**文章编号**：1000-7032(2009)03-0409-05

# $TiO_2$ 颗粒紫外区 Mie 散射特性

徐庆君，张士英，韦德泉
（枣庄学院 物理与电子工程系，山东 枣庄　277160）

**摘要**：应用 Mie 散射理论对紫外光下 $TiO_2$ 微粒光散射特性进行了理论分析与数值计算，得到了散射强度分布、偏振度与散射角、散射强度与参数 $X$ 以及光学截面与粒子半径的关系。结果表明，前向散射强度随着粒子半径的增大而增强；当粒子半径为 50 nm 左右，散射截面和吸收截面达到最大值。

**关　键　词**：Mie 散射；光学截面；散射强度；$TiO_2$
**中图分类号**：O436.2　　**PACS**：78.35.+c　　**PACC**：7835　　**文献标识码**：A

## 1　引　　言

微粒或者粒子群能够散射或吸收入射的电磁波，是由于每一种材料都是由质子、中子和电子构成的，其中质子和电子代表离散的电荷，因此入射电磁波和这些电荷之间的相互作用会引起电荷的振动。受激发的电荷可以向所有方向重新辐射出电磁能量，这种二次辐射称作散射。

$TiO_2$ 颗粒是一种在可见光区有着高透过率、高折射率，在紫外光区有着强烈吸收的光学材料，它在抗反射涂层、多层光学涂层、光波导、紫外光探测器等方面有着广泛的应用。研究表明 $TiO_2$ 粒子具有很强的光散射效应[1,2]，可以利用 $TiO_2$ 粒子在纳晶薄膜中的多次散射效应，使光能吸收效率进一步提高，从而提高光电转换效率，有利于增加染料的吸附量，达到充分吸收光能[3]。目前主要采用具有较强光散射性能的几百纳米大颗粒 $TiO_2$ 作为薄膜电极内的光散射中心增大光能的吸收[4~6]。因此，研究 $TiO_2$ 粒子的光散射特性能有助于理解材料应用中的物理机制，在本文中我们借助于 Mie 散射理论对紫外光下 $TiO_2$ 颗粒的光散射特性进行深入研究，希望能对 $TiO_2$ 材料的研制及在紫外光下的应用有一定的理论指导意义。

## 2　理论基础

对于规则的球形散射体，在入射到散射体上的电磁场的波长与散射体的线度可比拟时，散射体对电磁场的散射作用可以精确地用 Mie 散射理论处理[7]。如图 1 所示，平面线极化光照射在球形粒子上，光将被粒子所散射、吸收，坐标原点在粒子的球心，其中 $r$ 为球心到场点 P 的距离，$\theta$ 为 $r$ 与 $x$ 轴夹角，称为散射角。

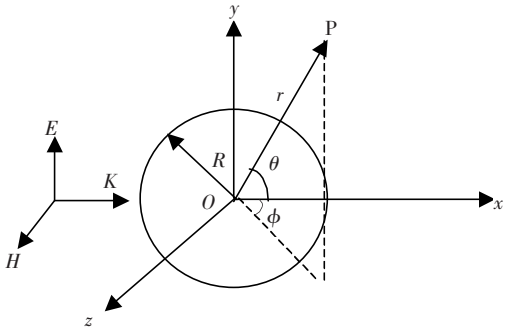



图 1　球形粒子的 Mie 散射图
Fig. 1　Mie scattering figure of spherical particle

Mie 散射理论已经精确的给出球形粒子的散射截面($Q_{sca}$)、消光截面($Q_{ext}$)、吸收截面($Q_{abs}$)，并由下式表示：

$$Q_{sca} = \frac{1}{n^2 |X|^2} \sum_{n=1}^{\infty} 2(2n+1)(|a_n^s|^2 + |b_n^s|^2)$$

$$Q_{ext} = \frac{1}{n^2 |X|^2} \sum_{n=1}^{\infty} 2(2n+1) R_e(a_n^s + b_n^s) \qquad (1)$$

$$Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{sca}$$

其中 $X = 2\pi a/\lambda$，$a$ 是粒子的半径，$n$ 为散射体环

**收稿日期**：2008-07-14；**修订日期**：2008-11-11
**基金项目**：山东省科技攻关项目(2007GG30004005)；山东省教育厅科技计划(J08LI68)；枣庄学院 2008 年科研计划重点项目(2008ZD04)资助项目
**作者简介**：徐庆君（1979－），男，山东枣庄人，主要从事光散射理论和实验的研究。
E-mail：xqjwl@126.com，Tel：(0632)3786765

