ACERCA DEL CALCULO DE LAS CARACTERISTICAS DEL CAMPO DE RADIACION DISPERSADO POR PARTICULAS DE MIE

A. LEYVA* A. MUHLIA* O. B. VASILIEV** (Recibido: 18 de abril, 1983) (Aceptado: 7 de marzo, 1984)

RESUMEN

En el presente trabajo se describe un algoritmo computacional para el cálculo de la intensidad de la radiación dispersada y las secciones de extinción y dispersión de una partícula esférica y químicamente homogénea. Se calculan las propiedades radiacionales para diferentes valores de los parámetros físicos involucrados, característicos de las partículas que forman el aerosol atmosférico. Se deduce una nueva expresión para uno de los coeficientes angulares de las series funcionales de Mie. Los cálculos demuestran que el algoritmo es aplicable a los casos más comunes de sistemas de partículas atmosféricas; su rango de aplicabilidad es significativamente más amplio que el de otros trabajos. En el Apéndice se describen las características fundamentales del campo de radiación dispersado por partículas esféricas y químicamente homogéneas.

ABSTRACT

An algorithm for the calculation of the scattered radiation intensity and the scattering and extinction efficient sections of a spherical and chemically homogeneous particle is described. A new expression for one of the angular coefficients of the Mie's functional series was deducted. The radiative properties were calculated for characteristic values of the physical parameters of the atmospheric aerosol's particles. The results show that the algorithm is useful for the most frequent atmospheric particle systems. This algorithm has a larger applicability compared to similar studies. The authors describe the fundamental characteristic of the scattered radiation field produced by spherical and chemically homogeneous particles.

* Instituto de Geofísica, UNAM, MEXICO.

** Depto. de Física de la Atmósfera, Univ. Estatal de Leningrado, URSS.

INTRODUCCION

G. Mie (Mie, 1908), al resolver el problema de la difracción de una onda electromagnética plana, de longitud de onda λ , en una esfera de índice de refracción complejo $\tilde{m} = \nu \cdot i\chi$ y radio r, encontró que el campo electromagnético, tanto dentro de la esfera como fuera de ella, puede describirse en forma general por medio de series infinitas de funciones especiales. Las expresiones resultantes se reducen a otras más simples para casos particulares como son, por ejemplo, la dispersión molecular (Rayleigh, 1903; Mandelshtam, 1907), o la dispersión en partículas "ópticamente suaves", es decir, con índice de refracción cercano al índice de refracción del aire (Shifrin, 1951; Van de Hulst, 1964).

En el presente trabajo se exponen los resultados del cálculo de las propiedades radiacionales de partículas características del aerosol atmosférico, con base en las expresiones generales de Mie. Se supone que el aerosol está compuesto por partículas esféricas y químicamente homogéneas, de tal modo que cada una de ellas puede ser totalmente descrita por su radio y por el índice de refracción de la substancia que la forma. Este modelo de aerosol, aunque es una clara abstracción del aerosol real, ha demostrado sus ventajas para los estudios climatológicos de la interacción entre la radiación solar y esta componente de la atmósfera terrestre, siendo el que con mayor frecuencia se utiliza en los trabajos de esta área.

Entre los trabajos dedicados al problema del cálculo del campo dispersado por partículas representativas del aerosol atmosférico habrá que mencionar en primer lugar la monografía, ya clásica, de D. Deirmendjan (Deirmendjan, 1969). R. Pendorf (Pendorf, 1957) estudia el comportamiento del coeficiente de dispersión de partículas con índices de refracción reales. En (Pendorf, 1962) R. Pendorf estudia la distribución angular de la radiación dispersada, G. N. Plass (Plass, 1966) analiza las secciones efectivas de dispersión y absorción de partículas con índice de refracción complejo; M. J. Pilat (Pilat, 1967) investiga los factores de dispersión y extinción de partículas con estructura concéntrica.

En la gran mayoría de los trabajos consultados, a excepción de la citada monografía de D. Deirmendjan, hay pocas referencias a los algoritmos de cálculo. Es por eso que los autores del presente trabajo, al iniciar una serie de trabajos sobre el campo de radiación dispersado por el aerosol atmosférico, decidieron diseñar un algoritmo computacional que sirviera de base para este estudio.

Luego de revisar la fundamentación del algoritmo usado por D. Deirmendjan, fue posible simplificar la expresión para la distribución angular de la radiación dispersada y ampliar el rango de aplicabilidad. En este trabajo no se investiga, a diferencia de Deirmendjan, el comportamiento de los coeficientes de las series de Mie, sino el comportamiento y los problemas de cálculo de las características (intensidad y secciones efectivas) del campo de radiación.

LA SOLUCION DE MIE

La solución, en coordenadas polares, del campo dispersado por una partícula de radio r e índice de refracción $\tilde{m} = \nu - i\chi$, está dada como (Shifrin, 1951; Van de Hulst, 1964):

$$E_{\theta} = -\frac{i}{kR} \exp(-ikR + i\omega t) E_{0\theta} S_{2}(\theta),$$

$$E_{\phi} = \frac{i}{kR} \exp(-ikR + i\omega t) E_{0\phi} S_{1}(\theta),$$

$$E_{R} = 0.$$
(1)

 $\overline{E}_{\lambda}^{(d)} = (E_{\theta}, E_{\phi}, E_{R}) \text{ y } \overline{E}_{o\lambda} = (E_{o\theta}, E_{o\phi}, o) \text{ son los vectores eléctricos del campo dispersado e incidente, respectivamente: las amplitudes <math>S_1(\theta) \text{ y } S_2(\theta)$ son series complejas de funciones especiales, dadas más adelante.

