

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

Unidad Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Dispersión de luz por una esfera recubierta y su
aplicación a un modelo de látex solvatado

Tesis que para obtener el grado de Maestro en Ciencias (Física)

presenta

ANGEL MANZUR GUEMAN

Enero de 1985

A Lucha, Gabi y Angel

CONTENIDO

Introducción.	1
Capítulo 1. Teoría General de Dispersión por una Esfera.	
1.1 Representación en términos de los potenciales de Debye.	4
1.2 Solución de la ecuación de onda.	8
1.3 Solución en la zona de radiación.	15
a. Intensidad de la luz dispersada.	17
b. Secciones transversales y factores de eficiencia.	18
1.4 Desarrollo en multipolos.	21
Capítulo 2. Teoría general de dispersión por una esfera estratificada.	
2.1 Teoría general.	24
a. Reducción a esfera homogénea	30
Capítulo 3. Eficiencia de dispersión e intensidad.	
3.1 Indices de refracción.	33
3.2 Factor de eficiencia de dispersión.	37
3.3 Función de intensidad para esfera homogénea.	43
a. Variación con el ángulo y con el tamaño.	43
b. Variación con el índice de refracción.	49
c. Posición angular de los extremos.	49
3.4 Funciones de intensidad para núcleo-cáscara.	52

3.4.1	Tamaño inicial mayor que 2.	52
a.	Variación con q y m_2	52
b.	Variación con \bar{v} y q .	52
c.	Variación usando corrimiento de fase	57
d.	Intensidades en un mínimo.	64
3.4.2	Tamaño inicial menor que 2	69
	Conclusiones.	80
	Referencias.	82

de polímeros y todas o casi todas las cadenas poseen al menos un extremo anclado en la superficie⁽¹³⁾. En este extremo se encuentra el radical libre que inicia la polimerización; esto significa que las moléculas están ligadas a la interfase agua-partícula por un extremo.

Un solvente para el polímero, pero que sea inmisible con el agua, al ser transferido a través de la fase acuosa puede ser absorbido por las esferas de látex (por ejemplo poliestireno). Si se usa un solvente no polar (por ejemplo tetracloruro de carbono o benceno) para hinchar las esferas de látex, los grupos cargados en las cadenas de polímeros tienen una gran tendencia a permanecer en la superficie para estar en contacto con el agua. Se ha predicho que la distribución del solvente en el interior de la partícula de látex es no uniforme^(8,13).

En este trabajo se construye un modelo para el látex hinchado o solvatado consistente en un núcleo esférico de polímero puro rodeado de una cáscara concéntrica formada por una mezcla de polímero y solvente. Se analiza la radiación dispersada tanto por una esfera homogénea que corresponde al látex no hinchado o "seco" como por una partícula núcleo-cáscara. El contenido está distribuido de la manera siguiente:

En el capítulo 1 se reproduce la teoría de la dispersión producida por una esfera homogénea general (dieléctrica o conductora) cuando se le hace incidir una onda electromagnética plana monocromática. A esta teoría se le conoce como teoría de Mie. En el capítulo 2 se hace una extensión de la teoría de Mie para el caso de una partícula esférica compuesta de un núcleo y de una cáscara concéntrica. Finalmente, en el capítulo 3 se calculan los valores que la teoría predice para la eficiencia y para la intensidad de la radiación dispersada.

INTRODUCCION

En el estudio de la caracterización de partículas microscópicas esféricas, los métodos absolutos usados, particularmente en la medición del tamaño y la distribución de tamaños de partícula, se encuentran el de microscopía electrónica, espectrofotometría y dispersión de luz. Estos dos últimos están íntimamente relacionados desde un punto de vista teórico y su aplicación a la caracterización está basada en la teoría general de Mie de dispersión por una esfera. La teoría de Mie está dirigida a esferas homogéneas (una sola fase) y poco es el trabajo que se ha hecho en generalizar esta teoría para el caso de esferas con dos o más fases y de varios tamaños (polidispersas). Las generalizaciones se han dado en el campo de la Astronomía y de las ciencias de la atmósfera donde se han estudiado la dispersión de ondas electromagnéticas por partículas esféricas estratificadas⁽¹⁸⁾ y la dispersión de partículas esféricas homogéneas polidispersas⁽⁶⁾. Sin embargo, todos estos trabajos han sido encaminados a aplicaciones específicas en su propio campo dada la dificultad de generar tablas generales para cualquier otra aplicación.

Nosotros estamos interesados en la caracterización de partículas de látex. Para ello se presentan en este trabajo los resultados que la teoría predice se obtendrían usando espectrofotometría y dispersión de luz, tanto para esfera homogénea como para esfera con una capa concéntrica.

En muchas de las preparaciones de látex, las polimerizaciones son típicamente iniciadas por sales inorgánicas solubles en agua tales como el persulfato de potasio, las cuales se rompen en agua para formar radicales libres e iniciar la polimerización. Características importantes de las partículas de látex son: tienen forma esférica, están compuestas por cadenas o moléculas

Lista de Símbolos Principales

a	radio de esfera homogénea, radio de núcleo
a_n	coeficiente de dispersión
b	radio de partícula con recubrimiento
b_n	coeficiente de dispersión
c	Concentración expresada en gramos de soluto en 100 mililitros de solución.
i_1, i_2	funciones de intensidad
i_r	función de intensidad relativa
m	índice de refracción
n	orden de las funciones Ricatti-Bessel y Legendre
$P_n^{(m)}(\cos \theta)$	polinomios asociados de Legendre
q	cociente $\frac{\alpha}{\beta}$ o $\frac{a}{b}$. En algunas gráficas aparece como Q.
Q_{sca}, Q_{ext}	factores de eficiencia de dispersión y extinción
r	distancia radial
r, θ, φ	coordenadas esféricas
α	$\frac{2\pi a}{\lambda}$ tamaño adimensional de esfera homogénea, núcleo
β	$m\alpha$
λ	longitud de onda
ν, NU	$\frac{2\pi b}{\lambda}$ tamaño adimensional de esfera recubierta
ρ, RO	corrimiento de fase. En las gráficas se usa RO.
θ	ángulo de dispersión
Ψ_n, X_n, ζ_n	funciones Ricatti-Bessel

CAPITULO 1

TEORIA GENERAL DE DISPERSION POR UNA ESFERA

En 1908 G. Mie obtuvo una solución rigurosa para la dispersión de una onda plana monocromática por una esfera homogénea de tamaño y composición arbitrarios colocada en un medio homogéneo. Esta solución de Mie, aunque se deriva para la dispersión de una sola esfera, también se aplica a la dispersión de cualquier número de esferas, con tal que todas sean del mismo tamaño y composición y que estén aleatoriamente distribuidas y separadas entre sí por distancias grandes comparadas con la longitud de onda. Bajo estas condiciones la energía dispersada total es igual a la energía dispersada por una esfera multiplicada por el número total de ellas. Es por esto que la solución de Mie es de gran valor práctico y puede aplicarse al estudio de una variedad de problemas: suspensiones metálicas, polvo atmosférico, partículas interestelares o suspensiones coloidales, efecto de nubes y nieblas en la transmisión de luz, partículas de látex, etc.

En lo que sigue se presenta un resumen de los pasos principales para obtener la solución y para ello nos basaremos en la discusión que se hace en el libro de Born y Wolf⁽⁴⁾. Otros tratamientos de esta teoría se encuentran, por ejemplo, en los libros de Kerker⁽¹²⁾, Van de Hulst⁽¹⁶⁾ y Stratton⁽¹⁵⁾. El método empleado, descrito brevemente, es así: estamos interesados en encontrar la solución de las ecuaciones de Maxwell que describen el campo que resulta al incidir una onda monocromática plana sobre una superficie esférica, a través de la cual las propiedades del medio cambian abruptamente. Usando coordenadas esféricas, el campo se representa como la suma de dos subcampos; uno de los subcampos es tal que su vector eléctrico no tiene componente radial mientras que el otro tiene un

vector magnético con esta propiedad. En coordenadas esféricas las ecuaciones de Maxwell junto con las condiciones a la frontera se separan en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias, las cuales se resuelven para los dos subcampos en la forma de series infinitas.

1-1. Representación en Términos de los Potenciales de Debye.

Consideremos una onda monocromática plana linealmente polarizada dispersada por una esfera de radio a , inmersa en un medio isotrópico y homogéneo. Suponemos que el medio en que la esfera está sumergida es no-conductor y que tanto el medio como la esfera son no magnéticos.

Las ecuaciones de Maxwell y las relaciones constitutivas son

$$\nabla \cdot \underline{D} = 4\pi \rho \quad , \quad \nabla \times \underline{H} = \frac{4\pi}{c} \underline{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \underline{D}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \underline{B} = 0 \quad , \quad \nabla \times \underline{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \underline{B}}{\partial t} = 0$$

$$\underline{D} = \epsilon \underline{E} \quad , \quad \underline{J} = \sigma \underline{E} \quad , \quad \underline{B} = \mu \underline{H}$$

Suponiendo la dependencia temporal $\exp(-i\omega t)$, es decir,

$$\underline{E}(\underline{r}, t) = \underline{E}(\underline{r}) e^{-i\omega t} \quad , \quad \underline{H}(\underline{r}, t) = \underline{H}(\underline{r}) e^{-i\omega t}$$

las partes independientes del tiempo de los vectores eléctrico y magnético satisfacen, adentro y afuera de la esfera, las ecuaciones de Maxwell en la forma

$$\nabla \times \underline{H} = -k_1 \underline{E} \quad (1a)$$

$$\nabla \times \underline{E} = k_2 \underline{H} \quad (1b)$$

donde

$$k_1 = \frac{i\omega}{c} \left(\epsilon + \frac{i4\pi\sigma}{\omega} \right) \quad (2a)$$

$$k_2 = \frac{i\omega}{c} \quad (2b)$$

El cuadrado del número de onda k (cuyo valor es real afuera y complejo adentro) es

$$k^2 = -\epsilon_1 k_2^2 \quad (3)$$

Las cantidades que se refieren a la esfera se denotarán por el superíndice (1) y las que se refieren al medio que rodea a la esfera por el superíndice (2). Como suponemos que el medio que rodea a la esfera es, no conductor, $\sigma^{(2)} = 0$.

Escogemos un sistema de coordenadas rectangulares con el origen en el centro de la esfera, la dirección z en la dirección de propagación de la onda y la dirección x en la dirección del vector eléctrico, como se indica en la figura 1b.

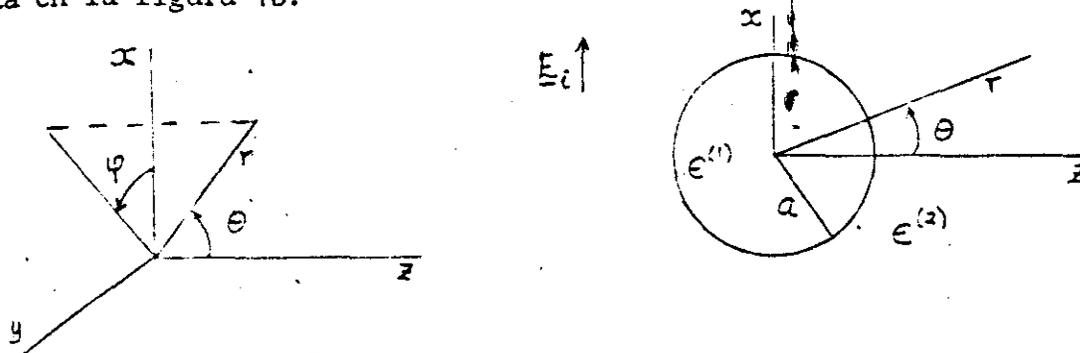


Fig. 1. Dispersión por esfera: notación.

Si la amplitud del vector eléctrico de la onda incidente está normalizada a la unidad, i.e.

$$|E_i| = |e^{i k^{(2)} z}| = 1,$$

El cuadrado del número de onda k (cuyo valor es real afuera y complejo adentro) es

$$k^2 = -\epsilon_1 k_2^2 \quad (3)$$

Las cantidades que se refieran a la esfera se denotarán por el superíndice (1) y las que se refieran al medio que rodea a la esfera por el superíndice (2). Como suponemos que el medio que rodea a la esfera es no conductor, $\sigma^{(2)} = 0$.

Escogemos un sistema de coordenadas rectangulares con el origen en el centro de la esfera, la dirección z en la dirección de propagación de la onda y la dirección x en la dirección del vector eléctrico, como se indica en la figura 1b.

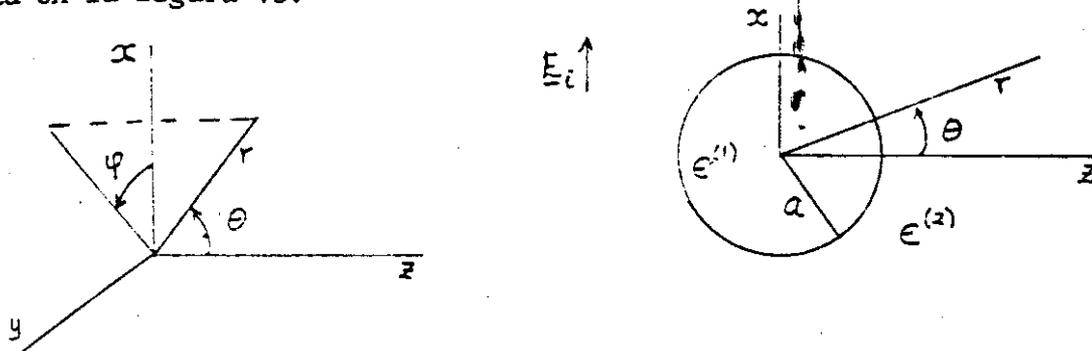


Fig. 1. Dispersión por esfera: notación.

Si la amplitud del vector eléctrico de la onda incidente está normalizada a la unidad, i.e.

$$|E_i| = |e^{i k^{(2)} z}| = 1,$$

las seis componentes de los vectores del campo son

$$E_{ix} = e^{ik^{(2)}z} \quad (a)$$

$$H_{iy} = \frac{ik^{(2)}}{k_z} e^{ik^{(2)}z} \quad (b)$$

$$E_{iy} = E_{iz} = H_{ix} = H_{iz} = 0 \quad (c)$$

(4)

Los vectores del campo que describen las propiedades electromagnéticas del espacio pueden separarse en tres partes: la onda incidente $\underline{E}_i, \underline{H}_i$, la onda dentro de la partícula $\underline{E}_r, \underline{H}_r$ y la onda dispersada $\underline{E}_s, \underline{H}_s$. Además de satisfacer las ecuaciones (1), estas cantidades también satisfacen las ecuaciones de onda vectoriales y las condiciones a la frontera. El campo eléctrico total en las dos regiones puede escribirse como $\underline{E} = \underline{E}_r$ adentro de la esfera y como $\underline{E} = \underline{E}_i + \underline{E}_s$ afuera, las expresiones para el campo magnético son similares.

La solución a las ecuaciones de Maxwell para este problema, escrita en coordenadas esféricas, se representará como una superposición de dos campos linealmente independientes $(\underline{E}_1, \underline{H}_1)$ y $(\underline{E}_2, \underline{H}_2)$ tales que

$$E_{1r} = E_r, \quad H_{1r} = 0$$

y

$$E_{2r} = 0, \quad H_{2r} = H_r$$

A la solución con campo magnético radial nulo ($H_{1r} = 0$) se le llama la onda eléctrica u onda magnética transversal (TM) y a la solución con la componente radial del campo eléctrico igual a cero ($E_{2r} = 0$) se le llama onda magnética u onda eléctrica transversal (TE). En el libro de Born y Wolf se demuestra que cada una de estas ondas puede ser derivada de un potencial escalar π_1 y π_2 respectivamente, los cuales se conocen como potenciales de Debye.

La solución completa se obtiene sumando los dos campos. El resultado es

$$E_r = E_{1r} + E_{2r} = \frac{\partial^2(r\pi_1)}{\partial r^2} + k^2 r \pi_1 + 0 \quad (a)$$

$$E_\theta = E_{1\theta} + E_{2\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2(r\pi_1)}{\partial r \partial \theta} + k_2 \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial(r\pi_2)}{\partial \varphi} \quad (b)$$

$$E_\varphi = E_{1\varphi} + E_{2\varphi} = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial^2(r\pi_1)}{\partial r \partial \varphi} - k_2 \frac{1}{r} \frac{\partial(r\pi_2)}{\partial \theta} \quad (c) \quad (5)$$

$$H_r = H_{1r} + H_{2r} = 0 + \frac{\partial^2(r\pi_2)}{\partial r^2} + k^2 r \pi_2 \quad (d)$$

$$H_\theta = H_{1\theta} + H_{2\theta} = -k_1 \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial(r\pi_1)}{\partial \varphi} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2(r\pi_2)}{\partial r \partial \theta} \quad (e)$$

$$H_\varphi = H_{1\varphi} + H_{2\varphi} = k_1 \frac{1}{r} \frac{\partial(r\pi_1)}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial^2(r\pi_2)}{\partial r \partial \varphi} \quad (f)$$

Ambos potenciales π_1 y π_2 son soluciones de la ecuación de onda

$$\nabla^2 \pi + k^2 \pi = 0 \quad (6)$$

escrita en coordenadas esféricas. Con el objeto de que las componentes E_r , E_θ , H_θ y H_φ sean continuas sobre la superficie esférica $r = a$, las cuatro cantidades

$$k_1 r \pi_1, \quad k_2 r \pi_2, \quad \frac{\partial}{\partial r}(r\pi_1), \quad \frac{\partial}{\partial r}(r\pi_2) \quad (7)$$

también deben ser continuas sobre esta superficie.

Nuestro problema de dispersión se ha reducido al problema de encontrar dos soluciones independientes de la ecuación de onda, con condiciones a la frontera fijas.

1-2. Solución de la Ecuación de Onda.

La ecuación de onda (6) escrita en coordenadas esféricas

$$\frac{1}{r} \left(\frac{\partial^2 r \Pi}{\partial r^2} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Pi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Pi}{\partial \varphi^2} + k^2 \Pi = 0 \quad (6)$$

puede resolverse usando el método de separación de variables. El potencial Π es el producto de tres funciones

$$\Pi = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \quad (8)$$

Estas funciones satisfacen las ecuaciones diferenciales ordinarias siguientes

$$\frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left(k^2 - \frac{m(m+1)}{r^2} \right) rR = 0 \quad (9)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(m(m+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0 \quad (10)$$

$$\frac{d^2}{d\varphi^2} \Phi + m^2 \Phi = 0 \quad (11)$$

Como el campo \underline{E} , \underline{H} es una función univaluada de la posición, Π también debe ser univaluada y este requerimiento impone que n sea un número entero y que $m \in [-n, n]$.

Las soluciones de la ecuación (10) son los polinomios asociados de Legendre

$$\Theta = P_n^{(m)}(\cos \theta) \quad (12)$$

y las soluciones de (11) son

$$\sin(mr) \quad , \quad \cos(mr) \quad (13)$$

con m y n sujetos a las restricciones anteriores.

Para resolver la ecuación radial (9) se hacen los cambios

$$kr = \rho \quad , \quad R(r) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} Z(\rho)$$

y se obtiene la ecuación de Bessel (1 p. 358)

$$\frac{d^2 Z}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dZ}{d\rho} + \left[1 - \frac{(m + \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right] Z = 0$$

La solución de esta ecuación es la función cilíndrica general $Z = Z_{m+\frac{1}{2}}(\rho)$ de orden $n + \frac{1}{2}$, de tal manera que la solución de (9) es

$$R = \frac{1}{\sqrt{kr}} Z_{m+\frac{1}{2}}(kr)$$

Cada función cilíndrica puede expresarse como una combinación lineal de dos funciones cilíndricas de tipo estándar, por ejemplo las funciones Bessel $J_{m+\frac{1}{2}}(\rho)$ y las funciones Neumann $N_{m+\frac{1}{2}}(\rho)$. Nosotros usaremos las funciones Ricatti-Bessel (1 cap. 10) definidas como

$$\psi_m(\rho) = \sqrt{\frac{\pi \rho}{2}} J_{m+\frac{1}{2}}(\rho) \quad , \quad \chi_m(\rho) = -\sqrt{\frac{\pi \rho}{2}} N_{m+\frac{1}{2}}(\rho) \quad (14)$$

Las funciones $\chi_n(\rho)$ tienen singularidades en el origen $\rho = 0$, donde se hacen infinito. Por tanto, solamente usaremos las funciones $\psi_n(\rho)$ para representar la onda adentro de la esfera.

La solución general de (9) puede escribirse como

$$rR = c_m \psi_m(kr) + d_m \chi_m(kr) \quad (15)$$

En particular, la combinación

$$rR = S_m(kr) = \psi_m(kr) - i\chi_m(kr) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} H_{m+\frac{1}{2}}^{(1)}(kr) \quad (16)$$

donde $H^{(1)}$ es una de las funciones Hankel, tiene la virtud de tener un comportamiento físicamente aceptable para valores grandes de r , como se discutirá más adelante.

De acuerdo con (8) se obtiene una solución particular $\pi_n^{(m)}$ al multiplicar las funciones (12), (13) y (15); la solución general de la ecuación de onda se obtiene superponiendo las soluciones particulares:

$$\begin{aligned} r\pi &= r \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{m=-m}^{m} \pi_m^{(m)} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{m=-m}^{m} \left\{ c_m \psi_m(kr) + d_m \chi_m(kr) \right\} \left\{ P_m^{(m)}(\cos\theta) \right\} \left\{ a_m \cos m\varphi + b_m \sin m\varphi \right\} \quad (17) \end{aligned}$$

Ahora requerimos las funciones potencial correspondientes a las tres partes en que hemos dividido el campo electromagnético, es decir, los potenciales para la onda incidente π_1^i y π_2^i , para las ondas adentro de la partícula π_1^r y π_2^r y para las ondas dispersadas π_1^s y π_2^s .

Debemos determinar las constantes que aparecen en (17) en forma tal que se satisfagan las condiciones a la frontera. Para ello primero vamos a expresar los potenciales π_1^i y π_2^i en series de la forma (17). Al expresar las cantidades de las ecuaciones (4) en coordenadas esféricas, la componentes radiales de \underline{E}_i y \underline{H}_i son

$$E_{ir} = e^{ik^{(2)}r \cos\theta} \sin\theta \cos\varphi \quad (18a)$$

$$H_{ir} = \frac{ik^{(2)}}{k_2^{(2)}} e^{ik^{(2)}r \cos\theta} \sin\theta \sin\varphi \quad (18b)$$

De las ecuaciones (5a) y (5d) se observa que E_{ir} sólo depende de $\Pi_1^{(i)}$ y H_{ir} sólo de $\Pi_2^{(i)}$. Para calcular $\Pi_1^{(i)}$ usaré (5a)

$$e^{ik^{(2)}r \cos \theta} \sin \theta \cos \varphi = \frac{\partial^2 (r \Pi_1^{(i)})}{\partial r^2} + (k^{(2)})^2 r \Pi_1^{(i)} \quad (19)$$

Por comodidad voy a escribir el número de onda en el medio 1 como $k^{(1)} \equiv k_1$ y en el medio 2 como $k^{(2)} \equiv k_2$.

El primer factor en el primer miembro de esta ecuación puede expresarse como una serie de polinomios de Legendre (3 p. 434)

$$e^{ik_2 r \cos \theta} = \sum_{n=0}^{\infty} i^{2n} (2n+1) \frac{\psi_n(k_2 r)}{k_2 r} P_n(\cos \theta) \quad (20)$$

También tenemos las identidades (3 p. 435)

$$e^{ik_2 r \cos \theta} \sin \theta \equiv -\frac{1}{ik_2 r} \frac{\partial}{\partial \theta} (e^{ik_2 r \cos \theta}) \quad (21a)$$

$$P_n^{(1)}(\cos \theta) = -\frac{\partial}{\partial \theta} P_n(\cos \theta) \quad (21b)$$

Usando estas relaciones, el primer miembro de (19) puede expresarse en la forma

$$e^{ik_2 r \cos \theta} \sin \theta \cos \varphi = \frac{1}{(k_2 r)^2} \sum_{n=1}^{\infty} i^{2n-1} (2n+1) \psi_n(k_2 r) P_n^{(1)}(\cos \theta) \cos \varphi \quad (22)$$

De acuerdo con (22) tomamos como solución de (19) una serie que tenga una forma similar

$$r \Pi_1^{(i)} = \frac{1}{k_2^2} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \psi_n(k_2 r) P_n^{(1)}(\cos \theta) \cos \varphi \quad (23)$$

Sustituyendo (22) y (23) en la ecuación (19) y comparando los coeficientes de $P_m^{(1)}(\cos \theta) \cos \varphi$ se obtiene que

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi_m(k_2 r) + k_2^2 \psi_m(k_2 r) - \frac{i^{m-1} (2m+1)}{\alpha_m} \frac{\psi_m(i/r)}{r^2} = 0 \quad (24)$$

Por otra parte, $\psi_m(k_2 r) = rR$ es una solución de (9)

$$\frac{d^2}{dr^2} R + \left(k^2 - \frac{m(m+1)}{r^2} \right) R = 0$$

Por tanto, comparando estas dos ecuaciones se ve que

$$\alpha_m = \frac{i^{m-1} (2m+1)}{m(m+1)} \quad (25)$$

En forma análoga se obtiene el potencial magnético Π_2^i . De esta manera se obtienen las expresiones siguientes para los potenciales de la onda incidente:

$$r \Pi_1^i = \frac{1}{k_2} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} \psi_m(k_2 r) P_m^{(1)}(\cos \theta) \cos \varphi \quad (26a)$$

$$r \Pi_2^i = \frac{i}{k_2 k_2^{(2)}} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} \psi_m(k_2 r) P_m^{(1)}(\cos \theta) \sin \varphi \quad (26b)$$

Hemos expresado ambos potenciales en una serie de la forma (17) y las constantes pueden ahora determinarse fácilmente.

Las condiciones a la frontera (7), las reescribimos en la forma

$$\frac{\partial}{\partial r} [r(\pi_1^i + \pi_1^s)] = \frac{\partial}{\partial r} (r \pi_1^r) \quad (27a)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} [r(\pi_2^i + \pi_2^s)] = \frac{\partial}{\partial r} (r \pi_2^r) \quad (27b)$$

$$k_1^{(2)} r (\pi_1^i + \pi_1^s) = k_1^{(1)} r \pi_1^r \quad (27c)$$

$$k_2^{(2)} r (\pi_2^i + \pi_2^s) = k_2^{(1)} r \pi_2^r \quad (27d)$$

en $r=a$

De acuerdo con (26), estas ecuaciones (27) pueden satisfacerse solamente si en los desarrollos (17) para π^s y π^r ocurren solamente aquellos términos para los cuales $m = 1$ y si, además $a_1 = 0$ para los potenciales π_2 y $b_1 = 0$ para los potenciales π_1 .

Para la representación de π^r solamente las funciones ψ_m son apropiadas, pues permanecen regulares en el origen, mientras que las funciones X_n se hacen infinito ahí. Por tanto, en analogía con (26):

$$r\pi_1^r = \frac{1}{k_1^2} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} c_m \psi_m(k_1 r) P_m^{(1)}(\cos\theta) \cos\varphi \quad (28a)$$

$$r\pi_2^r = \frac{i}{k_1 k_2^{(1)}} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} d_m \psi_m(k_1 r) P_m^{(1)}(\cos\theta) \sin\varphi \quad (28b)$$

Una representación para la onda dispersada en términos de $\zeta_m = \psi_m - i^m Z_m$ es apropiada, ζ_m se obtiene al multiplicar la función de Hankel $H_{m+\frac{1}{2}}^{(1)}$ por $\sqrt{\frac{\pi}{2}}$ (ver(16)). Para valores grandes de ρ , $H_{m+\frac{1}{2}}^{(1)}$ se comporta como $\frac{e^{i\rho}}{\sqrt{\rho}}$ (10 p. 72), es decir ζ_m se comporta como $e^{i\rho}$, y puesto que $\zeta_m = r R$ entonces R se comporta como $\frac{1}{r} e^{ik_2 r}$. Esto significa que a grandes distancias de la esfera, la onda dispersada es esférica con su centro en el origen $r = 0$. Por tanto

$$r\pi_1^s = - \frac{1}{k_2^2} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} a_m \zeta_m(k_2 r) P_m^{(1)}(\cos\theta) \cos\varphi \quad (29a)$$

$$r\pi_2^s = - \frac{i}{k_2 k_2^{(2)}} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} b_m \zeta_m(k_2 r) P_m^{(1)}(\cos\theta) \sin\varphi \quad (29b)$$

Antes de calcular las constantes a_m y b_m vamos a recopilar las diferentes constantes y a definir otras. Como hemos supuesto que el medio que rodea a la esfera es no conductor, $\sigma^{(2)} = 0$. Si escribimos σ en lugar de $\sigma^{(1)}$ para la conductividad de la esfera, de (2) tenemos que

$$k_1^{(2)} = \frac{i\omega}{c} \epsilon^{(2)} = i \frac{2\pi}{\lambda_0} \epsilon^{(2)}, \quad k_2^{(2)} = \frac{i\omega}{c} = i \frac{2\pi}{\lambda_0}$$

$$k^{(2)} = k_2 = \sqrt{-k_1^{(2)} k_2^{(2)}} = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\epsilon^{(2)}} = \frac{2\pi}{\lambda^{(2)}}$$

(30)

$$k_1^{(1)} = \frac{i\omega}{c} \left(\epsilon^{(1)} + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right) = i \frac{2\pi}{\lambda_0} \left(\epsilon^{(1)} + \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right), \quad k_2^{(1)} = \frac{i\omega}{c} = i \frac{2\pi}{\lambda_0}$$

$$k^{(1)} = k_1 = \sqrt{-k_1^{(1)} k_2^{(1)}} = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\epsilon^{(1)} + i \frac{4\pi\sigma}{\omega}}$$

donde λ_0 es la longitud de onda de la luz en el vacío y $\lambda^{(2)}$ es la longitud de onda en el medio que rodea a la esfera.