境(或基质)的折射率,$a_n^s$、$b_n^s$ 为 Mie 系数。散射截面、吸收截面和消光截面不仅取决于散射体的线度(半径),同时还取决于散射体的折射率 $n'$ 和消光系数 $k$。

散射光场中 P 点的散射光强为

$$I_s = \frac{\lambda^2}{4\pi r^2} I_0 (I_{HH} + I_{VV}) \tag{2}$$

$$\begin{aligned} I_{HH} &= i_1(\theta) = |S_1(\theta)|^2 \\ I_{VV} &= i_2(\theta) = |S_2(\theta)|^2 \end{aligned} \tag{3}$$

其中 $I_{HH}$(parallel polarisation intensity)为平行于入射光方向的极化光的相对光强;$I_{VV}$(perpendicular polarisation intensity)为垂直于入射光方向的极化光的相对光强,$r$ 为球心到场点 P 距离;$S_1(\theta)$ 和 $S_2(\theta)$ 为两个与散射角有关的振幅函数。可以表示为

$$\begin{aligned} S_1(\theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n) \\ S_2(\theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n) \end{aligned} \tag{4}$$

其中:

$$\pi_n = \frac{dP_n(\cos\theta)}{d(\cos\theta)}, \quad \tau_n = \frac{d}{d\theta} P_n^{(1)}(\cos\theta) \tag{5}$$

$P_n$、$P_n^{(1)}$ 分别为 Legendre 函数和一阶缔合 Legendre 函数。Mie 系数 $a_n$、$b_n$ 可以表示为

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{\varphi_n(\alpha)\varphi_n'(m\alpha) - m\varphi_n'(\alpha)\varphi_n(m\alpha)}{\xi_n(\alpha)\varphi_n'(m\alpha) - m\xi_n'(\alpha)\varphi_n(m\alpha)} \\ b_n &= \frac{m\varphi_n(\alpha)\varphi_n'(m\alpha) - \varphi_n'(\alpha)\varphi_n(m\alpha)}{m\xi_n(\alpha)\varphi_n'(m\alpha) - \xi_n'(\alpha)\varphi_n(m\alpha)} \end{aligned} \tag{6}$$

式中:

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \sqrt{\frac{x\pi}{2}} J_{n+1/2}(x) \\ \xi_n(x) &= \sqrt{\frac{x\pi}{2}} H_{n+1/2}^{(2)}(x), \quad \alpha = \frac{\pi R}{\lambda} \end{aligned} \tag{7}$$

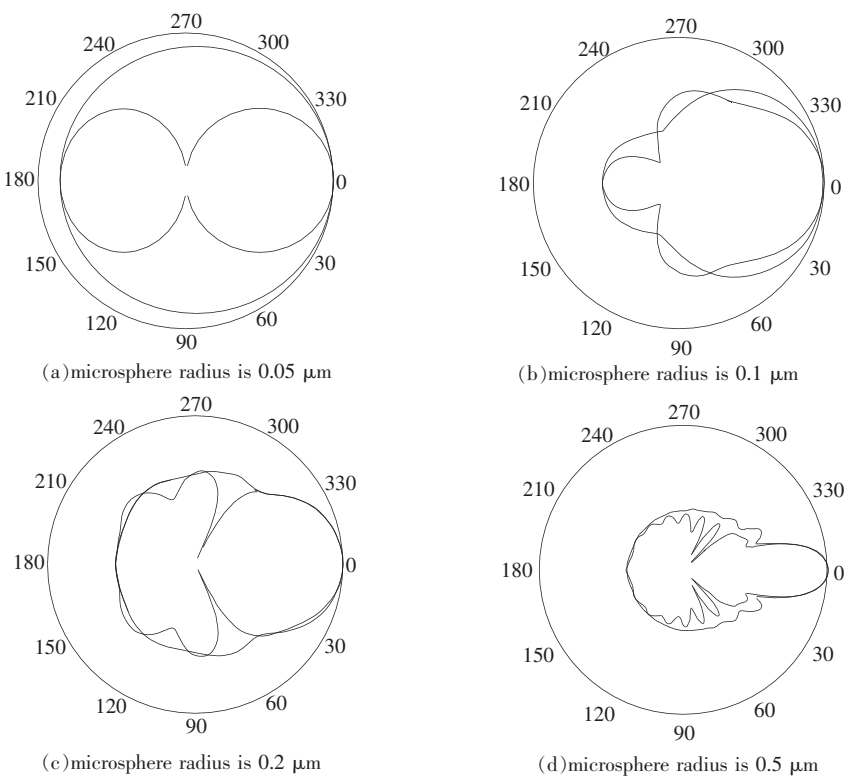
$J_{n+1/2}(x)$ 和 $H_{n+1/2}^{(2)}$ 分别是半整数 Bessel 函数和第二类 Hankel 函数。$m$ 为相对折射率,为球的折射率与环境介质折射率之比。