De (1) se tiene que la irradiancia del campo dispersado ξ_{λ} (ver definición en Apéndice) es igual a

$$\xi_{\lambda} = \frac{1}{k^2 R^2} (|E_{0\theta}|^2 |S_2(\theta)|^2 + |E_{0\phi}|^2 |S_1(\theta)|^2);$$

dado que

$$E_{\alpha\theta} = |\overline{E}_{\alpha\lambda}| \sin \phi ,$$
$$E_{\alpha\theta} = |\overline{E}_{\alpha\lambda}| \cos \phi ,$$

entonces

$$\xi_{\lambda} = \frac{|E_{0\lambda}|^2}{k^2 R^2} (|S_2(\theta)|^2 \sin^2 \phi + |S_1(\theta)|^2 \cos^2 \phi);$$

(2)

Si el campo incidente es de amplitud $|E_{0\lambda}|$ pero no polarizado, entonces por irradiancia del campo dispersado debe entenderse el valor medio de (2), es decir $\xi_{\lambda} = \frac{\xi_{0\lambda}}{k^2 R^2} (|S_2(\theta)|^2 < sen^2 \phi > + |S_1(\theta)|^2 < cos^2 \phi >)$

en donde $\langle x \rangle$ representa la esperanza matemática de la variable aleatoria x. Dado que $\langle sen^2 \phi \rangle = \langle cos^2 \phi \rangle = 1/2$, entonces

$$\xi_{\lambda} = \frac{\xi_{0\lambda}}{k^2 R^2} \frac{|S_1(\theta)|^2 + |S_2(\theta)|^2}{2}$$
(3)

Para la intensidad (ver definición en Apéndice) del campo dispersado se tiene $\left| \left(0, \left(0 \right) \right)^2 \right| + \left| \left(0, \left(0 \right) \right)^2 \right|$

$$I_{\lambda}(\theta) = \xi_{0\lambda} \frac{|S_1(\theta)|^2 + |S_2(\theta)|^2}{2k^2}$$
(4)

Por definición (ver Fórmula 5 del Apéndice)

$$F_{\lambda}(\tilde{m}, r, \theta) = \frac{1}{2} \left(\left| S_{1}(\theta) \right|^{2} + \left| S_{2}(\theta) \right|^{2} \right)$$
(5)

Dado que la extinción es independiente de la polarización de la luz deberá cumplirse que, para $\theta = 0$, $S_1 \equiv S_2$.

EL ALGORITMO: FORMULAS DE RECURRENCIA

El cálculo del campo electromagnético dispersado por una partícula de radio e índice de refracción conocidos requiere del cálculo de las series funcionales de Mie definidas como (Deirmendjan, 1969).

$$S_{1}(\widetilde{m}, \theta, r, \lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_{n}(\widetilde{m}, r, \lambda) \pi_{n}(\theta) + b_{n}(\widetilde{m}, r, \lambda) \tau_{n}(\theta)],$$

$$S_{2}(\widetilde{m}, \theta, r, \lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_{n}(\widetilde{m}, r, \lambda) \tau_{n}(\theta) + b_{n}(\widetilde{m}, r, \lambda) \pi_{n}(\theta)].$$
(6)

Los coeficientes $a_n y b_n$ son funciones del parámetro de dispersión x y del índice de refracción \tilde{m} :

$$a_{n} = \frac{\psi_{n}'(\widetilde{m}x)\psi_{n}(x) - \widetilde{m}\psi_{n}(\widetilde{m}x)\psi_{n}'(x)}{\psi_{n}'(\widetilde{m}x)\zeta_{n}(x) - \widetilde{m}\psi_{n}(\widetilde{m}x)\zeta_{n}'(x)} ,$$

$$b_{n} = \frac{\widetilde{m}\psi_{n}'(\widetilde{m}x)\psi_{n}(x) - \psi_{n}(\widetilde{m}x)\psi_{n}'(x)}{\widetilde{m}\psi_{n}'(\widetilde{m}x)\zeta_{n}(x) - \psi_{n}(\widetilde{m}x)\zeta_{n}'(x)}$$
(7)

268

donde $x = \frac{2\pi r}{\lambda}$,

$$\psi_{n}(z) = (\frac{1}{2} \pi z)^{1/2} J_{n+1/2}(z)$$

$$\zeta_{n}(y) = \left(\frac{1}{2}\pi y\right)^{1/2} H_{n+1/2}^{(2)}(y)$$
(8)

(z: complejo; y: real); $J_{n+1/2}(z)$ y $H_{n+1/2}^{(2)}(y)$ son funciones esféricas de Bessel (Watson, 1944). Basándose en las fórmulas de recurrencia de las funciones de Bessel se llega a las expresiones, sumamente cómodas para los propósitos de cómputo, propuestas por D. Deirmendjan en su monografía (Deirmendjan, 1969)

$$a_{n} = \frac{\left(\frac{An}{\widetilde{m}} + \frac{n}{x}\right) \operatorname{Re} \left\{w_{m}\right\} - \left\{\operatorname{Re} \quad w_{n-1}\right\}}{\left(\frac{An}{\widetilde{m}} + \frac{n}{x}\right) w_{n} - w_{n-1}},$$

$$b_{n} = \frac{\left(\widetilde{m}A_{n} + \frac{n}{x}\right) \operatorname{Re}\left\{w_{n}\right\} - \operatorname{Re}\left\{w_{n-1}\right\}}{\left(\widetilde{m}A_{n} + \frac{n}{x}\right) w_{n} - w_{n-1}}$$
(9)

$$w_n = \frac{2n-1}{x} w_{n-1} - w_{n-2}$$

$$A_{n} = -\frac{n}{\widetilde{m}x} + \left(\frac{n}{\widetilde{m}x} - A_{n-1}\right)^{-1}$$