El índice de refracción complejo de la esfera lo expresaremos en términos del índice de refracción del medio, para ello escribimos el índice de refracción de la partícula relativo al del medio como

$$m^2 = \frac{n_1^2}{n_2^2} = \frac{k_1^2}{k_2^2} = \frac{\epsilon^{(1)}}{\epsilon^{(2)}} + i \frac{4\pi\sigma}{\omega \epsilon^{(2)}} = \frac{k_1^{(1)}}{k_1^{(2)}}$$

$$i.e. \quad m = \frac{n_1}{n_2} = \frac{k_1}{k_2} \quad (31)$$

También definimos los parámetros dimensionales

$$\alpha = k_2 a = \frac{2\pi a}{\lambda} = \frac{2\pi n_2 a}{\lambda_0} \quad (32a)$$

y

$$\beta = k_1 a = \frac{2\pi n_1 a}{\lambda_0} = m \alpha \quad (32b)$$

donde escribimos λ en lugar de $\lambda^{(2)}$.

Ahora sustituimos las expresiones (26), (28) y (29) en las condiciones a la frontera (27) y se obtienen relaciones entre los coeficientes a_n , b_n , c_n y d_n

$$\begin{aligned} m[\Psi'_m(\alpha) - a_m S'_m(\alpha)] &= c_m \Psi'_m(\beta) \\ \Psi'_m(\alpha) - b_m S_m(\alpha) &= d_m \Psi'_m(\beta) \\ \Psi_m(\alpha) - a_m S_m(\alpha) &= c_m \Psi_m(\beta) \\ m[\Psi_m(\alpha) - b_m S_m(\alpha)] &= d_m \Psi_m(\beta) \end{aligned} \quad (33)$$

donde la prima significa derivada respecto al argumento. De estas ecuaciones pueden obtenerse todos los coeficientes, pero sólo estamos interesados en a_n y b_n que son los que caracterizan a la onda dispersada.

Estos están dados por

$$a_m = \frac{\Psi_m(\alpha) \Psi'_m(\beta) - m \Psi_m(\beta) \Psi'_m(\alpha)}{S_m(\alpha) \Psi'_m(\beta) - m \Psi_m(\beta) S'_m(\alpha)} \quad (34a)$$

$$b_m = \frac{m \Psi_m(\alpha) \Psi'_m(\beta) - \Psi_m(\beta) \Psi'_m(\alpha)}{m S_m(\alpha) \Psi'_m(\beta) - \Psi_m(\beta) S'_m(\alpha)} \quad (34b)$$

Con esto se termina la solución formal del problema. Los potenciales de Debye de la onda dispersada π_1^s y π_2^s están completamente determinados. Los coeficientes de dispersión a_n y b_n están expresados en términos de m y α . Los vectores del campo que describen la onda dispersada pueden obtenerse directamente de (15).

1-3. Solución en la Zona de Radiación.

Ahora consideremos el campo dispersado en posiciones suficientemente lejos de la partícula tales que $k_2 r \gg n$ donde n es el orden de la función Ricatti-Bessel. Esta es la llamada zona de onda, de campo lejano o de radiación. Para dispersión de luz, todas las observaciones experimentales se realizan en esta zona.

Las expresiones que describen el campo dispersado son menos complicadas en la zona de radiación. Las funciones definidas por (16) tienen las siguientes expresiones asintóticas (4 p. 647, 10 p. 72)

$$\begin{aligned} S_m(k_2 r) &= (-i)^{m+1} e^{ik_2 r} \\ S'_m(k_2 r) &= (-i)^m e^{ik_2 r} \end{aligned} \quad (35)$$

Usando (29) y (35) en las ecuaciones (5) se obtienen las componentes del campo dispersado

$$E_r = \frac{\cos \varphi e^{ik_2 r}}{(k_2 r)^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) a_m P_m^{(1)}(\cos \theta) \quad (36a)$$

$$H_r = \frac{i \sin \varphi e^{ik_2 r}}{k_2 k_2^{(2)} r^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) b_m P_m^{(1)}(\cos \theta) \quad (36b)$$

$$E_\theta = \frac{H_\varphi}{m_2} = \frac{i e^{ik_2 r}}{b_2 r} \cos \varphi \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m+1}{m(m+1)} [a_m Z_m(\cos \theta) + b_m \Pi_m(\cos \theta)] \quad (37a)$$

$$E_\varphi = -\frac{H_\theta}{m_2} = -\frac{i e^{ik_2 r}}{k_2 r} \sin \varphi \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m+1}{m(m+1)} [a_m \Pi_m(\cos \theta) + b_m Z_m(\cos \theta)] \quad (37b)$$

donde las funciones angulares son

$$\Pi_m(\cos \theta) = \frac{P_m^{(1)}(\cos \theta)}{\sin \theta} \quad (38a)$$

$$Z_m(\cos \theta) = \frac{d}{d\theta} P_m^{(1)}(\cos \theta) \quad (38b)$$

Se observa que las componentes radiales E_r y H_r de la onda dispersada decaen como $\frac{1}{r^2}$ mientras que las otras componentes decaen más lentamente, como $\frac{1}{r}$. Por tanto, en la zona de radiación las componentes radiales pueden despreciarse en comparación con las componentes tangenciales, i.e. en esta región la onda es transversal. De (37) se ve que \underline{E} y \underline{H} son ortogonales y que su depen-

dencia en el inverso de r indica que la onda dispersada es una onda esférica.

Reescribo las componentes del campo eléctrico como

$$E_{\theta} = \frac{i e^{ik_2 r}}{k_2 r} \cos \varphi S_2(\theta) \quad (39a)$$

$$E_{\varphi} = - \frac{i e^{ik_2 r}}{k_2 r} \sin \varphi S_1(\theta) \quad (39b)$$

donde a

$$S_1(\theta) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m+1}{m(m+1)} [a_m P_m(\cos \theta) + b_m Z_m(\cos \theta)] \quad (40a)$$

$$S_2(\theta) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m+1}{m(m+1)} [a_m Z_m(\cos \theta) + b_m P_m(\cos \theta)] \quad (40b)$$

les llamamos funciones de amplitud.

a. Intensidad de la Luz Dispersada.

Como sólo estamos interesados en valores relativos de la intensidad de la luz dispersada, podemos tomar como una medida de la intensidad el cuadrado de la amplitud del vector eléctrico.

$$I_{\varphi} = \frac{|S_1|^2}{k_2^2 r^2} \sin^2 \varphi = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} |S_1|^2 \sin^2 \varphi = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} i_1 \sin^2 \varphi \quad (41)$$

$$I_{\theta} = \frac{|S_2|^2}{k_2^2 r^2} \cos^2 \varphi = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} |S_2|^2 \cos^2 \varphi = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} i_2 \cos^2 \varphi \quad (42)$$

donde λ es la longitud de onda en el medio que rodea a la esfera, a i_1 e i_2 les llamaremos funciones de intensidad.

Definimos el plano de observación como aquel que contiene la dirección de propagación de la luz incidente y la dirección (θ, φ) de observación. De acuerdo a las figuras 1, φ representa el ángulo entre este plano y la dirección de vibración del vector eléctrico de la onda incidente. Como E_{φ} o E_{θ} se anula

cuando $\varphi = 0$ ó $\varphi = \frac{\pi}{2}$, la luz dispersada está linealmente polarizada cuando el plano de observación es paralelo o perpendicular a las vibraciones primarias. Para cualquier otra dirección (θ, φ) la luz en general está elípticamente polarizada.

b. Secciones Transversales y Factores de Eficiencia.

Es de interés práctico determinar la cantidad total de luz que es dispersada o absorbida por la esfera. Esto puede calcularse evaluando el vector de Poynting e integrándolo en todas direcciones. Con la ayuda de las relaciones de ortogonalidad que existen entre los polinomios asociados de Legendre, es posible expresar las integrales en términos de los coeficientes a_n y b_n . Estos cálculos fueron hechos por Mie.

La energía total perdida por la onda incidente, i.e. la suma de la energía dispersada y la absorbida, puede determinarse de una manera alternativa a partir de ciertas consideraciones generales que se aplican a un obstáculo de cualquier forma. Estas consideraciones muestran que existe una estrecha conexión entre la energía perdida y la amplitud de la onda dispersada en la dirección hacia adelante ($\theta = 0$). A partir de este resultado, que se demuestra en el libro de Born y Wolf (pp 657-661), y de las fórmulas de Mie para la onda dispersada, la energía total perdida por dispersión y absorción por una esfera puede ser determinada.

Considérese que una onda plana monocromática incide sobre un obstáculo de forma arbitraria sumergido en un medio dieléctrico. El campo en cualquier punto del medio es

$$\underline{E} = \underline{E}_i + \underline{E}_s \quad , \quad \underline{H} = \underline{H}_i + \underline{H}_s$$

El promedio temporal del flujo de energía se representa por el promedio del vector de Poynting

$$\langle \underline{S} \rangle = \langle \underline{S}_i \rangle + \langle \underline{S}_s \rangle + \langle \underline{S}' \rangle \quad (43)$$

donde (R denota a la parte real)

$$\langle \underline{s}_i \rangle = \frac{c}{8\pi} R(\underline{E}_i \times \underline{H}_i^*) \quad (44a)$$

$$\langle \underline{s}_s \rangle = \frac{c}{8\pi} R(\underline{E}_s \times \underline{H}_s^*) \quad (44b)$$

$$\langle \underline{s}' \rangle = \frac{c}{8\pi} R(\underline{E}_i \times \underline{H}_s^* + \underline{E}_s \times \underline{H}_i^*) \quad (44c)$$

Considérese el flujo de energía saliente a través de la superficie de una esfera grande de radio R centrada en algún punto de la región ocupada por el obstáculo. El flujo neto por segundo se representa por la integral de la componente radial $\langle \underline{s} \rangle_r$ de $\langle \underline{s} \rangle$ en la superficie. Si el obstáculo es un conductor, parte de la energía incidente la absorbe y el flujo neto saliente a través de la superficie esférica es igual en magnitud a la rapidez con que toma lugar la absorción. Representemos por $W^{(a)}$ a la rapidez con que el obstáculo absorbe energía; entonces, de (43)

$$-W^{(a)} = W^{(i)} + W^{(s)} + W' \quad (45)$$

donde $W^{(i)}$, $W^{(s)}$ y W' son las integrales de las componentes radiales de $\langle \underline{s}_i \rangle$, $\langle \underline{s}_s \rangle$ y $\langle \underline{s}' \rangle$ sobre la superficie esférica. Como el medio que rodea al obstáculo es no conductor, $W^{(i)} = 0$, entonces

$$W^{(a)} + W^{(s)} = -W' = -\frac{c}{8\pi} R \int (\underline{E}_i \times \underline{H}_s^* + \underline{E}_s \times \underline{H}_i^*) \cdot \hat{n} dS \quad (46)$$

\hat{n} es un vector unitario normal saliente y s representa a la esfera. La expresión del lado derecho representa la rapidez con que la energía se disipa por calor y dispersión.

Suponemos que los campos incidente y dispersado son

$$\underline{E}_i = \underline{e} e^{ik_2(\hat{m}_0 \cdot \underline{r})}, \quad \underline{H}_i = \underline{h} e^{ik_2(\hat{m}_0 \cdot \underline{r})}$$

$$\underline{E}_s = \underline{a}(\hat{m}) \frac{e^{ik_2 r}}{r}, \quad \underline{H}_s = \underline{b}(\hat{m}) \frac{e^{ik_2 r}}{r}$$

donde \hat{n}_0 es el vector unitario en la dirección de propagación de la onda incidente. Con estos campos se obtiene que la ecuación (46) se convierte en

$$W^{(a)} + W^{(s)} = \frac{c\sqrt{\epsilon^{(2)}}}{2k_2} I[\underline{e} \cdot \underline{a}(\hat{n}_0)]$$

I significa la parte imaginaria.

Al cociente entre la rapidez de disipación de la energía ($W^{(a)} + W^{(s)}$) y $|\langle S_i \rangle|$, con S_i dado por (44a), se le llama sección transversal de extinción del obstáculo (C_{ext}), pues tiene unidades de área:

$$C_{ext} = \frac{W^{(a)} + W^{(s)}}{|\langle S_i \rangle|} = 2 \pi I\left(\frac{\underline{e} \cdot \underline{a}(\hat{n}_0)}{e^2}\right) \quad (47)$$

En forma similar se pueden definir la sección transversal de dispersión C_{sca} y la sección transversal de absorción C_{abs}

$$C_{sca} = \frac{W^{(s)}}{|\langle S_i \rangle|}, \quad C_{abs} = \frac{W^{(a)}}{|\langle S_i \rangle|} \quad (48)$$

con $C_{ext} = C_{sca} + C_{abs}$

Si el obstáculo es un dieléctrico $C_{abs} = 0$ y $C_{ext} = C_{sca}$.

Para aplicar la fórmula general (47) al caso de un obstáculo esférico es necesario calcular la amplitud de la onda dispersada en la dirección del vector eléctrico de la onda incidente ($\varphi = 0$), para la dispersión hacia adelante ($\vartheta = 0$). Usando (37a) y propiedades de los polinomios asociados de Legendre se obtiene que

$$E_{\vartheta}(\vartheta = \varphi = 0) = \frac{1}{2k_2} \frac{e^{ik_2 r}}{r} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(a_n + b_n)$$

Como desde el principio tomamos la amplitud del campo incidente con valor uno ($e^2 = 1$), la cantidad requerida es el factor que multiplica a $e^{ik_2 r}/r$ en esta expresión. La expresión para la sección transversal de extinción (Born y Wolf, p. 661) es

$$C_{ext} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) R(a_n + b_n) \quad (49)$$

R significa la parte real. Para nuestro caso, que estamos interesados en esferas dieléctricas, aquí terminaríamos el cálculo de las secciones transversales, pero por completez daremos la expresión de C_{sca} (Kerker, p. 50)

$$C_{sca} = \frac{k^2}{2\pi} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) [|a_m|^2 + |b_m|^2] \quad (50)$$

Cuando el índice de refracción de la esfera (m) es real, las ecuaciones (49) y (50) son idénticas ya que (Van de Hulst, p. 135) los coeficientes a_m y b_m satisfacen

$$R(a_m) = |a_m|^2, \quad R(b_m) = |b_m|^2$$

El factor de eficiencia para dispersión es una cantidad adimensional que se define como el cociente de la sección transversal entre la sección transversal geométrica; en forma análoga se definen los factores de eficiencia para extinción y absorción. Dividiendo (49) y (50) entre πa^2 obtenemos

$$Q_{sca} = \frac{C_{sca}}{\pi a^2} = \frac{2}{\alpha^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) [|a_m|^2 + |b_m|^2] \quad (51)$$

$$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{\pi a^2} = \frac{2}{\alpha^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) R(a_m + b_m) \quad (52)$$

Ambos factores de eficiencia son independientes del estado de polarización de la onda incidente.

1-4. Desarrollo en multipolos.

A primera vista, los resultados que hasta aquí se han obtenido no parecen ofrecer una imagen físicamente intuitiva del proceso de dispersión. Sin embargo, pueden obtenerse algunos aspectos cualitativos. La onda dispersada resulta de las oscilaciones de los electrones en la partícula excitada por la onda incidente. Esto se ha descrito aquí por una serie infinita de potenciales de Debye eléctrico y magnético.

Las fórmulas (37) muestran que la onda dispersada está compuesta de contribuciones que involucran polinomios asociados de Legendre de diferentes órdenes. A estas contribuciones se les puede llamar ondas parciales. Cada onda parcial consiste de una parte eléctrica que contiene a los coeficientes a_n , y de una parte magnética que contiene a los coeficientes b_n . Estos coeficientes dependen de la naturaleza de los medios y del cociente entre el radio de la esfera y la longitud de onda de la luz incidente.

Estas ecuaciones (37) se obtuvieron al sustituir los potenciales de Debye (29) en (5), de tal manera que cada uno de los términos de $r\pi_1^s$ representan una onda parcial eléctrica y los de $r\pi_2^s$ representan las ondas parciales magnéticas. La amplitud y la fase de cada una de estas ondas parciales están determinadas por los coeficientes de dispersión a_n y b_n . De acuerdo con esto, cada uno de los términos en las series que describen a la onda dispersada (potenciales de Debye $r\pi_1^s$, $r\pi_2^s$; componentes del campo, (37); funciones de amplitud $s_1(\theta)$, $s_2(\theta)$; funciones de intensidad i_1 , i_2) corresponde a una onda parcial particular. Mie dibujó las proyecciones en un plano de las líneas de campo sobre la superficie de una esfera grande y concéntrica con la partícula correspondiente a las primeras cuatro ondas parciales. Estos dibujos los reproduce Born y Wolf (p. 648).

Cualquier distribución de cargas eléctricas y dipolos magnéticos puede representarse por una superposición de multipolos eléctricos y magnéticos localizados en algún origen con momentos multipolares arbitrarios. Si, como en el caso de dispersión, la distribución de cargas y corrientes está oscilando sincrónicamente con la onda incidente, la radiación dispersada resulta de los correspondientes multipolos oscilantes. El resultado importante que ahora nos interesa es que existe una estrecha relación entre la representación de campos electromagnéticos por potenciales de Debye y su representación por desarrollo en multipolos (Kerker, p. 53). Los multipolos eléctricos oscilantes dan lugar a las ondas parciales eléctricas y los multipolos magnéticos oscilantes a las ondas parciales magnéticas. Reescribamos los potenciales

$r\pi_1^s$ y $r\pi_2^s$ como

$$r\pi_1^s = \sum_{n=1}^{\infty} r\pi_{1,n}^s, \quad r\pi_2^s = \sum_{m=1}^{\infty} r\pi_{2,m}^s \quad (53)$$

π_{11}^s describe la radiación por un dipolo eléctrico oscilante cuyo momento dipolar es proporcional al coeficiente de dispersión a_1 . π_{21}^s es un potencial de Debye que puede atribuirse a un dipolo magnético oscilante con momento dipolar b_1 . Los términos superiores están relacionados a los multipolos correspondientes, y los coeficientes de dispersión a_n y b_n son los momentos multipolares.

En el libro de Born y Wolf se calcula, a manera de ejemplo, la radiación producida por un dipolo eléctrico oscilante y el resultado coincide con el campo de la primera onda parcial eléctrica. Otros ejemplos se encuentran en el libro de van de Hulst.

Finalmente cabe mencionar que en el libro de van de Hulst se discuten propiedades de los coeficientes de dispersión para el caso de esfera dieléctrica.

A la solución de la dispersión de una onda plana por una esfera homogénea se le refiere generalmente como "teoría de Mie", aunque muchos otros autores han contribuido a ella. En el libro de Kerker (sección 3-4) se hace una revisión histórica de los principales autores que han contribuido a la solución de este problema desde el siglo pasado.

CAPITULO 2

TEORIA GENERAL DE DISPERSION POR UNA ESFERA ESTRATIFICADA

En este capítulo discutiremos la dispersión producida por una esfera cuyas propiedades ópticas están estratificadas, i.e., el índice de refracción complejo puede variar radialmente desde el centro hasta la superficie exterior. Hay dos casos principales. Por una parte, la esfera puede consistir de dos o más capas concéntricas en las que el índice de refracción es constante. Cuando sólo hay dos capas a la partícula le llamaremos esfera recubierta y diremos que consiste de un núcleo esférico y de una cáscara esférica concéntrica. En el segundo caso, el índice de refracción en cualquier capa, o a través de la esfera, puede variar en forma continua. Ambos casos se discuten en el libro de Kerker (cap. 5). Como a nosotros sólo nos interesa el caso de núcleo con cáscara, reproduciremos aquí el correspondiente análisis que Kerker hace.

2.1 Teoría General.

La notación y el formalismo que usaremos aquí es el mismo que se usó en el capítulo anterior para el caso de una esfera simple.

En la figura 2.1 se muestra la partícula esférica y la onda plana monocromática incidente. Hay tres constantes de propagación k_1 , k_2 y k_3 , correspondientes al material del núcleo, de la cáscara y del medio. El radio núcleo es a y el de la partícula completa es b .

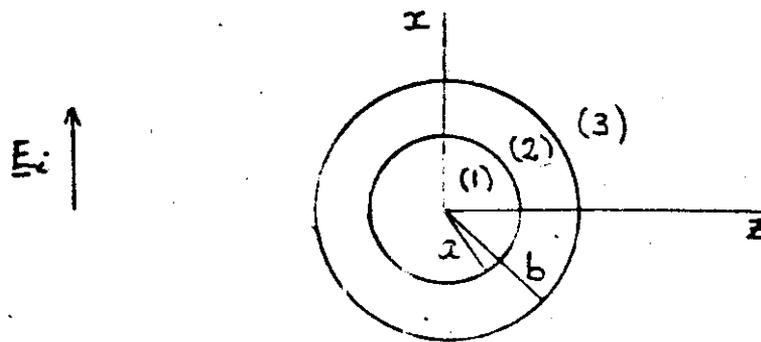


Figura 2-1

Formalmente, el problema es muy similar al problema de la esfera homogénea. Como antes, el campo se representa por un desarrollo de los dos potenciales de Debye correspondientes a las ondas TM y TE. Para el campo incidente (ver ecs. (26)) estos potenciales son

$$r \Pi_1^i = \frac{1}{k_3^2} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} \psi_m(k_3 r) P_m^{(1)}(\cos \theta) \cos \varphi \quad (54a)$$

$$r \Pi_2^i = \frac{i}{k_3 k_2^{(3)}} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} \psi_m(k_3 r) P_m^{(1)}(\cos \theta) \sin \varphi \quad (54b)$$

Los potenciales de Debye para el campo secundario inducido deben ahora construirse en tres partes, correspondientes a las tres regiones; de esta manera la onda dispersada en el medio externo (ver ecuaciones (29)) es

$$r \Pi_1^s = - \frac{1}{k_3^2} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} a_m \zeta_m(k_3 r) P_m^{(1)}(\cos \theta) \cos \varphi \quad (55a)$$

$$r \Pi_2^s = - \frac{i}{k_3 k_2^{(3)}} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} b_m \zeta_m(k_3 r) P_m^{(1)}(\cos \theta) \sin \varphi \quad (55b)$$

la onda en la cáscara es

$$r \Pi_1^{II} = - \frac{1}{k_2^2} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} [c_m \psi_m(k_2 r) + d_m \chi_m(k_2 r)] P_m^{(1)}(\cos \theta) \cos \varphi \quad (56a)$$

$$r \Pi_2^{II} = - \frac{i}{k_2 k_2^{(2)}} \sum_{m=1}^{\infty} i^{m-1} \frac{2m+1}{m(m+1)} [e_m \psi_m(k_2 r) + f_m \chi_m(k_2 r)] P_m^{(1)}(\cos \theta) \sin \varphi \quad (56b)$$

y la onda en el núcleo es

$$r\pi_1^{(v)} = -\frac{1}{k_1} \sum_{n=1}^{\infty} i^{n-1} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} g_n \psi_n(k_1 r) P_n^{(1)}(\cos\theta) \cos\varphi \quad (57a)$$

$$r\pi_2^{(v)} = -\frac{i}{k_2} \sum_{n=1}^{\infty} i^{n-1} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} h_n u_n(k_2 r) P_n^{(1)}(\cos\theta) \sin\varphi \quad (57b)$$

Con la misma justificación que se dió para el caso de la esfera homogénea, solamente ψ_n puede usarse para la onda incidente y la onda en el núcleo ya que X_n se hace infinito en el origen. Por otra parte, solamente S_n tiene un comportamiento apropiado en $r \rightarrow \infty$ y por ello se usa en la onda dispersada. En la región intermedia, i.e. en la cáscara, tanto ψ_n como X_n tienen un buen comportamiento de tal manera que se usa una combinación lineal de ellas.

Los campos deben acoplarse en cada una de las dos fronteras. Aplicando las ecuaciones (27) en $r = a$ y en $r = b$ se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial r} (r\pi_1^{(u)}) = \frac{\partial}{\partial r} (r\pi_1^{(v)}) , \quad \frac{\partial}{\partial r} (r\pi_2^{(u)}) = \frac{\partial}{\partial r} (r\pi_2^{(v)})$$

$$k_1^{(2)} (r\pi_1^{(u)}) = k_1^{(1)} (r\pi_1^{(v)}) , \quad k_2^{(2)} (r\pi_2^{(u)}) = k_2^{(1)} (r\pi_2^{(v)}) \quad \text{en } r = a \quad (58)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial r} (r\pi_1^{(u)}) = \frac{\partial}{\partial r} (r\pi_1^{(s)} + r\pi_1^{(i)}) , \quad \frac{\partial}{\partial r} (r\pi_2^{(u)}) = \frac{\partial}{\partial r} (r\pi_2^{(s)} + r\pi_2^{(i)})$$

$$k_1^{(2)} (r\pi_1^{(u)}) = k_1^{(3)} (r\pi_1^{(s)} + r\pi_1^{(i)}) , \quad k_2^{(2)} (r\pi_2^{(u)}) = k_2^{(3)} (r\pi_2^{(s)} + r\pi_2^{(i)}) \quad \text{en } r = b \quad (59)$$

Sustituyendo las ecuaciones (54) a (57) en (58) y (59) se obtiene:

$$m_1 c_m \psi_m'(m_2 \alpha) + m_1 d_m \chi_m'(m_2 \alpha) - m_2 g_m \psi_m'(m_1, \alpha) = 0$$

$$c_m \psi_m(m_2 \alpha) + d_m \chi_m(m_2 \alpha) - g_m \psi_m(m_1, \alpha) = 0$$

$$m_1 f_m'(\alpha) + d_m \chi_m'(m_2 \alpha) - m_2 a_m S_m'(\alpha) = -m_2 \psi_m'(\alpha)$$

$$c_m \psi_m(m_2 \alpha) + d_m \chi_m(m_2 \alpha) - a_m S_m(\alpha) = -\psi_m(\alpha)$$

$$e_m \psi_m'(m_2 \alpha) + f_m \chi_m'(m_2 \alpha) - h_m \psi_m'(m_1, \alpha) = 0 \quad (60)$$

$$m_1 e_m \psi_m(m_2 \alpha) + m_1 f_m \chi_m(m_2 \alpha) - h_m \psi_m(m_1, \alpha) = 0$$

$$e_m \psi_m'(m_2 \alpha) + f_m \chi_m'(m_2 \alpha) - b_m S_m'(\alpha) = -\psi_m'(\alpha)$$

$$e_m \psi_m(m_2 \alpha) + f_m \chi_m(m_2 \alpha) - m_2 b_m S_m(\alpha) = -m_2 \psi_m(\alpha)$$

En estas fórmulas la prima indica derivada respecto al argumento y además, suponiendo que el medio externo es dieléctrico, hemos escrito

$$k_3 a = \frac{2\pi a}{\lambda} = \alpha$$

$$k_3 b = \frac{2\pi b}{\lambda} = \gamma$$

$$m_1 = \frac{k_1}{k_3}$$

$$m_2 = \frac{k_2}{k_3} \quad (61)$$

es decir, m_1 y m_2 son los índices de refracción del núcleo y de la cáscara relativos al del medio externo, respectivamente. El sistema de ecuaciones (60) se resuelve para a_n y b_n que son las que nos interesan para obtener la onda dispersada, el resultado son las ecuaciones (62) y (63). Los determinantes que aparecen en a_n se obtienen directamente de las primeras cuatro ecuaciones y los que aparecen en b_n de las últimas cuatro.

$$a_m = \frac{\begin{vmatrix} m_1 \frac{1}{r} (m_2 \alpha) & m_1 \chi'_m(m_2 \alpha) & -m_2 \psi'_m(m_1 \alpha) & 0 \\ \psi_m(m_2 \alpha) & \chi_m(m_2 \alpha) & -\psi_m(m_1 \alpha) & 0 \\ \psi'_m(m_2 \gamma) & \chi'_m(m_2 \gamma) & 0 & -m_2 \frac{1}{r}(\gamma) \\ \psi_m(m_2 \gamma) & \chi_m(m_2 \gamma) & 0 & -\psi'_m(\gamma) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} m_1 \psi'_m(m_2 \alpha) & m_1 \chi'_m(m_2 \alpha) & -m_2 \psi'_m(m_1 \alpha) & 0 \\ \psi_m(m_2 \alpha) & \chi_m(m_2 \alpha) & -\psi_m(m_1 \alpha) & 0 \\ \psi'_m(m_2 \gamma) & \chi'_m(m_2 \gamma) & 0 & -m_2 \zeta'_m(\gamma) \\ \psi_m(m_2 \gamma) & \chi_m(m_2 \gamma) & 0 & -\zeta_m(\gamma) \end{vmatrix}} \quad (6)$$

$$b_m = \frac{\begin{vmatrix} \psi'_m(m_2 \alpha) & \chi'_m(m_2 \alpha) & -\psi'_m(m_1 \alpha) & 0 \\ m_1 \psi_m(m_2 \alpha) & m_1 \chi_m(m_2 \alpha) & -m_2 \psi_m(m_1 \alpha) & 0 \\ \psi'_m(m_2 \gamma) & \chi'_m(m_2 \gamma) & 0 & -\psi'_m(\gamma) \\ \psi_m(m_2 \gamma) & \chi_m(m_2 \gamma) & 0 & -m_2 \frac{1}{r}(\gamma) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \frac{1}{r}(\alpha) & \chi'_m(m_2 \alpha) & -\psi'_m(m_1 \alpha) & 0 \\ m_1 \psi_m(m_2 \alpha) & m_1 \chi_m(m_2 \alpha) & -m_2 \psi_m(m_1 \alpha) & 0 \\ \psi'_m(m_2 \gamma) & \chi'_m(\gamma) & 0 & -\zeta'_m(\gamma) \\ \psi_m(m_2 \gamma) & \chi_m(\gamma) & 0 & -m_2 \zeta_m(\gamma) \end{vmatrix}} \quad (6)$$

Expresando S_n en términos de ψ_n y χ_n se obtiene que

$$a_m = \frac{p_a \cdot q_a - r_a \cdot s_a}{p_a (q_a + i t_a) - s_a (r_a + i \mu_a)} \quad (64)$$

donde

$$\begin{aligned} p_a &= m_1 \psi'_m(m_2 x) \psi_m(m_1 x) - m_2 \psi'_m(m_1 x) \psi_m(m_2 x) \\ q_a &= \chi'_m(m_2 y) \psi_m(y) - m_2 \chi_m(m_2 y) \psi'_m(y) \\ r_a &= \psi'_m(m_2 y) \psi_m(y) - m_2 \psi_m(m_2 y) \psi'_m(y) \\ s_a &= m_1 \chi'_m(m_2 x) \psi_m(m_1 x) - m_2 \chi_m(m_2 x) \psi'_m(m_1 x) \\ t_a &= -[\chi'_m(m_2 y) \chi_m(y) - m_2 \chi_m(m_2 y) \chi'_m(y)] \\ \mu_a &= -[\psi'_m(m_2 y) \chi_m(y) - m_2 \psi_m(m_2 y) \chi'_m(y)] \end{aligned} \quad (64)$$

análogamente

$$b_m = \frac{p_b \cdot q_b - r_b \cdot s_b}{p_b (q_b + i t_b) - s_b (r_b + i \mu_b)} \quad (65)$$

donde

$$\begin{aligned} p_b &= m_2 \psi'_m(m_2 x) \psi_m(m_1 x) - m_1 \psi_m(m_2 x) \psi'_m(m_1 x) \\ q_b &= m_2 \chi'_m(m_2 y) \psi_m(y) - \chi_m(m_2 y) \psi'_m(y) \\ r_b &= m_2 \psi'_m(m_2 y) \psi_m(y) - \psi_m(m_2 y) \psi'_m(y) \\ s_b &= m_2 \chi'_m(m_2 x) \psi_m(m_1 x) - m_1 \chi_m(m_2 x) \psi'_m(m_1 x) \\ t_b &= -[m_2 \chi'_m(m_2 y) \chi_m(y) - \chi_m(m_2 y) \chi'_m(y)] \\ \mu_b &= -[m_2 \psi'_m(m_2 y) \chi_m(y) - \psi_m(m_2 y) \chi'_m(y)] \end{aligned} \quad (65)$$

A partir de aquí, todos los cálculos que deben hacerse para obtener las cantidades de interés físico como las funciones de intensidad i_1 e i_2 y los factores de eficiencia para extinción, absorción y dispersión (Q_{ext} , Q_{abs} , Q_{sca}), son idénticos al caso de esfera homogénea.

a. Reducción a esfera homogénea.