在我们的研究中,$TiO_2$ 颗粒为球形结构,周围被空气所包围,空气的折射率可以近似为 1。

## 3 结果与讨论

### 3.1 散射强度分布

图 2 是 $TiO_2$ 颗粒半径分别为 0.05,0.1,0.2,0.5 μm,紫外光波长为 0.3 μm 时,$I_{HH}$ 和 $I_{VV}$ 随散射角 $\theta$ 变化的极坐标曲线。




(a)microsphere radius is 0.05 μm

(b)microsphere radius is 0.1 μm

(c)microsphere radius is 0.2 μm

(d)microsphere radius is 0.5 μm

图 2 极坐标下,$I_{HH}$ 和 $I_{VV}$ 与散射角 $\theta$ 的关系曲线,内线为 $I_{HH}$,外线为 $I_{VV}$

Fig. 2 The curve of $I_{HH}$ and $I_{VV}$ with scattering angle by polar scale, inside curve is $I_{HH}$, outside curve is $I_{VV}$.

由 2(a)图可见，垂直方向极化光的强度随角度均匀分布，而平行方向极化光的强度在 90°(或 270°)最小，呈左右对称状；随着粒子半径的增大，两种极化光强度随角度的分布情况发生了变化，尤其平行方向的极化光的强度变得复杂。前向散射占据了主导地位，并且两种极化光的前向散射和背向散射强度始终相等。同时，散射场的偏振度发生了变化，为了得到偏振度变化的规律，我们计算了上述条件下的偏振度，如图 3 所示。

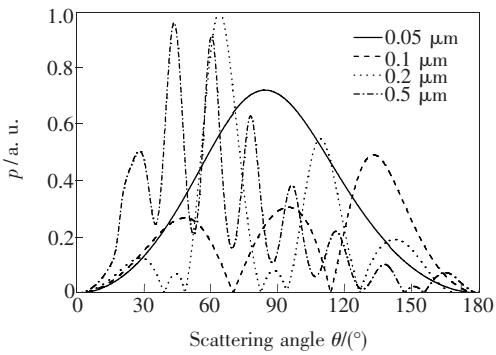



图 3　不同粒子半径下的偏振度与散射角的关系

Fig. 3　The relationship of polarization rate and scattering angle for different particle's radius

从图 3 可以看出，当粒子半径为 0.05 μm 时，偏振度在散射角为 90°附近达到最大值，两侧成对称分布。随着粒子半径的增大，偏振度的峰值增多，对应的散射角的位置主要集中在 0° ~ 90°之间，其主要原因是平行方向的极化光的强度随粒子半径的增大而变化得复杂。而前向散射和背向散射偏振度都等于 0，说明平行方向与垂直方向两个偏振的强度是相等的。

为了更好了解前向散射和背向散射的信息，我们数值计算了散射强度随参数 $X$ 的变化关系。

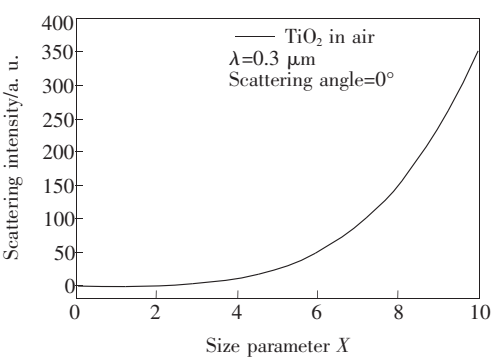



图 4　$TiO_2$ 粒子的前向散射强度与 $X$ 的关系

Fig. 4　The relationship of $TiO_2$ particle's forward scattering intensity and size parameter $X$

图 4 和图 5 给出了前向散射和背向散射与参数 $X$ 的关系曲线。两图相比较，前向散射强度远远大于背向散射强度，相差两个数量级。从图 4 可以看出，前向散射强度随 $X$ 的增大而增大。因此，我们在入射波长确定的情况下，通过测量前向散射强度可以实现对微球粒子半径的测量[8]。而在背向散射中(图 5 所示)，虽然散射强度随 $X$ 的增大而增大，但伴随着振荡，且 $X$ 增大，振荡幅度加大。我们认为这种周期性的振荡是由磁多极子系数和电多极子系数的周期性振荡所产生的[9]。