El cálculo de los coeficientes $a_n y b_n$ se realiza utilizando los siguientes valores iniciales

$$w_{-1} = \cos x - i \sin x ,$$

$$w_{0} = \sin x + i \cos x ,$$

$$A_{0} = \frac{\operatorname{sen}(\nu x) \cos(\nu x) + \operatorname{ish}(\chi x) \operatorname{ch}(\chi x)}{\operatorname{sen}^{2}(\nu x) + \operatorname{sh}^{2}(\chi x)}$$
(10)

GEOFISICA INTERNACIONAL

Los coeficientes $\pi_n(\theta)$ y $\tau_n(\theta)$, funciones exclusivamente del ángulo de dispersión θ , se expresan a través de las Funciones Asociadas de Legendre $P_n^{(1)}(\cos\theta)$ (Watson, 1944) y de sus derivadas

$$\pi_{n}(\theta) = \frac{1}{\sin\theta} P_{n}^{(1)}(\cos\theta) ;$$

$$\tau_{n}(\theta) = \frac{d}{d\theta} P_{n}^{(1)}(\cos\theta) ;$$
(11)

empleando las fórmulas de recurrencia

$$(2n+1)\mu P_n^{(1)}(\mu) = -n P_{n+1}^{(1)}(\mu) + (n+1) P_{n-1}^{(1)}(\mu) ,$$

$$(1-\mu^2) \frac{d}{d\mu} P_n^{(1)}(\mu) = \mu(n+1) P_n^{(1)}(\mu) - n P_{n+1}^{(1)}(\mu) ,$$

$$(\mu \equiv \cos\theta) , \qquad (12)$$

pueden encontrarse las expresiones de recurrencia para π_n y τ_n , de las cuales la primera es semejante a la reportada por Deirmendjan en la citada monografía y la segunda fue determinada por los autores:

$$\pi_{n} = \mu \frac{2n-1}{n-1} \pi_{n-1} - \frac{n}{n-1} \pi_{n-2} ,$$

$$\tau_{n} = n \mu \pi_{n} - (n+1) \pi_{n-1} . \qquad (13)$$

Como valores iniciales para estas fórmulas, se tiene, según (11)

$$\pi_0 = 0$$
 ,
 $\pi_1 = 1$.

Basados en estas fórmulas de recurrencia pueden calcularse las secciones transversales $c_e y c_d$; en efecto, substituyendo (5) en (11 del Apéndice) e integrando se obtiene

$$c_{d} = \frac{\lambda^{2}}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(|a_{n}|^{2} + |b_{n}|^{2}) ; \qquad (14)$$

de la misma forma, substituyendo $S_1(o) = S_2(o)$ en (16 del Apéndice) puede escribirse

$$c_{e} = \frac{\lambda^{2}}{2\pi} \sum_{n+1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re} \left\{ a_{n} + b_{n} \right\}.$$
(15)

270

A. Leyva et al.

EL CRITERIO DE APROXIMACION DE LAS SERIES DE MIE

En la práctica siempre es necesario substituir el valor exacto de las series por el de sumas finitas. Sea S una serie cualquiera de las aquí tratadas. Podemos definir la siguiente notación

$$S_k^{\ell} = \sum_{i=k}^{\infty} Z_i \quad ; \tag{16}$$

entonces S puede representarse como

$$S = S_1^n + S_{n+1}^{\infty} \tag{17}$$

Para establecer un criterio que nos permita estimar la exactitud de la aproximación $S = S_1^n$, es indispensable suponer de antemano que

$$\lim S_1^n = S \quad , \tag{18}$$

es decir, que la serie S es convergente. Por esa razón, aquí supondremos que cualquiera de las series de Mie converge para cualquier grupo de parámetros (m, θ , r, λ).

Sea, por definición

$$k_{n} = \left| \frac{S_{1}^{n-1} - S_{1}^{n}}{S_{1}^{n}} \right|, \qquad (19)$$

de donde

$$|S_1^n| k_n = |S_1^{n-1} - S_1^n| , \qquad (20)$$

o bien

$$|S_{1}^{n}|k_{n} = |z_{n}| \quad . \tag{21}$$

De acuerdo con esta relación, si para limitar el número de términos en el cálculo de la serie S se utiliza el criterio

$$k_n < 10^{-m}$$
 (22)

eso significa que la aproximación S_1^n es exacta cuando menos hasta la m-ésima cifra decimal.

CALCULOS DE LAS CARACTERISTICAS DEL CAMPO DISPERSADO POR PARTICULAS REPRESENTATIVAS DEL AEROSOL TROPOSFERICO

Basados en las fórmulas respectivas (secciones cuarta y quinta de este escrito), se diseñó un programa para el cálculo de la intensidad $I_{\lambda}(\theta)$ así como de las secciones transversales de extinción (c_e) y de dispersión (c_d).

0.005	<	r ·	<	50	,	μm,
1.4	<	ν	<	1.9	,	•
5 x 10 ⁻⁵	<	x	<	5 x 10 ⁻¹	ι,	
0.3	<	λ	<	0.8	,	μm. (23)

Los rangos de variación de los parámetros involucrados fueron

Dichos rangos de variación pueden considerarse típicos en la interacción de la radiación solar con el aerosol atmosférico (Junge, 1963; Ivlev *et al.*, 1973; Kondratyev *et al.*, 1981).

