

掺杂物形状对混合粒子等效光学常数的影响

王希影

(中国航空工业集团公司 中航空天发动机研究院有限公司, 北京 100028)

摘 要: 基于电磁场平均的概念, 利用 Maxwell-Garnett 有效介质理论对含有椭球形掺杂物的混合粒子等效光学常数进行研究, 分析了掺杂物形状比例参数和体积分数对混合粒子等效光学常数的影响. 结果表明: 掺杂物形状比例参数存在一个临界值, 当形状比例参数小于临界值时, 随着形状比例参数增加, 含椭球形掺杂物的混合粒子等效光学常数与含球形掺杂物的混合粒子等效光学常数的差别增大; 反之, 形状比例参数对混合粒子等效光学常数的影响非常小. 混合粒子的等效光学常数介于基体和掺杂物的光学常数之间, 当掺杂物的体积分数增大时, 混合粒子的等效光学常数趋向于掺杂物的光学常数.

关键词: 掺杂物; 混合粒子; Maxwell-Garnett 有效介质理论; 形状比例参数; 等效光学常数

中图分类号: V219

文献标志码: A

Inclusion shape's effects on effective optical constants of mixed particles

WANG Xi-ying

(China Aviation Engine Establishment,
Aviation Industry Corporation of China, Beijing 100028, China)

Abstract: Based on the concept of electromagnetic field average, the effective optical constants of mixed particles containing ellipsoidal inclusions were studied with Maxwell-Garnett effective medium theory. The effects of shape scale factors and volume fractions of inclusions on the effective optical constants of mixed particles were analyzed. The results show that: a critical value has been found in the shape scale factors of inclusion. When the shape scale factor is smaller than the critical value, the differences in the effective optical constants of mixed particles containing ellipsoidal and spherical inclusions increase with the growing shape scale factor. Otherwise, little effects are shown in the effects of shape scale factors on the effective optical constants of mixed particles. The value of effective optical constants for mixed particles varies between that for the background and inclusions. With the increase of volume fraction of inclusions, the effective optical constants of mixed particles will approach to those of inclusions.

Key words: inclusions; mixed particles; Maxwell-Garnett effective medium theory; shape scale factors; effective optical constants

粒子态物质广泛存在航空航天、能源动力及大气科学等多个领域, 如含微粒的热障涂层多孔材料、固体火箭发动机尾喷焰中的 Al_2O_3 粒子以及大气的气溶胶粒子等^[1-6]. 研究这些粒子态物质的辐射特性, 对飞行器的隐身性能、天基预警、红

外探测等具有重要的指导意义.

粒子的光学常数是粒子辐射特性研究的前提和关键. 实际中的粒子多是由不同化学成分组成的混合体系, 因组成成分的不同而没有固定的光学常数, 特别是光学常数的虚部变化范围较大, 难

以精确测定^[7-8]. 目前, 对于内混型混合粒子等效光学常数的研究国内外已经开展了不少工作^[9-15], 但这些研究均将掺杂物的形状作为球形进行简化处理, 实际上粒子的形状是千差万别的, 这种简化处理必然会带来一定的误差, 而对于掺杂物为非球形粒子的混合粒子等效光学常数的研究报道极少.

本文基于电磁场平均的概念, 利用 Maxwell-Garnett 有效介质理论研究了掺杂物的形状为椭球形时混合粒子的等效光学常数, 计算了掺杂物不同形状比例参数和体积分数时混合粒子的等效光学常数, 并将计算结果与掺杂物为球形时的计算结果进行比较.