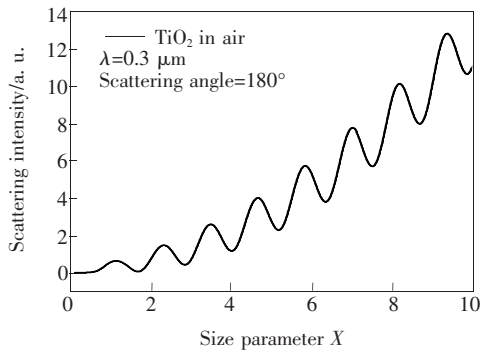



图 5　$TiO_2$ 粒子的背向散射强度与 $X$ 的关系

Fig. 5　The relationship of $TiO_2$ particle's back scattering intensity and size parameter $X$

## 3.2　光学截面

为了进一步地了解散射场的特点，我们计算了散射截面、吸收截面随粒子半径的变化曲线。如图 6 和图 7 所示，分别给出了 $TiO_2$ 微球粒子在半径为 0.01 ~ 10 μm 范围内，入射波长为 0.3 μm 时，散射截面、吸收截面与粒子半径之间的关系曲线。从图 6 可以看出，散射截面在粒子半径为 0.01 μm 时接近 0，随着半径的增大散射截面增大，然后缓慢下降。在粒子半径大约为 0.05 μm 时，

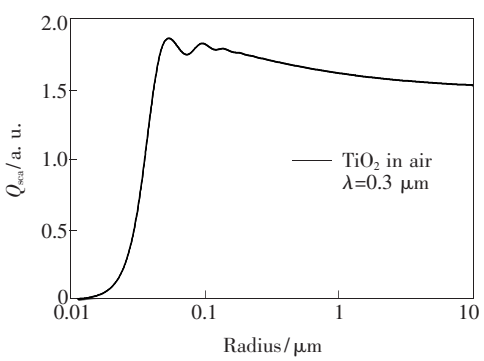



图 6　$TiO_2$ 粒子的散射截面与粒子半径的关系

Fig. 6　The relationship of $TiO_2$ particle's scattering cross section and radius

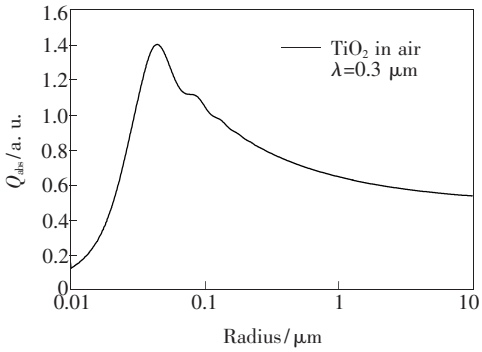



图7 $TiO_2$ 粒子的吸收截面与粒子半径的关系

Fig. 7 The relationship of $TiO_2$ particle's absorbability cross section and radius.

散射截面达到最大值。吸收截面随粒子半径的变化类似与散射截面的变化规律,也在半径为0.05 μm左右达到最大值。另外,粒子对紫外光的消光作用主要取决于它对光的散射和吸收,从两图可以看出,粒子的散射作用稍大于吸收作用。

## 4 结 论

根据Mie散射理论,研究了 $TiO_2$ 微球颗粒在紫外光下光散射特性。结果表明:

(1)前向散射占优势,并且随粒子半径的增大散射强度增强。

(2)对于纳米 $TiO_2$ 颗粒而言,散射截面和吸收截面在粒子半径为50 nm左右达到最大值。

**致谢**:感谢田贵才教授热情帮助、指导,对笔者教益颇深,在此表示感谢。

## 参 考 文 献:

[1] Lawandy N W, Balachandran R M, Gomes A S L, *et al.* Laser action in strongly scattering media [J]. *Nature*, 1994, **368**(6470):436-438.

[2] Ferber J, Luther J. Computer simulation of light scattering and absorption in dye sensitized solar cells [J]. *Sol. Energy Mater.*, 1998, **54**(4):265-275.

[3] Barbe C J, Arendse F, Comte P, *et al.* Nanocrystalline $TiO_2$ electrodes for photovoltaic applications [J]. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1997, **80**(12):3157-3171.

[4] Lin Yuan, Xiao Xurun, Zhang Dongshe, *et al.* Light scattering characteristics of nanocrystalline $TiO_2$ thin film [J]. *Chin. Science Bulletin* (科学通报), 2002, **47**(15):1145-1147 (in Chinese).

