KfK 3678 Februar¹ 1984

OPTIMA Berechnung der optischen Eigenschaften einzelner Mie-Partikeln mit homogener oder schalenförmiger Struktur

G. Metzig Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Laboratorium für Aerosolphysik und Filtertechnik

KfK 3678

ΟΡΤΙΜΑ

Berechnung der

optischen Eigenschaften einzelner Mie-Partikeln mit homogener oder schalenförmiger Struktur

G. Metzig

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

,

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Es wird die Berechnung der Streueigenschaften einzelner Mie-Partikel mit homogener oder schalenförmiger Struktur beschrieben. Die exakten Mie-Funktionen, bezogen auf die Streuung elektromagnetischer Wellen an dielektrischen und teilweise absorbierenden Kugeln, werden bestimmt. Mit Hilfe der komplexen Mie-Streukoeffizienten werden alle abgeleiteten Größen, wie z. B. die Mie-Intensitäts- und -Amplitudenfunktionen, die Extinktions-, Streu- und Absorptionswirkungsfaktoren, die Stokesvektoren, der Polaritätsgrad usw. berechnet. Es wird eine Genauigkeit der numerischen Ergebnisse von vier geltenden Ziffern für komplexe Brechungsindizes und Größenparameter atmosphärischer Aerosole im sichtbaren und infraroten Spektralbereich erreicht.

Es besteht die Möglichkeit, die Streueigenschaften von Partikelpolydispersionen zu bestimmen. Als Beispiel wird ein Rußaerosol behandelt, auf dem sich ein Wasserfilm unterschiedlicher Dicke befindet.

Abstract

Optima - Computation of the optical properties of single homogeneous or coated Mie-particles

The computation of the scattering properties of single homogeneous or coated Mie-particles is described. The exact Mie-functions, related to the scattering of electromagnetic waves on dielectric and partially absorbing spheres, are calculated. By means of the complex Mie scattering coefficients all derived quantities may be determined, i.e. the Mie-intensityand -amplitude functions, the extinction, scattering, and absorption efficiencies, the Stokes-vectors, the degree of polarization etc. An accuracy of four decimal places is obtained for complex indices of refraction and size parameters corresponding to atmospheric particles illuminated by visible and infrared radiation.

The possibility to evaluate the scattering properties of particle polydispersions is included. A soot particle coated with a water film of different thickness is taken for sample calculations.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung II Liste der verwendeten Symbole 1 1 Einleitung 2 Streueigenschaften einzelner Kugeln mit schalenförmiger 3 Struktur 3 9 Streueigenschaften von Partikelpolydispersionen 4 11 Rechenprozedur und Rekursionsformeln 5 15 Ein- und Ausgabestruktur des Programms 6 Eingabeparameter für die Fallstudie 20 7 21 Ergebnisse der Fallstudie 8 70 Literaturverzeichnis

Danksagung

71

Seite

Liste der verwendeten Symbole

a, b _n	: Mie-Koeffizienten n-ter Ordnung
f()	: Volumenstreufunktion
i ₁ , i ₂	: Grad der linearen Polarisation
i ₃	: Polarisationsebene
i ₄	: Elliptizität
m	: komplexer Brechungsindex
^m k	: komplexer Brechungsindex des Kerns
m m	: komplexer Brechungsindex des Mantels
r	: Radius der Kugel
r _k	: Radius des Kerns
r/r _k	: Radius Kugel/Radius Kern
x	: Größenparameter der Kugel
×k	: Größenparameter des Kerns
E ₁	: Streufeldkomponente senkrecht zur Streuebene
E ₂	: Streufeldkomponente parallel zur Streuebene
F _i ()	: Intensitätswirkungsfaktor
N	: Anzahl der Partikeln
Q _a	: Absorptionswirkungsfaktor
Q _e	: Extinktionswirkungsfaktor
Q _s	: Streuwirkungsfaktor
Im { }	: Imaginärteil von { }

Re { } : Realteil von {	.1 von { }
-------------------------	------------

 $J_{n + 1/2}$ (): Besselfunktionen der ersten Art von der Ordnung (n + 1/2) $Y_{n + 1/2}$ (): Besselfunktionen der zweiten Art von der Ordnung (n + 1/2) $H_{n + 1/2}^{(2)}$ (): Hankelfunktionen der zweiten Art von der Ordnung (n + 1/2) P_{n} (): Legendresche Polynome

a	: Volumenabsorptionskoeffizient
αe	: Volumenextinktionskoeffizient
α s	: Volumenstreukoeffizient
v	: Zenitwinkel
λ	: Wellenlänge
π	: Zahl Pi
π^{n}, τ^{n}	: Winkelkoeffizienten
σ	: spektrale Streustrahlung
σ a	: Absorptionsquerschnitt
σe	: Extinktionsquerschnitt
σ s	: Streuquerschnitt
4	: Azimutwinkel
θ	: Streuwinkel
Ω	: Raumwinkel
$\Psi_{n}(\cdot)$ $\chi_{n}(\cdot)$	Ricatti-Bessel-Funktionen
ξ _n () Ψ' _n ()	
χ' _n () ξ' _n ()	Ableitungen der Riccatti-Bessel-Funktionen

1 Einleitung

Die Theorie der Streuung einer elektromagnetischen Welle an einem kugelförmigen Metallpartikel wurde von Mie (1908) begründet. Erweiterungen dieser Theorie, z. B. Kugeln mit schalenförmigem Aufbau oder auch für ausgewählte, nichtkugelförmige Teilchen sind u. a. bei van de Hulst (1957) und bei Kerker (1969) zusammengefaßt.