1 Maxwell-Garnett 有效介质理论

考虑一种组分的椭球形掺杂物(掺杂物的介电常数为 ϵ_1) 嵌埋于介质基体中(基体的介电常数为 ϵ_e) 所构成的复合体系, 如图 1 所示. 假定混合粒子的等效介电常数是 ϵ_{eff} , 则介质中平均电感应强度 \mathbf{D} 与外加电场强度 \mathbf{E} 和电极化强度 \mathbf{P} 的关系可以用下式表示^[16]:

$$\mathbf{D} = \epsilon_{\text{eff}} \mathbf{E} = \epsilon_e \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (1)$$

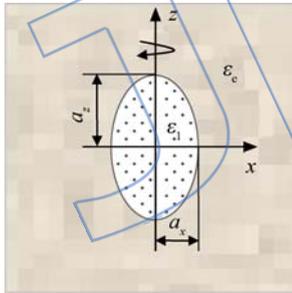


图 1 掺杂物为椭球形时的混合粒子示意图

Fig. 1 Schematic of mixed particles with ellipsoidal inclusion

电极化强度 \mathbf{P} 和混合粒子中的电偶极矩 \mathbf{p} 的关系如下^[16]:

$$\mathbf{P} = n_v \mathbf{p} \quad (2)$$

其中 n_v 表示混合粒子中单位体积内所含掺杂物的数目, 下角标 v 表示单位体积混合粒子.

在复合体系中, 将每个粒子看作是一个近独立子系, 但出现外加电场强度 \mathbf{E} 时, 每个粒子都被极化, 并产生电矩, 从而在其周围建立自己的电场, 由于库仑作用是长程的, 每个粒子除受外加电场强度 \mathbf{E} 的作用之外, 还要受到其他粒子的感应电矩的电场的作用, 这两部分电场强度合起来记

作 \mathbf{E}_1 , 称为局域场. 该局域场的表达式与混合粒子中包含的掺杂物形状有关, 对于椭球形为例, 其表达式如下^[17]:

$$\mathbf{E}_1 = \mathbf{E} + \frac{1}{\epsilon_e} \bar{\mathbf{L}} \mathbf{P} \quad (3)$$

式中 $\bar{\mathbf{L}}$ 表示去极化并矢, 取决于粒子的形状. $\bar{\mathbf{L}} = \sum_{i=x,y,z} N_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i$, \mathbf{u}_i 为椭球体轴向单位矢量, N_i 为椭球体的去极化因子, 其表达式^[17]为

$$N_i = \frac{a_x a_y a_z}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{(s + a_i^2) \sqrt{(s + a_x^2)(s + a_y^2)(s + a_z^2)}} \quad (4)$$

式中 a_x, a_y 和 a_z 分别为直角坐标系中椭球体的各半轴长; s 为积分变量. 任意椭球形粒子的 3 个方向的去极化因子满足下列表达式: $N_x + N_y + N_z = 1$.

对于均匀媒质椭球形粒子, 电偶极矩 \mathbf{p} 可以写成如下形式^[17]:

$$\mathbf{p} = \bar{\boldsymbol{\alpha}} \mathbf{E}_1 \quad (5)$$

其中 $\bar{\boldsymbol{\alpha}}$ 表示极化并矢, 其表达式如下^[14]:

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}} = \frac{4\pi a_x a_y a_z (\epsilon_1 - \epsilon_e)}{3} \sum_{i=x,y,z} \frac{\epsilon_e}{\epsilon_e + N_i (\epsilon_1 - \epsilon_e)} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i \quad (6)$$

将方程式(5)代入方程式(2)中, 则电极化强度 \mathbf{P} 可以写为^[16]

$$\mathbf{P} = n_v \bar{\boldsymbol{\alpha}} \mathbf{E}_1 \quad (7)$$

将式(3)和式(4)代入式(7), 然后将所得的表达式代入式(1)中, 整理可得掺杂物形状为椭圆形的混合粒子等效介电常数计算公式(Maxwell-Garnett 有效介质理论公式), 表达式如下所示^[16]:

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_e + \epsilon_e \frac{\frac{\varphi}{3} \sum_{i=x,y,z} \frac{\epsilon_1 - \epsilon_e}{\epsilon_e + N_i (\epsilon_1 - \epsilon_e)}}{1 - \frac{\varphi}{3} \sum_{i=x,y,z} \frac{N_i (\epsilon_1 - \epsilon_e)}{\epsilon_e + N_i (\epsilon_1 - \epsilon_e)}} \quad (8)$$

其中 φ 为混合粒子中掺杂物的体积分数, 且 $\varphi = n_v V$; V 为单个椭球形粒子的体积, 且 $V = 4\pi a_x a_y a_z / 3$.