Esta solución se reduce a la de una esfera simple dada en el capítulo anterior, cuando se toman los límites apropiados. Por ejemplo, cuando las propiedades ópticas del núcleo y de la cáscara son iguales

$$m_1 = m_2 = m,$$

las funciones p_a y p_b se anulan y los coeficientes a_n y b_n son idénticos a los dados en las ecuaciones (34) si se identifica a con α y a $m\alpha$ con β .

$$a_n = \frac{r_a}{r_a + i\lambda r_a} = \frac{\psi'_m(m_1\alpha)\psi_m(\beta) - m_1\psi_m(m_1\alpha)\psi'_m(\beta)}{\psi'_m(m_1\alpha)S_m(\beta) - m_1\psi_m(m_1\alpha)S'_m(\beta)}$$

$$b_n = \frac{r_b}{r_b + i\lambda r_b} = \frac{m_1\psi'_m(m_1\alpha)\psi_m(\beta) - \psi_m(m_1\alpha)\psi'_m(\beta)}{m_1\psi'_m(m_1\alpha)S_m(\beta) - \psi_m(m_1\alpha)S'_m(\beta)}$$

Otro límite que puede tomarse fácilmente es cuando $a \rightarrow 0$, que corresponde a cuando la esfera completa tiene sus propiedades ópticas como las del material de la cáscara. Como $\psi_n(0) = 0$, entonces $p_a = p_b = 0$ y a_n y b_n se reducen a

$$a_n = \frac{\psi'_m(m_2\alpha)\psi_m(\beta) - m_2\psi_m(m_2\alpha)\psi'_m(\beta)}{\psi'_m(m_2\alpha)S_m(\beta) - m_2\psi_m(m_2\alpha)S'_m(\beta)}$$

$$b_n = \frac{m_2\psi'_m(m_2\alpha)\psi_m(\beta) - \psi_m(m_2\alpha)\psi'_m(\beta)}{m_2\psi'_m(m_2\alpha)S_m(\beta) - \psi_m(m_2\alpha)S'_m(\beta)}$$

Aunque analíticamente se obtiene el resultado deseado, para hacer cálculos numéricos a partir de las fórmulas completas es necesario tomar precauciones pues $X_n(0)$ se hace infinito.

Finalmente, queremos mencionar que con este tratamiento pueden estudiarse sistemas no solamente de interés físico, como por ejemplo esferas conductoras con recubrimientos dieléctricos o conductores, sino que también sistemas de interés biológico, por ejemplo la dispersión de luz por cáscaras esféricas o burbujas ($m_1 = 1$) tiene aplicaciones importantes en biofísica⁽²⁾.

CAPITULO 3

EFICIENCIA DE DISPERSION E INTENSIDAD

En los capítulos anteriores se han calculado las funciones que describen la radiación dispersada tanto por una esfera homogénea como por una partícula compuesta de núcleo y cáscara. Ahora estamos interesados en ver cómo varían las funciones de dispersión con los varios parámetros físicos tales como tamaño, espesor de cáscara, índices de refracción y el ángulo de observación.

En la literatura existe una gran cantidad de tablas de valores para los coeficientes de dispersión⁽¹⁴⁾ a_n y b_n , para las eficiencias⁽¹⁸⁾ Q_{sca} , Q_{ext} , para las funciones de intensidad⁽⁷⁾ i_1 , i_2 , etc., todas ellas para el caso de esfera homogénea. Aunque las tabulaciones son muchas, no son completas porque cada autor hace los cálculos para los índices de refracción, tamaños y ángulos de observación que a él le interesan. En pequeña cantidad son las tabulaciones existentes para el caso de esfera recubierta. Por otra parte, con las ventajas que actualmente se disponen con las computadoras, no vale la pena crear más tablas sino más bien diseñar programas de computadora capaces de calcular los valores específicos que la teoría predice para las funciones de dispersión que se necesitan y comparar éstos con los datos obtenidos experimentalmente. Otra ventaja que presentan las computadoras es que pueden evitarse las aproximaciones basadas en reducciones matemáticas de la teoría general, las cuales en una época se justificaban para hacer los cálculos con rapidez ya que las cantidades de interés están expresadas como series infinitas (ecuaciones (40), (51) y (52) por ejemplo), y para que éstas converjan es necesario que el número de términos (n) sea mayor que el tamaño de la partícula (α).

Como ya se mencionó al principio de este trabajo, nosotros estamos interesados en caracterizar partículas de látex seco y solvado mediante espectrofotometría y dispersión de luz, principalmente. Para ello haremos los cálculos que la teoría predice para el factor de eficiencia de dispersión Q_{sca} y de las funciones de intensidad i_1 e i_2 . En este caso los cálculos se simplifican pues los índices de refracción son reales, los argumentos que aparecen en las funciones Ricatti-Bessel son reales y no hay absorción lo cual hace que $Q_{ext} = Q_{sca}$. La intensidad en que estamos interesados es i_1 , dada por la ecuación (41), ya que en el dispersor que usaremos la polarización de la onda incidente está en la dirección vertical y el plano de observación es horizontal, es decir $\varphi = 90^\circ$.

3.1. Índices de Refracción.

Para ilustrar los cálculos conviene escoger un látex típico por ejemplo, de poliestireno, el cual además, tiene la ventaja de que se pueden obtener muestras bastante monodispersas, el medio en que se encuentra el látex es agua y un solvente adecuado para este látex puede ser tetracloruro de carbono o benceno. Debido a que la fuente de luz del dispersor disponible es luz de láser con longitud de onda $\lambda_0 = 6328 \text{ \AA}$, necesitamos los índices de refracción de estas sustancias para esta λ . En la tabla 3-I se dan los valores de los índices de refracción para otras longitudes de onda obtenidos a temperatura $T = 20^\circ \text{C}$ (5,9,17). Los valores que aparecen en la penúltima columna se obtuvieron usando los valores en las columnas anteriores y empleando la fórmula de Cauchy (11)

$$n_1 = a + \frac{b}{\lambda} \quad (66)$$

En la última columna de esta tabla están los índices de refracción relativos al agua para la λ que nos interesa.

Se ha predicho que al agregar solvente al polímero a través del medio acuoso, la partícula de látex se hincha de una manera no uniforme (8,13). Basándonos en esto, nosotros proponemos que la partícula hinchada, ante una onda electromagnética, se comporte como un núcleo esférico de polímero rodeado

Tabla 3-I. Índices de refracción para diferentes longitudes de onda.

	589.6 m μ	656.3 m μ	6328 Å	n relativo
poliestireno	1.591	1.586	1.5876	1.19207
tetracloruro de carbono	1.4607	1.4579	1.4588	1.09536
benceno	1.5012	1.4965	1.4980	1.12479
agua	1.3350	1.3312	1.3318	1

Tabla 3-II. Cambio en el índice de refracción respecto al solvente (Δn) para soluciones de poliestireno en tetracloruro de carbono.

Concentración gr de ps 100 ml de soln.	$\Delta n \times 10^6$		
	436 m μ	546 m μ	6328 Å
0.10	153 \pm 6.5	144 \pm 6.9	139 \pm 13.7
0.50	777 1.4	732 1.5	712 3.1
1.00	1,548 0.8	1,445 0.8	1,399 1.7
5.00	7,755 0.3	7,268 0.3	7,049 0.7
10.00	15,551 0.3	14,556 0.3	14,108 0.7
15.00	23,144 0.3	21,616 0.3	20,943 0.7
20.00	30,674 0.3	28,687 0.3	27,793 0.7

de una cáscara concéntrica formada por polímero y solvente. Es decir, proponemos que el índice de refracción de la partícula como función de la distancia radial sea de la forma representada en la figura 3-1.

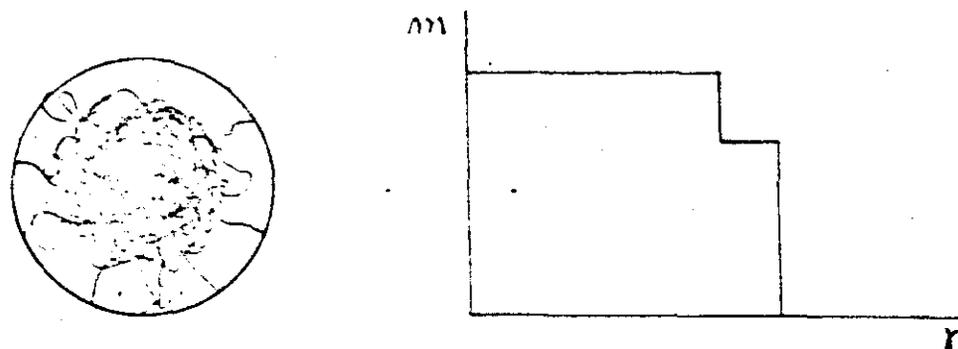
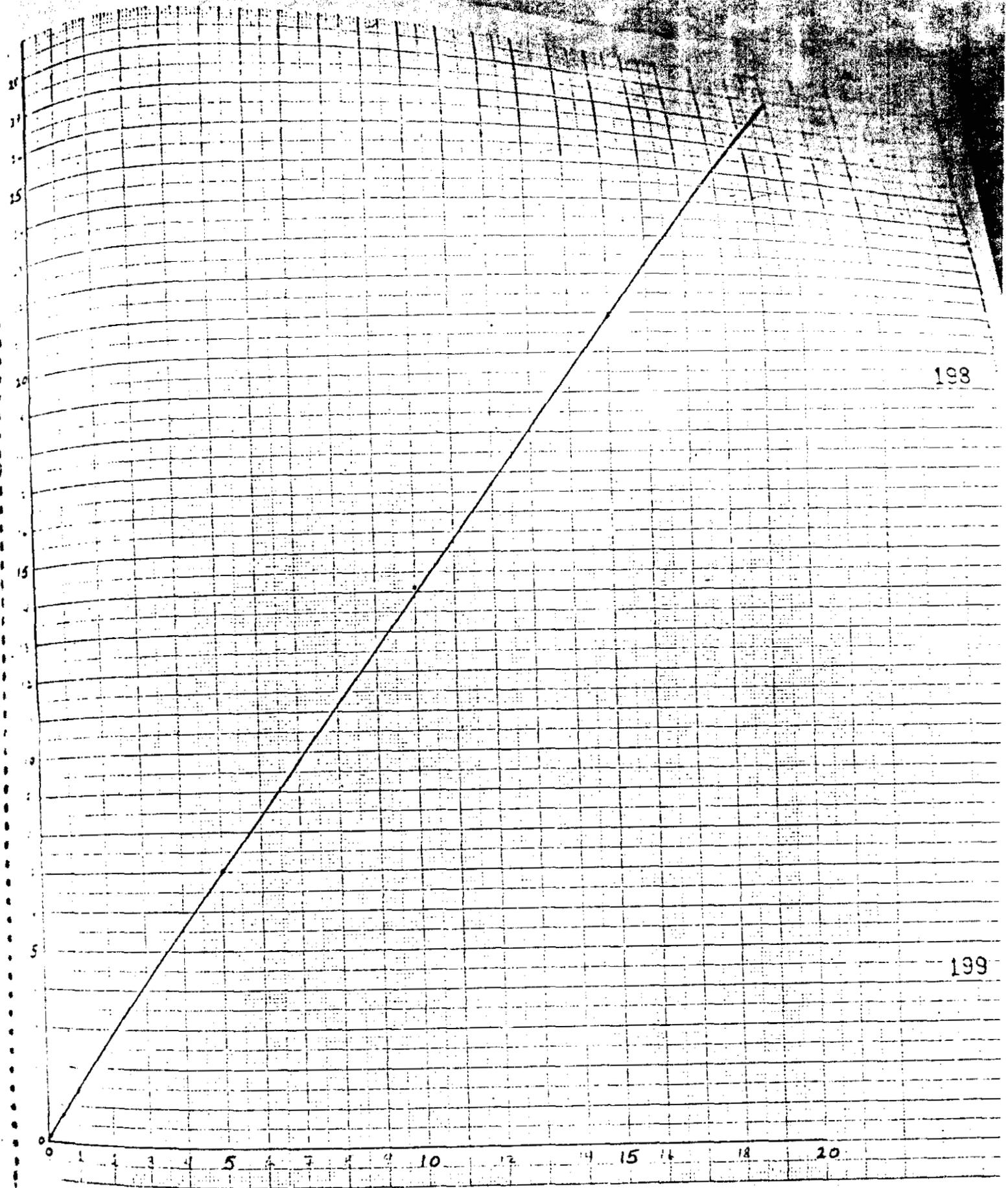


Figura 3-1. Modelo propuesto para látex solvatado.

En los cálculos vamos a necesitar el índice de refracción de la cáscara. Para ello hemos medido experimentalmente, usando un refractómetro diferencial, el cambio del índice de refracción de soluciones de poliestireno en tetracloruro de carbono respecto al solvente. En la tabla 3-II se muestran las concentraciones de las soluciones expresadas en gramos de soluto en 100 ml de solución. En las columnas segunda y tercera se muestran los cambios en el índice de refracción respecto al solvente para dos longitudes de onda del mercurio; también se indica el error porcentual. Con estos valores y usando la fórmula de Cauchy se obtiene el correspondiente valor para $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ indicado en la última columna. Para estar seguros que el uso de la fórmula de Cauchy es adecuado, determinamos Δn usando luz del láser para las primeras dos concentraciones y se obtuvo $137 \pm 7.3\%$ y $706 \pm 1.6\%$ respectivamente. Comparando los correspondientes valores de Δn y sus errores se observa que la concordancia es buena.

Es importante disponer de estos valores del cambio en el índice de refracción de la solución respecto al solvente pues permiten calcular los índices de refracción de la cáscara para diferentes concentraciones.



198

199

Figura 3-2. $\Delta n \times 10^3$ vs C

En la figura 3-2 se muestra la gráfica de Δn en función de la concentración; se hace un ajuste por mínimos cuadrados y se obtiene que

$$\Delta n = 0.13949 C \quad (67)$$

con C expresada en gramos de soluto por ml de solución y con una desviación estándar de $S_{\Delta n} = 0.00009$.

En la tabla 3-III se muestra el índice de refracción de la cáscara m_2 respecto al agua, calculado sumando a (67) el índice de refracción del tetracloruro de carbono y dividiendo entre el del agua, para diferentes concentraciones.

	C	m_2	C	m_2
Tabla 3-III.	0	1.09536	5.0	1.10060
	0.1	1.09546	10.0	1.10583
	0.5	1.09588	15.0	1.11107
	1.0	1.09641	20.0	1.11631

De ahora en adelante al referirnos a las propiedades ópticas de la cáscara, usaremos indistintamente el valor del índice de refracción relativo o el de la concentración de acuerdo a la tabla 3-III.

3-2. Factor de Eficiencia de Dispersión.

El factor de eficiencia está dado por la ecuación (51)

$$Q_{sca} = \frac{2}{\nu^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) [|a_m|^2 + |b_m|^2] \quad (51)$$

donde ν es el tamaño de la partícula esférica en unidades de longitud de onda, y los coeficientes de dispersión están dados en las ecuaciones (64) y (65) los cuales como ya vimos antes, se reducen apropiadamente para el caso de esfera homogénea.

Con la posibilidad de variar los tamaños y los índices de refracción tanto del núcleo como del recubrimiento, la variedad de resultados que pueden explorarse es enorme.

Por comodidad definimos el parámetro q como el cociente del radio del núcleo entre el radio de la partícula

$$q = \frac{x}{y} = \frac{a}{b} \quad (68)$$

Con este parámetro variaremos el espesor de la cáscara; $q = 1$ representa una esfera homogénea sin cáscara, i.e. toda la partícula representa a un látex seco, $q = 0$ representa a una partícula hecha con el material de la cáscara.

En todos los cálculos numéricos de las cantidades de interés (Q_{sca}, i_1, i_2), la precisión depende de la precisión con que se calculen las funciones Ricatti-Bessel y las funciones de Legendre y principalmente del número de términos (n) que se consideren en cada serie $Q_{sca}, |S_1|^2$ y $|S_2|^2$. Con el programa de computación que hemos construido hemos reproducido los valores de las funciones de Legendre y de las funciones Bessel esféricas que se encuentran en el libro de Abramowitz ⁽¹⁾, de tal manera que tenemos confianza en los valores que obtenemos para las funciones $P_n(\cos \vartheta)$, $Z_n(\cos \vartheta)$, Ricatti-Bessel y sus derivadas.

En el cálculo de las series infinitas que describen a Q_{sca}, i_1 , e i_2 , hemos asegurado numéricamente su convergencia al obtener el mismo valor con diez cifras decimales para n y $n + 6$ términos. Reproducimos valores de Q_{sca}, i_1 e i_2 que existen en la literatura ^(7,12,14,18).

Al hacer una grafica de Q_{sca} vs α para una partícula homogénea con índice de refracción m , se obtiene una curva que presenta máximos y mínimos cuya posición es característica para el índice de refracción. Sin embargo, se ha encontrado ^(16,12) que la eficiencia de dispersión de esferas dieléctricas exhibe

los patrones característicos mostrados en las figuras 3-3 tomadas del libro de Kerker:

El parámetro φ contra el cual Q_{sca} se grafica es

$$\varphi = 2\alpha(m-1) \quad (69)$$

Esta es la diferencia entre el corrimiento de fase que experimenta el rayo central al atravesar el diámetro de la partícula y el que se obtiene en ausencia de la partícula. En la gráfica superior los índices de refracción son $m = 1, 1.15, 1.33, 1.50$ y 2.105 y para efectos de claridad se han usado diferentes escalas en el eje de las ordenadas. Dependiendo del índice de refracción, Q_{sca} crece hasta un valor máximo en $\varphi \approx 4.41$ y después realiza una oscilación amortiguada. Se observa que superpuesta a la oscilación principal aparece una oscilación secundaria que se incrementa irregularmente en los índices de refracción mayores. La posición φ de los extremos de la oscilación principal es aproximadamente independiente del índice de refracción.

En la parte inferior de la figura 3-3 aparece Q_{sca} vs $\varphi/2$ para índices de refracción contenidos en el intervalo $1.33 \leq m \leq 1.50$. Aparecen tres curvas: la curva promedio y las dos envolventes, una trazada a través de los valores más pequeños de Q_{sca} en cada φ y la otra trazada a través de los valores más grandes.

Es conveniente mencionar que aunque este parámetro φ es un buen parámetro para la localización de los máximos y mínimos de Q_{sca} , no forma parte de la teoría general de dispersión por esferas sino que se introduce externamente.

Para el caso de esfera con recubrimiento se puede construir el correspondiente parámetro para el corrimiento de fase del rayo central al atravesar diametralmente a la partícula y se obtiene que

$$\begin{aligned} \rho &= 2Vq(m_1 - 1) + 2V(1-q)(m_2 - 1) \\ &= \rho_1 + \rho_2 \end{aligned} \tag{70}$$

El primer término (ρ_1) es la contribución del núcleo y el segundo (ρ_2) es la contribución de la cáscara. Los límites $q = 1$ y $q = 0$ corresponden a esfera homogénea hecha de material igual al del núcleo y de la cáscara respectivamente. En la figura 3-4b se muestran las curvas de Q_{sca} vs $\theta/2$ con m_1 correspondiente al poliestireno y m_2 al tetracloruro de carbono para $q = 1.0, 0, 0.8$ y 0.6 . La posición del primer máximo, que es el único que se ha graficado, es la misma para $q = 1, q = 0$ (esferas homogéneas) y $q = 0.8$. Sin embargo, para $q = 0.6$ que corresponde a cuando el núcleo tiene el 60% del tamaño de la partícula, la posición del máximo se recorre. En la figura 3-4a se muestra lo mismo que en la 3-4b, pero para m_2 correspondiente al benceno; también se observa que la posición del máximo para $q = 0.6$ se recorre.

Lo anterior parece indicar que para cuando la cáscara tiene un espesor relativamente grande, el corrimiento de fase deja de ser un buen parámetro para la localización de los extremales de Q_{sca} . Sin embargo, no abandonemos este parámetro y lo usaremos en los cálculos de la intensidad, como veremos más adelante.

Una de las técnicas usadas para determinar el tamaño de partículas de un sistema monodisperso de partículas esféricas es el llamado de turbidez aparente (12 p 335). Esta técnica consiste en la comparación del primer máximo en la curva teórica Q_{sca} vs α con el correspondiente máximo en la curva experimental de turbidez (o densidad óptica) vs longitud de onda. Los datos experimentales se obtienen con espectrofotómetro.

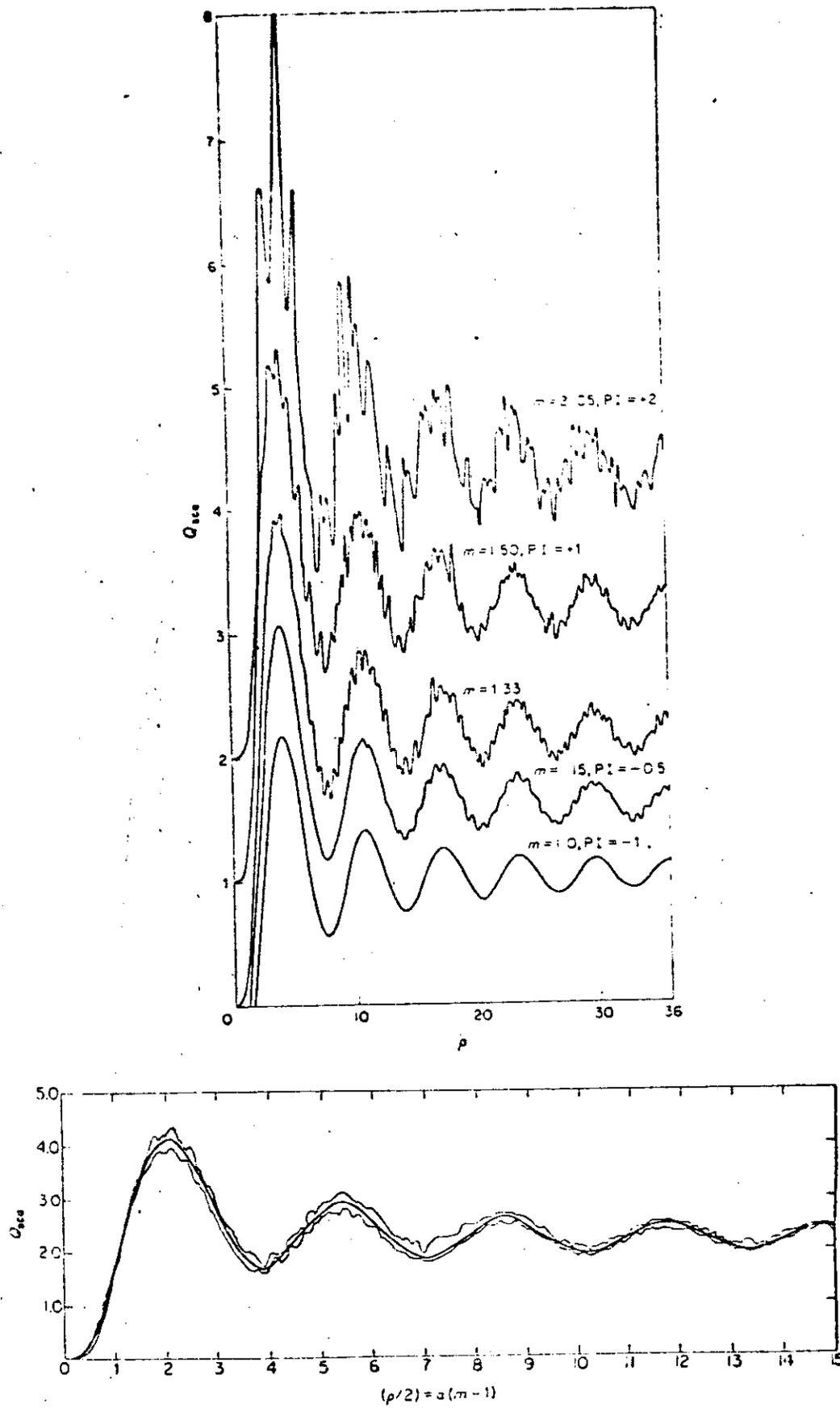


Figura 3-3. Q_{sca} vs ρ para diferentes índices de refracción de esfera homogénea.