Como se vio en la sección anterior, las series funcionales que determinan las características del campo de radiación dispersado dependen de los parámetros físicos del problema (r, ν , χ , λ) a través de diferentes combinaciones de los mismos. De ellas, las combinaciones adimensionales: $x = 2\pi r/\lambda$, $p = \nu x$ y $q = \chi x$ son las que con mayor frecuencia se emplean para caracterizar un evento elemental de dispersión. Los rangos de variación de estos parámetros adimensionales son, de acuerdo con (23), los siguientes

0.04	<	х	<	1050;	
0.06	<	р	<	2000;	
2 x 10 ⁻²	<	q	<	$5 \ge 10^2$.	(24)

Si bien el algoritmo aquí utilizado parte de una formulación semejante a la de D. Deirmendjan, es obvio que el programa computacional desarrollado para el presente trabajo puede tener diferencias significativas con el utilizado en ese u otros trabajos. Por esta razón se creyó conveniente reproducir los cálculos de las funciones $i_1(\theta) \equiv |S_1(\theta)|^2$ e $i_2(\theta) \equiv |S_2(\theta)|^2$, para casos investigados por Deirmendjan (Deirmendjan, 1969; p. 47, fig. 14 y p. 50, fig. 16.b). Como puede verse de las figuras 2 y 3, ambos algoritmos coinciden en lo fundamental.

Si se fijan los valores de los parámetros (r, ν , χ , λ) entonces cada punto del plano (p, q) representa un caso particular de dispersión. En



Fig. 2. Las funciones angulares $i_1(\theta)$, (línea continua), e $i_2(\theta)$, (línea punteada). Las curvas (1) y (1') fueron calculadas para $\widetilde{m} = 1.315 - i.(0.4298)$ y x = 1.0; las curvas (2) y (2') para $\widetilde{m} = 1.315$ y x = 1.0.



Fig. 3. La magnitud $F = 1/2(i_1 + i_2)$ en la región de los ángulos pequeños (región aureolar). La curva (1) (línea continua), se calculó para $\tilde{m} = 1.28 - i(1.37)$ y x = 30; la curva (2), (línea punteada), con $\tilde{m} = 1.70 - i.(1.84)$ y x = 20.

el caso de la figura 4 se fijó $\nu = 1.65$ y $\lambda = 0.55 \,\mu$ m, ya que por ser estos parámetros los que menor rango de variación presentan, la zonificación del plano (p, q) no se modifica sensiblemente si ellos varían dentro de sus rangos normales.



dos los puntos $\nu = 1.65$ y $\lambda = 0.55 \,\mu\text{m}$.

274

La zona $\chi < 0.01$ puede definirse como la "zona atmosférica", si se toma en cuenta que valores mayores de χ , en un modelo de aerosol químicamente homogéneo, son poco frecuentes.

En la figura 4 se muestra, para una serie de puntos de plano (p, q), el número de términos requerido para que se cumpla la condición $k_n < 10^{-6}$ en el cálculo de Q_e . Como la separación entre la dispersión de Rayleigh y la dispersión de Mie puede definirse por el número de términos de las series involucradas, la zona p < 1 podía definirse como la "zona de Rayleigh" del aerosol atmosférico.

Por otro lado, de la misma figura 4 podemos observar que la rapidez de la convergencia de las series de Mie depende fuertemente de p y débilmente de q, lo cual nos hace suponer que la parte real del índice de refracción es la que determina en gran parte las propiedades ópticas del aerosol atmosférico.

Se encontró que las series de Mie presentan problemas de cálculo en aquellos casos que requieren un gran número de términos, para $p \sim 1000$. Esto sin duda está relacionado con la acumulación de los errores de cálculo, es decir, con el redondeo de las cifras en la computadora. D. Deirmendjan (Deirmendjan, 1969, p. 19) apunta la posibilidad de problemas de este tipo para x > 30. Con el algoritmo utilizado en el presente trabajo se obtienen resultados con sentido físico $|(c_e \ge c_d)|$ en la región p < 1000, q < 10; esto equivale a la necesidad de limitar los valores de los parámetros ópticos de acuerdo con las desigualdades

 $\nu < \frac{1000}{x}$ y $\chi < \frac{10}{x}$.

Dado que ν está acotado inferiormente, es decir $1 \le \nu$, entonces, de la primera desigualdad podemos concluir que x tendrá que ser menor que 1000. De hecho, si aceptamos que los valores reales de ν para aerosoles atmosféricos, están entre $1 \le \nu \le 2$, entonces puede afirmarse que x no deberá exceder por mucho el valor de 500; el rango de aplicación del algoritmo se amplía así de x = 30 a x = 500. Para esos mismos valores de x la parte imaginaria del índice de refracción deberá ser menor que 0.02.

La variación de los parámetros r, λ , ν y χ dio resultados esperados, en general, pero permitió observar algunos fenómenos no señalados anteriormente por otros autores. El aumento del radio conduce, como es obvio, a un aumento de las secciones efectivas de absorción y dispersión (figura 5).



Fig. 5. Las secciones efectivas de extinción c_e , (línea continua), y de dispersión c_d , (línea punteada), como funciones de la longitud de onda. (1) $r = 50 \mu m$; (2) $r = 0.5 \mu m$; (3) $r = 0.005 \mu m$. En todos los casos $\tilde{m} = 1.65 - i$. (0.005).