在电磁理论中, 对于非铁磁性物质的介电常数 ϵ 与粒子光学常数 m 的关系如下所示^[17]:

$$\epsilon = m^2 \quad (9)$$

由 $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$, $m = n + ik$ 及式(9), 可得出 n, k ^[17]

$$n^2 - k^2 = \epsilon' \quad (10a)$$

$$2nk = \epsilon'' \quad (10b)$$

按有效介质理论,由式(8)获得混合粒子的等效介电常数后,可由式(10)计算混合粒子的等效光学常数 n, k .

2 计算结果与讨论

2.1 掺杂物形状比例参数对去极化因子的影响

椭球体可以分为扁长椭球体和扁圆椭球体,其去极化因子如下所示^[17]:

$$\begin{aligned} \text{扁长椭球体 (prolate ellipsoid, } a_x > a_y = a_z) \\ N_x = \frac{1 - e^2}{2e^3} \left(\ln \frac{1+e}{1-e} - 2e \right) \\ N_y = N_z = \frac{1}{2}(1 - N_x) \end{aligned} \quad (11)$$

其中 $e = \sqrt{1 - a_z^2/a_x^2}$.

$$\begin{aligned} \text{扁圆椭球体 (oblate ellipsoid, } a_x = a_y > a_z) \\ N_z = \frac{1 + e^2}{e^3} (e - \arctan e) \\ N_x = N_y = \frac{1}{2}(1 - N_z) \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $e = \sqrt{a_x^2/a_z^2 - 1}$.

为了方便计算,定义形状比例参数 $\xi = a_x/a_z$. 则不同形状比例参数下的扁圆椭球体和扁长椭球体的去极化因子如图2所示,图中 ξ_c 为临界形状比例参数.

当 $\xi=1$ 时掺杂物的形状为球形,此时的去极化因子 $N_x = N_z = 1/3$,如图2所示.当扁长椭球体的去极化因子达到其极限值时,即 $N_x = 0$ 且 $N_z = 0.5$,此时扁长椭球体即为“needle”^[16],当扁

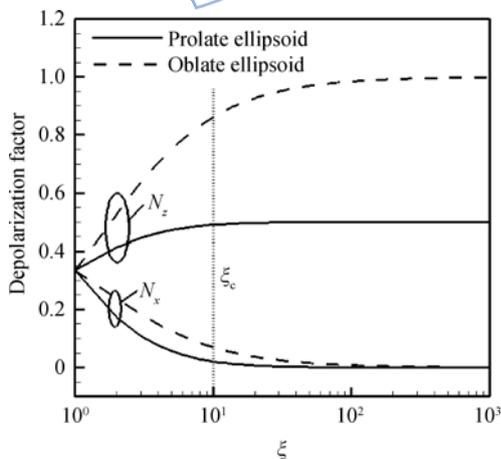


图2 不同形状比例参数下扁长椭球体和扁圆椭球体的去极化因子

Fig. 2 Depolarization factors of prolate ellipsoid and oblate ellipsoid with different shape scale factors

圆椭球体的去极化因子达到其极限值时,即 $N_x = 0$ 且 $N_z = 1$,此时扁圆椭球体即为“disk”^[16].随着 ξ 的增加,扁长椭球体和扁圆椭球体的去极化因子 N_x 均减小, N_z 均增大,但当 ξ 增加到一定值时,扁长椭球体和扁圆椭球体的去极化因子 N_x 和 N_z 基本保持不变,如图2所示,当 $\xi \leq 10$ 时,形状比例参数对椭球体的去极化因子影响较大,从而进一步影响混合粒子的等效光学常数;而当 $\xi > 10$ 时,形状比例参数对椭球体的去极化因子影响非常小(去极化因子随 ξ 的变化率小于1%),几乎可以忽略,此时混合粒子的等效光学常数主要受掺杂物的几何形状(扁长椭球体或扁圆椭球体)的影响.因此,本文以形状比例参数对去极化因子的影响不足1%为基准,取 $\xi_c = 10$ 为混合粒子的等效光学常数随形状比例参数变化的临界值.