- 1 -

Die Übertragung dieser Theorie auf atmosphärische Bedingungen ermöglicht die Lösung der verschiedensten Problemstellungen beim Strahlungstransport, bei der Aerosolmeßtechnik, bei der Fernerkundung usw. Die Wechselwirkung zwischen Aerosolen und elektromagnetischer Strahlung ist bis heute noch nicht vollständig erfaßt. Hier bietet sich das vorliegende Rechenprogramm an, experimentelle Arbeiten zu unterstützen.

Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt mit Hilfe der Riccati-Bessel-Funktionen. Bei reinen dielektrischen Kugeln genügen Riccati-Bessel-Funktionen mit realem Argument. Diese lassen sich relativ einfach bestimmen, zumal die Lösungen tabellarisch in der Literatur dokumentiert sind (z. B. Abramowitz und Stegun, 1972). Lösungen werden auch durch maschineninterne Programme angeboten, jedoch nur bis zur Ordnung 29 + 0.5. Dies reicht für atmosphärische Anwendungen nicht aus, da die Riccati-Bessel-Funktionen teilweise bis zur 100 + 0.5ten Ordnung bestimmt werden müssen. Bei Kugeln mit Absorption müssen die Riccati-Bessel-Funktionen für komplexe Argumente berechnet werden. Dies erfordert hohe Ansprüche an die Rechengenauigkeit. Für homogene Kugeln haben Deirmendjian et al. (1961), Quenzel und Müller (1978) u. a. Lösungsmöglichkeiten und Ergebnisse veröffentlicht.

Die Behandlung von Kugeln mit schalenförmiger Struktur ist noch diffiziler, da hier noch häufiger die Bildung von Differenzen und Quotienten sehr kleiner Größen durchgeführt werden muß. So liegt der Schwerpunkt der Arbeit in der Bereitstellung des Rechenprogramms, insbesondere in der Implementierung des Programms auf einer IBM-kompatiblen Datenverarbeitungsanlage. Erst die konsequente Benutzung doppeltgenauer Variablen und verschiedener Rekursionsformelnfür die Bessel-Funktionen führte zu fehlerfreien Ergebnissen. Bei homogenen Kugeln wird eine Übereinstimmung von vier geltenden Ziffern mit Quenzel und Müller (1978) erreicht. Die Rechenprozedur besteht aus drei Teilen:

- ein Hauptprogramm zur Berechnung der optischen Eigenschaften usw.

- ein Unterprogramm zur Erzeugung eines Plots auf dem Drucker
- ein weiteres Hauptprogramm zur Erzeugung von Zeichnungen auf einem externen Plotter.

2 Streueigenschaften einzelner Kugeln mit schalenförmiger Struktur

Die Mie-Streuung (Mie, 1908) für homogene Kugeln mit komplexem Brechungsindex ist ausführlich bei van de Hulst (1957), Deirmendjian et al. (1961), Kerker (1969), Quenzel et al. (1978) u. a. zusammengefaßt. In dieser Arbeit stehen Kugeln mit schalenförmiger Struktur im Mittelpunkt.

Das Streufeld einer elektromagnetischen Welle wird durch seine Komponenten senkrecht (E₁) und parallel (E₂) zur Streuebene beschrieben. Wenn die einfallende elektromagnetische Welle unpolarisiert und von der Größenordnung 1 ist, berechnen sich die Komponenten wie folgt:

$$E_{1} = \frac{2\pi}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_{n} \pi + b_{n} \tau_{n})$$
(2.1)

$$E_{2} = \frac{2\pi}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (b_{n} \pi_{n} + a_{n} \tau_{n})$$
(2.2)

Die Winkelkoeffizienten π_n und τ_n sind definiert wie bei van de Hulst (1957). Aus den komplexen Mie-Streukoeffizienten a_n und b_n können alle abgeleiteten Größen berechnet werden. Die Mie-Streukoeffizienten selbst sind durch folgende Gleichungen bestimmt:

$$a_{n} = \frac{S_{n}^{1} \cdot S_{n}^{2} - S_{n}^{3} \cdot S_{n}^{4}}{S_{n}^{1} \cdot S_{n}^{5} - S_{n}^{3} \cdot S_{n}^{6}}$$
(2.3)

$$b_{n} = \frac{T_{1} \cdot T_{2} - T_{3} \cdot T_{4}}{T_{1} \cdot T_{5} - T_{3} \cdot T_{6}}$$
(2.4)