La variación de las secciones efectivas de extinción y dispersión con la variación de los parámetros ópticos ν y χ es distinta en los radios grandes, medios y pequeños. Así la sección de extinción para $r = 50 \mu m$, no sufre cambio alguno con la variación del índice de refracción; la sección de dispersión aumenta, lo que implica una reducción de la sección de absorción ($c_a = c_e - c_d$) (figura 6).

La partícula de 0.5 μ m de radio muestra una variación de la sección de extinción espectralmente irregular: con el aumento de la parte real



Fig. 6. Variación de las secciones efectivas $c_e y c_d$ con el índice de refracción. $r = 50 \mu m$. (1) $\widetilde{m} = 1.4 - i.(0.005);$ (2) m = 1.9 - i. (0.005); (3) $\widetilde{m} = 1.65 - i.(0.005);$ (4) $\widetilde{m} = 1.65 - i.$ (0.00005).

(ν) C_e aumenta para $\lambda > 0.35 \mu m$ y disminuye para $\lambda < 0.35 \mu m$ significativamente para $\lambda < 0.55 \mu m$) (figura 7a). Con el aumento de la parte imaginaria (χ), en promedio, el coeficiente de extinción no varía, pero se hace espectralmente indiferente (figura 7b) y disminuye la sección de dispersión, lo que implica un aumento significativo de la sección de absorción.

Por lo que respecta a la partícula de menor radio, $0.005 \mu m$, el aumento de la parte real del índice de refracción conduce a la disminución de la sección de extinción y al aumento de la sección de dispersión, lo que implica una reducción de la sección de absorción (figura 8a). El aumento de la parte imaginaria del índice de refracción, en esta partícu-



Fig. 7a. Variación de las secciones efectivas c_e , (línea continua) y c_d , (línea punteada) con la parte real del índice de refracción. $r = 0.5 \mu m$ y $\chi = 0.005$. (1) $\nu = 1.4$; (2) $\nu = 1.9$.

la, conduce a un aumento relativamente débil de la sección de dispersión; la sección de absorción, sin embargo, crece significativamente (figura 8b).

La distribución angular del campo dispersado puede ser estudiada también con detalle por medio del algoritmo computacional aquí presentado. En la figura 9 se muestran las distribuciones angulares de la intensidad del campo dispersado $I_{\lambda}(\theta)$ por tres partículas de diferentes radios, para $\lambda = 0.55 \,\mu$ m. En esta figura se ve claramente la tendencia al aumento de la intensidad del campo dispersado, especialmente en la zona de los ángulos pequeños ($\theta \rightarrow 0$), con el aumento del radio.



Fig. 7b. Variación de las secciones efectivas c_e (línea continua) y c_d (línea punteada) con la parte imaginaria del índice de refracción. $r = 0.5 \mu m$ y $\nu = 1.65$. (1) $\chi = 5 \times 10^{-5}$; (2) $\chi = 0.5$.

La variación de la intensidad $I_{\lambda}(\theta)$ con la variación de los parámetros ópticos en la partícula con radio igual a 50 μ m se muestra en las figuras 9 y 10. El aumento de la parte real (ν) del índice de refracción, hace crecer la intensidad del campo dispersado en la zona de los ángulos grandes. La variación de la parte imaginaria dio resultados inestables, ocasionados por el hecho de que, para r = 50 μ m, el algoritmo se encuentra en el límite de su rango de aplicabilidad.

Con respecto a la partícula de radio a 0.5μ m la variación de la parte real del índice de refracción ocasiona variaciones angularmente irregulares de la intensidad (figura 11a). La variación de $I_{\lambda}(\theta)$ con la parte imaginaria (χ) tiene un carácter más regular (figura 11b): en la zona de



Fig. 8a. Variación de las secciones efectivas c_e (línea continua) y c_d (línea punteada) con la parte real del índice de refracción. $r = 0.005 \mu m$ y $\chi = 0.005$. (1) $\nu = 1.40$; (2) $\nu = 1.65$; (3) $\nu = 1.90$.

los ángulos pequeños la intensidad aumenta con el aumento de χ , mientras que para ángulos mayores de 20^o se observa el comportamiento inverso.

La partícula de radio igual a $0.005 \mu m$ presenta a este respecto un comportamiento muy apegado al que predice la Teoría de la dispersión de Rayleigh (figuras 12a y 12b); la intensidad de la radiación dispersada tiene una distribución angular casi simétrica alrededor del eje $\theta = 90^{\circ}$; la influencia de la variación de los parámetros ópticos ν y χ es homogénea en todo el rango de ángulos ($0 < \theta < 180^{\circ}$).



Fig. 8b. Variación de las secciones efectivas c_e (línea continua) y c_d (línea punteada) con la parte imaginaria del índice de refracción. $r = 0.005 \mu m y \nu = 1.65$. (1) $\chi = 0.00005$; (2) $\chi = 0.5$.



Fig. 9. Distribución angular de la intensidad de la radiación dispersada $I_{\lambda}(\theta)$. $\xi_0 = 1.0$ erg.seg.⁻¹ cm.⁻² m = 1.65 - *i*.(0.005), $\lambda = 0.55 \,\mu$ m. (1) r = $50 \,\mu$ m; (2) r = $0.5 \,\mu$ m; (3) r = $0.005 \,\mu$ m.



Fig. 10. Variación de $I_{\lambda}(\theta)$ con la parte real del índice de refracción para una partícula de radio r = 50 µm. $\xi_0 = 1.0$ erg.seg.¹cm.⁻², $\chi = 0.005$, $\lambda = 0.55 µm$. (1) $\nu = 1.4$; (2) $\nu = 1.65$; (3) $\nu = 1.9$.



