[15] C. E. Carr, Y. K. Pan, T. Y. Chang. Chem. Phys., *18*, 251, 1976.
[16] Б. Ф. Минаев. Изв. вузов, физика, № 6, 159, 1976; Автореф. канд. дисс., Томск, 1973.
[17] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, 165. Наука, М., 1974.
[18] В. А. Губанов, В. П. Жуков, А. О. Литинский. Полуэмпирические методы молекулярных орбиталей в квантовой химии. Наука, М., 1976.
[19] F. O. Ellison, F. M. Matheo. Chem. Phys. Lett., *10*, 322, 1971.
[20] M. Tinkham, M. W. P. Strandberg. Phys. Rev., *97*, 937, 951, 1955.
[21] Б. Ф. Минаев. Опт. и спектр., *42*, 1096, 1977.

Поступило в Редакцию 28 февраля 1978 г.

УДК 535.58

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫХ ЧАСТИЦ МЕТОДОМ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПРОЗРАЧНОСТИ

А. Я. Перельман и *К. С. Шифрин*

1. Пусть монодисперсная система частиц, имеющих форму эллипсоидов вращения, облучается параллельным, монохроматическим пучком света. Если предположить, что уравнение поверхности частицы имеет вид (для определенности эллипсоиды предполагаются вытянутыми)

$$\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2+z^2}{b^2}=1,\ c=\frac{a}{b}>1, \tag{1}$$

то ее ориентация определяется углом Δ между направлением пучка и осью Ox [1]. В случае системы различно ориентированных частиц введем плотность распределения $w(\Delta)$, относительно которой из соображений симметрии предполагаем

$$W(\Delta)\geqslant 0,\ \Delta\in\left[0,\ \frac{\pi}{2}\right];\ w(\Delta)=0,\ \Delta\notin\left[0,\ \frac{\pi}{2}\right]. \tag{2}$$

Эта функция представляет интерес при решении ряда задач физики коллоидных частиц. Цель настоящей работы — указать способ расчета $w(\Delta)$. Мы покажем, что поскольку изменение Δ сводится к изменению радиуса эквивалентной сферы, решение нашей задачи может быть получено методом спектральной прозрачности [2].

2. По [3], коэффициент ослабления $C_{\text{осл.}}$ определяется формулой

$$C_{\text{осл.}}=2\,\mathrm{Re}\,F=\iint\limits_{S\,(0)}(1-e^{-i\varepsilon})\,dS,\ \varepsilon=\frac{2\pi}{\lambda}\,l\,(m-1). \tag{3}$$

Здесь l — длина отрезка луча внутри частицы, λ — длина волны, m — коэффициент преломления. Интегрирование распространяется по области $S(0)$, соответствующей проекции эллипсоида на экран — плоскость перпендикулярную направлению пучка света.

Длина хорды l, получающаяся при пересечении поверхности (1) с лучом

$$\left.\begin{aligned} z&=z_0+x\,\mathrm{tg}\,\Delta,\\ y&=y_0\ (0\leqslant y_0,\ z_0\leqslant b),\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

равна

$$l=\frac{2c}{p^2}\left[p^2\left(b^2-y_0^2\right)-z_0^2\cos^2\Delta\right]^{1/2}, \tag{5}$$

где

$$p^2=\cos^2\Delta+c^2\sin^2\Delta. \tag{6}$$

В плоскости yOz линиям, равным l, соответствуют эллипсы

$$\frac{y_0^2}{b^2-\left(\frac{pl}{2c}\right)^2}+\frac{z_0^2}{\frac{p^2}{\cos^2\Delta}\left[b^2-\left(\frac{pl}{2c}\right)^2\right]}=1, \tag{7}$$

для которых l может меняться в пределах

$$l_{\max}\geqslant l\geqslant 0,\ l_{\max}=\frac{2a}{p}. \tag{8}$$

Отметим, что эллипс (7) при $l=0$ дает проекцию эллипсоида (1) на плоскость yOz при проектировании в направлении (4), а площадь эллипса (7) при любом допустимом l, умноженная на $\cos\Delta$, равна площади $S(l)$ проекции эллипса (7) на экран. Имеем

$$S(l) = \pi p\left(b^2 - \frac{p^2 l^2}{4c^2}\right). \qquad (9)$$

В силу (8) и (9) имеем

$$F = \int\limits_{l_{\max}}^{0} (1 - e^{-i\varepsilon})\,\frac{-\pi p^3 l}{2c^3}\,dl = 2\pi p b^2 \int\limits_0^1 (1 - e^{-i\delta x})\,x\,dx, \qquad (10)$$