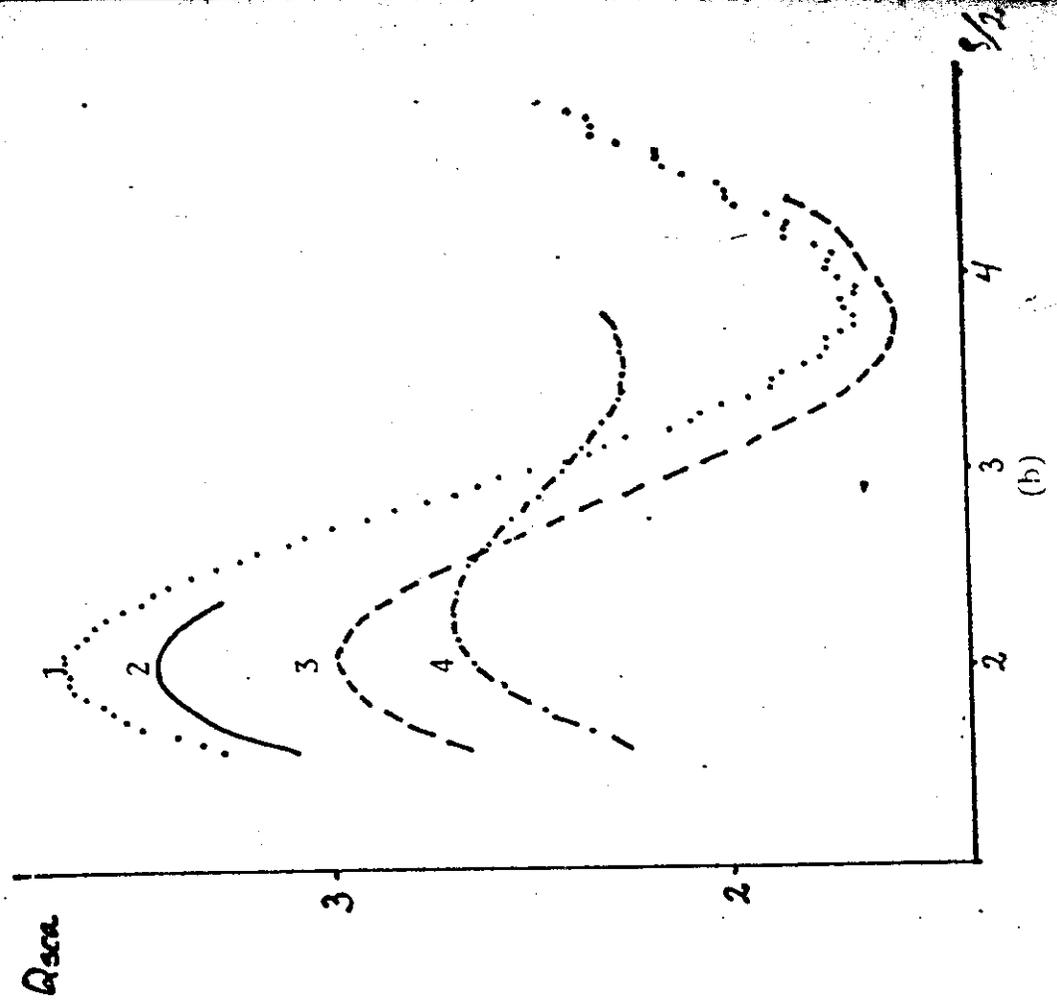
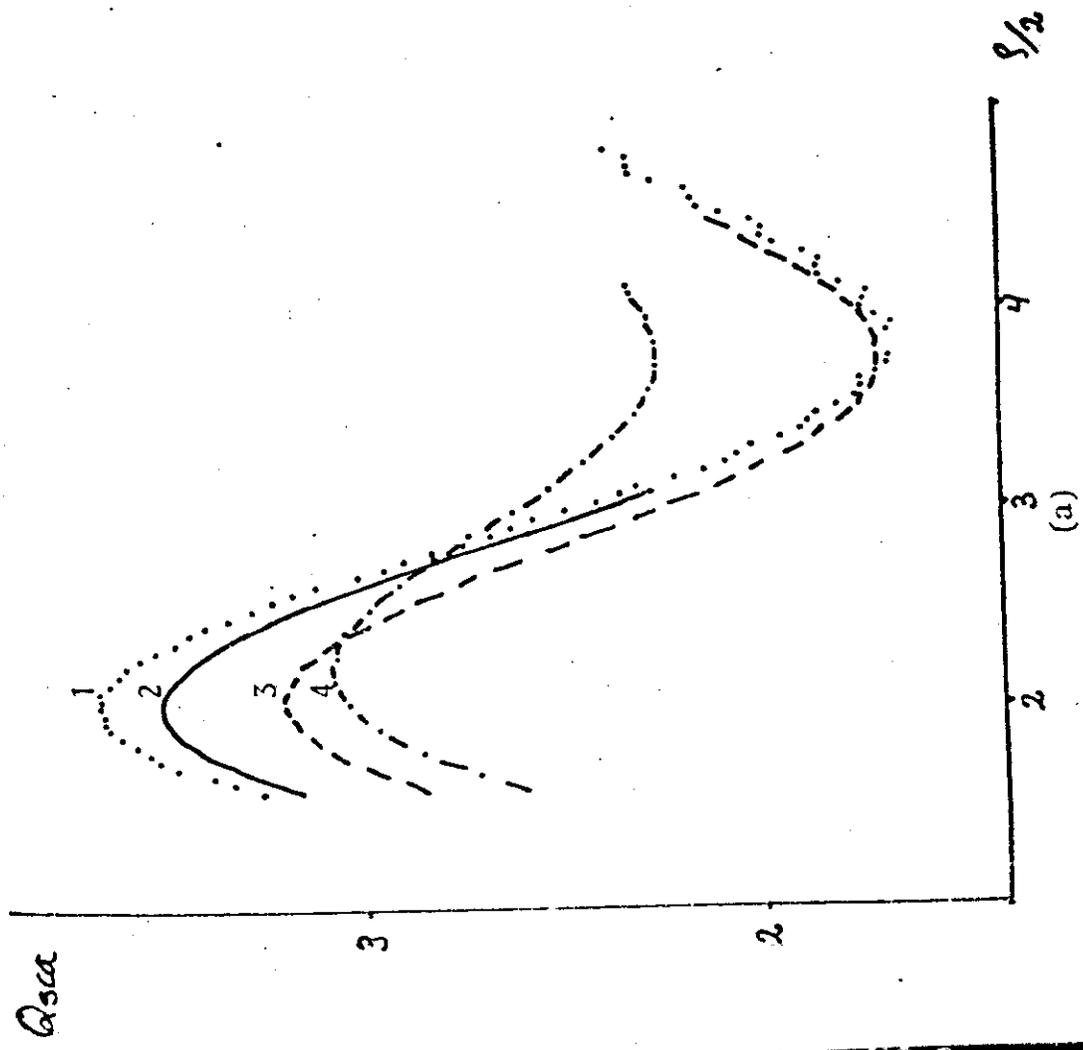


Figura 3-4 (a) Poliestireno con benceno. (b) Poliestireno con tetracloruro de carbono. Curvas 1 para poliestireno puro, 2 para solvente puro, 3 para $q = 0.8$, 4 para $q = 0.6$.

3-3. Función de Intensidad para Esfera Homogénea.

En las ecuaciones (41) y (42) están dadas las intensidades

$$I_{\varphi} = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} i_1 \sin^2 \varphi$$

$$I_{\theta} = \frac{\lambda^2}{4\pi^2 r^2} i_2 \cos^2 \varphi$$

donde λ es la longitud de onda en el medio, r es la distancia de la partícula al punto de observación, $i_1 = |S_1(\theta)|^2$, $i_2 = |S_2(\theta)|^2$ y las funciones de amplitud S_1 y S_2 están dadas por las expresiones (40). Usualmente se calculan teóricamente los valores de las funciones de intensidad i_1 e i_2 ya que éstas no dependen de las coordenadas r y φ del punto de observación. Con el programa computacional que hemos construido se calculan ambas funciones de intensidad. Debido a las características del dispersor disponible, nos conviene analizar los valores que la teoría predice para i_1 . En todo lo que sigue nos referiremos a ésta.

a. Variación con el ángulo y con el tamaño. En todas las gráficas de intensidad contra el ángulo que presentaremos se grafica el logaritmo en base 10 de i_1 y la posición angular θ se varía desde 0° hasta 180° de 1° en 1° .

La variación de la intensidad i_1 en función del ángulo θ para diferentes tamaños de partícula con el mismo índice de refracción se muestra en las figuras 3-5 a 3-8. En estas gráficas el índice de refracción corresponde al del poliestireno. Se observan varios aspectos característicos tales como: la intensidad es mayor en la dirección hacia adelante ($\theta < 90^\circ$), la oscilación con el ángulo de dispersión y la intensidad aumenta con el tamaño.

En la figura 3-5 se muestran las curvas para tres tamaños de partícula de poliestireno y se ve que prácticamente son paralelas y no presentan extremas. Sin embargo, en las figuras 3-6 a 3-8 se ve que las curvas presentan una serie de máximos y mínimos y que el número de éstos crece al crecer el tamaño

$$\alpha = \frac{2\pi a}{\lambda}$$

Consideremos primero la evolución de los extremales de i_1 al aumentar. La aparición de mayor número de extremales al aumentar el tamaño, hace que sus posiciones angulares se desplacen hacia ángulos menores para valores pequeños de α y después, al crecer α , en ambas direcciones de \ominus . En general, la posición de un valor extremo se recorre en una sola dirección, como veremos más adelante.

En la tabla 3-IV se muestra la posición angular de los extremales para valores de α desde 5 hasta 6.4 de 0.1 en 0.1 que en notación compacta podemos escribir como 5.0(0.1)6.4. Las posiciones de los mínimos y máximos se representan por los subíndices m y M respectivamente y el número entre paréntesis representa al número de extremal correspondiente. Las gráficas de intensidad correspondientes a tres de estos valores de α se muestran en las figuras 3-6 y 3-7.

En la figura 3-8 el patrón de dispersión para $\alpha = 25$ presenta un mayor número de extremales espaciados más o menos uniformemente. Las envolventes trazadas a través de los máximos y mínimos son curvas suaves en las direcciones hacia adelante, pero en la dirección hacia atrás las curvas son menos regulares. Algunos de los mínimos en la vecindad de 80° son particularmente profundos de tal manera que la intensidad sufre cambios hasta en casi tres órdenes de magnitud en un intervalo angular de sólo 4° .

En todas estas gráficas se observa que la posición de los mínimos está mejor definida que la de los máximos.

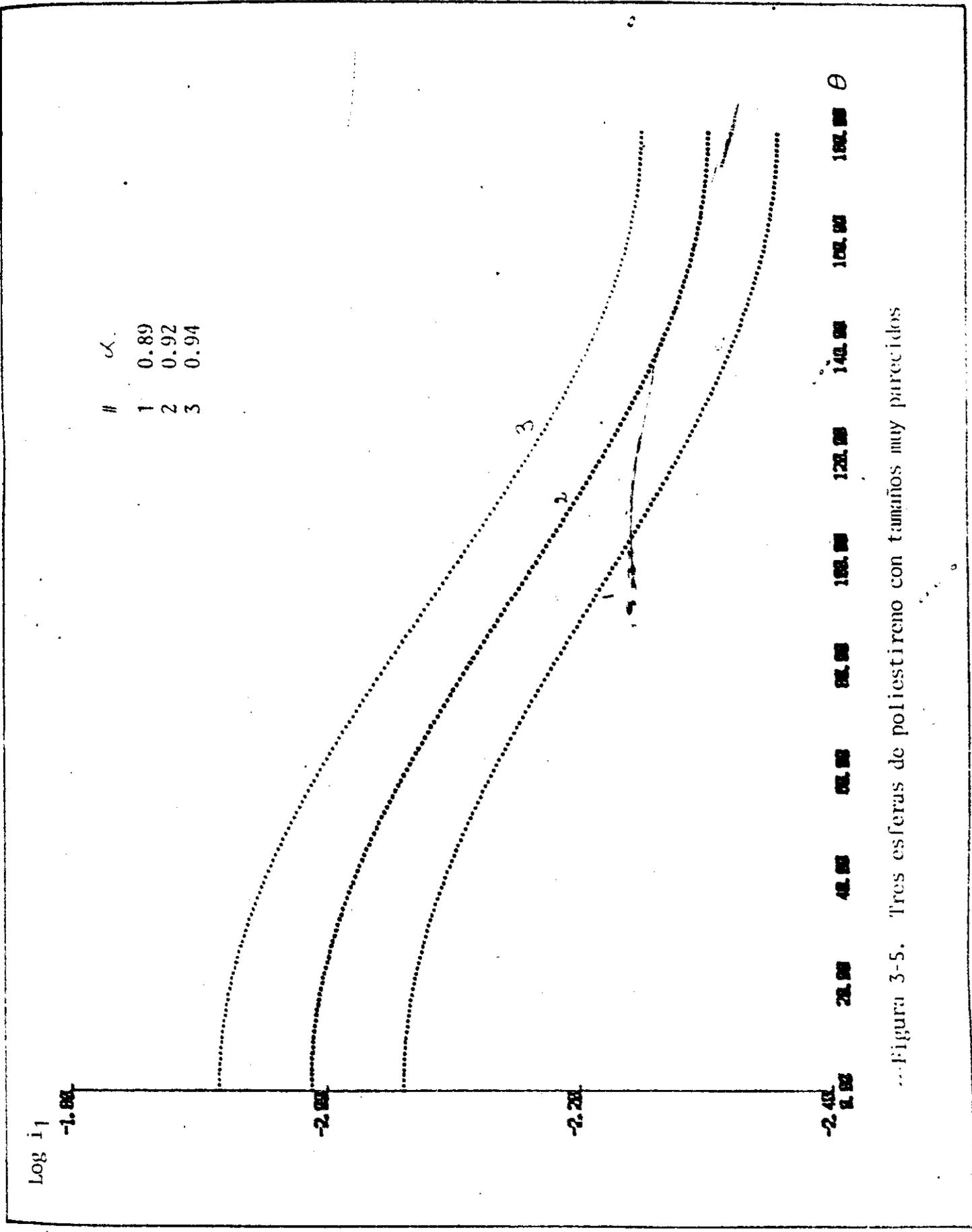


Figura 3-5. Tres esferas de poliestireno con tamaños muy parecidos

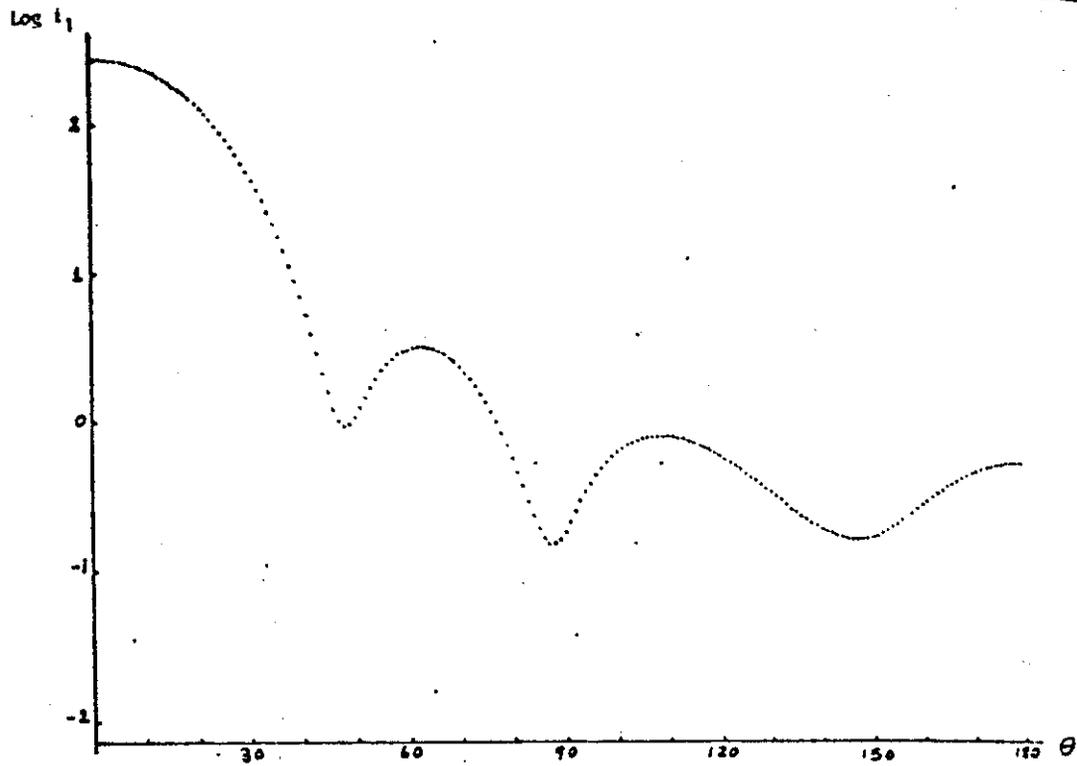


Figura 3-6. $m = 1.19207, \alpha = 5.$

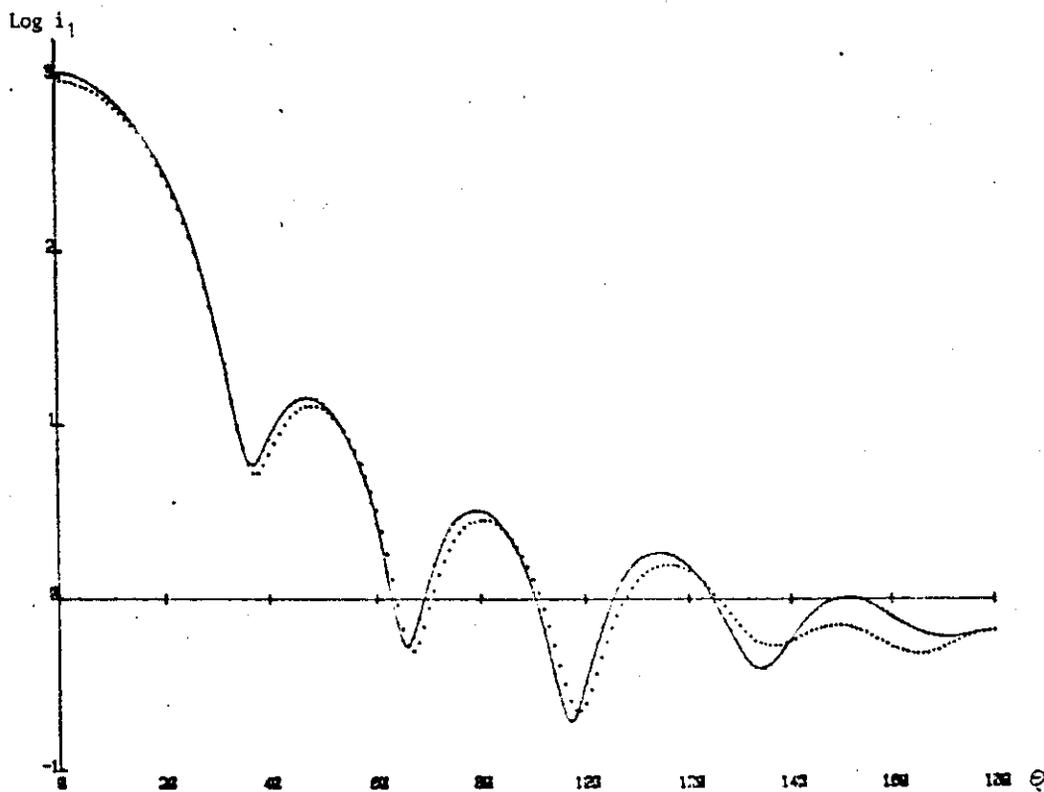


Figura 3-7. La curva punteada corresponde a $\alpha = 6.3$ y la continua a $\alpha = 6.1$, ambas para $m = 1.19207$.

Tabla 3-IV. Posición angular de extremales para $\alpha = 5.0$ a 6.4

	5.0	5.1	5.2	5.3	5.4	5.5	5.6	5.7	5.8	5.9	6.0	6.1	6.2	6.3	6.4
$\Theta_m(1)$	48	47	46	45	44	43	43	42	41	40	39	39	38	37	37
$\Theta_M(1)$	62	61	59	58	57	56	55	54	53	52	51	50	49	48	47
$\Theta_m(2)$	87	85	83	81	79	78	77	75	74	72	71	69	68	67	66
$\Theta_M(2)$	108	104	101	99	97	96	94	92	90	88	85	83	82	80	79
$\Theta_m(3)$	147	135	127	123	120	118	117	115	113	110	106	103	100	99	97
$\Theta_M(3)$				147	145	143	141	140	138	136	134	124	118	116	114
$\Theta_{in}(4)$				165	174	*	*	174	170	167	164	163	163	136	134
$\Theta_M(4)$														149	151
$\Theta_{in}(5)$														165	170

* Posiblemente el mínimo esté en 180° .

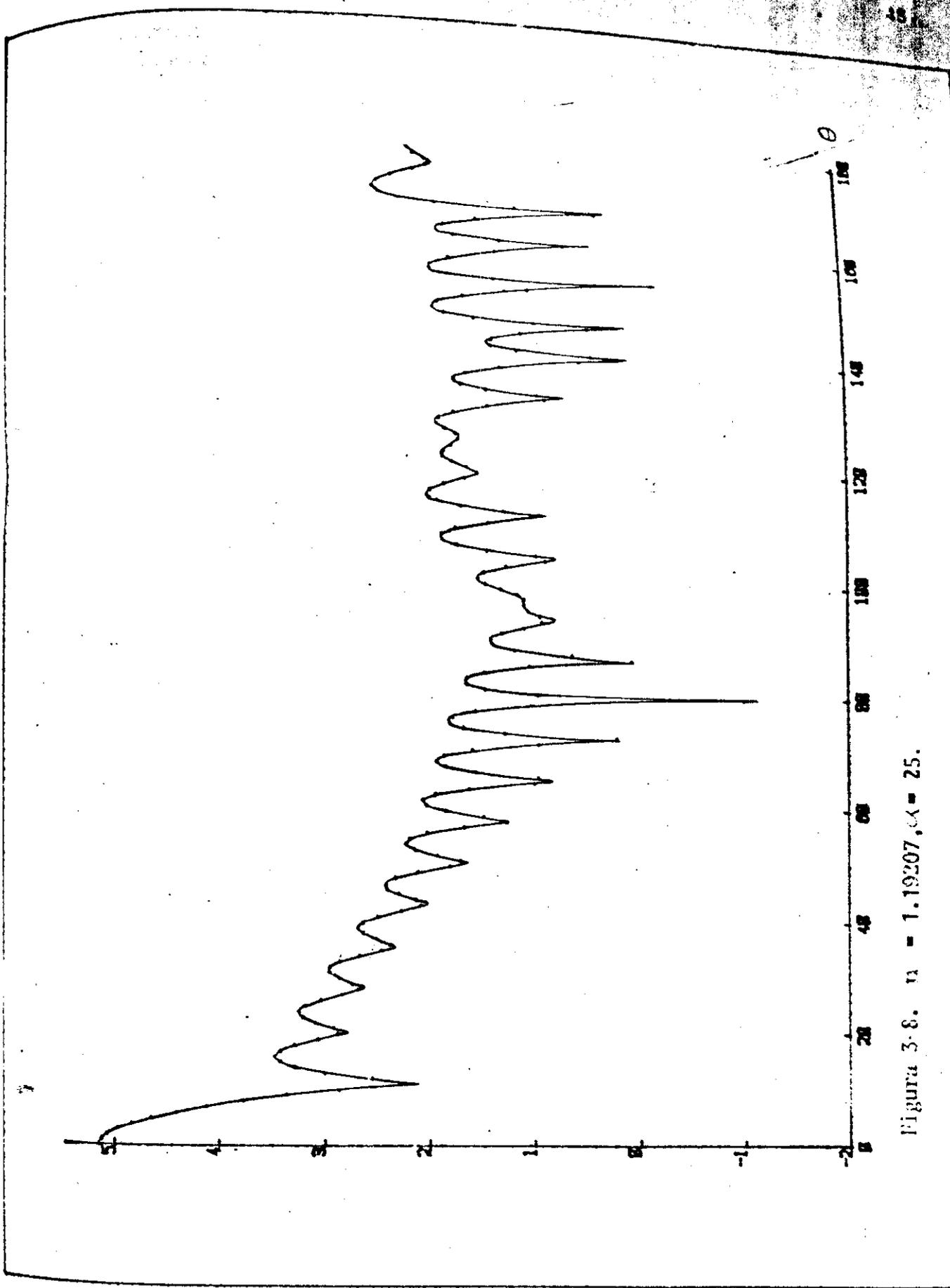


Figura 3-8. $n = 1.19207, \alpha = 25$.

b. Variación con el índice de refracción. En la figura 3-9 se muestran las curvas para tres índices de refracción y un mismo tamaño. En ellas se observa que la intensidad es mayor cuando el índice de refracción es mayor y que la posición de los máximos y mínimos depende del valor del índice de refracción. En la figura 3-10 se muestran los patrones para los índices de refracción de la figura 3-9, pero con tamaños diferentes de tal modo que el corrimiento de fase $\delta = 2\pi(m-1)$ se mantenga constante e igual a 2.42. Los patrones son muy distintos entre sí lo cual significa que para el caso de esfera homogénea el corrimiento de fase no es un buen parámetro para la localización de los extremos.

c. Posición angular de los extremos. Los patrones de dispersión correspondientes a cada valor particular del m y α son tan diferentes que proporcionan una identificación prácticamente única para una esfera particular. Esto ofrece al experimental una herramienta poderosa para la determinación del tamaño de partícula mediante dispersión de luz. En realidad hay más información en el diagrama de dispersión de la que usualmente se necesita y a menudo sólo es suficiente localizar las posiciones angulares en que ocurren los máximos y mínimos para caracterizar un tamaño de partícula. En la figura 3-11 las posiciones angulares de los valores extremos de i_1 obtenidos para $m = 1.19207$ que corresponde a poliestireno, están graficados hasta $\alpha = 26$. Estas posiciones se originan cerca de la dirección hacia atrás ($\theta > 90^\circ$) y luego emigran, al aumentar el valor de α , algunas hacia adelante y otras hacia atrás. Las curvas continuas representan a la posición de los máximos y las discontinuas a los mínimos. Cualquier valor particular de α está caracterizado por el número de extremos y su localización angular. El número de máximos o de mínimos es aproximadamente igual a $\alpha - 2$. Este intervalo para α de 2 a 26 corresponde a partículas de poliestireno con diámetros de 0.5 a 3.9 micrones si la longitud de onda que se use es de 6328 Å en el vacío.

También se observa que el primer mínimo y el primer máximo se colapsan para $\alpha = 21.7$. A partir de los últimos valores de α graficados, los extremos empiezan a estar tan cercanos que tal vez se pueda hacer un análisis, como el aquí expuesto, a través de las envolventes de los máximos y de los mínimos para valores mayores de α .