Dabei bedeuten die Terme im einzelnen:

$$S1_{n} = m_{k} \cdot A_{n} (m_{m} \cdot x_{k}) \cdot \Psi_{n}(m_{k} \cdot x_{k}) - m_{m} \cdot \Psi'_{n}(m_{k} \cdot x_{k})$$
(2.5)

$$S2_{n} = B_{n} (m_{m} \cdot x) \cdot \Psi_{n} (x) - m_{m} \cdot \Psi'_{n} (x)$$
(2.6)

$$S3_{n} = m_{k} \cdot B_{n} (m_{k} \cdot x_{k}) \cdot \Psi_{n} (m_{k} \cdot x_{k}) - m_{m} \cdot \Psi'_{n} (m_{k} \cdot x_{k})$$
(2.7)

$$S4_{n} = A_{n} (m_{m} \cdot x) \cdot \Psi_{n} (x) - m_{m} \cdot \Psi'_{n} (x)$$
(2.8)

$$S5_{n} = B_{n} (m_{m} \cdot x) \cdot \xi_{n} (x) - m_{m} \cdot \xi'_{n} (x)$$
(2.9)

$$S6_n = A_n (m_m \cdot x) \cdot \xi_n (x) - m_m \cdot \xi'_n (x)$$
 (2.10)

$$T1_{n} = m_{m} \cdot A_{n} (m_{m} \cdot x_{k}) \cdot \Psi_{n} (m_{k} \cdot x_{k}) - m_{k} \cdot \Psi'_{n} (m_{k} \cdot x_{k})$$
(2.11)
$$T2 = m \cdot B (m \cdot x) \cdot \Psi (x) - \Psi' (x)$$
(2.12)

$$T3_{n} = m_{m} \cdot B_{n} (m_{m} \cdot x_{k}) \cdot \Psi_{n} (m_{k} \cdot x_{k}) - m_{k} \cdot \Psi'_{n} (m_{k} \cdot x_{k})$$
(2.13)

$$T4_{n} = m_{m} \cdot A_{n} (m_{m} \cdot x) \cdot \Psi_{n} (x) - \Psi'_{n} (x)$$
 (2.14)

$$T5_{n} = m_{m} \cdot B_{n} (m_{m} \cdot x) \cdot \xi_{n} (x) - \xi'_{n} (x)$$
(2.15)
$$T6_{n} = m_{m} \cdot A_{n} (m_{m} \cdot x) \cdot \xi_{n} (x) - \xi'_{n} (x)$$
(2.16)

Es gelten folgende Definitionen:

$$A_{n} (m \cdot x) = \frac{d\Psi_{n} (m \cdot x) / d(m \cdot x)}{\Psi_{n} (m \cdot x)}$$
(2.17)

$$B_{n} (m \cdot x) = \frac{d\chi_{n} (m \cdot x) / d(m \cdot x)}{\chi_{n} (m \cdot x)}$$
(2.18)

Der Größenparameter:

$$x = \frac{2\pi r}{\lambda}$$
(2.19)

Die Riccati-Bessel-Funktionen Ψ_n (z) und χ_n (z):

$$\Psi_{n}(z) = \sqrt{\frac{\pi \cdot z}{2}} \cdot J_{n+1/2}(z)$$
 (2.20)

$$X_{n}(z) = \sqrt{\frac{\pi \cdot z}{2}} \quad Y_{n+1/2}(z)$$
 (2.21)

$$\xi_{n}(z) = \sqrt[n]{\frac{\pi \cdot z}{2}} H_{n+1/2}^{(2)}$$
 (2.22)

wobei die J $_{n + 1/2}$ (z) modifizierte sphärische Bessel-Funktionen der ersten Art von der Ordnung n + 1/2, die Y $_{n + 1/2}$ (z) der zweiten Art von der Ordnung n + 1/2 und die H $_{n + 1/2}^{(2)}$ der dritten Art von der Ordnung n + 1/2 sind. Letztere werden auch als Hankel-Funktionen, hier der zweiten Art bezeichnet.

Die Winkelkoeffizienten (definiert bei van de Hulst (1957))sind nur vom Streuwinkel abhängig. Sie lassen sich mit Hilfe der Legendreschen Polynome bestimmen.

$$\pi_{n} = \frac{d P_{n} (\cos \theta)}{d \cos \theta} = \pi_{n} (\cos \theta)$$
(2.23)

$$\pi_{n} = \cos \theta \cdot \pi_{n} (\cos \theta) - \sin^{2} \theta \quad \frac{d \pi_{n} (\cos \theta)}{d \cos \theta}$$
(2.24)

Mit der Kenntnis aller Größen aus den Gleichungen (2.1) und (2.2) sind die folgenden abgeleiteten Größen sehr leicht zu berechnen:

$$i_{1} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x, \theta) = (\frac{2\pi}{\lambda})^{2} \cdot |E_{1}|^{2} = (\frac{2\pi}{\lambda})^{2} E_{1} E_{1}^{*}$$
 (2.25)

$$i_2 (m_k, m_m, r/r_k, x, \theta) = (\frac{2\pi}{\lambda})^2 \cdot |E_2|^2 = (\frac{2\pi}{\lambda})^2 E_2 E_2^*$$
 (2.26)

$$i_{3}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x, \theta) = (\frac{2\pi}{\lambda})^{2} \cdot \text{Re} \{E_{1}, E_{2}^{*}\}$$
 (2.27)

$$i_4 (m_k, m_m, r/r_k, x, \theta) = - (\frac{2\pi}{\lambda})^2 \cdot Im \{E_1 E_2^*\}$$
 (2.28)

Der Stern kennzeichnet die konjugiert komplexen Zahlen. Die i₁ und i₂, normalisiert mit $(\frac{2\pi}{\lambda})^2$, repräsentieren die Intensitäten der Streuquelle (Fluß pro Einheitsraumwinkel) unter der Annahme von unpolarisiert einfallendem Fluß von zwei Einheiten. Sie beschreiben den Grad der linearen Polarisation. Die Größen i₃ und i₄ stehen im Zusammenhang mit den Stokes-Parametern, i₃ gibt die Polarisationsebene und i₄ die Elliptizität an.