где

$$\delta = \frac{\rho}{p}, \quad \rho = 4\pi a\,(m-1)\,\nu, \quad \nu = \frac{1}{\lambda}. \qquad (11)$$

Используя (3) и (10), согласно [3], получим

$$C_{\text{осл.}} = \pi p b^2 Q(\delta), \quad Q(\delta) = 2 - \frac{4}{\delta}\sin\delta + \frac{4}{\delta^2}(1 - \cos\delta). \qquad (12)$$

Формула (12) совпадает с формулой для сферы, указанной в [3], если принять радиус эквивалентной сферы равным $p^{1/2}b$, и заменить m на m^* так, чтобы $a\;(m-1) = p^{3/2}b\;(m^*-1)$.

3. Коэффициент спектрального ослабления среды $\alpha(\nu)$ монодисперсной системы частиц вида (1) и плотность $w(\Delta)$ связаны соотношением

$$\alpha(\nu) = \pi b^2 \int\limits_0^{\pi/2} pQ\left(\frac{\rho}{p}\right) w(\Delta)\,d\Delta. \qquad (13)$$

Заменив в (13) переменную интегрирования

$$\frac{k}{p} = y, \quad k = 4\pi a\,(m-1), \qquad (14)$$

находим

$$\int\limits_{k/c}^{k} Q(\nu y)\,\frac{w(\Delta)}{y^2\sqrt{(c^2y^2 - k^2)(k^2 - y^2)}}\,dy = \frac{\alpha(\nu)}{\pi b^2 k^3}, \qquad (15)$$

где

$$\Delta = \frac{1}{2}\arcsin\frac{2\sqrt{\left(c^2 - \frac{k^2}{y^2}\right)\left(\frac{k^2}{y^2} - 1\right)}}{c^2 - 1}\;\left(\frac{k}{c} \leqslant y \leqslant k\right). \qquad (16)$$

Отметим, что подынтегральная функция в (15) имеет интегрируемые особенности на концах промежутка интегрирования, а вне промежутка интегрирования эта функция становится комплексной.

Положим

$$\frac{\pi b^2 k^3 w(\Delta)}{y^2\sqrt{(c^2y^2 - 1)(k^2 - y^2)}} = f(y). \qquad (17)$$

Теперь основное уравнение (15) можно записать в виде

$$\int\limits_{4\pi b\,(m-1)}^{4\pi a\,(m-1)} Q(\nu y)\,f(y)\,dy = \alpha(\nu). \qquad (18)$$

4. Искомая функция $f(y)$ является решением интегрального уравнения 1-го рода с конечными пределами. Точное решение этой задачи представляет значительные трудности. Укажем способ приближенного решения уравнения (18).

В соответствии с (2) и (17) положим

$$F(y) = \begin{cases} f(y), & 4\pi(m-1)\,b \leqslant y \leqslant 4\pi(m-1)\,a, \\ 0 & \text{в остальных } y \geqslant 0. \end{cases} \qquad (19)$$

Тогда вместо (18) получаем интегральное уравнение типа свертки Меллина

$$\int\limits_0^\infty Q(\nu y)\, F(y)\, dy = \alpha(\nu). \tag{20}$$

Решение уравнения (20) или равносильного ему уравнения

$$\int\limits_0^\infty [Q(\nu y) - Q(\infty)]\, F(y)\, dy = \alpha(\nu) - \alpha(\infty), \ Q(\infty) = 2 \tag{21}$$

дано в [2]. Преобразуем это решение к виду, не содержащему контурные интегралы. Имеем $(-2 < \sigma < 0)$

$$F(y) = \frac{-1}{2\pi} \int\limits_0^\infty [\alpha(\nu) - \alpha(\infty)] \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} [\Gamma_s(p+1) + \Gamma_c(p)]\, (y\nu)^{-p}\, dp \right\} d\nu, \tag{22}$$