Fig. 11a. Variación de $I_{\lambda}(\theta)$ con la parte real del índice de refracción para una partícula de radio r = 0.5 µm. $\xi_0 = 1$ erg.seg⁻¹cm⁻², $\chi = 0.005$, v = 0.55 µm. (1) v = 1.4, (2) v = 1.65, (3) v = 1.9.



Fig. 11b. Variación de $I_{\lambda}(\theta)$ con la parte imaginaria del índice de refracción para una partícula de radio r = $0.5 \mu m$. $\xi_0 = 1 \text{ erg.seg.}^{-1} \text{ cm.}^{-2}$, $\nu = 1.65$, $\lambda = 0.55 \mu m$. (1) $\chi = 0.0005$; (2) $\chi = 0.005$; (3) $\chi = 0.5$.



Fig. 12a. Variación de $I_{\lambda}(\theta)$ con la parte real del índice de refracción para una partícula de radio r = 0.005 µm. ξ_0 = 1 erg.seg.⁻¹cm.⁻², χ = 0.005, λ = 0.55 µm. (1) ν = 1.4; (2) ν = 1.65; (3) ν = 1.9.



Fig. 12b. Variación de $I_{\lambda}(\theta)$ con la parte imaginaria del índice de refracción para una partícula de radio $r = 0.005 \mu m$. $\xi_0 = 1 \text{ erg.seg.}^{-1} \text{ cm.}^{-2}$ (1) $\chi = 0.00005$; (2) $\chi = 0.5$.

CONCLUSIONES

El algoritmo construido aquí puede ser aplicado para el estudio de las propiedades radiacionales de los tipos más comunes de aerosol atmosférico. El rango de aplicabilidad del mismo permite incluir en el modelo de aerosol las partículas más representativas de dicha componente atmosférica. Las limitaciones más importantes son la cota superior del intervalo de radios y la parte imaginaria del índice de refracción, cuyos valores, para las condiciones particulares de la interacción aerosol - radiación solar, deberán encontrarse dentro de los límites $r < 10 \sim 20 \mu m$ y $\chi < 0.02$, respectivamente.

Un primer análisis de las propiedades radiacionales de partículas individuales muestra que la dependencia del campo dispersado con respecto a los parámetros físicos que definen la interacción partícula - radiación es compleja cuando se cumple $r \simeq \lambda$ (como lo muestran las figuras 7a y 11a), es decir, cuando las dimensiones de las partículas son del orden de las longitudes de onda de la radiación incidente. Este comportamiento influye necesariamente en el comportamiento colectivo de los sistemas de partículas por lo que, en el rango correspondiente de valores de dichos parámetros será necesario describirlos con mayor detalle para evitar que la acción colectiva del sistema pueda enmascarar algunos fenómenos importantes.

APENDICE

LA CARACTERISTICA RADIACIONAL FUNDAMENTAL

El campo electromagnético en medios homogéneos puede describirse por medio de las componentes del vector eléctrico \vec{E} . De acuerdo con H. Van de Hulst (Van de Hulst, 1964), la aleatoriedad en la distribución espacial de los dispersores elementales no permite observar, por lo general, fenómenos de interferencia entre las ondas dispersadas por partículas diferentes, de tal manera que, macroscópicamente, lo que se mide es el flujo de energía por unidad de tiempo. Llamaremos irradiancia ξ_{λ} a la cantidad de energía electromagnética que pasa por unidad de tiempo a través de una superficie de área unitaria. La solución de Mie al problema de la difracción de una onda electromagnética plana por una esfera de radio r e índice de refracción m = ν - ix se basa en el "Principio Radiacional", según el cual la onda dispersada se propaga del centro de la esfera hacia el infinito y $|\bar{E}| \sim R^{-1}$ (Shifrin, 1951); R es la distancia del centro dispersor al punto de observación y E es la intensidad del vector eléctrico (figura 1); la dependencia con el tiempo es del tipo exp(i ω t) y tanto la onda incidente como la dispersada son de la misma frecuencia.



Fig. 1. Componentes de los vectores eléctricos $\overline{E}_0 = (E_0, 0, 0)$, (campo electromagnético incidente) y $\overline{E}^{(d)} = (E_r, E_{\phi}, E_{\theta})$, (campo electromagnético dispersado). El campo incidente se propaga en la dirección positiva del eje z.

Sea $\xi_{o\lambda}$ la irradiancia de la onda incidente y (R, θ , ϕ) un sistema de coordenadas esféricas con centro en la esfera dispersora. Supongamos que en el sistema cartesiano correspondiente al vector eléctrico de la onda incidente tiene las siguientes componentes $E_o = (E_o, 0, 0)$. Puede entonces definirse una función adimensional $F_{\lambda}(\tilde{m}, r, \theta, \phi)$ tal que (Van de Hulst, 1964)

$$\xi_{\lambda} = \xi_{0\lambda} \frac{F_{\lambda}(\widetilde{m}, r, \theta, \phi)}{k^2 R^2}$$
(1)

donde ξ_{λ} es la irradiancia de la onda electromagnética dispersada, es decir, la onda que se propaga del centro de la esfera en todas direcciones y $k = 2\pi/\lambda$; por razones de simetría $F_{\lambda}(\tilde{m}, r, \theta, \phi) \equiv F_{\lambda}(\tilde{m}, r, \theta)$; el subíndice λ significa que la energía se encuentra confinada en un intervalo elemental de longitudes de onda $(\lambda, \lambda + d\lambda)$.