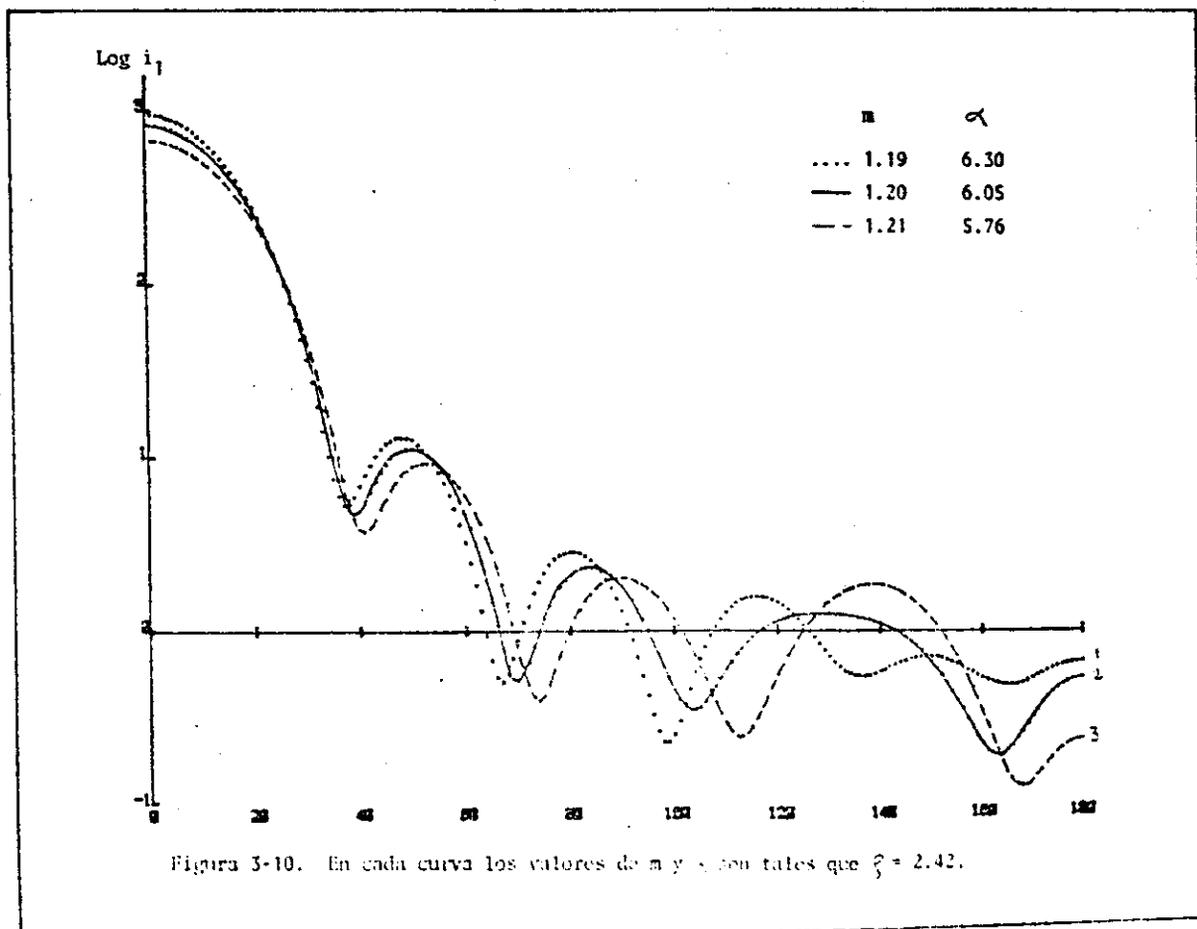
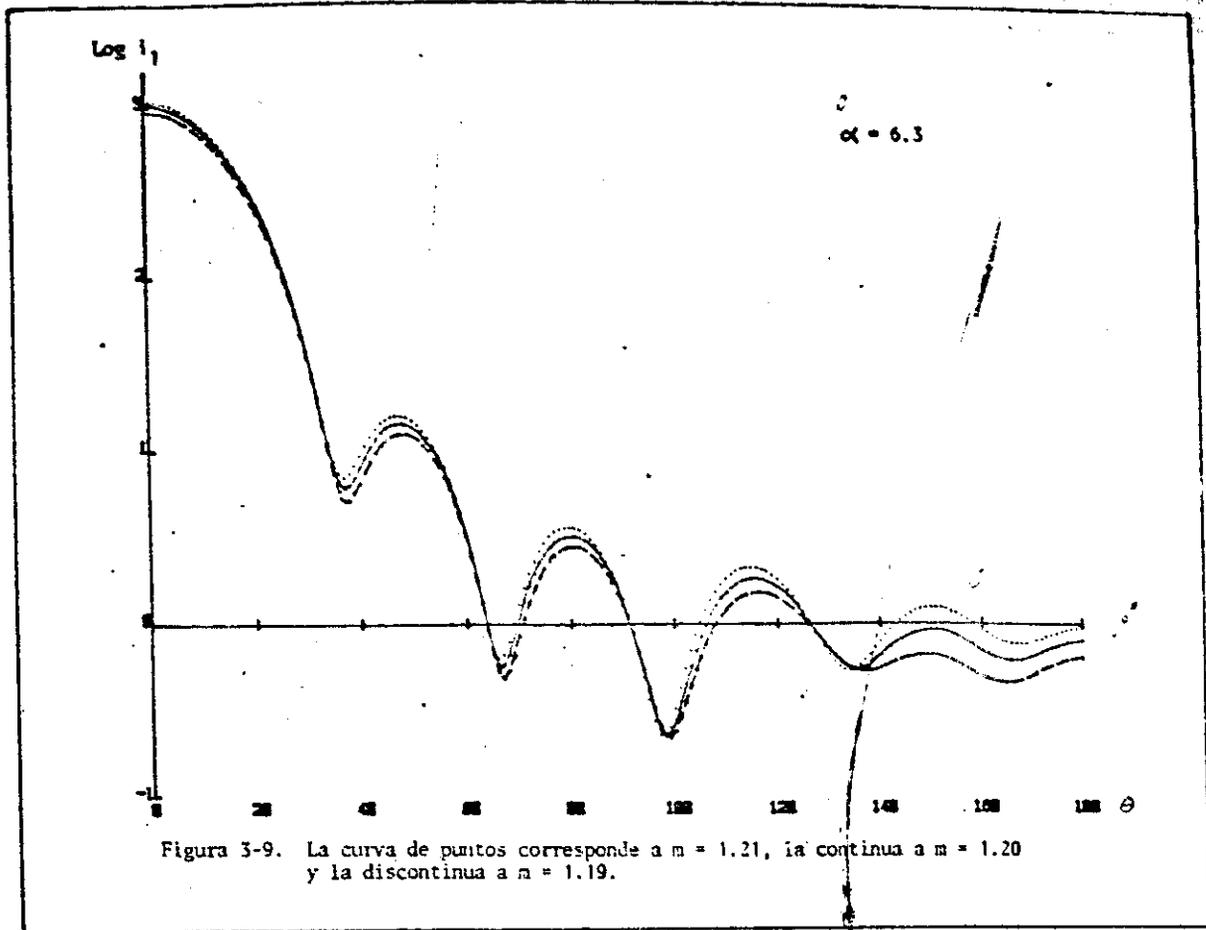
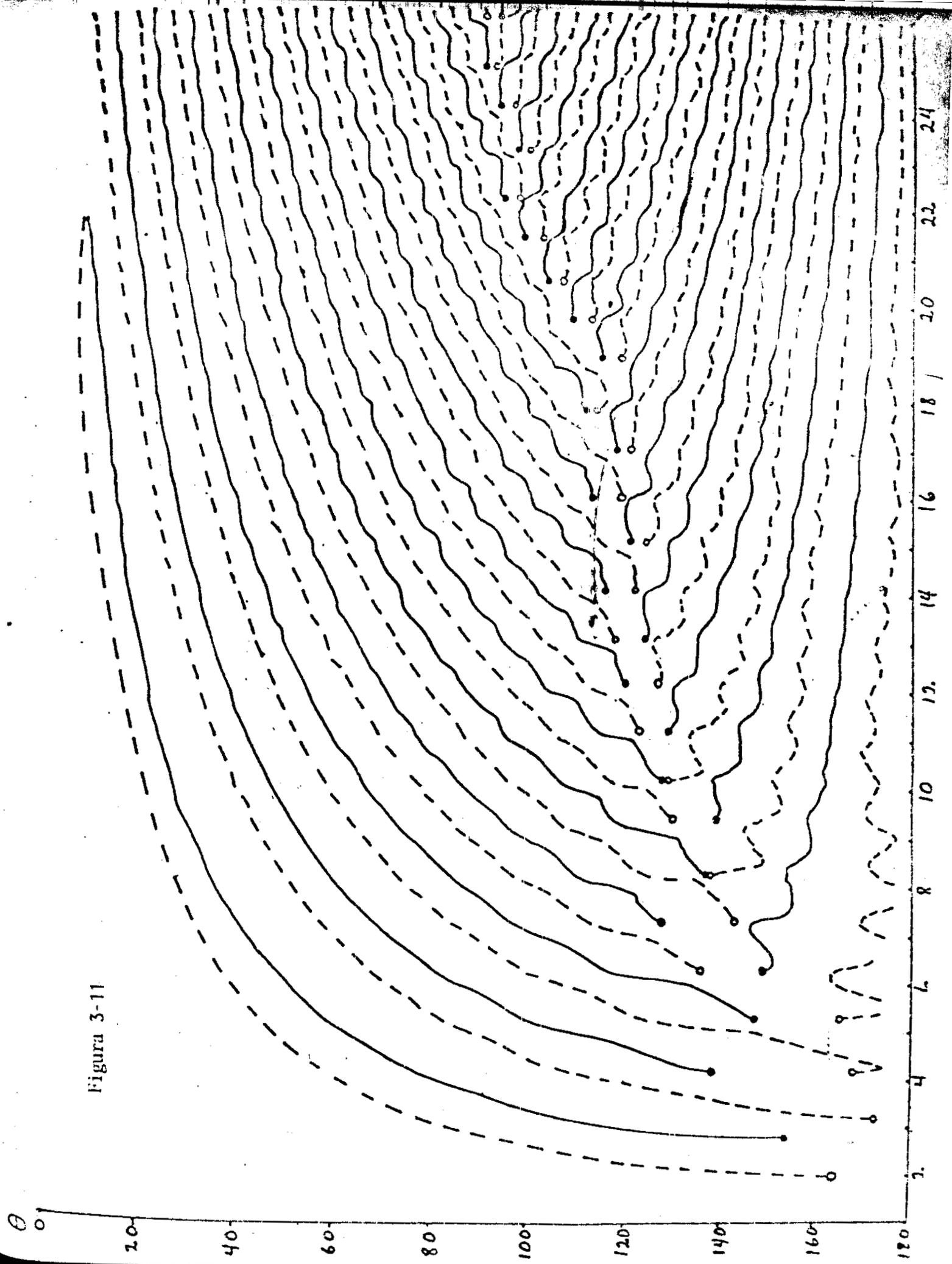


Figura 3-11



3-4. Funciones de Intensidad para Núcleo-Cáscara.

Analicemos los resultados teóricos para la intensidad en el caso de esfera recubierta. A diferencia del caso de esfera homogénea, en el que solamente variábamos el tamaño, ahora tenemos la posibilidad de variar el tamaño de la partícula (γ), el tamaño relativo del núcleo (q) y el índice de refracción de la cáscara (m_2). Esto hace que la variedad de resultados numéricos sea enorme. El análisis siguiente lo dividiremos en dos grupos según el tamaño inicial de la partícula.

3-4.1 Tamaño Inicial Mayor que 2.

Como ya vimos en la sección 3-3, las esferas de látex de poliestireno con tamaño mayor que 2 presentarán máximos y mínimos en su patrón de dispersión. Al agregar solvente al látex a través del medio acuoso, el tamaño de la partícula crecerá y por tanto se seguirán presentando extremos.

a. Variación con q y m_2 . En las figuras 3-12 y 3-13 se presentan las curvas de intensidad correspondientes a partículas con un mismo tamaño, pero con distintos tamaños del núcleo $q = 0.9$ y $q = 0.8$ y 4 valores para el índice de refracción el cual se ha expresado en términos de la concentración medida en gramos de polímero en 100 mililitros de solución según la tabla 3-III. La concentración $c = 0$ significa que la cáscara está hecha de solvente puro y aunque esto pueda no tener mucho sentido físico la hemos incluido para usarla como referencia. Por otra parte, como se ve en estas figuras las curvas 1 y 2 correspondientes a $c = 0$ y $c = 0.5$ prácticamente coinciden para este tamaño de partícula. Los patrones se distinguen por la posición de sus extremos.

b. Variación con γ y q . En las figuras 3-14 y 3-15 se presentan patrones de dispersión para partículas cuyas cáscaras tienen el mismo índice de refracción y se ha escogido que sea el correspondiente al solvente puro. Las curvas 1 corresponden a látex seco y las número 2 y 3 a $q = 0.9$ y $q = 0.8$ respectivamente. Los patrones de dispersión son diferentes entre sí y la diferencia respecto al de esfera homogénea se hace mayor al aumentar el espesor del recubrimiento. Estas curvas sugieren que pueden construirse gráficas similares a la figura 3-11 para cada valor de q . En las figuras 3-16 y 3-17 se le ha superpuesto a la figura 3-11 la posición de los máximos y mínimos correspondientes a partículas con el mismo tamaño ($\gamma = 5(5) 25$), pero con $q = 0.9$ y $q = 0.8$ y con valor de m_2 igual al del solvente. Es notorio que el número de extremos disminuye al aumentar el espesor de la cáscara.

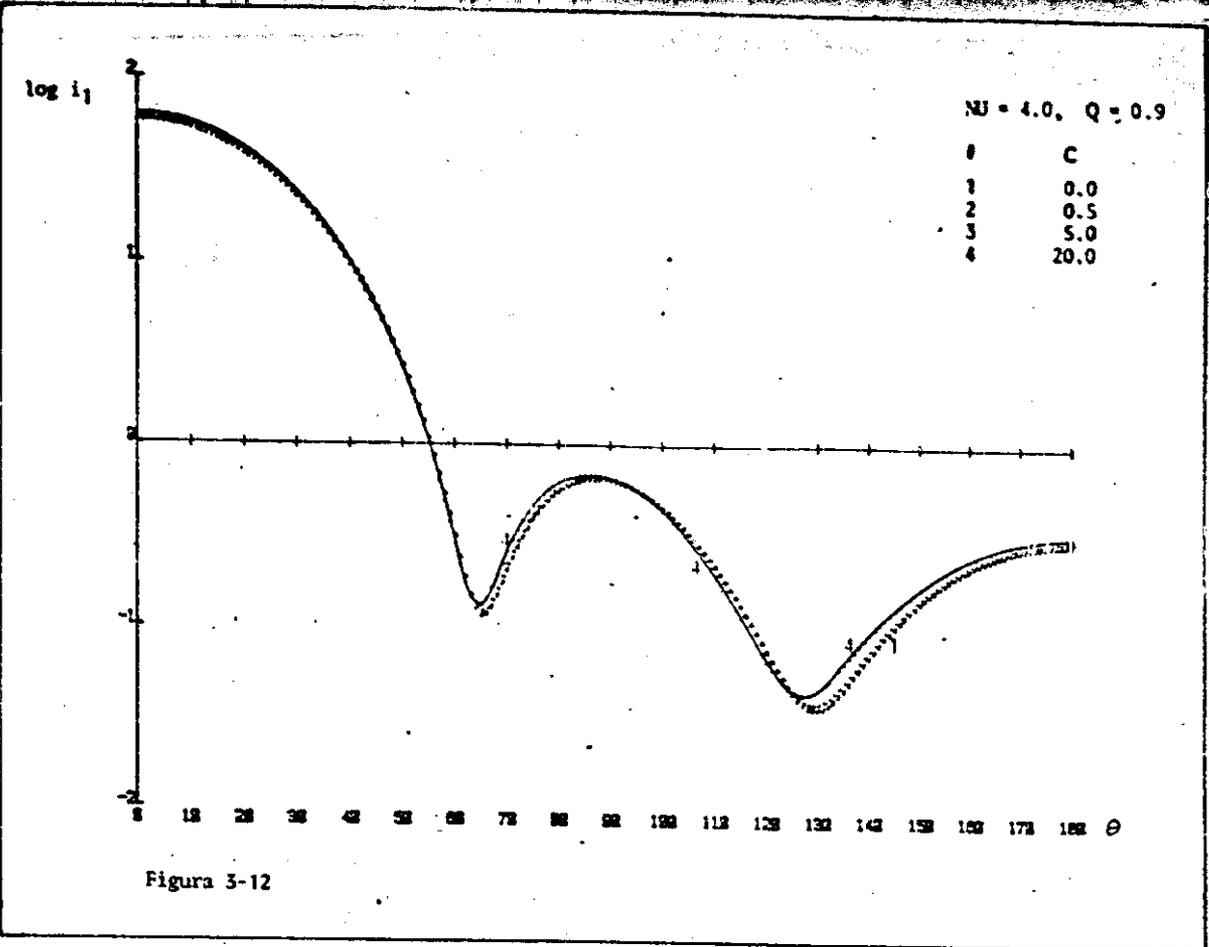


Figura 3-12

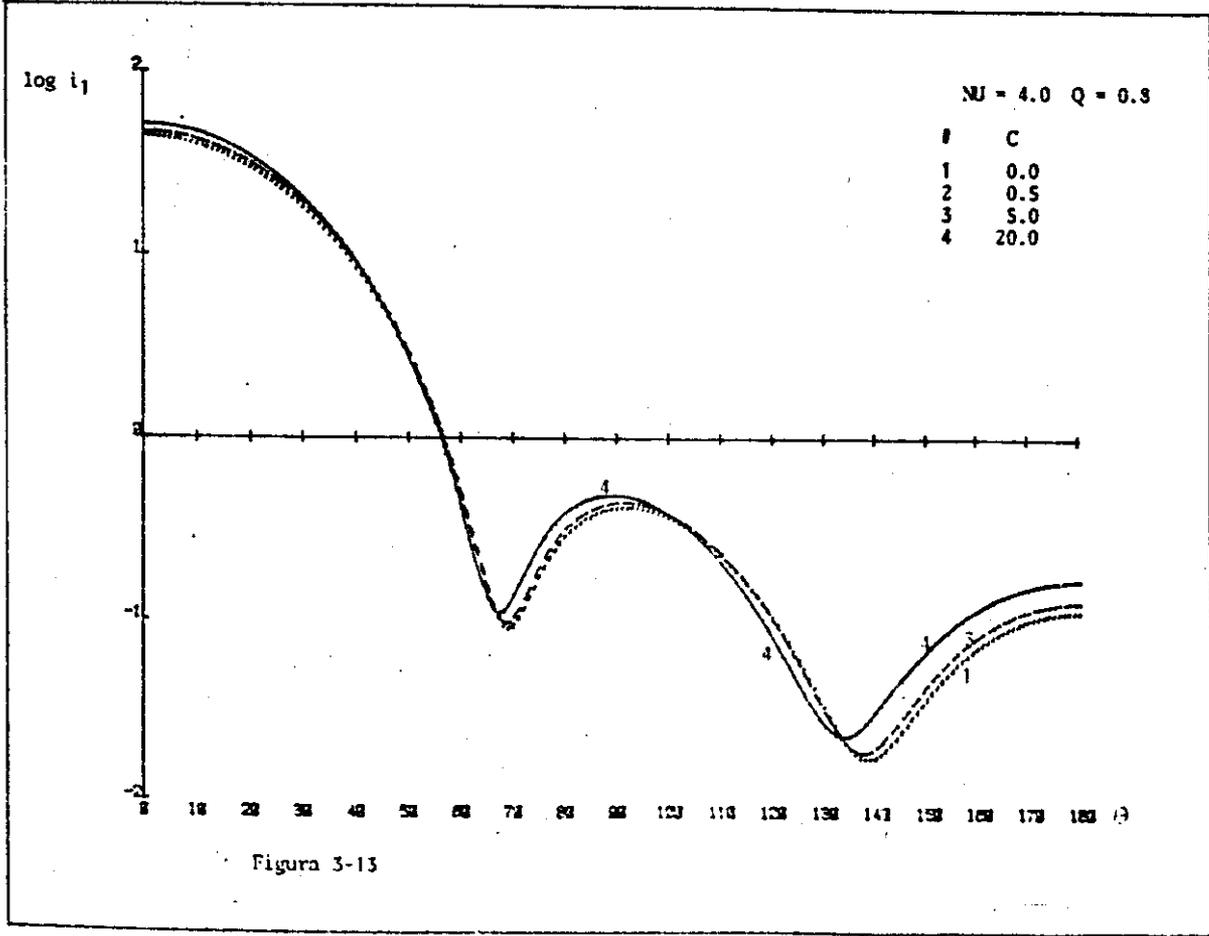


Figura 3-13

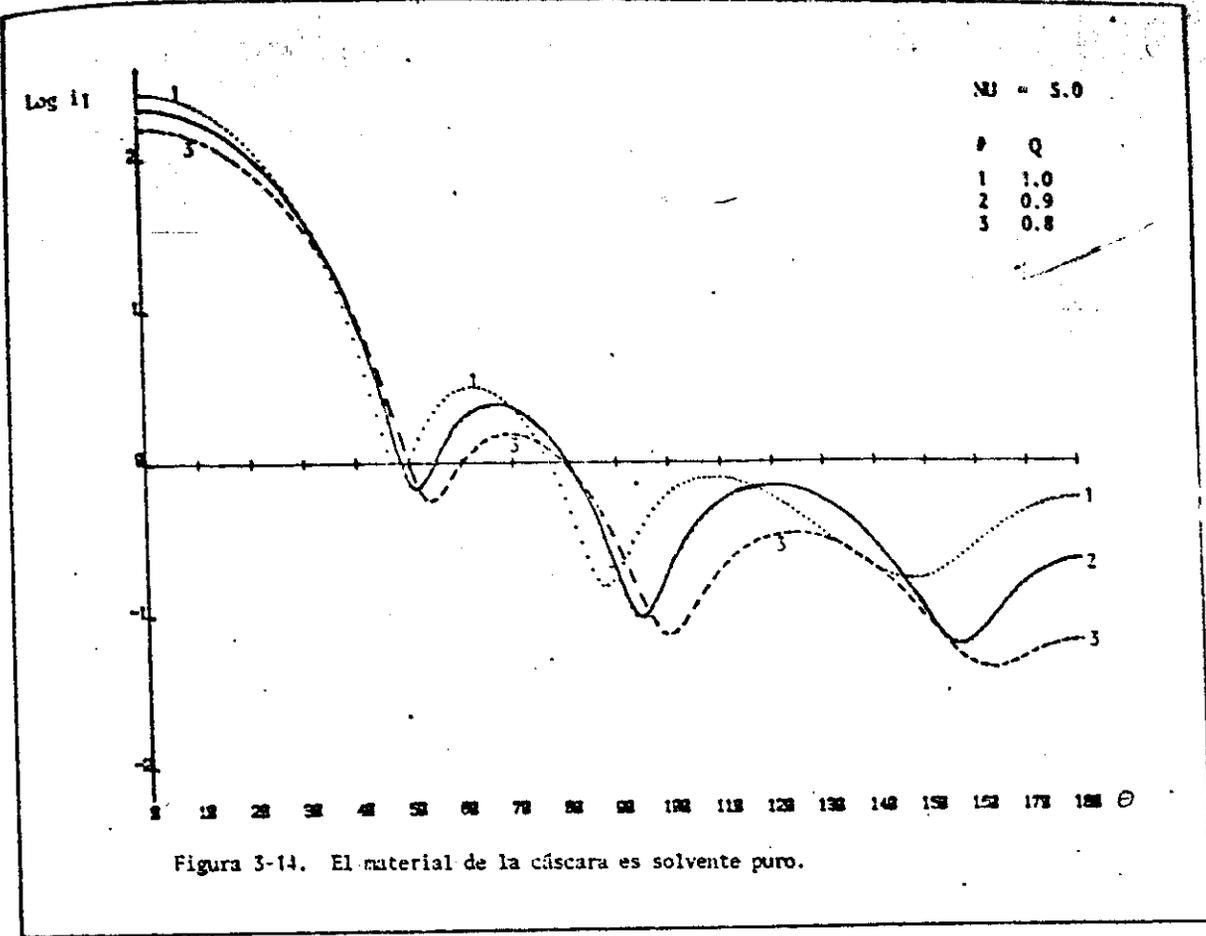


Figura 3-14. El material de la cáscara es solvente puro.

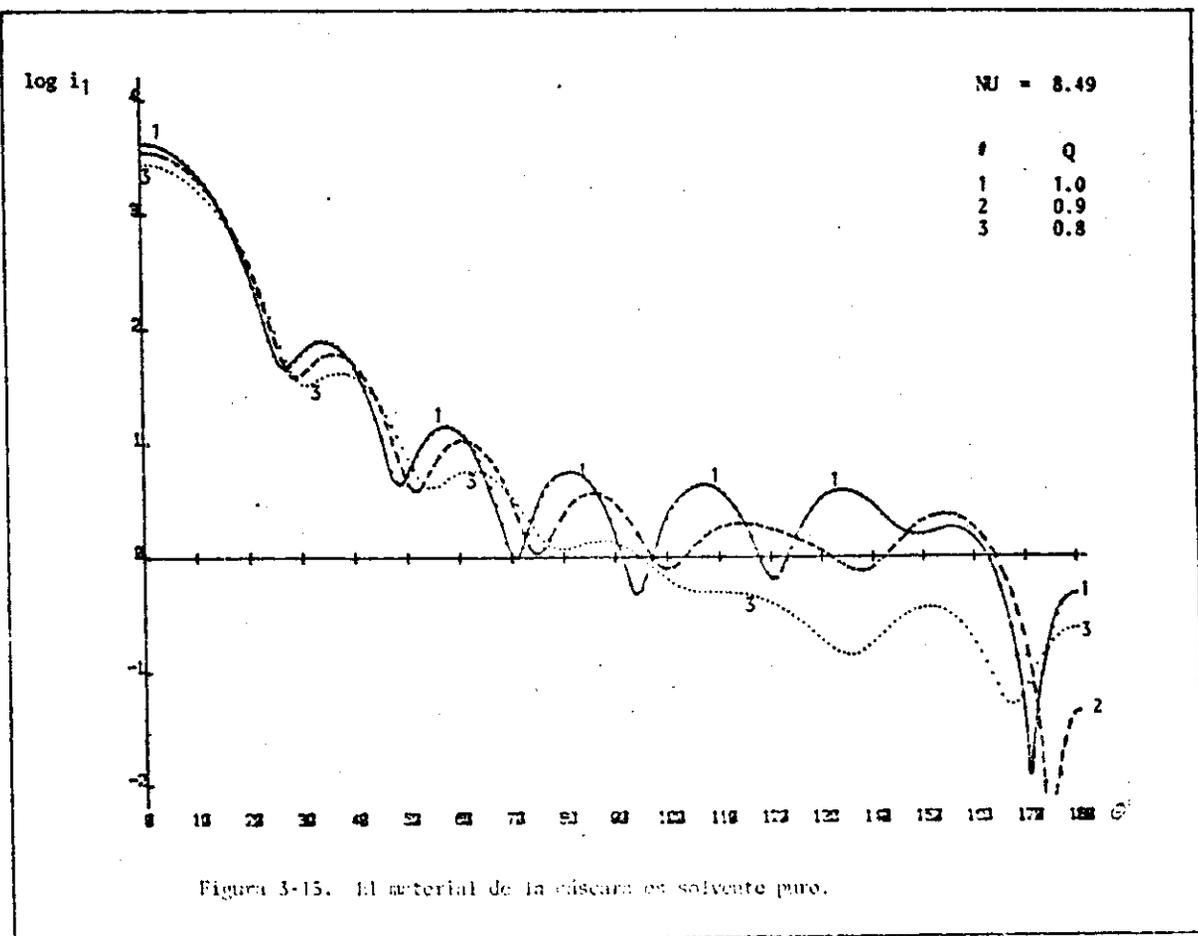


Figura 3-15. El material de la cáscara es solvente puro.

Figura 3-16

$q = 0.9$, $c = 0$

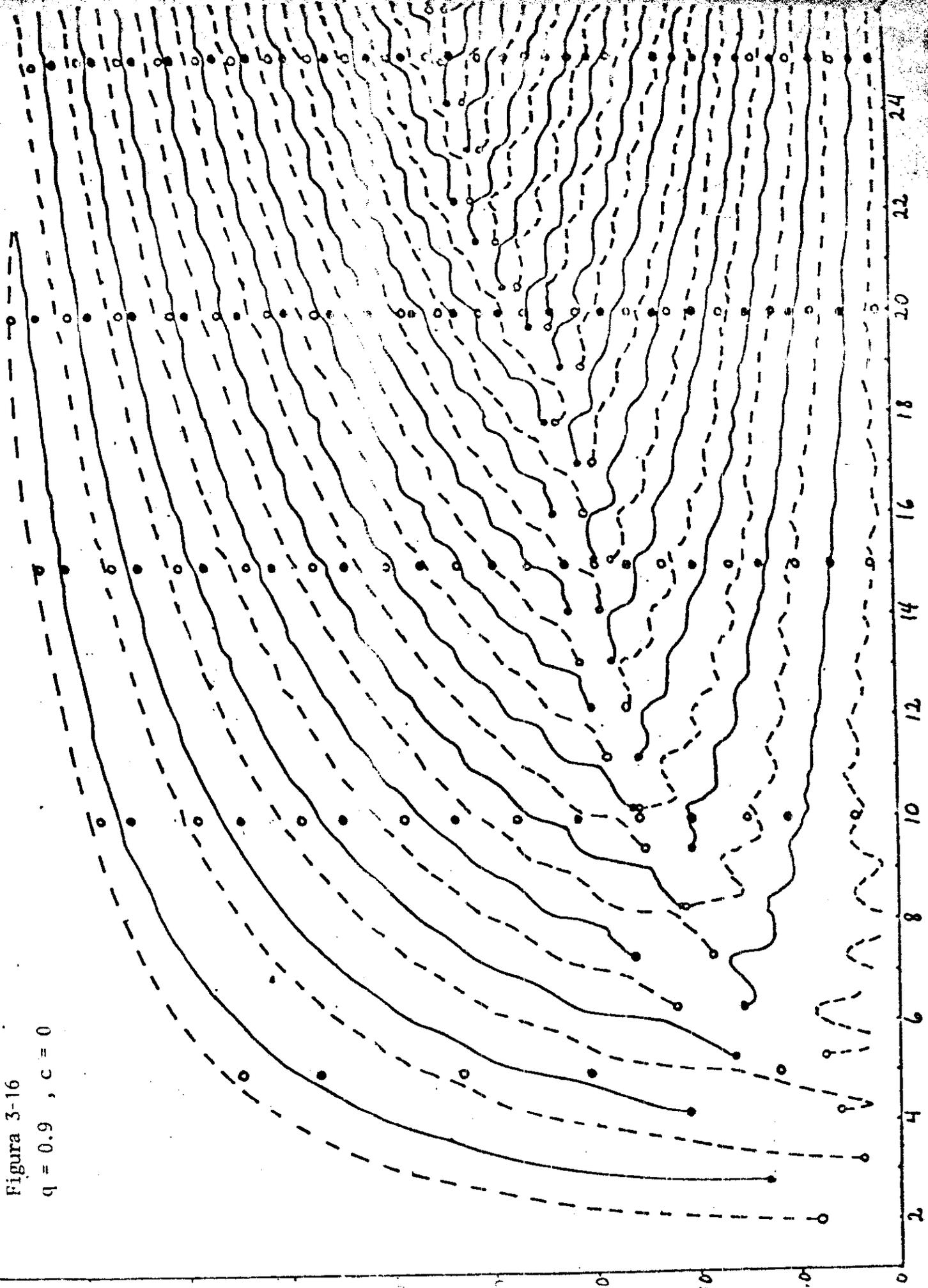
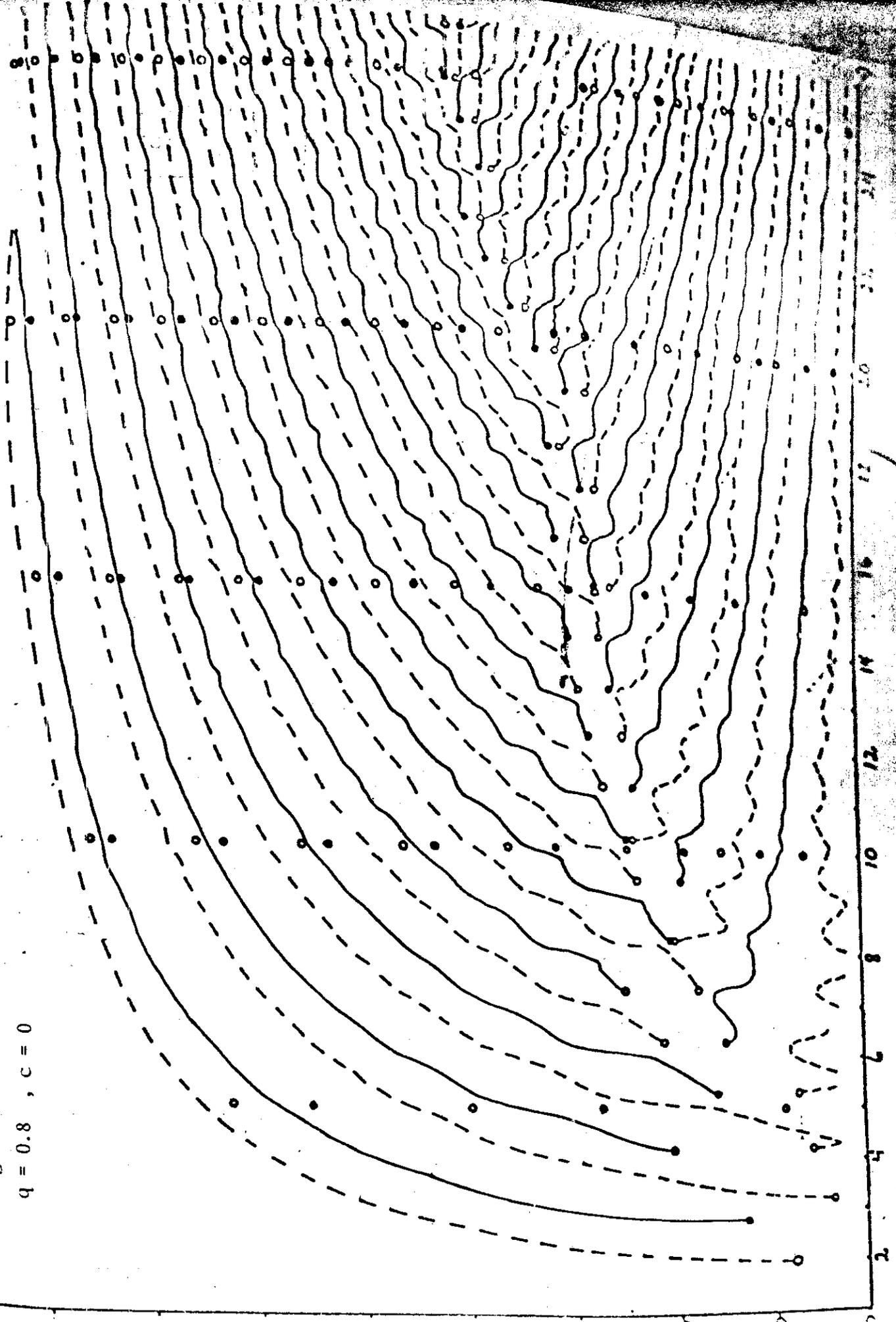