где

$$\Gamma_c(p) = \Gamma(p) \cos \frac{\pi p}{2}, \ \ \Gamma_c(p) = \Gamma_s(p) \sin \frac{\pi p}{2}. \tag{23}$$

Легко проверить, что $(-2 < \sigma < 0)$

$$\frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} \Gamma_c(p)\, a^{-p} dp = \cos a - 1, \ \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} \Gamma_s(p+1)\, a^{-p} dp = a \sin a. \tag{24}$$

Из (22) и (24) находим

$$F(y) = \frac{-1}{2\pi} \int\limits_0^\infty [\alpha(\nu) - \alpha(\infty)]\, \omega(y\nu)\, d\nu, \tag{25}$$

где

$$\omega(a) = a \sin a + \cos a - 1. \tag{26}$$

Решение (25), (26) представляет собой модификацию формулы, полученной в [4].

Используя результаты [5], нетрудно убедиться непосредственной подстановкой, что (25) дает решение (21). В самом деле, надо проверить, что

$$\int\limits_0^\infty I(x, \nu)\, [\alpha(x) - \alpha(\infty)]\, dx = \alpha(\nu) - \alpha(\infty) \ (\nu > 0), \tag{27}$$

где

$$I(x, \nu) = \frac{-1}{2\pi} \int\limits_0^\infty [Q(\nu z) - 2]\, \omega(zx)\, dz \ (x > 0, \ \nu > 0). \tag{28}$$

Интеграл (28) можно вычислить так. Имеем

$$I(x, \nu) = \frac{x}{\nu} \delta(x - \beta) - \frac{x}{\nu} \delta(x + \nu) + I_0(x, \nu), \tag{29}$$

где регулярная часть $I_0(x, \nu)$ интеграла (28) легко выписывается. Расчеты показывают, что $I_0(x, \nu) = 0$ при $x > \nu > 0$, где $\nu > x > 0$ и при $\nu = x > 0$ [5], т. е. равенство (27) выполняется при всех $\nu > 0$.

В качестве приближения решения уравнения (18) будем брать функцию

$$f(y) = F(y), \ 4\pi(m-1)\, b \leqslant y \leqslant 4\pi(m-1)\, a. \tag{30}$$

Разумеется, при обращении экспериментальных данных о коэффициенте ослабления среды по формуле (25) соотношение (19) не будет выполняться строго и здесь требуется найти условия, при которых точность полученного приближения окажется удовлетворительной. В частности, такую оценку можно получить, используя конкретные типы распределений $w(\Delta)$. Влияние ориентации частиц на спектральное ослабление света, очевидно, будет существенно только для сильно вытянутых эллипсоидов ($c \gg 1$), и, в частности, для данных тонких нитей ($b \ll 1$, $a \gg 1$). В последнем случае ошибка, связанная с заменой интегрального уравнения (18) на уравнение (20), мала и может быть оценена в общем виде, а приближенное решение (30) дает удовлетворительную аппроксимацию решения основного интегрального уравнения (18).

В заключение отметим, что устойчивость обращения интегральных уравнений с ядрами типа (12) подробно исследована в [6-8]. В этих работах не только выполнена серия численных экспериментов для различных моделей, при которых в точно рассчитанные левые части были добавлены погрешности, типичные для оптического эксперимента, но и даны аналитические оценки погрешности обращения в зависимости от ошибок входных данных.

Литература

[1] К. С. Шифрин. Рассеяние света в мутной среде. Гостехтеоретиздат, 288, М.,—Л. 1951.
[2] К. С. Шифрин, А. Я. Перельман. ДАН СССР, *151*, 326, 1963.
[3] Ван де Хюлст. Рассеяние света малыми частицами. ИЛ, 536, М., 1961.
[4] К. С. Шифрин, И. Б. Колмаков, В. И. Чернышев. ФАО, 5, 1085, 1969.
[5] А. Я. Перельман, В. А. Пунина. Изв. вузов, математика, *3* (*106*), 61, 1971.
[6] К. С. Шифрин, А. Я. Перельман. Опт. и спектр., *16*, 117, 1964.
[7] К. С. Шифрин, А. Я. Перельман. ФАО, *1*, 964, 1965.
[8] А. Я. Перельман. ЖФМиМФ, *7*, 94, 1967.

Поступило в Редакцию 19 мая 1978 г.