Para la descripción del campo de radiación se emplea también el parámetro que aquí denominaremos "intensidad del campo de radiación" I_{λ} , que no incluye explícitamente la distancia del punto de observación al origen (R). Por definición de irradiancia tenemos

$$\xi_{\lambda} = \frac{d\phi_{\lambda}}{dA} \tag{2}$$

donde $d\phi_{\lambda}$ es el flujo de energía que pasa por la superficie elemental dA en la unidad de tiempo. Podemos expresar dA como

$$dA = R^2 d\Omega \tag{3}$$

donde $d\Omega$ es el elemento de ángulo sólido que subtiende dA en el origen de coordenadas (R = 0). Substituyendo la ec. (3) en la ec. (2) puede escribirse

$$R^{2}\xi_{\lambda} = \frac{d\phi_{\lambda}}{d\Omega}$$
(4)

y definir $d\phi_{\lambda}/d\Omega$ como la intensidad I_{λ} del campo dispersado. De esa manera I_{λ} tiene unidades de energía por unidad de tiempo y por unidad de ángulo sólido.

Para una partícula de radio r e índice de refracción \widetilde{m} puede entonces escribirse

$$I_{\lambda} = \xi_{0\lambda} \frac{F_{\lambda}(\widetilde{m}, r, \theta)}{k^2}$$
 (5)

En la interacción del campo radiacional con la partícula intervienen tres fenómenos: absorción, dispersión y polarización del campo electromagnético. Aquí nos referimos solamente a los dos primeros, va que el tercero puede tratarse en un trabajo por separado.

La absorción y la dispersión de la energía por la partícula son las dos componentes de un mismo proceso: la extinción de la radiación incidente por su interacción con el elemento dispersor. Evidentemente la energía perdida tendrá que ser proporcional a la energía incidente. Si por $\Delta \phi_{\lambda}^{(e)}$ representamos la energía que pierde la onda incidente (por unidad de tiempo) como efecto de su interacción con la partícula, entonces podemos definir un coeficiente de proporcionalidad ce tal que

$$\Delta \phi_{\lambda}^{(e)} = c_e \, \xi_{0\lambda} \quad . \tag{6}$$

De la misma forma podemos definir, para los procesos de dispersión vabsorción

$$\Delta \phi_{\lambda}^{(d)} = c_d \xi_{0\lambda} \quad . \tag{7}$$

$$\Delta \phi_{\lambda}^{(a)} = c_a \, \xi_{0\lambda} \quad . \tag{8}$$

Como por definición la extinción es la suma de los efectos (dispersión v absorción) se tiene

 $\Delta \phi_{\lambda}^{(e)} = \Delta \phi_{\lambda}^{(d)} + \Delta \phi_{\lambda}^{(a)} ,$

es decir.

Es obvio que los coeficientes de proporcionalidad
$$c_e, c_d y c_a$$
 tienen unidades de área. Por esta razón se les denomina "secciones efectivas" de extinción, dispersión y absorción, respectivamente.

 $c_e = c_d + c_s .$

No es difícil deducir la expresión general para c_d a partir de la definición de dispersión: la extinción de energía por dispersión se lleva a cabo por la redistribución de ésta en direcciones distintas a las de la onda incidente. Así que si $I_{\lambda}(\theta)$ es la intensidad del campo dispersado, la energía perdida $\Delta \phi_{\lambda}^{(d)}$ por dispersión será igual a:

> $\Delta \phi_{\lambda}^{(d)} = \int_{\Delta}^{4\pi} I_{\lambda}(\theta) d\Omega \quad .$ (10)

Substituyendo $I_{\lambda}(\theta)$ de la ec. (5) y d Ω por sen θ d θ d ϕ , se tiene

$$c_{d} = \frac{2\pi}{k^{2}} \int_{0}^{\pi} \sin\theta F_{\lambda}(\widetilde{m}, r, \theta) d\theta \quad . \tag{11}$$

H. C. van de Hulst (Van de Hulst, 1964; p. 30-31), ha calculado la

(9)

sección efectiva de extinción c_e analizando el campo en la dirección de propagación de la luz incidente. De una forma breve repetiremos aquí los pasos más importantes del desarrollo.

Sea un círculo con centro en O' (0, 0, Z), perpendicular al eje Z y que contiene el punto Q (x, y, z), cercano a aquél. Por el teorema de Pitágoras

$$R = \overline{OQ} = z \left(1 + \frac{x^2 + y^2}{z^2}\right)^{1/2}$$

desarrollando la expresión dentro del paréntesis en serie de potencias y despreciando los términos de orden mayor que dos, nos queda:

$$R = z + \frac{x^2 + y^2}{2z} .$$
 (12)

Sean

$$E_{0} = E_{ox} \exp \left\{ -ikz + i\omega t \right\},$$

$$E^{(d)} = E_{ox} \frac{S(o)}{ikz} \exp \left\{ -ikR + i\omega t \right\},$$
(13)

las componentes del campo electromagnético incidente y dispersado, respectivamente; S(o) es una amplitud adimensional y en general compleja, que expresa la dispersión en la dirección de propagación.