Die spektrale Streustrahlung, d. h. die gestreute spektrale Strahlungsintensität pro Einheitsraumwinkel, ist:

spektrale Streustrahlung =
$$\frac{\left|E_{1}\right|^{2} + \left|E_{2}\right|^{2}}{2}$$
 (2.29)

Unter der Bedingung von unpolarisiert einfallendem Fluß der Größenordnung 1, beschreibt die spektrale Streustrahlung den Anteil der einfallenden Strahlung, der unter dem Streuwinkel θ in den Einheitsraumwinkel hinein gestreut wird. Dieser Anteil wird durch den differentiellen Streuquerschnitt beschrieben.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|E_1|^2 + |E_2|^2}{2}$$
(2.30)

Unter Berücksichtigung der Gleichungen (2.25) und (2.26) kann der differentielle Streuquerschnitt mit den Intensitätsparametern ausgedrückt werden.

$$\frac{d \sigma (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda, \theta)}{d \Omega} = \frac{(\frac{\lambda}{2\pi})^{2} \cdot \frac{i_{1} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x, \theta) + i_{2} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x, \theta)}{2} \qquad (2.31)$$

Da der differentielle Streuquerschnitt mit wachsendem Größenparameter schnell große Werte annimmt, wird er auf den geometrischen Querschnitt des Partikels bezogen. Die so erhaltene dimensionslose Größe wird als Intensitätswirkungsfaktor bezeichnet. Dieser hat den gleichen Wert wie das Verhältnis von der aus dem Einheitsraumwinkel in Richtung θ gestreuten Energie zum geometrischen Querschnitt des Partikels.

$$F_{i} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x, \theta) = \frac{1}{\pi \cdot r^{2}} \frac{d \sigma(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda, \theta)}{d \Omega} (2.32)$$
$$= (\frac{\lambda}{2\pi})^{2} \cdot \frac{1}{\pi \cdot r^{2}} \cdot \frac{i_{1} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x, \theta) + i_{2} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x, \theta)}{2} (2.33)$$

Den Streuquerschnitt eines Partikels erhält man durch Integration des differentiellen Streuquerschnitts über alle Streuwinkel, d. h. alle Raumwinkel. Aus Gründen der Orthogonalität kann das Integral durch eine unendliche Reihe ersetzt werden.

$$\sigma_{s} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda)$$

$$= \int_{=0}^{4\pi} \int_{=0}^{\pi} \frac{d \sigma (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda, \theta)}{d \Omega} \sin \sqrt{d} \sqrt{d} q \qquad (2.34)$$

$$= \frac{2}{X^{2}} \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) \{|a_{n}|^{2} + |b_{n}|^{2}\} \qquad (2.35)$$

Den dimensionslosen Streuwirkungsfaktor erhält man wiederum durch Division des Streuquerschnitts des Partikels durch seinen geometrischen Querschnitt.

$$Q_{s}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x) = \frac{1}{\pi r^{2}} \cdot \sigma_{s}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda)$$
 (2.36)

In ähnlich einfacher Weise lassen sich auch die entsprechenden Größen für die Extinktion finden:

$$\sigma_{\rm e} (m_{\rm k}, m_{\rm m}, r/r_{\rm k}, r, \lambda) = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) \cdot \operatorname{Re} \{a_n + b_n\}$$
 (2.37)

und

$$Q_{e}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda) = \frac{1}{\pi r^{2}} \cdot \sigma_{e}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda)$$
 (2.38)

Die entsprechenden Größen für die Absorption bestimmen sich aus den obigen Angaben, da folgende Beziehung gilt:

Extinktion = Streuung + Absorption (2.39)

3 Streueigenschaften von Partikelpolydispersionen

Polydispersionen von Partikeln mit schalenförmiger Struktur sind zu behandeln wie Polydispersionen von homogenen Partikeln. Es muß aber dabei beachtet werden, daß für einen Partikelradius Partikeln mit unterschiedlichem Verhältnis Mantel/Kern existieren können. Ungeachtet dessen erhält man die optischen Eigenschaften von Partikelpolydispersionen durch Summation der optischen Eigenschaften aller einzelnen Partikeln.

Der pro Einheitsweglänge in die Richtung θ pro Einheitsraumwinkel gestreute Anteil der Energie parallel einfallender Strahlung wird als Volumenstreufunktion bezeichnet:

$$f(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, \lambda, \theta) = \int_{0}^{\infty} \frac{d \sigma(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda, \theta)}{d \Omega} \cdot \frac{d N (r/r_{k}, r)}{dr} \cdot dr$$
(3.1)

 $dN(r/r_k, r)/dr$ bezeichnet die Partikelanzahlverteilung, wobei $dN(r/r_k, r)$ die Anzahl der Partikeln mit einem Radius zwischen r und r + dr und dem Radienverhältnis zwischen r/r_k und (r + dr)/(r_k + d_{r_k}) ist.