Figura 3-17

$q = 0.8$, $c = 0$



Hasta aquí hemos visto que dependiendo de los valores de los parámetros ν , q y m_2 los patrones de dispersión son diferentes. Se hacen aún más diferentes cuando estos valores son mayores. A manera de ejemplo consideremos los valores de la función de intensidad i_1 para partículas con igual tamaño y espesor de cáscara pero con índices de refracción distintos. En la tabla 3-V se indican los valores de i_1 en $\theta = 150^\circ$. En la primera parte de la tabla las partículas tienen núcleo de poliestireno y recubrimiento de tetracloruro de carbono; en este caso los valores son muy parecidos y sólo podemos decir que para $\nu = 12.0$ y 12.1 la intensidad es mayor para $q = 1$, para $\nu = 12.2$ es $q = 0.99$, para $\nu = 12.3$ es $q = 0.98$ y para $\nu = 12.4$ es $q = 0.97$. Sin embargo, en la segunda parte de la tabla donde los índices de refracción son muy distintos, los valores son bastante diferentes y se observan cambios abruptos para $q = 1.00$ y $q = 0.99$. El valor de i_1 para esfera homogénea ($q = 1.00$) decrece y luego crece en más de un orden de magnitud al variar ν de 12.1 a 12.3 . Para $\nu = 12.2$ un recubrimiento de 1% ($q = 0.99$) aumentará la intensidad en un factor de 12 mientras que para $\nu = 12.3$ la disminuirá en un factor de 68. Aunque este ejemplo ilustra una situación extrema en los índices de refracción, hace ver la complejidad que presentan las esferas con recubrimiento. Los valores de la primera parte de la tabla se calcularon usando 24 términos en la serie infinita, en cambio para la segunda parte fue necesario usar 40 términos.

c. Variación de ν , q y m_2 usando corrimiento de fase. Debido a que no podemos variar arbitrariamente los parámetros ν , q y m_2 , proponemos usar el corrimiento de fase para variarlos en una forma controlada. Ya hemos visto que ϕ es un buen parámetro para el factor de eficiencia de dispersión Q_{sca} para esfera homogénea. Ahora la usaremos en la forma siguiente: el valor de ϕ para el látex seco es $2 \nu_0 (m_1 - 1)$ y vamos a suponer que se mantiene constante cuando la partícula se hincha y se forma la cáscara, de tal manera que de los 3 parámetros sólo necesitamos fijar dos de ellos y el tercero se fija automáticamente a través de ϕ . Es conveniente mencionar que el valor de ϕ no interviene en el cálculo de las intensidades, sólo lo usaremos para calcular el tamaño de la partícula después de haber fijado q y m_2 .

Reescribimos la ecuación (70) como

$$2 \nu_0 (m_1 - 1) = 2 \nu \eta (m_1 - 1) + 2 \nu (1 - \eta) (m_2 - 1) \quad (71)$$

donde ν_0 es el tamaño de la partícula homogénea que antes llamamos α . En las figuras 3-18 a 3-23 se muestran curvas de intensidad para varios valores de η , en todas ellas el índice de refracción relativo de la cáscara es el mismo y corresponde al del solvente. Todas las curvas con el número 1 corresponden a la esfera homogénea. Los valores de η se han escogido para obtener diferentes números de extremales. Para los valores mostrados se observa que en la dirección hacia adelante la posición de los mínimos se mantiene constante para los primeros espesores de cáscara.

Por ejemplo, al comparar las figuras 3-22 y 3-15, donde el tamaño inicial y m_2 son los mismos, se ve que con el uso del valor de η se logra que la posición de los primeros mínimos coincida.

En la figura 3-24 se encuentran las curvas para $\eta = 2.42$, la curva 1 corresponde a esfera homogénea, las 2, 3 y 4 a partículas con tamaño de cáscara igual a 20% y diferentes índices de refracción. Se observa que los primeros mínimos tienen las mismas posiciones angulares. En particular nos fijaremos en el segundo mínimo y calcularemos los intervalos de valores de q y ν para $c \leq 20$ con la constricción de que el segundo mínimo permanezca en $\theta = 67^\circ$. Los resultados se muestran en la tabla siguiente

Tabla 3-VI. Intervalos en que el segundo mínimo de la intensidad permanece fijo en $\theta = 67^\circ$ usando $\eta = 2.42$.

C	q	ν
0	$0.74 \leq q \leq 1.00$	$7.25 \geq \nu \geq 6.30$
5	$0.76 \leq q \leq 1.00$	$7.11 \geq \nu \geq 6.30$
20	$0.80 \leq q \leq 1.00$	$6.84 \geq \nu \geq 6.30$

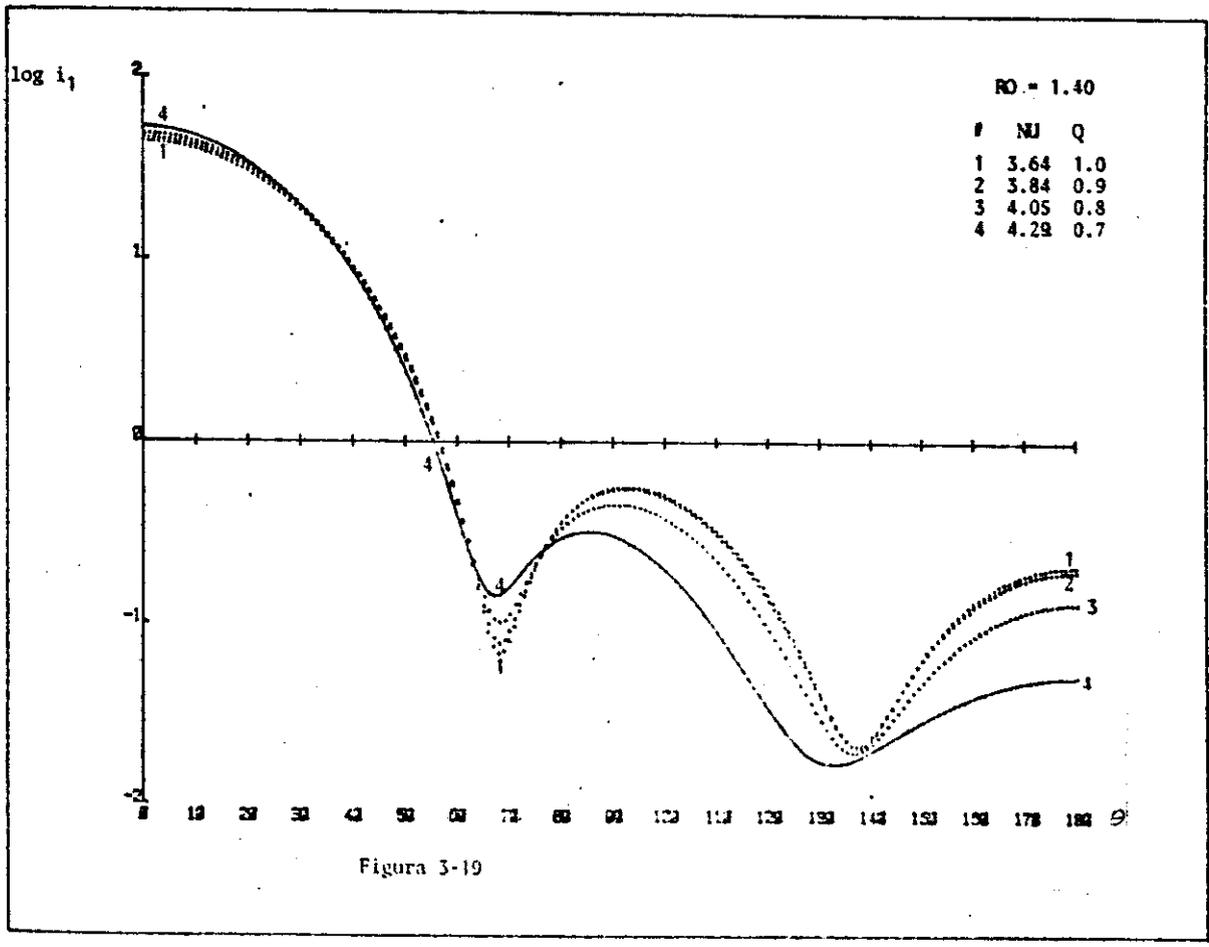
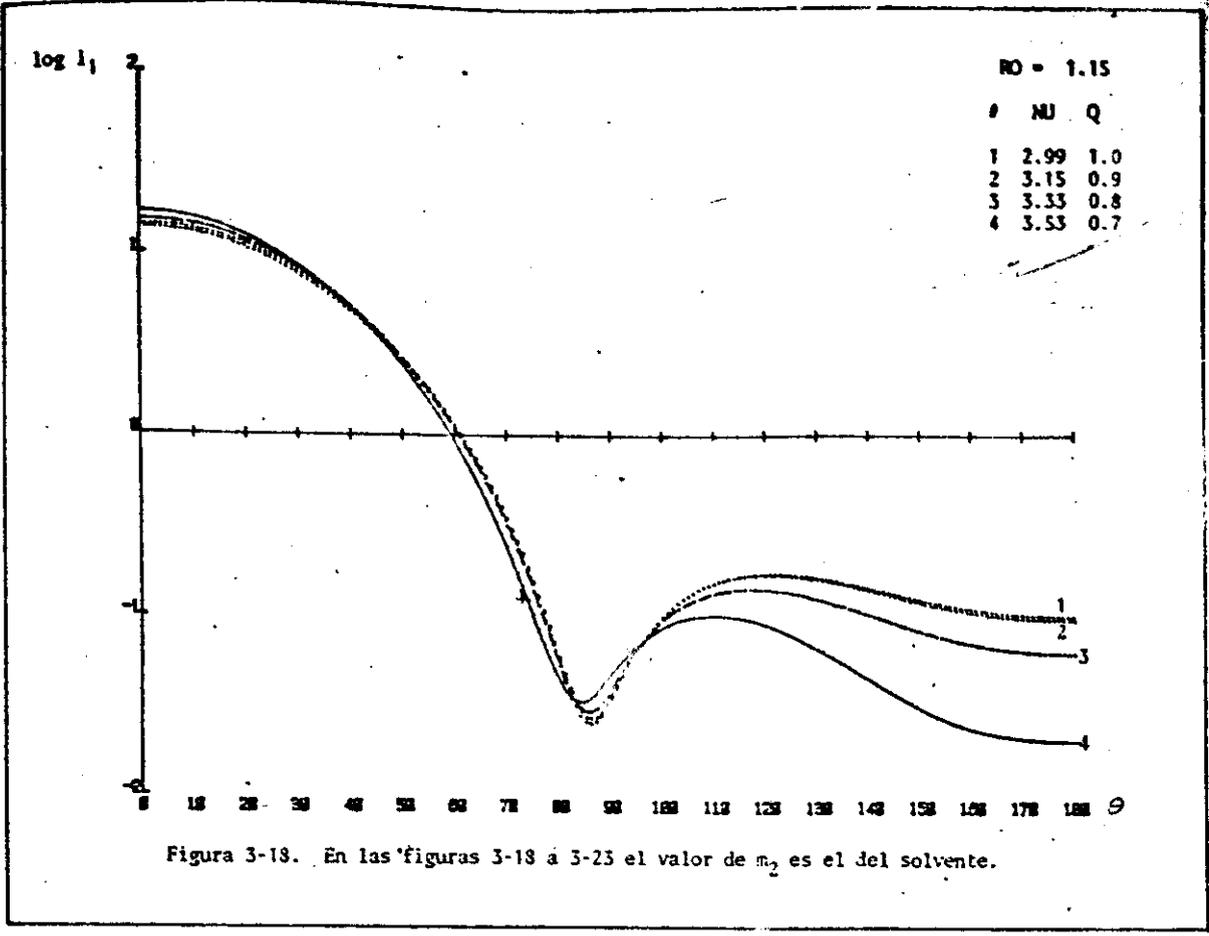
Tabla 3-V

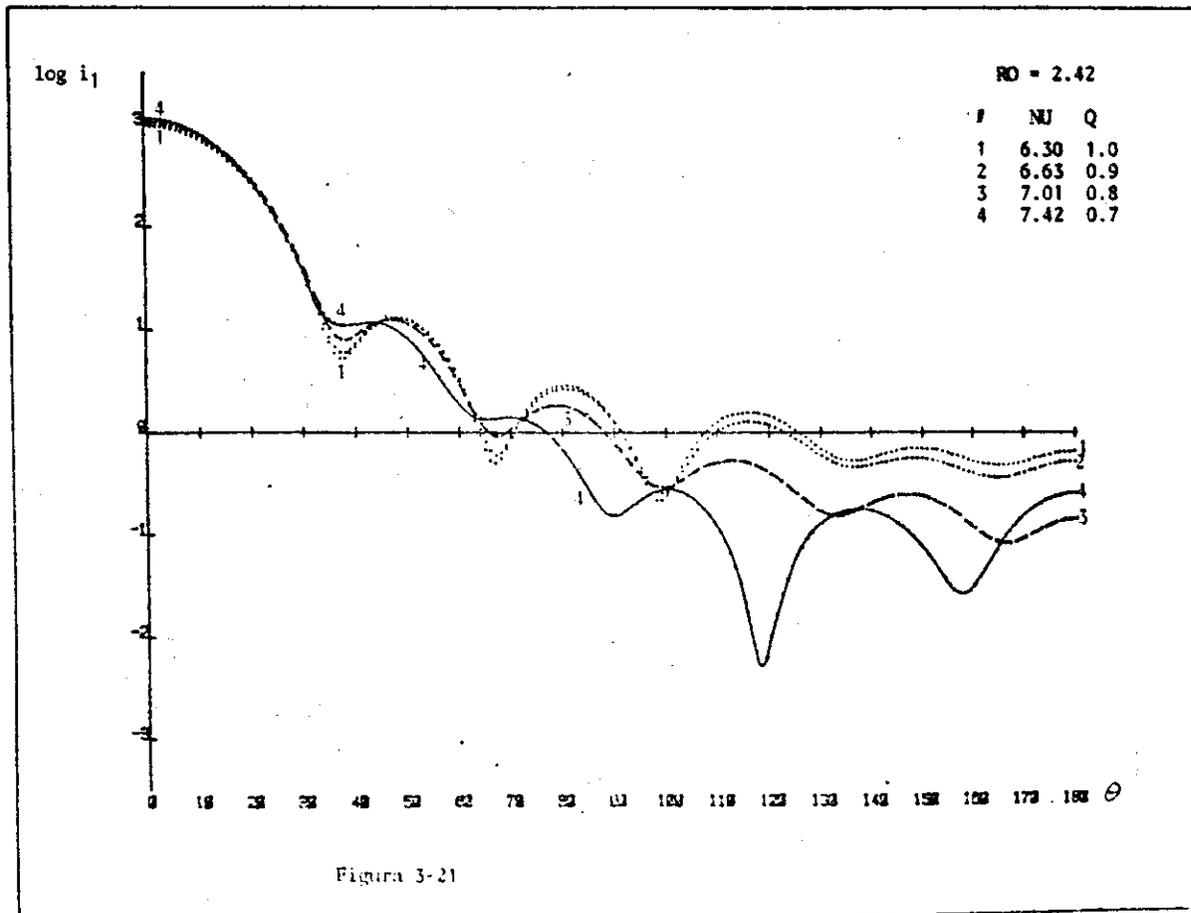
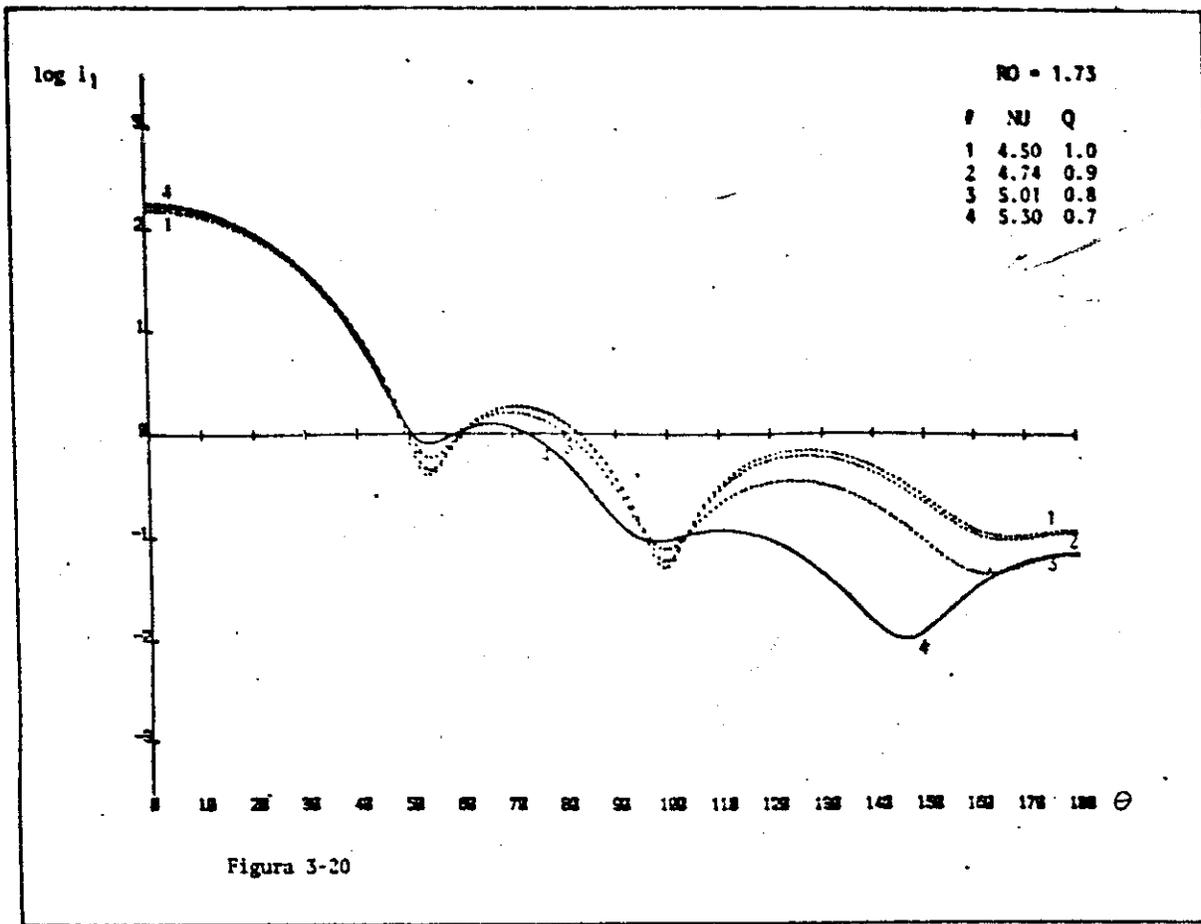
a. Función de Intensidad i_1 en $\theta = 150^\circ$, $m_1 = 1.19207$, $m_2 = 1.09536$

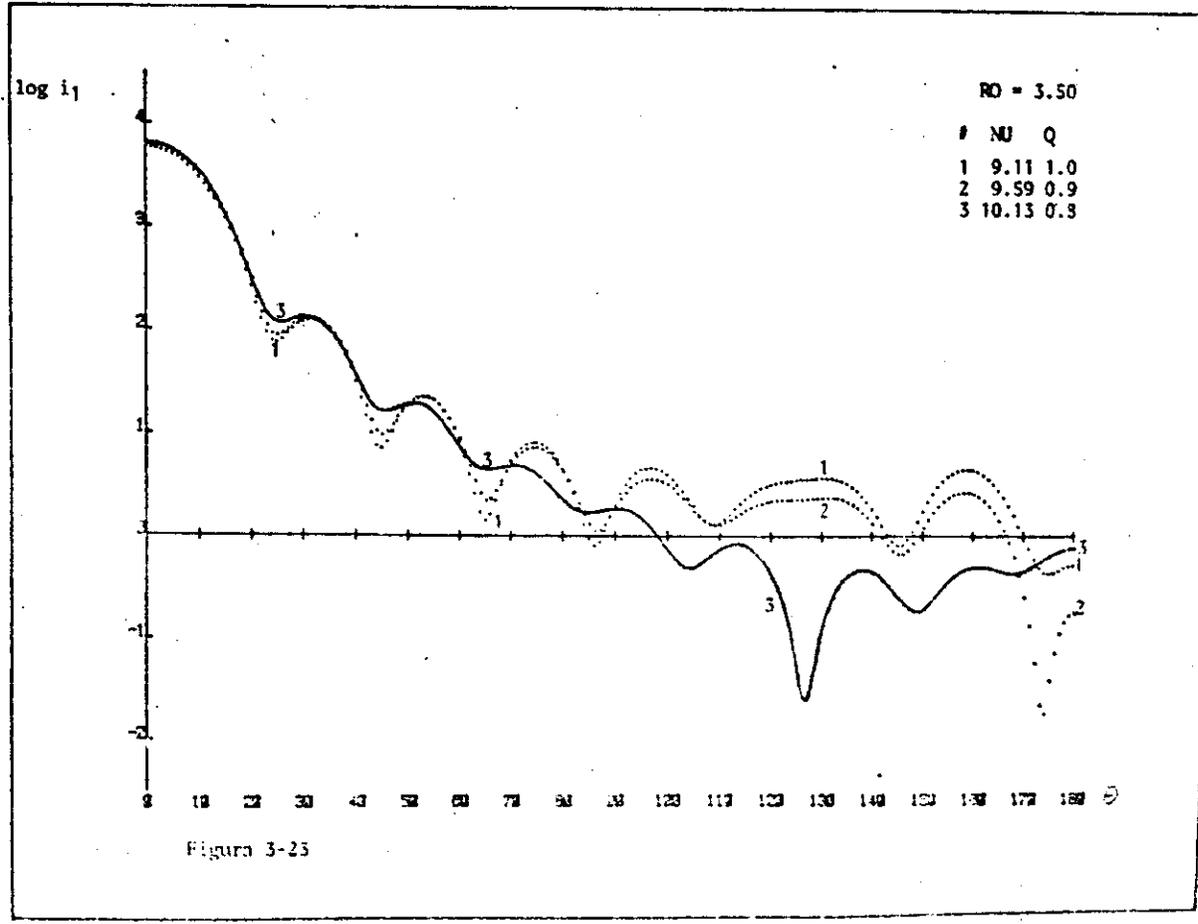
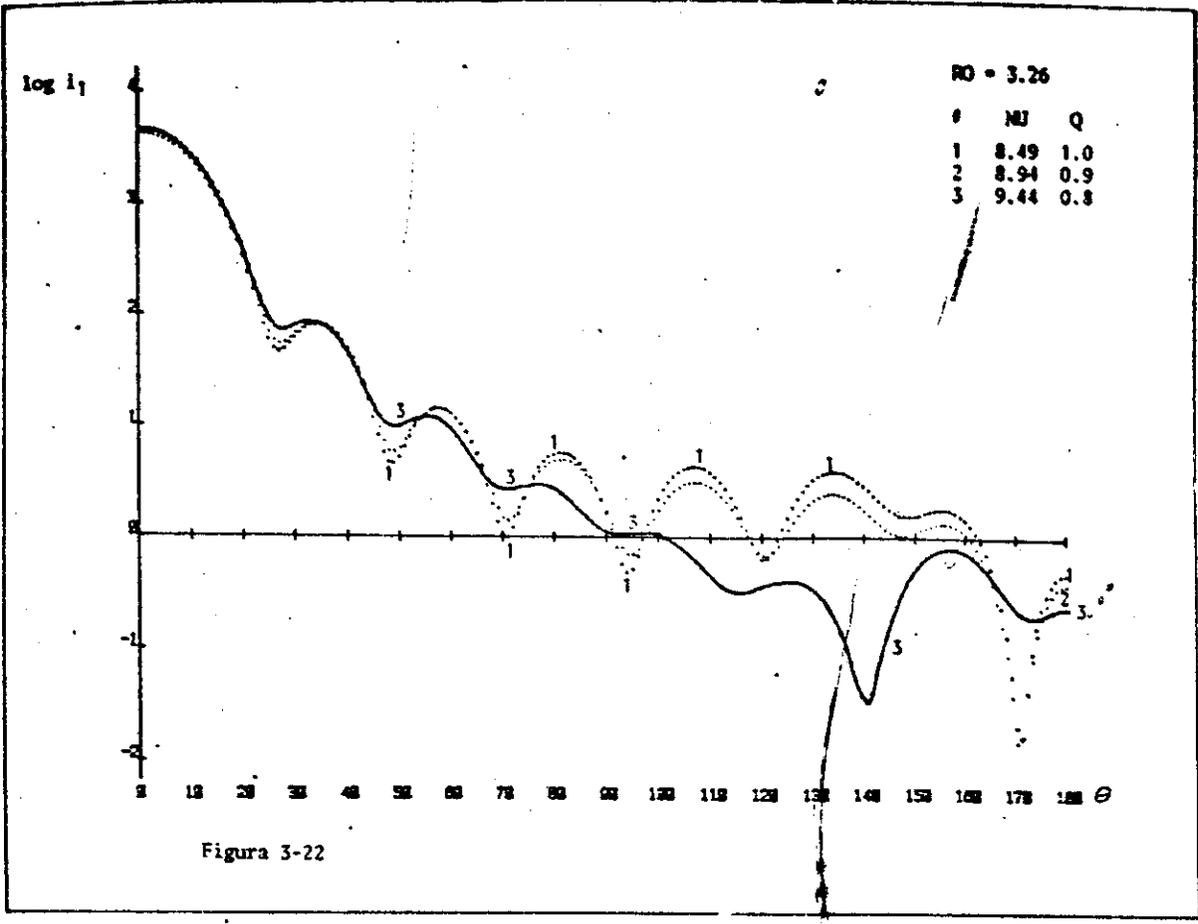
q	$\nu = 12.0$	$\nu = 12.1$	$\nu = 12.2$	$\nu = 12.3$	$\nu = 12.4$
0.95	3.8020	4.9273	6.0622	6.9773	7.4855
0.96	4.7587	6.0475	7.1912	7.9501	8.1618
0.97	5.8435	7.1775	8.1848	8.6462	8.4552
0.98	6.9472	8.1761	8.8985	8.9478	8.3052
9.99	7.9313	8.9010	9.2169	8.7959	7.7353
1.00	8.6567	9.2397	9.0822	8.2127	6.8579

b. Función de Intesidad i_1 en $\theta = 150^\circ$, $m_1 = 2.1050$, $m_2 = 1.4821$