El campo resultante en el punto Q(x, y, z) es la superposición de ambos campos

 $E = E_{ox} \exp \left\{ -ikz + i\omega t \right\} + E_{ox} \frac{S(o)}{ikz} \exp \left\{ -ikR + i\omega t \right\},$

que puede también escribirse, dada la ec. (13), como

$$E = E_{ox} \exp\left\{-ikz + i\omega t\right\} \left(1 + \frac{S(o)}{ikz} \exp\left\{-ik\frac{x^2 + y^2}{2z}\right\}\right)$$

Si igualamos la irradiancia de la onda resultante con el cuadrado del módulo de E entonces podemos escribir

$$\xi_{\lambda} = (E_{ox} + \frac{E_{ox}}{kz} \operatorname{Re} \left\{ \frac{S(o)}{i} \exp \left[-\frac{ik(x^2 + y^2)}{2z} \right] \right\}^2$$

Si la distancia de O' al centro de dispersión es suficientemente grande, entonces, desarrollando el cuadrado en una serie de potencias y despreciando los términos de segundo orden en adelante, se tiene:

$$\xi_{\lambda} = \xi_{0\lambda} + \frac{2\xi_{0\lambda}}{kz} \operatorname{Re} \left\{ \frac{S(0)}{i} \exp\left[-\frac{ik(x^2 + y^2)}{2z}\right] \right\}$$

integrando en todo el círculo (de área A) obtenemos

292

$$\iint_{(A)} \xi_{\lambda} dx dy = \xi_{0\lambda} A + \frac{2\xi_{0\lambda}}{kz} \iint_{(A)} \operatorname{Re} \left\{ \frac{S(0)}{i} \exp\left[-\frac{ik(x^2 + y^2)}{2z}\right] \right\} dx dy \quad (14)$$

como puede verse, la presencia de la partícula modifica la energía de la onda incidente que pasa por el área A en la unidad de tiempo $(\xi_{o\lambda}A)$ en una magnitud dada por el segundo término de la derecha. Como la partícula tiene nivel de excitación cero la modificación al flujo de energía, que físicamente sólo puede estar dada por la extinción, es necesariamente negativa. Entonces por definición de sección transversal de extinción, tomando límites infinitos en la ec.(14), se tiene:

$$c_{e}\xi_{0\lambda} = -\frac{2\xi_{0\lambda}}{kz} \operatorname{Re} \left\{ S(0) \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{Re} \left\{ \exp\left(-\frac{ikx^{2}}{2z}\right) \right\} dx$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{Re} \left\{ \exp\left(-\frac{iky^{2}}{2z}\right) \right\} dy \qquad (15)$$

Integrando la ec.(15)

$$c_e = -\frac{4\pi}{k^2} \operatorname{Re} \{ S(o) \} .$$
 (16)

AGRADECIMIENTOS

Los autores aprovechan la oportunidad para expresar su agradecimiento al personal de los Departamentos de Cómputo del Instituto de Física de la Universidad estatal de Leningrado y del Instituto de Geofísica de la UNAM, por la valiosa ayuda prestada para la realización del presente trabajo.

Agradecen también a Mauro Valdés B. por el trabajo de preparación de las figuras y a la Sección Editorial del Instituto de Geofísica por haber hecho posible la publicación de este trabajo.

BIBLIOGRAFIA

- BAYVEL, L. P. y A. S. LAGUNOV, 1977. Medición y control de distribución de partículas por el método de la dispersión luminosa e ángulos pequeños. Ed. "ENERGIA", Moscú. (En Ruso).
- DEIRMENDJAN, D., 1969. Electromagnetic Scattering on Spherical Polydispersions. Am. Elsevier Publishing Co., Inc., N.Y.

- IVLEV, L. S. and S. I. POPOVA, 1973. The Complex Refractive indices of substances in the Atmospheric-Aerosol Dispersed Phase, Izv. Atmos. Oceanic Phys., 9, 587-591.
- JUNGE, C. E., 1963. Air Chemistry and Radiactivity. Academic Press. N. Y.
- KONDRATYEV, K. Ya. y D. V. POZDNIAKOV, 1981. Modelos de aerosoles atmosféricos. Ed. Nauka, Moscú. (En Ruso).
- MANDELSHTAM, L. I., 1948. Obras completas, Tomo I, 109 Moscú. (En Ruso).
- MIE, G., 1908. A Contribution to the Optics of Turbid Media, Especially Colloidal Metallic Suspensions. Ann. d. Physik, 25, 4, 377-455.
- PENDORF, R., 1954. The Vertical Distribution of Mie Particles in the Troposphere. Rep. AFCRC-54-5, AFCRL, Bedford, Mass.
- PENDORF, R., 1957. New Tables of Total Mie Scattering Coefficients for Spherical Particles of Refractive Index (1.33≤n≤1.50). J. Opt. Soc. Am., 47, 176-182.
- PENDORF, R., 1962. Angular Mie Scattering. J. Opt. Soc. Am., 52, 402-408.
- PILAT, M. J., 1967. Optical Efficiency Factors for Concentric Spheres. Appl. Opt., 6, 1555-1558.
- PLASS, G. N., 1966. Mie Scattering and Absorption Cross-Sections for Absorbing Particles, *Appl. Opt. 5*, 279-285.
- RAYLEIGH, L., 1903. On the Transmission of Light through an Atmosphere Containing Small Particles in Suspension, and the Origin of the Blue of the Sky, Scientific Papers, Ed. 4, pp. 397-405, University Press.
- SHIFRIN, K. S., 1951. Dispersión de la Luz en Medios Turbios. Moscú. Ed. "Gostejizdat". (En Ruso).
- VAN DE HULST, H. C., 1964. Light Scattering by Small Particles. John Wiley and Sons, Inc., New York.
- WATSON, G. N., 1944. A treatise on the Theory of Bessel Functions (2nd. ed.). The Macmillan Co., N. Y.