Mit Gleichung (2.32) vereinfacht sich die obige Beziehung

$$f(m_k, m_m, r/r_k, \lambda, \theta) = \int_{0}^{\infty} F_i(m_k, m_m, r/r_k, x, \theta) \cdot \pi \cdot r^2 \frac{dN(r/r_k)}{dr} dr$$
(3.2)

In analoger Weise wird der Volumenstreukoeffizient durch Integration der Volumenstreufunktion über alle Streuwinkel definiert. Einfacher läßt er sich jedoch aus dem Streuquerschnitt der einzelnen Partikeln bestimmen:

$$\alpha_{s} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, \lambda) = \int_{Kuge1} f (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, \lambda, \theta) d \Omega \qquad (3.3)$$

$$= \int_{0}^{\infty} \sigma_{s} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda) \frac{dN(r/r_{k}, r)}{dr} dr (3.4)$$
$$= \int_{0}^{\infty} Q_{s} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x) \pi r^{2} \frac{dN(r/r_{k}, r)}{dr} dr (3.5)$$

Für den Volumenextinktions- und den Volumenabsorptionskoeffizienten lassen sich die gleichen Aussagen machen:

$$\alpha_{e}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, \lambda) = \int_{0}^{\infty} \sigma_{e}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda) \frac{dN(r/r_{k}, r)}{dr} dr \quad (3.6)$$
$$= \int_{0}^{\infty} Q_{e}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x) \cdot \pi r^{2} \frac{dN(r/r_{k}, r)}{dr} dr \quad (3.7)$$

$$\alpha_{a}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, \lambda) = \int_{0}^{\infty} \sigma_{a}(m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, r, \lambda) \frac{dN(r/r_{k}, r)}{dr} dr \qquad (3.8)$$

$$= \int_{0}^{\infty} Q_{a} (m_{k}, m_{m}, r/r_{k}, x) \cdot \pi r^{2} \frac{dN(r/r_{k}, r)}{dr} dr \quad (3.9)$$

4 Rechenprozedur und Rekursionsformeln

Im Rechenprogramm werden die optischen Eigenschaften einzelner Partikeln berechnet. Die optischen Eigenschaften von Partikelpolydispersionen werden entsprechend ihrer Anzahlverteilung additiv zusammengesetzt. Als Vorbild dient das Rechenprogramm für homogene Kugeln von Quenzel und Müller (1978). Mathematische Hilfen von Deirmendjian (1961, 1969) und Kerker (1969) werden berücksichtigt.

Zur Berechnung der Mie-Koeffizienten der n-ten Ordnung und der entsprechenden Winkelfunktionen sind Rekursionsformeln notwendig.

Für die Gleichungen (2.5) bis (2.16) werden folgende Ausdrücke vorgeschlagen, in denen verschiedene Rekusionsformeln für die Besselfunktionen eingearbeitet sind (Abramowitz und Stegun, 1972; Spiegel, 1971):

$$S1_{n} = \left(\frac{m_{k}}{m_{m}} \cdot A_{n} \left(m_{m} \cdot x_{k}\right)\right) - A_{n} \left(m_{k} \cdot x_{k}\right)$$
(4.1)

$$S2_{n} = \left(\frac{1}{m_{m}} \cdot B_{n} (m_{m} \cdot x) + \frac{n}{x}\right) \cdot Re \{w_{n}(x)\} - Re \{w_{n-1}(x)\}$$
(4.2)

$$S3_{n} = \left(\frac{m_{k}}{m_{m}} \cdot B_{n} \left(m_{m} \cdot x_{k}\right)\right) - A_{n} \left(m_{k} \cdot x_{k}\right)$$
(4.3)

$$S4_n = (\frac{1}{m_m} \cdot A_n (m_m \cdot x) + \frac{n}{x}) \cdot Re \{w_n(x)\} - Re \{w_{n-1}(x)\}$$
(4.4)

$$S5_{n} = \left(\frac{1}{m_{m}} \cdot B_{n} (m_{m} \cdot x) + \frac{n}{x}\right) \cdot w_{n} (x) - w_{n-1} (x)$$
(4.5)

$$S6_{n} = \left(\frac{1}{m_{m}} \cdot A_{n} (m_{m} \cdot x) + \frac{n}{x}\right) \cdot w_{n}(x) - w_{n-1}(x)$$
(4.6)

$$T1_{n} = \left(\frac{m}{m_{k}} \cdot A_{n} (m_{m} \cdot x_{k})\right) - A_{n} (m_{k} \cdot x_{k})$$
 (4.7)

$$T2_{n} = (m_{m} \cdot B_{n} (m_{m} \cdot x) + \frac{n}{x}) \cdot Re \{w_{n}(x)\} - Re \{w_{n-1}(x)\}$$
(4.8)

$$T3_{n} = \left(\frac{m}{m_{k}} \cdot B_{n} (m_{m} \cdot x_{k})\right) - A_{n} (m_{k} \cdot x_{k})$$

$$(4.9)$$

$$T4_{n} = (m_{m} \circ A_{n} (m_{m} \circ x) + \frac{n}{x}) \circ Re \{w_{n}(x)\} - Re \{w_{n-1}(x)\}$$
(4.10)

$$T5_n = (m_m \cdot B_n (m_m \cdot x) + \frac{n}{x}) \cdot w_n (x) - w_{n-1} (x)$$
 (4.11)

$$T6_n = (m_m \cdot A_n (m_m \cdot x) + \frac{n}{x}) \cdot w_n (x) - w_{n-1} (x)$$
 (4.12)