2.2 掺杂物形状比例参数对混合粒子等效光学常数的影响

本文的研究对象为含有黑炭和水的混合粒子体系,计算波长选择 $10.6 \mu\text{m}$. 其中黑炭为掺杂物,水为基体,黑炭和水在 $10.6 \mu\text{m}$ 处的光学常数分别为 $2.22 - 0.73i$ 和 $1.179 - 0.0718i$ ^[18]. 利用上述 Maxwell-Garnett 有效介质理论计算了黑炭不同形状比例参数时混合粒子的等效光学常数随黑炭体积分数的变化关系,黑炭形状分别选取了扁长椭球体和扁圆椭球体,形状比例参数 ξ 分别选取为1(球体),2,5,10,计算结果如图3和图4所示.

由图3和图4可以看出,不同形状比例参数下混合粒子的等效光学常数的实部与虚部均介于基体与掺杂物的实部和虚部之间,这一结论与文献[12-13]介绍的结论一致.随着黑炭体积分数(ϕ_0)的增加,混合粒子等效光学常数的实部和虚部均增大,这主要是黑炭粒子光学常数的实部和虚部均比水粒子大的缘故.

黑炭为椭球形时,黑炭形状比例参数越大,混合粒子的等效光学常数就越偏离黑炭为球形时混合粒子的等效光学常数,这主要是因为形状比例参数的变化导致椭球体去极化因子的变化.并且从图3和图4中可以看出:形状比例参数对混合粒子等效光学常数的虚部的影响程度大于对实部的影响,光学常数的实部表征粒子的折射行为,虚部表征粒子的吸收行为,粒子的光学常数直接影响着粒子的辐射特性.因此研究混合粒子中掺杂物形状对等效光学常数的影响具有重要的意义.

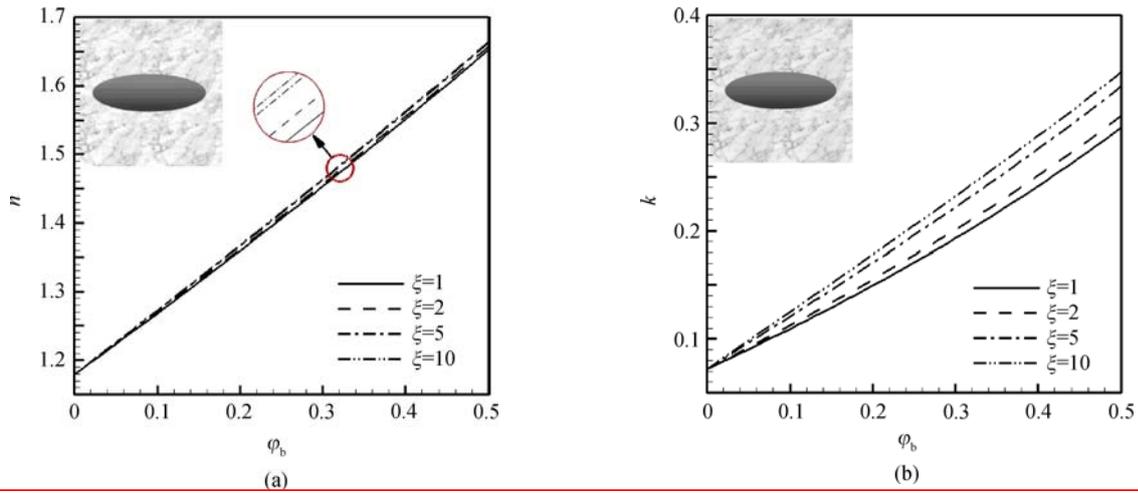


图 3 黑炭为扁长椭球体时不同形状比例参数下混合粒子的等效光学常数比较

Fig. 3 Comparison of effective optical constants of mixed particles with different shape scale factors for prolate ellipsoid black carbon particles