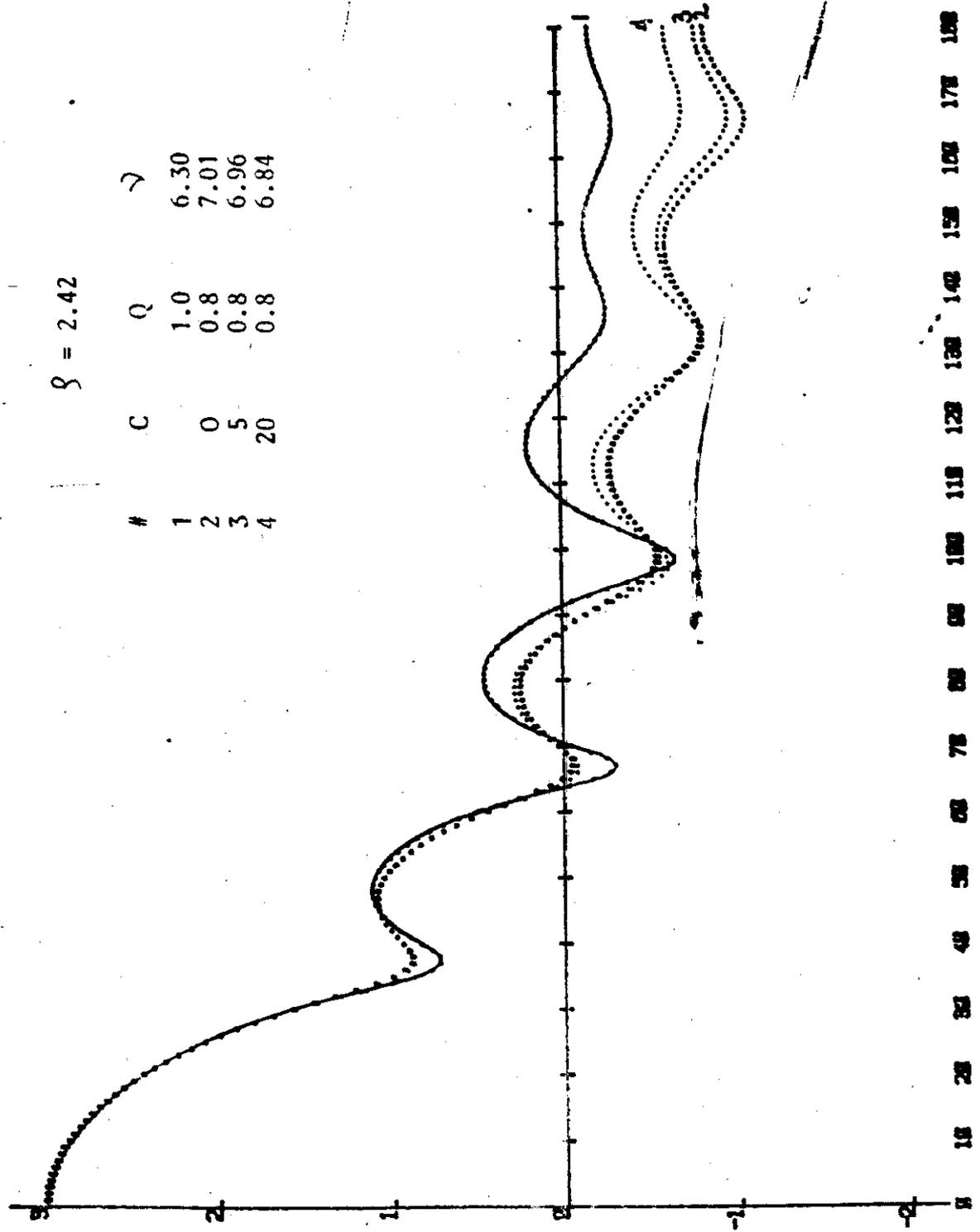
q	$\nu = 12.0$	$\nu = 12.1$	$\nu = 12.2$	$\nu = 12.3$	$\nu = 12.4$
0.95	8.0105	41.5877	55.3648	22.8022	13.0890
0.96	25.9402	70.4174	26.5839	18.2947	9.1028
0.97	89.5205	29.4677	22.3543	14.5959	2.2270
0.98	32.6194	25.0893	16.8023	4.4987	29.3926
0.99	26.6797	21.4254	7.6343	0.1323	29.7308
1.00	24.6748	11.9888	0.6271	8.8366	30.7342







log i₁



$\rho = 2.42$

#	C	Q	γ
1	0	1.0	6.30
2	5	0.8	7.01
3	20	0.8	6.96
4	0.8	0.8	6.84

Figura 3.24

d. Intensidades en un mínimo. Todos los patrones de dispersión para los valores de q , ν y c contenidos en la tabla 3-VI exhiben un mínimo en $\theta = 67^\circ$. Para comparar las intensidades en esta posición, vamos a calcular la intensidad relativa (i_r) definida como el cociente de la intensidad i_1 entre la intensidad i_0 de la partícula sin cáscara ($q = 1.0$), es decir

$$I_r = \frac{I_1}{I_0} \quad (72)$$

En las figuras 3-25 a 3-27 se muestran las gráficas de la intensidad relativa en función de q , ν y $q_1 = 2 \nu q \times (m_1 - 1)$ para los intervalos de la tabla 3-VI. Se observa que para cada valor del índice de refracción de la cáscara, expresado en términos de c , las curvas son completamente distinguibles. Sin embargo, cuando se grafica la intensidad relativa contra q/ν las curvas están tan cercanas entre sí que es difícil distinguirlas, como se muestra en la figura 3-28. Podemos decir que la curva 3-28 es poco sensible al índice de refracción de la cáscara y que representa a las familias de partículas de la tabla 3-VI. Esto proporciona una gran ayuda para facilitar la caracterización de la partícula si es que se comporta como el modelo propuesto.

Este tipo de análisis puede hacerse para los demás mínimos (o máximos) con la restricción de que su posición angular permanezca fija. Los correspondientes intervalos de ν , q y m_2 son menores cuando la posición angular del extremal es mayor.

Esta cantidad adimensional contra la cual se grafica la intensidad relativa, $\frac{q}{\nu} = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{a}{b^2}$, es proporcional al radio del núcleo e inversamente proporcional a la superficie de la partícula total.

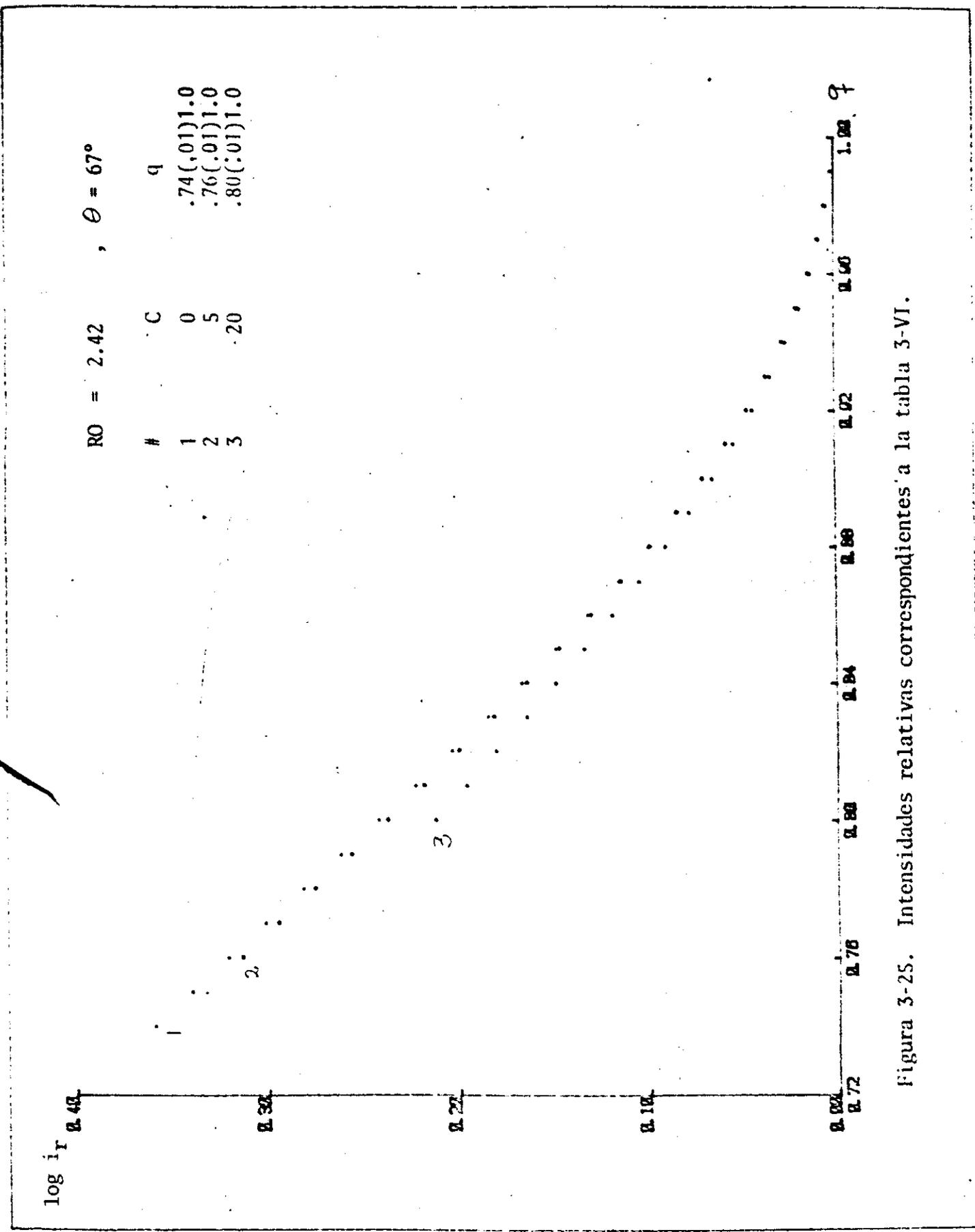


Figura 3-25. Intensidades relativas correspondientes a la tabla 3-VI.

log i_r

RO = 2.42, $\theta = 67^\circ$

#	C	q
1	0	.74(.01)1.0
2	5	.76(.01)1.0
3	20	.80(.01)1.0

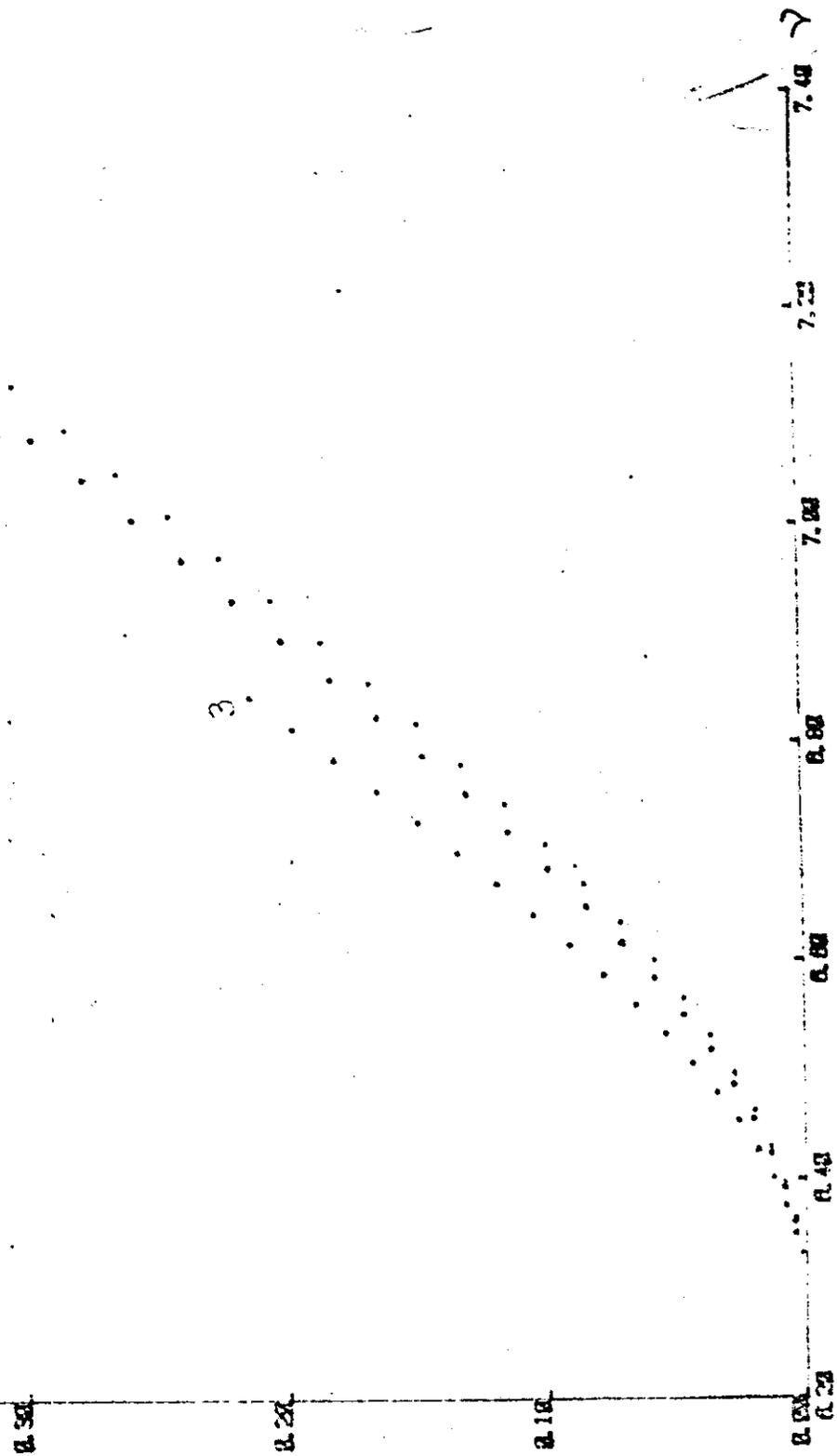


Figura 3-26

$R0 = 2.42$, $\phi = 67^\circ$

#	C	q
1	0	.74(.01)1.0
2	5	.76(.01)1.0
3	20	.80(.01)1.0

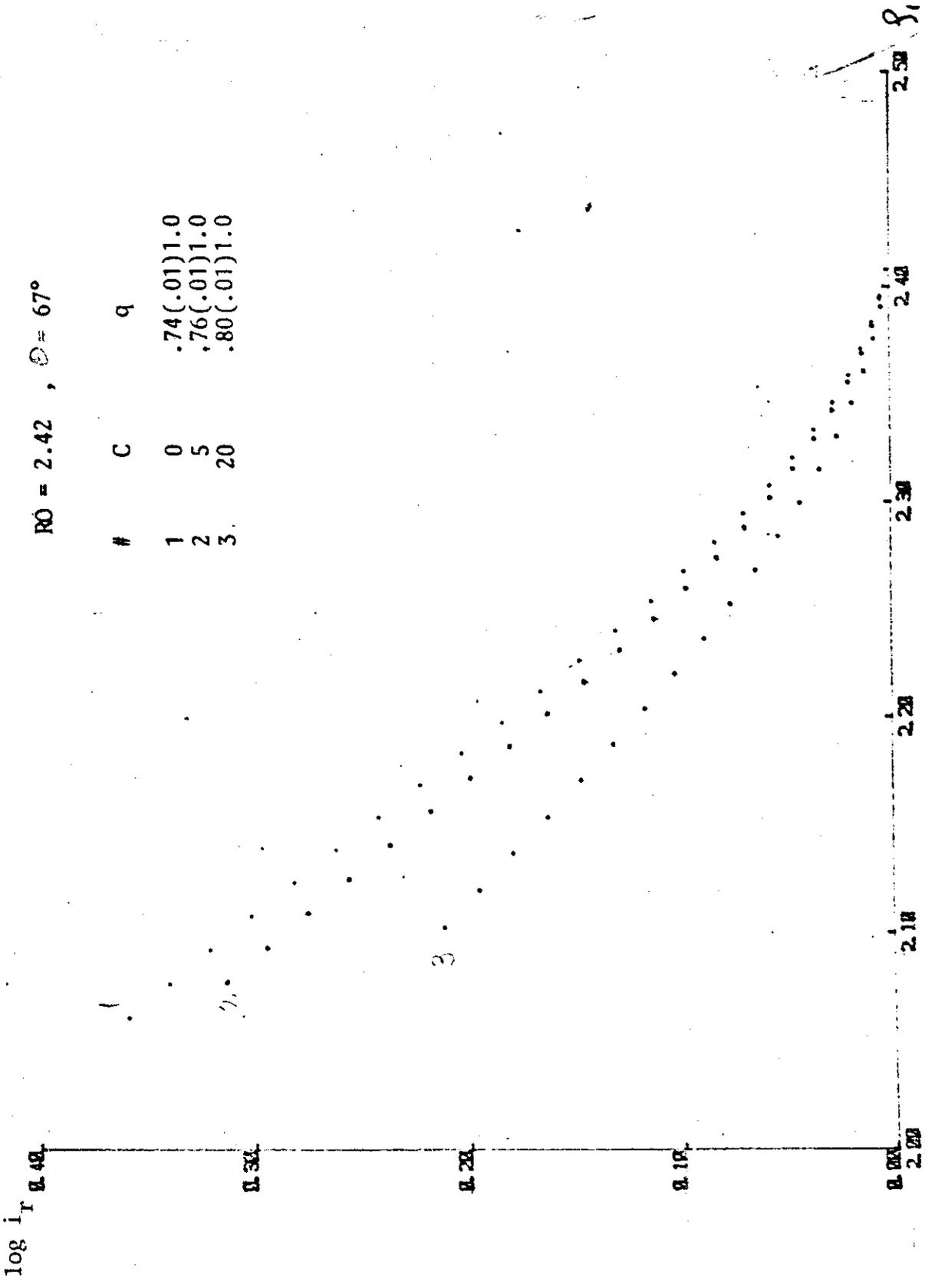


Figura 3-27. $S_i = 2.7q (m, - 1)$

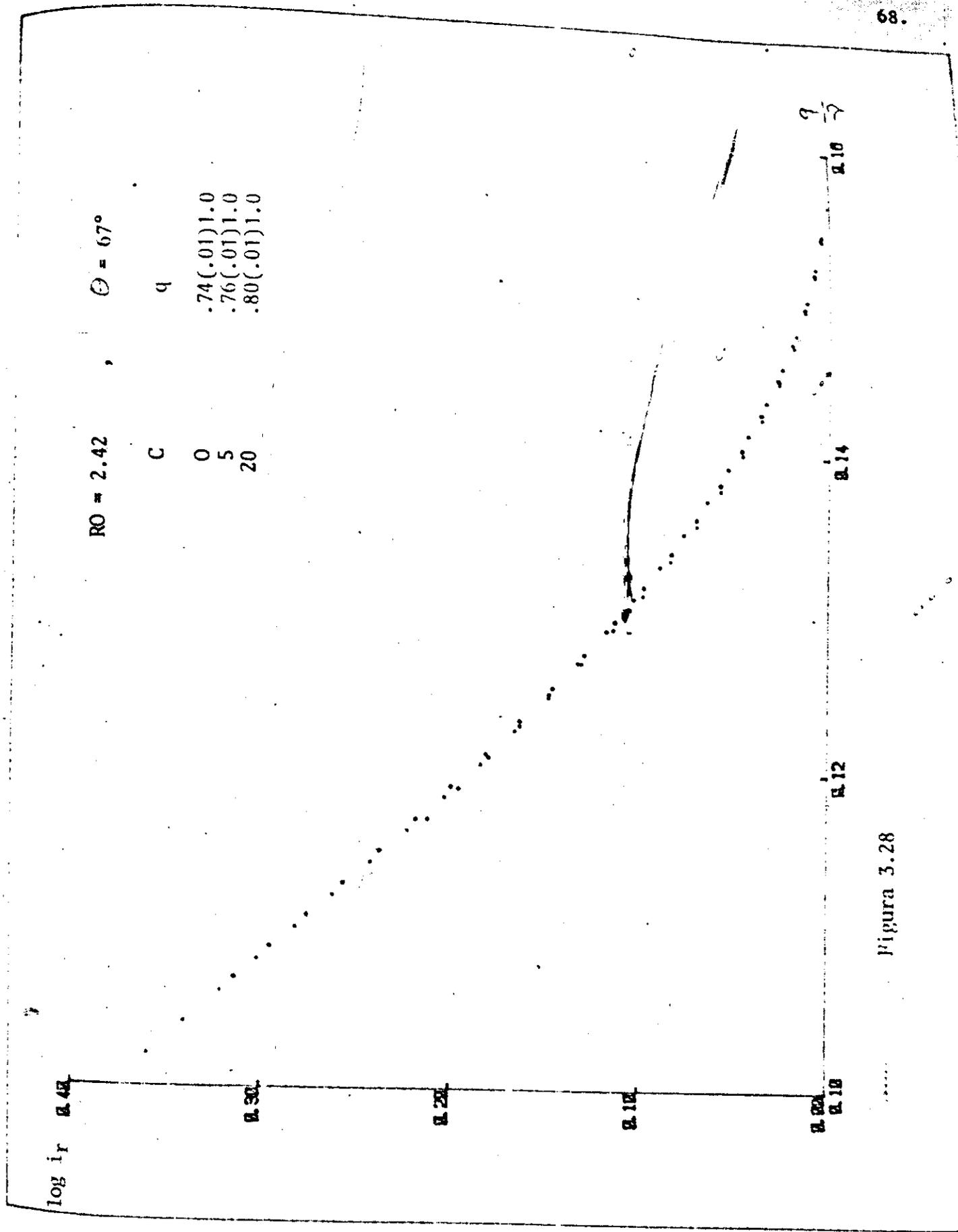


Figura 3.28

3-4.2 Tamaño Inicial Menor que 2.

Consideraremos ahora el caso en que debido al tamaño de la partícula el patrón de dispersión no presenta mínimo alguno. Los valores de la intensidad varían poco con el ángulo de dispersión, como se ilustra en las figuras 3-29 a 3-31. En particular, en la figura 3-30 se presentan las curvas para $q = 0.9$ y $c = 0, 5$ y 20 ; los valores de las intensidades son tan parecidos que las curvas no son distinguibles. En cambio, para $q = 0.7$ ya lo son (figura 3-31).

Vamos a hacer el mismo análisis que hicimos antes para un mínimo, pero como ahora no tenemos restricción en el ángulo, escogeremos arbitrariamente $\theta = 90^\circ$. En la figura 3-32 se muestran las gráficas de intensidad relativa contra $\frac{q}{\lambda}$ y se observa que las curvas hasta $c = 10$ coinciden para cáscaras hasta de 60% y que la curva para $c = 20$ se une a las otras para recubrimientos de 50% y menores. En la figura 3-33 se han considerado concentraciones muy altas, es decir $c = 40$ y 50 . Se ve que estas curvas se unen a las de $c = 0$ y 20 cuando el espesor de la cáscara es pequeño.

De la figura 3-34 en adelante se muestran las gráficas correspondientes para un tamaño de partícula ligeramente mayor (látex seco con diámetro = 0.185 micrones). En las figuras 3-35 a 3-37 se presentan curvas de intensidad relativa para posiciones $\theta = 40^\circ, 60^\circ$ y 90° respectivamente. En ellas las intensidades son diferentes de tal manera que se usan escalas diferentes. En la 3-38 se repiten las gráficas de las tres figuras anteriores para $c = 0$ y 20 . Para el análisis de los datos experimentales, conviene tener una gráfica como ésta para varios valores de θ y en cada curva leer el valor de $\frac{q}{\lambda}$ que teóricamente debería ser constante si es que la partícula de látex solvatado se comporta como el modelo propuesto. Los valores de η y $\frac{q}{\lambda}$ serán de gran ayuda para determinar los valores de q, η y m_2 de tal manera que los espectros de dispersión teórico y experimental se ajusten y así caracterizar la partícula.

Una suposición que se ha hecho al proponer el tamaño total de la partícula es que el valor del corrimiento de fase (φ) se mantiene constante. Es claro que no hay manera de controlar el valor de φ . Este parámetro solamente nos dará una forma de analizar los resultados experimentales que obtengamos.

Por otra parte, se ha obtenido gráficamente que la dependencia funcional de la intensidad relativa a través de las variables q , γ y m_2 , en ciertos intervalos, se comporta como una función de solamente q/γ . Es decir, la intensidad relativa parece depender de estas variables a través de otra función de esas variables. Por lo pronto no hemos llegado a determinar qué función de función es la intensidad de todas esas variables. Sin embargo, hemos aprendido algo acerca de cuáles son los efectos de un pequeño cambio en una de éstas. O bien hemos aprendido algo acerca de la dependencia funcional en ciertas regiones. Todo esto nos ayudará en la interpretación de los datos experimentales.

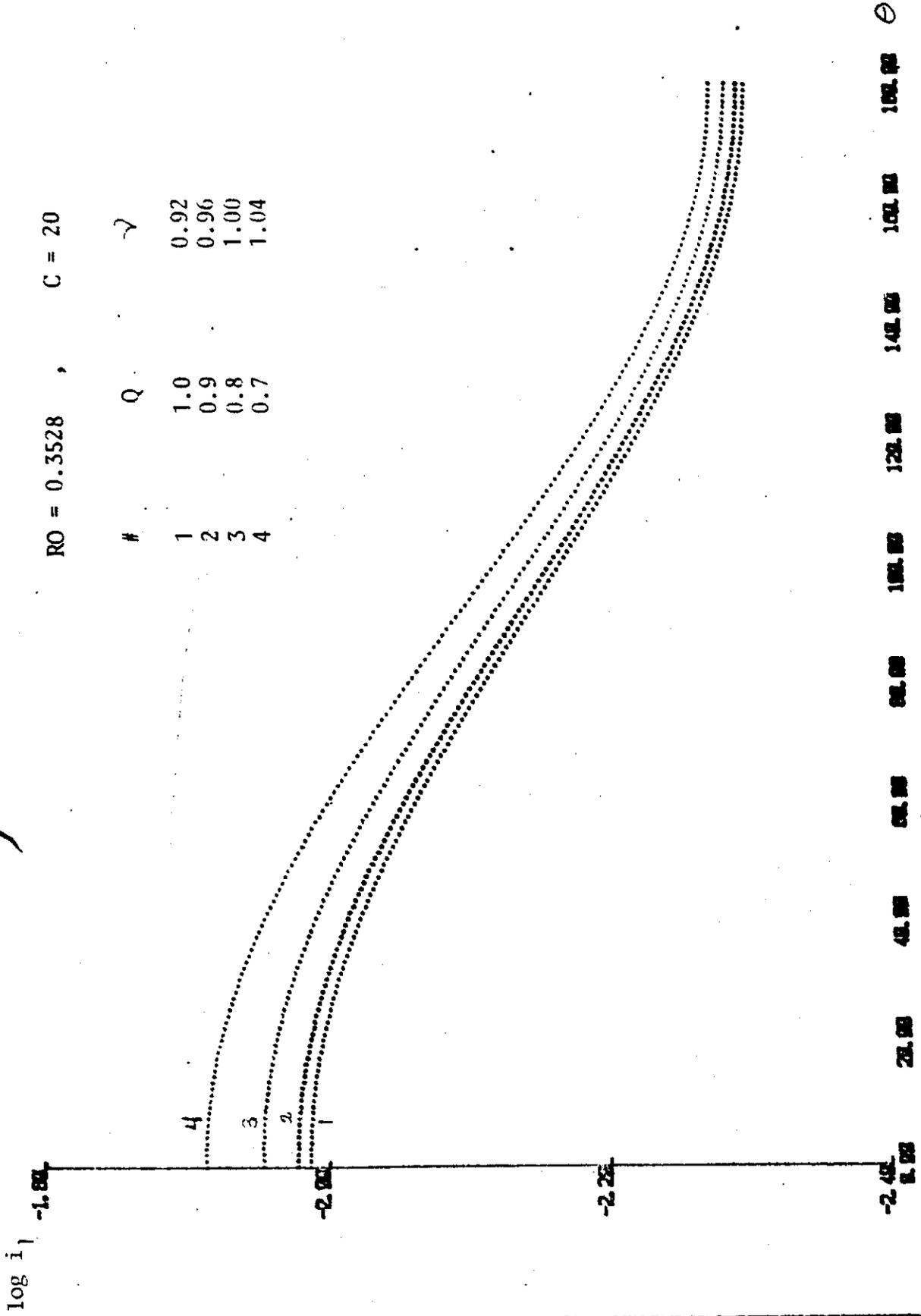
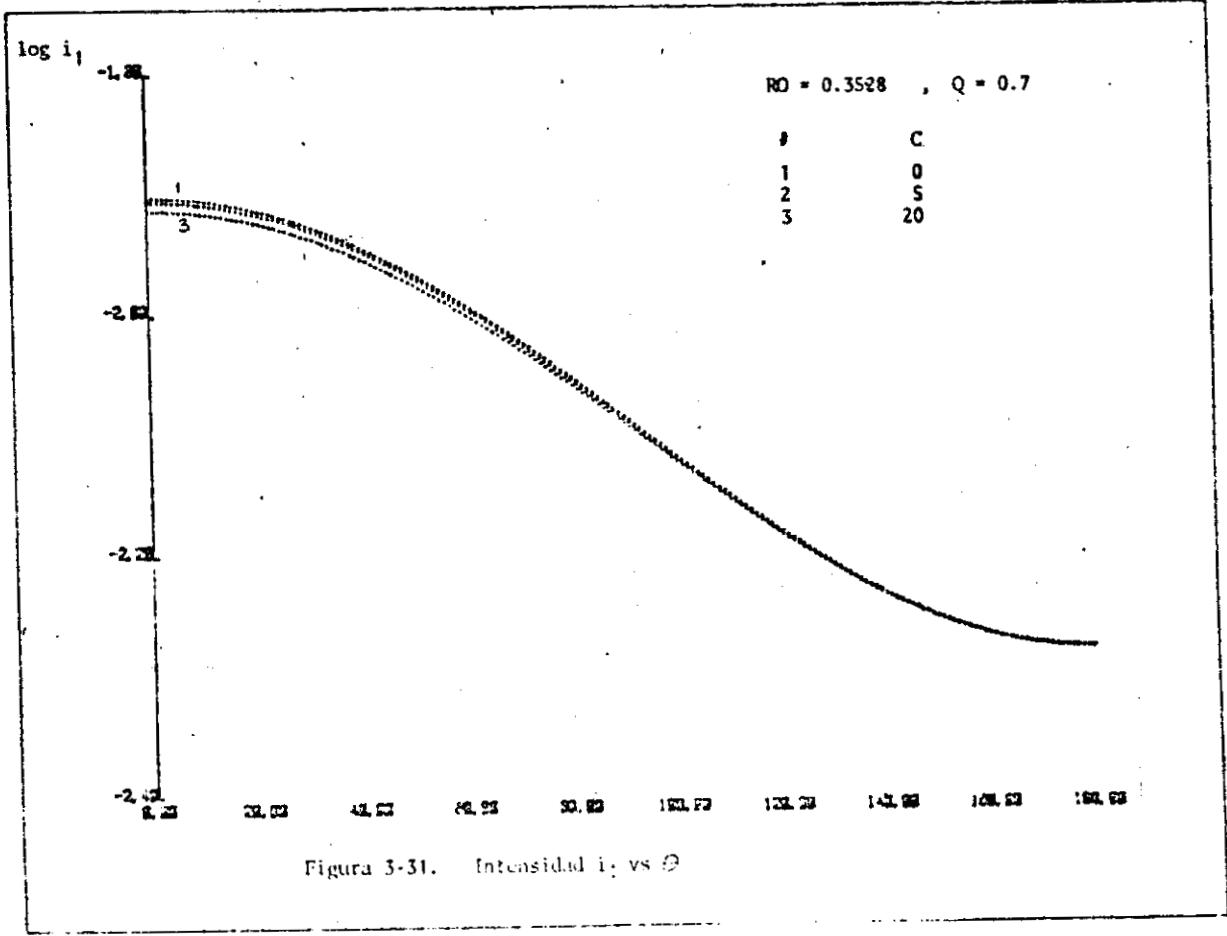
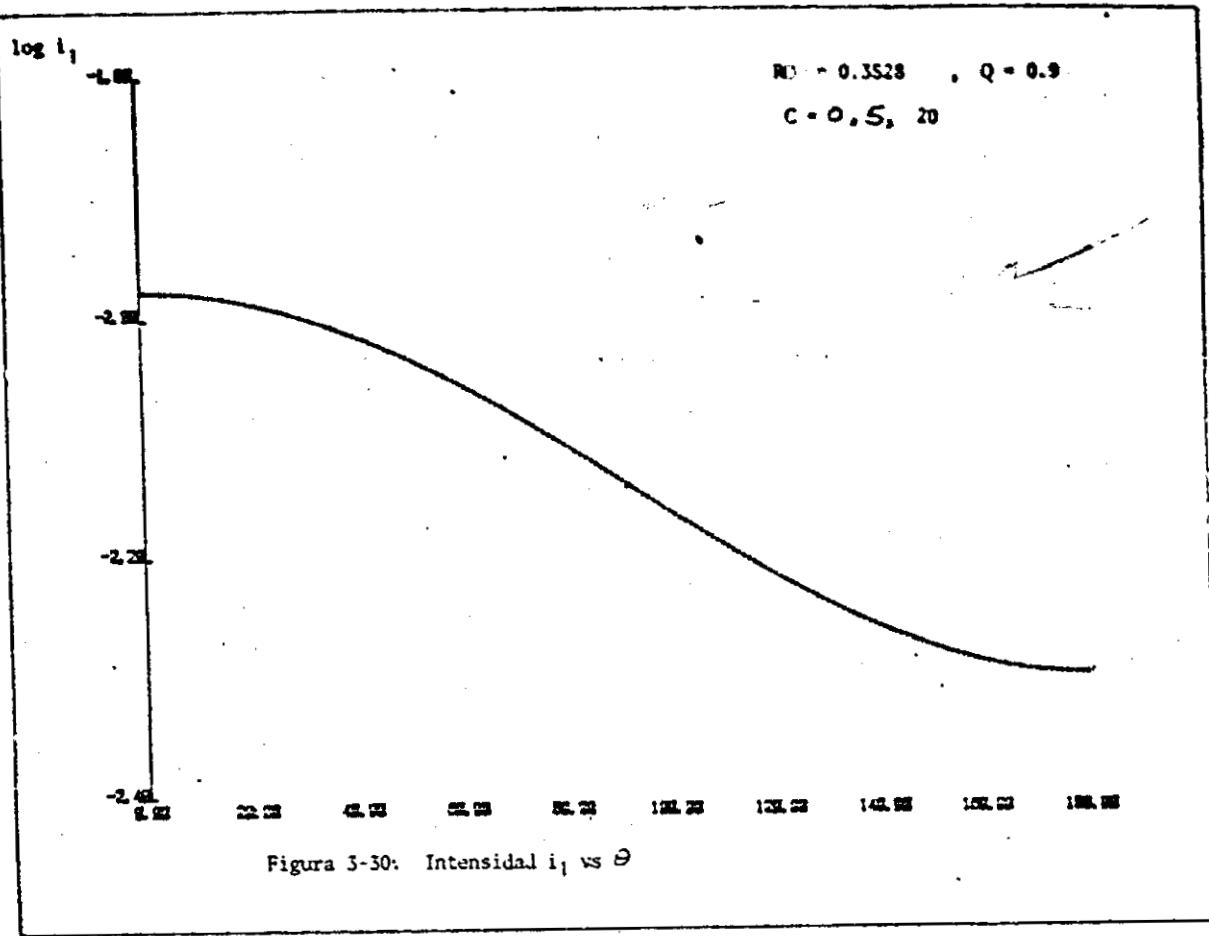