Die A_n (m·x) und B_n (m·x) leiten sich aus den folgenden Rekursionsformeln ab:

$$A_{n}(m \cdot x) = -\frac{n}{m \cdot x} + -\frac{n}{m \cdot x} - A_{n-1}(m \cdot x) - -1$$
(4.13)

$$B_{n}(m \cdot x) = -\frac{n}{m \cdot x} + \frac{1}{2} - \frac{n}{m \cdot x} + B_{n-1}(m \cdot x) - \frac{1}{2}$$
(4.14)

beginnend mit

$$A_{O}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{x}) = \frac{\cos(\mathbf{m} \cdot \mathbf{x})}{\sin(\mathbf{m} \cdot \mathbf{x})}$$
(4.15)

$$B_{O}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{x}) = \frac{\sin (\mathbf{m} \cdot \mathbf{x})}{\cos (\mathbf{m} \cdot \mathbf{x})}$$
(4.16)

Die Besselfunktionen mit komplexen Argumenten stellen an die Rechengenauigkeit hohe Anforderungen. Dies ergibt sich aus der Eigenschaft, daß für genügend große Argumente die Besselfunktionen der ersten und zweiten Art nahezu gleich sind. Daher können wegen der häufigen Differenzenbildung Fehler bei der Berechnung der Mie-Koeffizienten auftreten. Durch besondere Vorkehrungen (siehe Abramowitz und Stegun, 1972) läßt sich diese Fehlerquelle einschränken, d. h. zu noch größeren Argumenten verschieben. Es gibt also ein maximales Argument, für welches die Berechnung der unendlichen Reihen noch korrekte Werte liefert (siehe auch Quenzel und Müller, 1978). Bei IBM-kompatiblen Datenverarbeitungsanlagen müssen die Operationen unbedingt doppeltgenau durchgeführt werden. Eine weitere Fehlerquelle kann nur durch konsequente Benutzung des doppeltgenauen Datentyps und der doppeltgenauen internen Maschinenfunktionen vermieden werden. So hat es sich gezeigt, daß auch Konstanten unbedingt doppeltgenau eingelesen werden müssen.

Die Berechnung der $w_n(x)$ erfolgt nach folgender Rekursionsformel:

$$w_n(x) = \frac{2n-1}{x} \cdot w_{n-1}(x) - w_{n-2}(x)$$
 (4.17)

Diese Reihe beginnt mit den Startwerten

$$w_{0}(x) = \sin(x) + i \cdot \cos(x)$$
 (4.18)

$$w_{-1}(x) = \cos(x) - i \cdot \sin(x)$$
 (4.19)

Die benutzte Rekursionsformel für die Winkelkoeffizienten lautet:

$$\pi_{n}(\theta) = \cos(\theta) \cdot \frac{2n-1}{n-1} \cdot \pi_{n-1}(\theta) - \frac{1}{n-1} \cdot \pi_{n-2}(\theta)$$
(4.20)

Startwerte:

$$\pi_{0}(\theta) = 0 \tag{4.21}$$

$$\pi_1(\theta) = 1 \tag{4.22}$$

$$\pi_2(\theta) = 3 \cdot \cos(\theta) \tag{4.23}$$

$$\tau_{n}(\theta) = \cos(\theta) \cdot \{\pi_{n}(\theta) - \pi_{n-2}(\theta)\}$$
$$- (2n-1)\sin^{2}(\theta) \cdot \pi_{n-1}(\theta) + \tau_{n-2}(\theta) \qquad (4.24)$$

Startwerte:

$$\tau_0(\theta) = 0 \tag{4.25}$$

$$\tau_1(\theta) = \cos(\theta) \tag{4.26}$$

$$\tau_2(\theta) = 3 \circ \{ \cos^2(\theta) - \sin^2(\theta) \}$$

$$(4.27)$$

Es ist zu beachten, daß die Reihen zur Berechnung der Mie-Koeffizienten mit n = 1 beginnen. Die Reihenentwicklung der Mie-Koeffizienten wird unter den folgenden Voraussetzungen abgebrochen:

$$\frac{(|a_n|^2 + |b_n|^2)}{n} < 10^{-18}$$
(4.28)

oder

$$n \ge 1.2 \cdot x + 9,$$
 (4.29)

Die Beiträge der Reihenglieder höherer Ordnung liegen im Bereich der Rechenungenauigkeit der Mie-Koeffizienten.