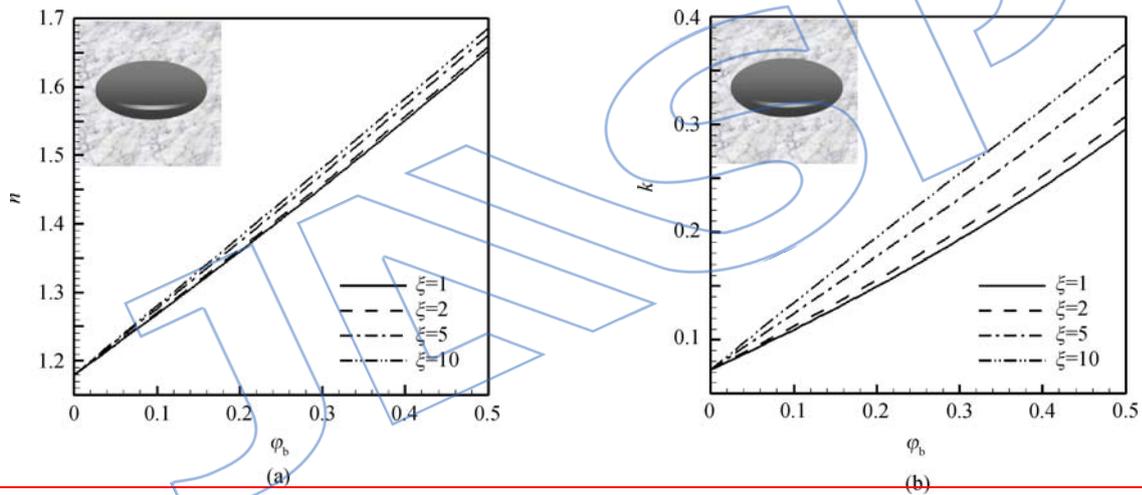


图 4 黑炭为扁圆椭球体时不同形状比例参数下混合粒子的等效光学常数比较

Fig. 4 Comparison of effective optical constants of mixed particles with different shape scale factors for oblate ellipsoid black carbon particles

3 结 论

本文基于电磁场平均的概念,以黑炭和水组成的混合粒子体系为研究对象,利用 Maxwell-Garnett 有效介质理论研究了掺杂物的形状为椭球形时混合粒子的等效光学常数,计算了掺杂物不同形状比例参数和体积分数时混合粒子的等效光学常数,主要结论如下:

1) 混合粒子等效光学常数与椭球形掺杂物的形状比例参数有关,掺杂物形状比例参数存在一个临界值,当形状比例参数小于临界值时,随着形状比例参数增加,含椭球形掺杂物的混合粒子等效光学常数与含球形掺杂物的混合粒子等效光

学常数的差别增大;反之,形状比例参数对混合粒子等效光学常数的影响非常小.

2) 混合粒子的等效光学常数介于基体和掺杂物的光学常数之间;当掺杂物的体积分数增大时,混合粒子的等效光学常数趋向于掺杂物的光学常数.

3) 在临界形状比例参数范围内,椭球形掺杂物的形状比例参数越大,混合粒子的等效光学常数就越偏离掺杂物为球形时混合粒子的等效光学常数.

4) 掺杂物形状比例参数对混合粒子等效光学常数的虚部的影响程度大于对实部的影响.

参考文献:

