol. 53, No. 29, 2014, pp. 6688–6697.
4. Fischer A. Imaging Flow Velocimetry with Laser Mie Scattering // Applied Sciences, 2017, 7, 1298.
5. Liang, J., Liu, Z., Huang, L., Yang, G. The indirect boundary integral equation method for the broadband scattering of plane P, SV and Rayleigh waves by a hill topography // Engineering Analysis with Boundary Elements, 98, 2019, pp. 184-202.
6. Zimovets S.V., Geshev P.I. The method of boundary integral equations for the calculation of light scattering on two-dimensional nanoparticles // Journal of Technical Physics. 2006. T. 76. Vol. 3. P. 1-6.
7. Shapovalov K.A. Light scattering by cylindrical particles in the Rayleigh-Gans-Debye approximation. 1. Strictly Oriented Particles // Atmospheric and Oceanic Optics. 2004. T. 17. No.4. Pp. 350-353.
8. Shapovalov K.A. Light scattering by cylindrical particles in the Rayleigh-Gans-Debye approximation. 2. Chaotically oriented particles // Optics of the Atmosphere and Ocean. 2004. V. 17. No. 8. P. 627-629.

9. Shapovalov K.A. Light scattering by a cylindrical capsule with arbitrary ends in the Rayleigh – Hans – Debye approximation / K.A. Shapovalov // Science and Education: a scientific publication MSTU. N.E. Bauman. Electron. Log - 2015. - № 5. P. 309–318.
10. Shapovalov K.A. Light scattering by axisymmetric particles in the Rayleigh – Hans – Debye approximation // Journal of the Siberian Federal University. Series: Mathematics and Physics. 2012. V. 5. P. 586–592.
11. Shapovalov K.A. Light scattering by a hexagonal pyramid and a needle-like column in the Rayleigh – Hans – Debye approximation // Natural and Technical Sciences. - №1. - 2016. P. 9–14.
12. Doll, U., Dues, M., Bacci, T., Picchi, A., Stockhausen, G., Willert, C. Aero-thermal flow characterization downstream of an NGV cascade by five-hole probe and filtered Rayleigh scattering measurements // Experiments in Fluids, 59 (10), 2018, Paper № 150.
13. Li, J., Yang, Y., Zhang, X., Zhang, B., Chang, H., Wei, W. Resonance Rayleigh scattering assay for EGFR using antibody immobilized gold nanoparticles // Luminescence, 33 (8), 2018. pp. 1326-1332.
14. Deirmendjian D. Electromagnetic scattering on spherical polydispersions / New York, American Elsevier Publishing Company INC., 1969, 165 p.
15. Sapronov M.V., Skornyakova N.M. Computer visualization of rayleigh scattering indicatrix in dynamic // Scientific Visualization, 9 (3), 2017, p. 42-53.
16. Van de Hulst H. C. Light scattering by small particles / New York, Dover Publications, Inc., 1957, 470 p.