5 <u>Ein-</u> und Ausgabestruktur des Programms

•

Alle zur Berechnung notwendigen externen Größen werden dem Programm per Datenkarten mitgeteilt. Dabei können die Variablen entsprechend der gestellten Aufgabe verschiedene Werte annehmen. Es bedeutet im einzelnen:

1. Datenkarte:

"BNDART":	: Form des Ausdrucks(entsprechend der Angaben in Tabelle 5.1) ==> "KEINP", "ENG", "I1234"
"AUSDRU"	: Form des Ausdrucks (siehe Tabelle 5.1) ==> "KURZ", "NORM", "LANG", "ELNG"
"INTEGR"	: Integration über eine Anzahlverteilung ==> "JA", "NEIN"
"PLATTE"	: Formatfreies Schreiben von Daten auf UNIT 7 ==> "JA", "NEIN"
"DRUPLO"	: Druckerplot der Phasenfunktion ==> "JA", "NEIN"
"IKURV"	<pre>: Anzahl der Phasenfunktionen in einem Plot ==> 1,2,, 10</pre>
"IVERT"	: Anzahl der zu integrierenden Verteilungsfunktionen für einen vorgegebenen Partikelgrößenbereich

"AUSDRU" "BNDART"	KURZ	NORM	LANG	ELANG
KEINP "keine Phase	Q _a , Q _e , Q _s	-	Q _a . Q _e , Q _s ^a n, ^b n a _n ² , b _n ²	$Q_{a}^{}, Q_{e}^{}, Q_{s}^{}$ $a_{n}^{}, b_{n}^{}$ $ a_{n}^{} ^{2}, b_{n}^{} ^{2}$
ENG	Q _a , Q _e , Q _s Phasen- funktion	Q _a , Q _e , Q _s (i ₁ + i ₂)/2 Phasen- funktion	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$ $(i_1 + i_2)/2$ Phasenfunktion	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$ $(i_1 + i_2)/2$ Mie-Amplituden Phasenfunktion
I1234	Q _a , Q _e , Q _s Phasen- funktion	Q _a , Q _e , Q _s i ₁ , i ₂ i ₃ , i ₄ (i ₁ + i ₂)/2 Polarisa- tionsgrad, Phasen- funktion	Q_a, Q_e, Q_s a_n, b_n $ a_n ^2, b_n ^2$ i_1, i_2 i_3, i_4 $(i_1 + i_2)^2$ Polarisations- grad Phasenfunktion	Q_a , Q_e , Q_s a_n , b_n $ a_n ^2$, $ b_n ^2$ i_1 , i_2 i_3 , i_4 $(i_1 + i_2)/2$ Polarisations- grad, Mie-Am- plituden, Pha- senfunktion

Tab. 5.1 Steuerung des Ausdrucks mittels der Variablen "AUSDRU" und "BNDART"

2. Datenkarte:

"IANZ" : Anzahl der verschiedenen Streuwinkelintervalle ==> 0: = Standartverteilung: 0. (0.2) 2. 3. (1.0) 10. 12. (2.0) 170.

- 171. (1.0) 180.
- > 0: Anzahl der Intervalle

Es folgen "IANZ"-Datenkarten mit je

"ANF"	:	1. Streuwinkel im Intervall
"DELTA"	:	Schrittweite
"END"	:	Letzter Streuwinkel im Intervall

nächste Datenkarte:

"TEXT" : Hier kann ein Text von max. 72 Zeichen eingegeben werden, der im Ausdruck erscheint

nächste Datenkarte:

"(ReBRECHM, - Im BRECHM)": komlexer Brechungsindex des Mantels "WELLE": Wellenlänge in µm

nächste Datenkarte:

"(ReBRECHK,-Im	BRECHK)":	komp1e	exer	Brech	ungsi	inde	k des Kern	ns
"AKERN"	:	Anteil	des	Kernr	adius	s voi	n Gesamtra	adius
	0:	Teilche	en bo	esteht	nur	aus	Material	Mantel
	1:	Teilche	en be	esteht	nur	aus	Material	Kern

"IAM" : Anzahl der Moden der Verteilungsfunktion ==> 0: keine Verteilungsfunktion 1: Verteilungsfunktion nach Shettle und Fenn (1975) 2,3: 3 ist maximaler Wert

Es folgen "IAM"-Datenkarten mit je:

"VCON1"	:	Konstante	1	für	die	Verteilungsfunktion
"VCON2"	:	Konstante	2	für	die	Verteilungsfunktion
"VCON3"	:	Konstante	3	für	die	Verteilungsfunktion
"VCON4"	:	Konstante	4	für	die	Verteilungsfunktion

nächste Datenkarte

"IANZ"	: Anzahl der Größenparameterintervalle
	==> 0: Automatische Einteilung Delta = 0.05 • x
	Setzen von "AUSDRU" = "KURZ" (Wegen der vielen
	Intervalle wären sonst Unmengen an Ausdruck
	zu erwarten)
	"DELTA" wird nicht eingelesen!!!
	> 0 : Anzahl der Intervalle

Es folgen "IANZ"-Datenkarten, jedoch mindestens eine, mit je:

"ANF"	: 1. Größenparameterwert im Intervall
"DELTA"	: Schrittweite
"END"	: letzter Größenparameterwert im Intervall

Der Ausdruck wird über die Variablen "BNDART" und "AUSDRU" gesteuert. Darüber hinaus werden auch alle anderen notwendigen Angaben ausgedruckt, wie z. B. die Wellenlänge, die komplexen Brechungsindices, die Verteilungsfunktion, der Anteil des Kernradius vom Gesamtradius und vieles mehr. Die Ausgabe von Daten auf UNIT 7 dient zur Bereitstellung der Ergebnisse für das sich Das derzeitige Plotprogramm kann alle Ergebnisse verarbeiten, die in Abhängigkeit vom Größenparameter vorliegen. Die Achsenbeschriftungen werden vom Programm automatisch erzeugt, entsprechend dem Wertebereich der zu zeichnenden Variablen. Alle Darstellungen im Kapitel 7 sind mit diesem Plotprogramm erstellt worden.