- [1] 李东辉,夏新林. 孔隙分布对陶瓷材料热辐射特性的影响[J]. 航空动力学报, 2011, 26(1): 60-64.
LI Donghui, XIA Xinlin. Influences of pores distribution on thermal radiation properties of ceramic materials[J]. Journal of Aerospace Power, 2011, 26(1): 60-64. (in Chinese)
- [2] 齐宏,阮立明,菅立川,等. 导弹尾喷焰红外辐射特性有限元法研究[J]. 装备指挥技术学院学报, 2007, 18(3): 72-76.
QI Hong, RUAN Liming, JIAN Lichuan, et al. Study on the infrared radiation properties of missile exhaust plume by finite element method[J]. Journal of the Academy of Equipment Command and Technology, 2007, 18(3): 72-76. (in Chinese)
- [3] 申文涛,董超,朱定强,等. 固液混合火箭发动机喷焰红外辐射特性分析[J]. 航空动力学报, 2012, 27(8): 1874-1880.
SHEN Wentao, DONG Chao, ZHU Dingqiang, et al. Analysis of infrared radiation of hybrid rocket motor exhaust plume[J]. Journal of Aerospace Power, 2012, 27(8): 1874-1880. (in Chinese)
- [4] 张净玉,常海萍,陈雄兵,等. 粉末气溶胶抑制热喷流红外辐射特性实验[J]. 推进技术, 2006, 27(4): 326-330.
ZHANG Jingyu, CHANG Haiping, CHEN Xiongbing, et al. Experiment on infrared suppression characteristics of thermojet with powder aerosol[J]. Journal of Propulsion Technology, 2006, 27(4): 326-330. (in Chinese)
- [5] Yang P, Gao B C. Radiative properties of cirrus clouds in the infrared (8-13 μm) spectral region[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2001, 70(4/5/6): 473-504.
- [6] Qiu J H, Zhou X J. Simultaneous determination of aerosol size distribution and refractive index and surface albedo from radiance: Part I theory[J]. Advances in Atmospheric Sciences, 1986, 3(2): 162-171.
- [7] Levoni C, Cervino M, Guzzi R, et al. Atmospheric aerosol optical properties; a database of radiative characteristics for different components and classes[J]. Applied Optics, 1997, 36(30): 8031-8041.
- [8] Ruan L M, Wang X Y, Qi H, et al. Experimental investigation on optical constants of aerosol particles[J]. Journal of Aerosol Science, 2011, 44(11): 759-770.
- [9] Yang W. Improved recursive algorithm for light scattering by amultilayered sphere[J]. Applied Optics, 2003, 42(9): 1710-1720.
- [10] Erlick C. Effective refractive indices of water and sulfate drops containing absorbing inclusions[J]. Journal of the Atmospheric Sciences, 2006, 63(2): 754-763.
- [11] 柳朝晖,刘迎晖,周英彪,等. 多孔炭粒的等效光学常数及辐射特性[J]. 工程热物理学报, 1997, 18(2): 251-255.
LIU Zhaohui, LIU Yinghui, ZHOU Yingbiao, et al. The mean optical properties of porous char and its radiative properties[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 1997, 18(2): 251-255. (in Chinese)
- [12] 殷金英,刘林华. 灰渣的有效光学常数及辐射特性[J]. 工程热物理学报, 2009, 30(1): 115-117.
YIN Jinying, LIU Linhua. Effective optical constant and radiative property of coal slag[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2009, 30(1): 115-117. (in Chinese)
- [13] Li J Y, Dong S K, Tan H P. Effective optical constant of alumina particle containing carbon[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2009, 23(1): 216-219.
- [14] 宗鹏程,缪启龙,魏晓奕. 不同混合方案对气溶胶辐射特性的影响[J]. 环境科学研究, 2010, 23(5): 627-633.
ZONG Pengcheng, MIAO Qilong, WEI Xiaoyi. Effect of different mixing scenarios on aerosol radiative properties[J]. Research of Environmental Sciences, 2010, 23(5): 627-633. (in Chinese)
- [15] 张小林,黄印博,饶瑞中. 一种内混合气溶胶粒子模型光散射的等效性[J]. 光学学报, 2012, 32(6): 0629001-0629007.
ZHANG Xiaolin, HUANG Yinbo, RAO Ruizhong. Equivalence of light scattering by one internal-mixed model for aerosol particles[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(6): 0629001-0629007. (in Chinese)
- [16] Jones S B, Friedman S P. Particle shape effects on the effective permittivity of anisotropic or isotropic media consisting of aligned or randomly oriented ellipsoidal particles[J]. Water Resources Research, 2000, 36(10): 2821-2833.
- [17] Choy T C. Effective medium theory-principle and applications[M]. Oxford: Oxford University Press, 1999.
- [18] 尹宏. 大气辐射学基础[M]. 北京: 气象出版社, 1993.