[5] Wang Z S, Kawauchi H, Kashima T, *et al.* Significant influence of $TiO_2$ photoelectrode morphology on the energy conversion efficiency of N719 dye-sensitized solar cell [J]. *Coordination Chem. Reviews*, 2004, **248**(13-14):1381-1389.

[6] Wang P, Dai Q, Zakeeruddin S M, *et al.* Ambient temperature plastic crystal electrolyte for efficient all-solid-state dye-sensitized solar cell [J]. *J. Am. Chem. Soc.*, 2004, **126**(42):13590-13591.

[7] Aden A L, Kerker M. Scattering of electromagnetic waves from concentric spheres [J]. *J. Appl. Phys.*, 1951, **22**(10):1242-1245.

[8] Sun Guozheng, Sun Qiang, Ren Zhibin. Analysis of the radius of microsphere particles based on Mie scattering theory [J]. *Infrared and Laser Engineering* (红外与激光工程), 2005, **34**(4):495-498 (in Chinese).

[9] Pluchino A B. Infrared emissivity of single water droplets [J]. *Appl. Opt.*, 1979, **18**(24):4065-4066.

# UV Scattering Characteristics of $TiO_2$ Particle Based on Mie Light Scattering Theory

XU Qing-jun, ZHANG Shi-ying, WEI De-quan

(*Department of Physics and Electron Engineering, Zaozhuang Institute, Zaozhuang* 277160, *China*)

**Abstract**: The theoretical analysis and numerical calculations of $TiO_2$ particle's light scattering characteristics were carried out using Mie scattering theory. Moreover, the distributions of scattering intensity and scattering

angle, polarization rate and scattering angle, scattering intensity and size parameter $X$, optic section and particle's radius were presented. The result showed that the larger radius of particle is, the larger forward scattering intensity is; the absoption cross-section and scattering cross-section possess of a peak value when particle's radius is approximately 50 nm for $TiO_2$ nanoparticle.

**Key words**: Mie scattering; optic section; scattering intensity; $TiO_2$

**CLC number**: O436.2　　**PACS**: 78.35.+c　　**PACC**: 7835　　**Document code**: A

Received date: 2008-07-14


# 《发 光 学 报》

## ——中文核心期刊（物理学类；无线电电子学、电信技术类）

《发光学报》是中国物理学会发光分会与中国科学院长春光学精密机械与物理研究所共同主办的中国物理学会发光分会的学术会刊。该刊是以发光学、凝聚态物质中的激发过程为专业方向的综合性学术刊物。

《发光学报》于 1980 年创刊，曾于 1992 年，1996 年，2000 年和 2004 年连续四次被《中文核心期刊要目总览》评为“物理学类核心期刊”，并于 2000 年同时被评为“无线电电子学、电信技术类核心期刊”。2000 年获中国科学院优秀期刊二等奖。现已被《中国学术期刊(光盘版)》、《中国期刊网》和“万方数据资源系统”等列为源期刊。英国《科学文摘》(SA)自 1999 年；美国《化学文摘》(CA)和俄罗斯《文摘杂志》(AJ)自 2000 年；美国《剑桥科学文摘社网站》自 2002 年；日本《科技文献速报》(CBST, JICST)自 2003 年已定期收录检索该刊论文；2008 年被荷兰“Elsevier Bibliographic Databases”确定为源期刊。2001 年在国家科技部组织的“中国期刊方阵”的评定中，《发光学报》被评为“双效期刊”。2002 年获中国科学院 2001 ~ 2002 年度科学出版基金“择重”资助。2004 年被选入《中国知识资源总库·中国科技精品库》。本刊内容丰富、信息量大，主要反映本学科专业领域的科研和技术成就，及时报道国内外的学术动态，开展学术讨论和交流，为提高我国该学科的学术水平服务。

《发光学报》为双月刊，A4 开本，144 页，国内外公开发行。国内定价：40 元，全年 240 元，全国各地邮局均可订阅。《发光学报》欢迎广大作者、读者广为利用，踊跃投稿。

**地　址**：长春市东南湖大路 3888 号
《发光学报》编辑部
**邮　编**：130033
**电　话**：(0431)86176862，84613407
**E-mail**：fgxbt@126.com

**国内统一刊号**：CN 22-1116/O4
**国际标准刊号**：ISSN 1000-7032
**国内邮发代号**：12-312
**国外发行代号**：4863BM
**http**://www.fgxb.org