6 Eingabeparameter für die Fallstudie

In der Literatur sind einige Fallstudien von kugelförmigen Rußpartikeln mit einer Wasserhülle dokumentiert (z. B. Fenn und Oser, 1965; Kerker, 1969). Jedoch unterscheiden sich alle durch die benutzten Brechungsindices für die Materialien Ruß und Wasser. Diesen Autoren standen auch nicht unsere modernen Hochleistungsdatenverarbeitungsanlagen zur Verfügung, so daß an dieser Stelle nochmals eine Fallstudie Ruß-Wasser beschrieben werden kann.

Für die vorliegende Arbeit werden folgende Brechungsindices ausgewählt:

- Ruß: m = 1.96 - i 0.66- Wasser: $m = 1.334 - i 8 \cdot 10^{-8}$

Diese gelten für die Wellenlänge von 550 nm. Der Brechungsindex für Wasser wurde der Arbeit von Irvine und Pollack (1968) entnommen.

Die Ergebnisse wurden für ein reines Wasser- und ein reines Rußpartikel berechnet sowie für ein Mischpartikel mit Schalenstruktur. Die Darstellung der Ergebnisse erfolgt außer für die reinen Partikel auch für Partikel mit folgenden Radienanteilen für Ruß als Kern: 0.9; 0.667; 0.5 und 0.2,

7 Ergebnisse der Fallstudie

Zur Darstellung der Ergebnisse wurde der Größenparameter zwischen 0.1 und 65.0 in 0.1-Schritten äquidistant unterteilt. Ebenso wurde die Streuwinkelanzahl auf zehn beschränkt, nämlich

0°, 2°, 5°, 10°, 30°, 60°, 90°, 120°, 150° und 180°.

In den Abbildungen werden als Beispiele der Intensitätswirkungsfaktor sowie die Extinktions-, Streu- und Absorptionswirkungsfaktoren in Abhängigkeit vom Größenparameter dargestellt.

Die Bildunterschriften der Darstellungen enthalten alle notwendigen Informationen zur Identifikation, so daß auf eine zusätzliche Bildnumerierung verzichtet wurde.



.

- 22 -



- 23 -





- 25 -



•



26



.

- 27 -








မ္မ



- 31 -



- 32

ſ



ά



- 34 --



- 35 -



- 36 -





- 38 --



- 39



- 40 -



- 41 -









- 44 -



- 45 -



46 -





•

- 48 -



- 49 -



- 50 -



- 51 -



- 52 -









- 55 -



- 56 -





- 58 -



- 59 —







- 62 -







- 64 -








- 67 -





- 69 --

- Abramowitz, M. and I. A. Stegun, 1972: Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications, Inc., New York.
- Deirmendjian, D., R. Clasen, and W. Viezee, 1961: Mie scattering with Complex Index of Refraction, J. of the Optical Society of Amerika, <u>51</u>, p. 620 - 633.
- Deirmendjian, D., 1969: Electromagnetic Scattering on Spherical Polydispersions, Elsevier, New York.
- Fenn, R. W. and H. Oser, 1965: Scattering Properties of Concentric Soot-Water Spheres for Visible and Infrared Light, Applied Optics, <u>4</u>, p. 1504 - 1509.
- van de Hulst, H. C., 1957: Light Scattering by Small Particles, John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Irvine, W. M. and J. B. Pollack, 1968: Infrared Optical Properties of Water and Ice Spheres. ICARUS, 8,p.324 - 360.
- Kerker, M., 1969: The Scattering of Light. Academic Press, New York and London.
- Mie, G., 1908: Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen, Ann.Physik, 25, p. 377-445.
- Quenzel, H. and H. Müller, 1978: Optical Properties of Single Mie Particles: Diagrams of Intensity - Extinction - Scattering - and Absorption Efficiencies. Universität München, Meteorologisches Institut - Mitteilung Nr. 34.
- Shettle, E. P. and W. Fenn, 1975: Models of the Atmospheric Aerosols and their Optical Properties. AGARD Conference Proceedings No. 183 on Optical Propagation in the Atmosphere, p. 2.1 - 2.16.
- Spiegel, M. R., 1971: Advanced Mathematics, Schaum's Outline Series, McGraw-Hill Book Company, New York.

Herrn Prof. Dr. H. Quenzel (Universität München) danke ich für die freundliche Überlassung seines Rechenmodells für homogene Mie-Partikeln. Dieser Arbeit wurden Anregungen zur Steuerung der Ein- und Ausgabe entnommen.

Wertvolle Unterstützung bei der Programmierung des Problems habe ich von Herrn M. Koyro erhalten. Er hat auch alle Arbeiten übernommen, die im Zusammenhang mit dem Zeichenprogramm standen.