Figura 3-29. Intensidad i_1 vs θ



log i r

$$R_0 = 0.3528, \theta = 90^\circ$$

$$Q = 0.20(.01)1.0$$

#	C
1	0
2	5
3	10
4	20



Figura 3-32. Intensidad relativa vs $q/7$

$R_0 = 0.3528$, $\theta = 90^\circ$

$Q = 0.60(.01)1.0$

#	C
1	0
2	20
3	40
4	50

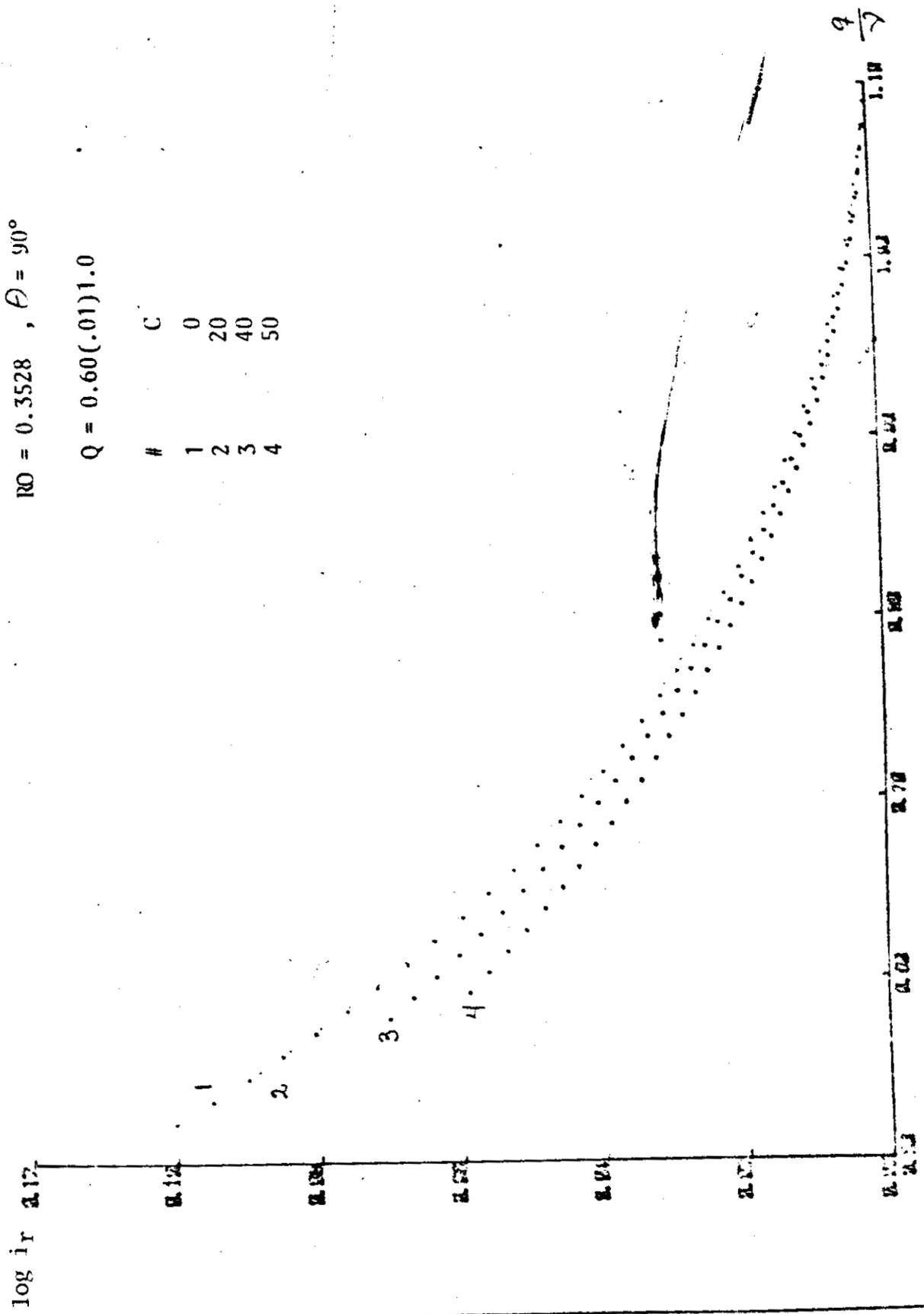


Figura 3-33. Intensidad relativa vs q/λ

$\log i_j$ -1.000
 -1.200
 -1.400
 -1.600
 -1.800
 -2.000

$KO = 0.4699$, $C = 0$

#	Q
1	1.0
2	0.8

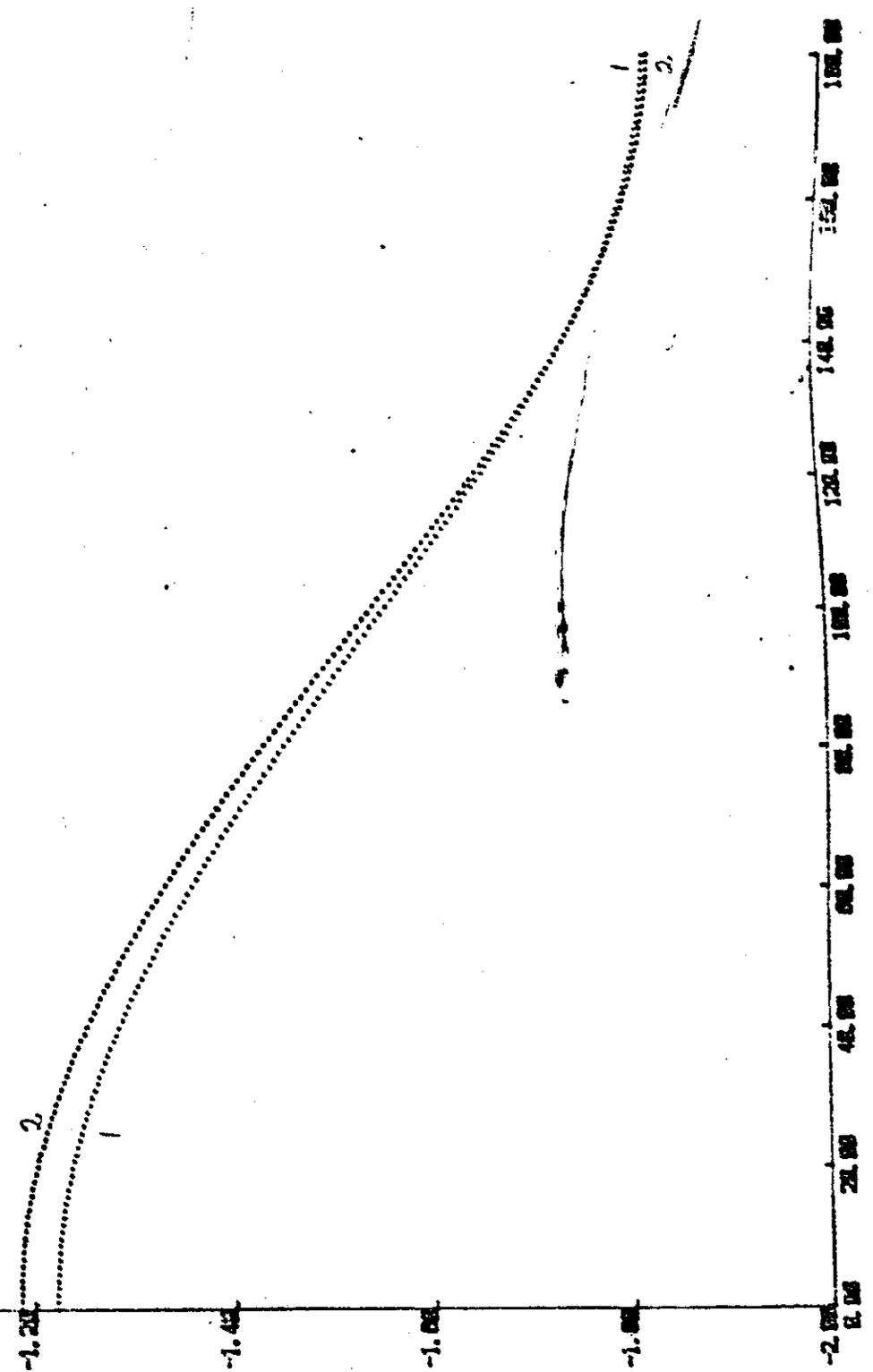


Figura 3-34. Intensidad i_j vs θ

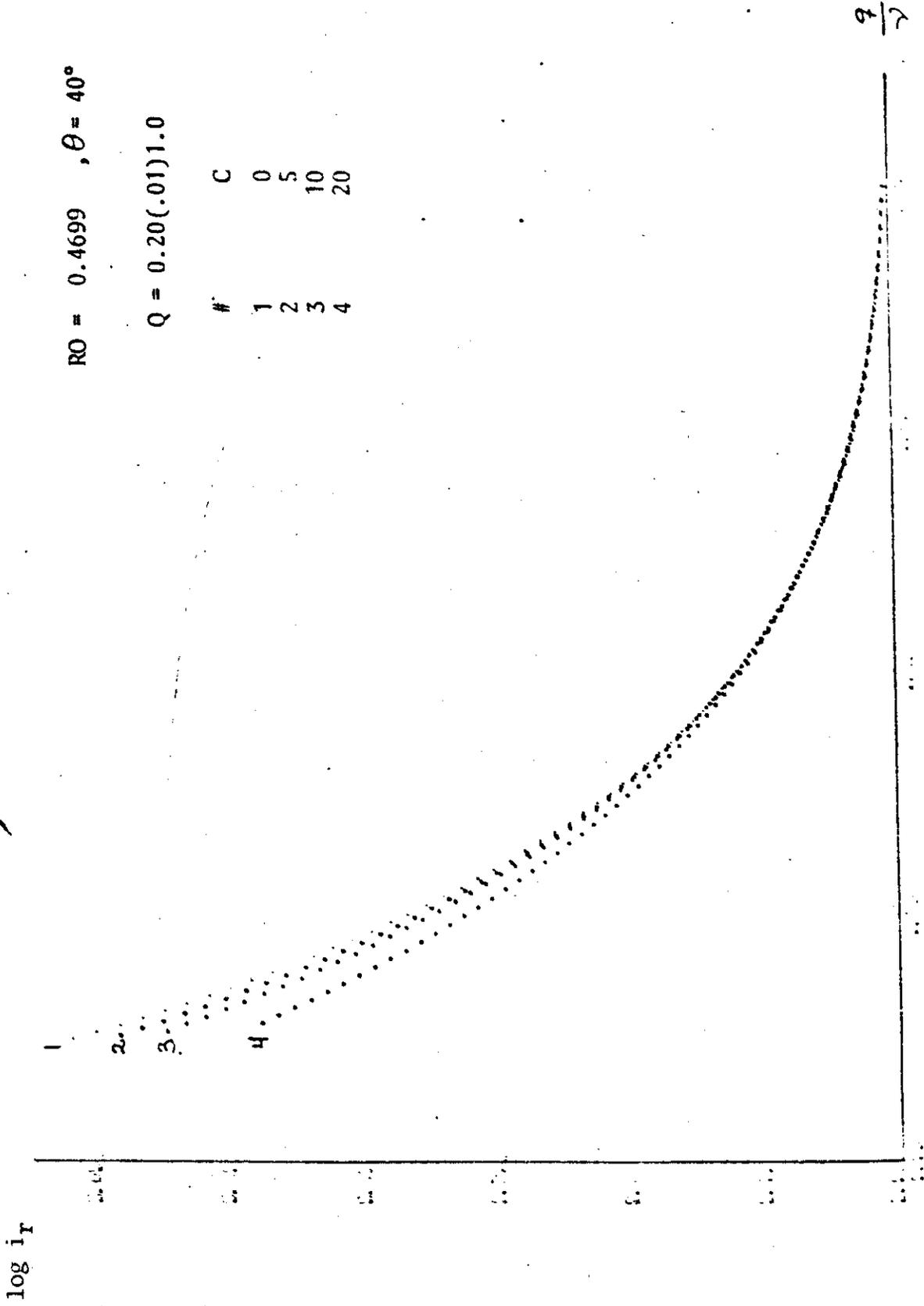


Figura 3-35. Intensidad relativa vs $\frac{q}{\lambda}$

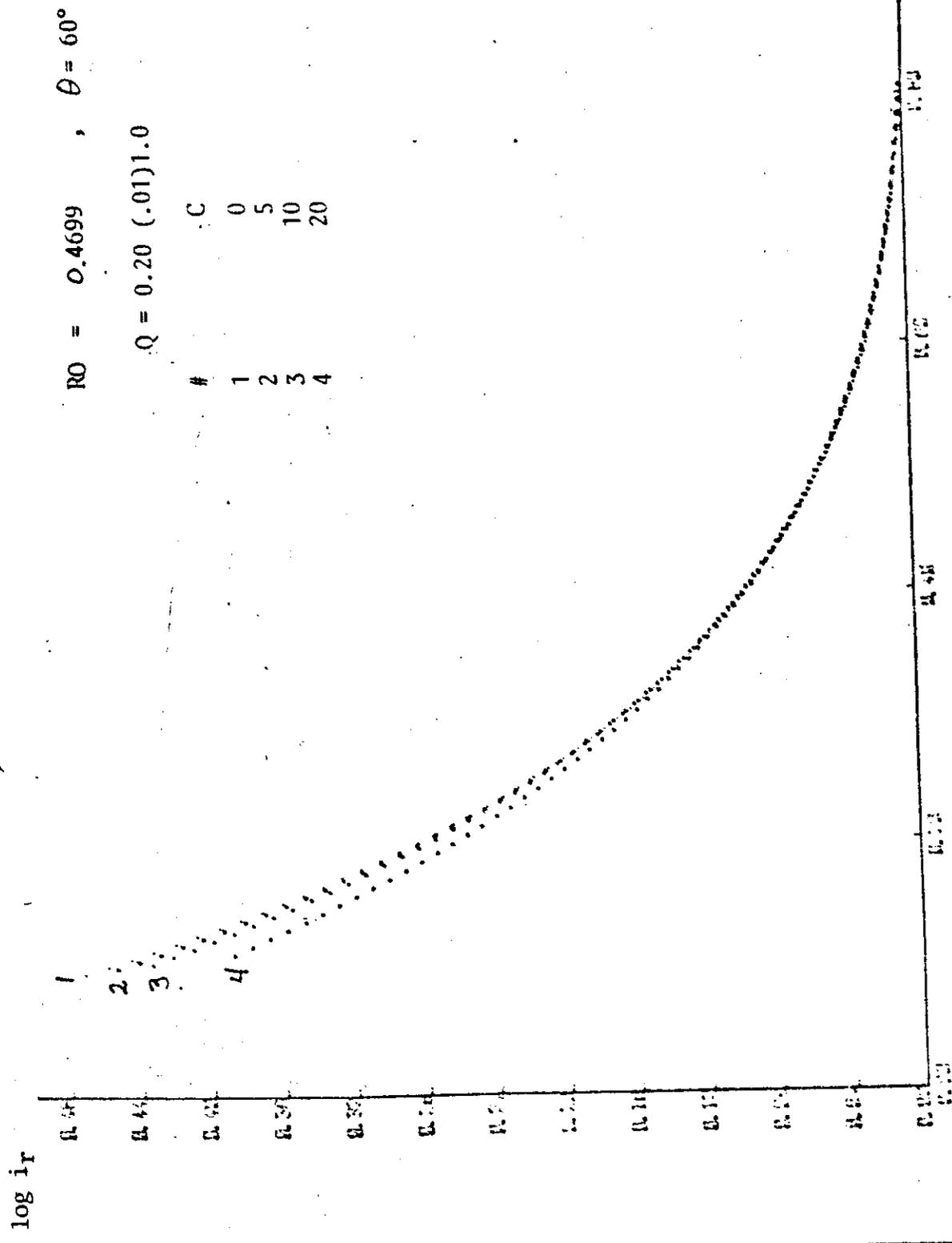


Figura 3-36.

log i_r 0.10

RO = 0.4699 , θ = 90°

Q = 0.20 (.01)1.0

#	C
1	0
2	5
3	10
4	20

3. 4

2.

1

9
2

0.00 0.10 0.20 0.30 0.40 0.50 0.60 0.70 0.80 0.90 1.00

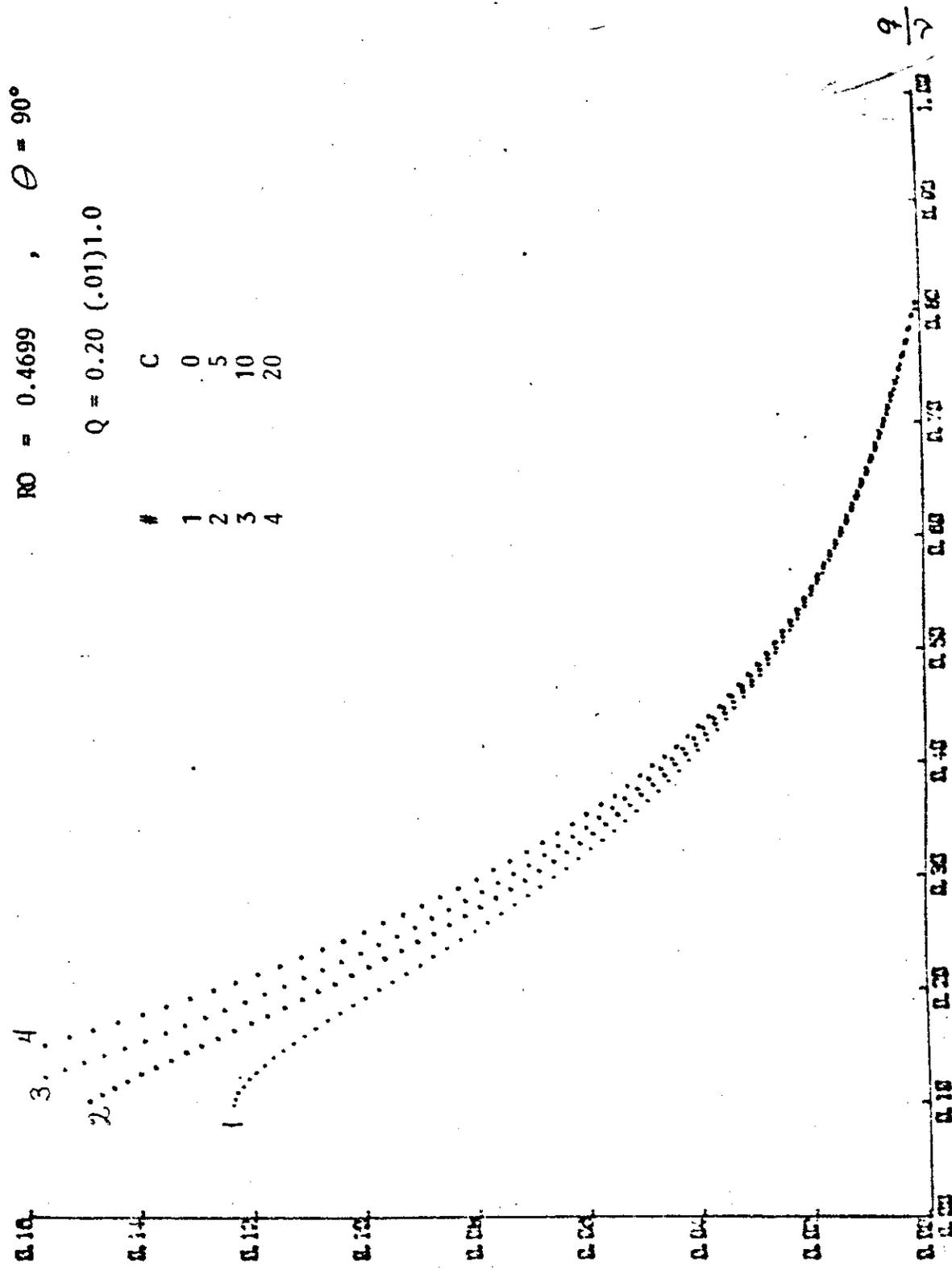


Figura 3-37

$RO = 0.4699$, $Q = 0.20(.01)1.0$

#	θ	C
1	40°	0
2	40°	20
3	60°	0
4	60°	20
5	90°	0
6	90°	20

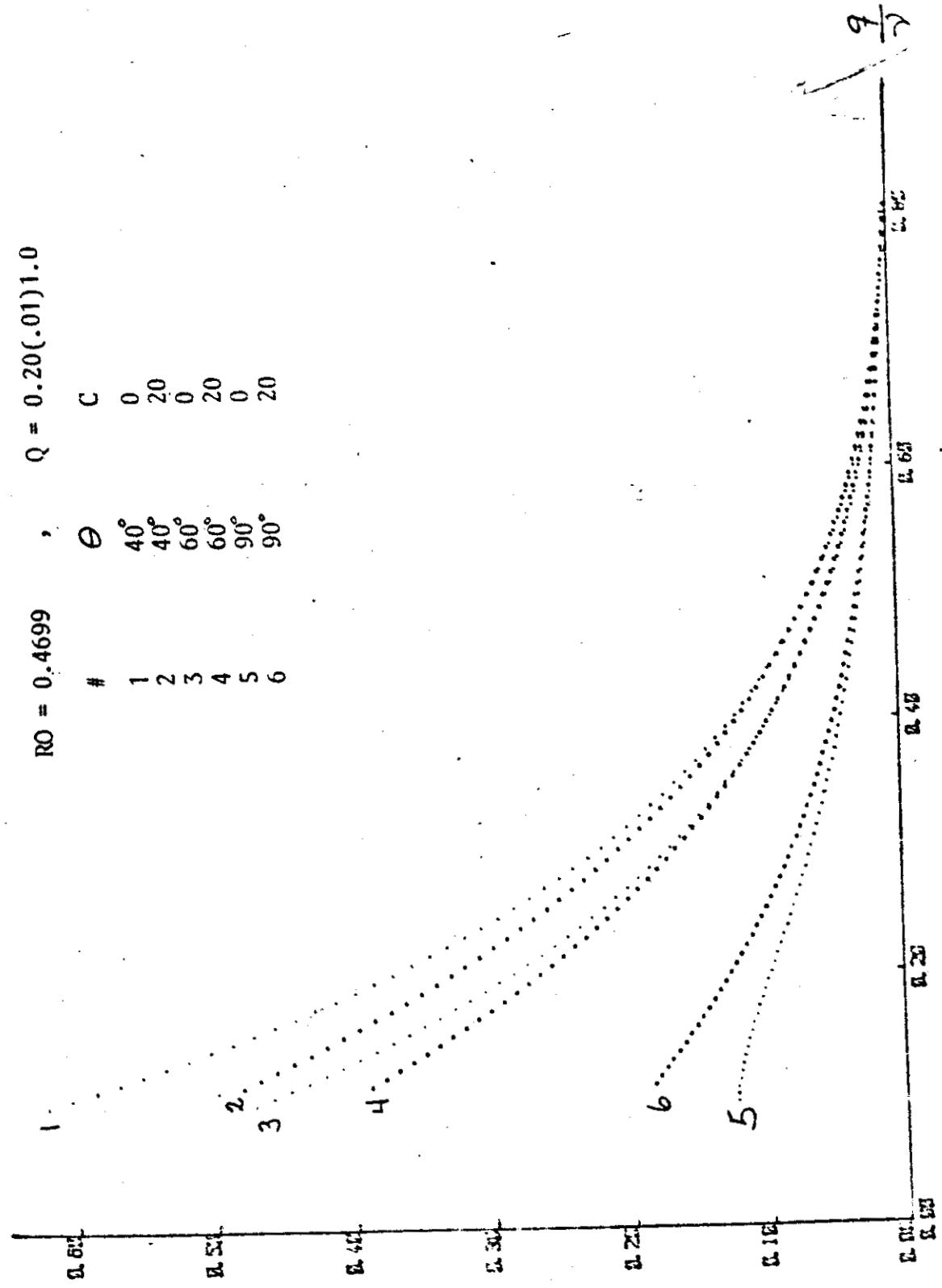


Figura 3-38. Comparación de las tres figuras anteriores.

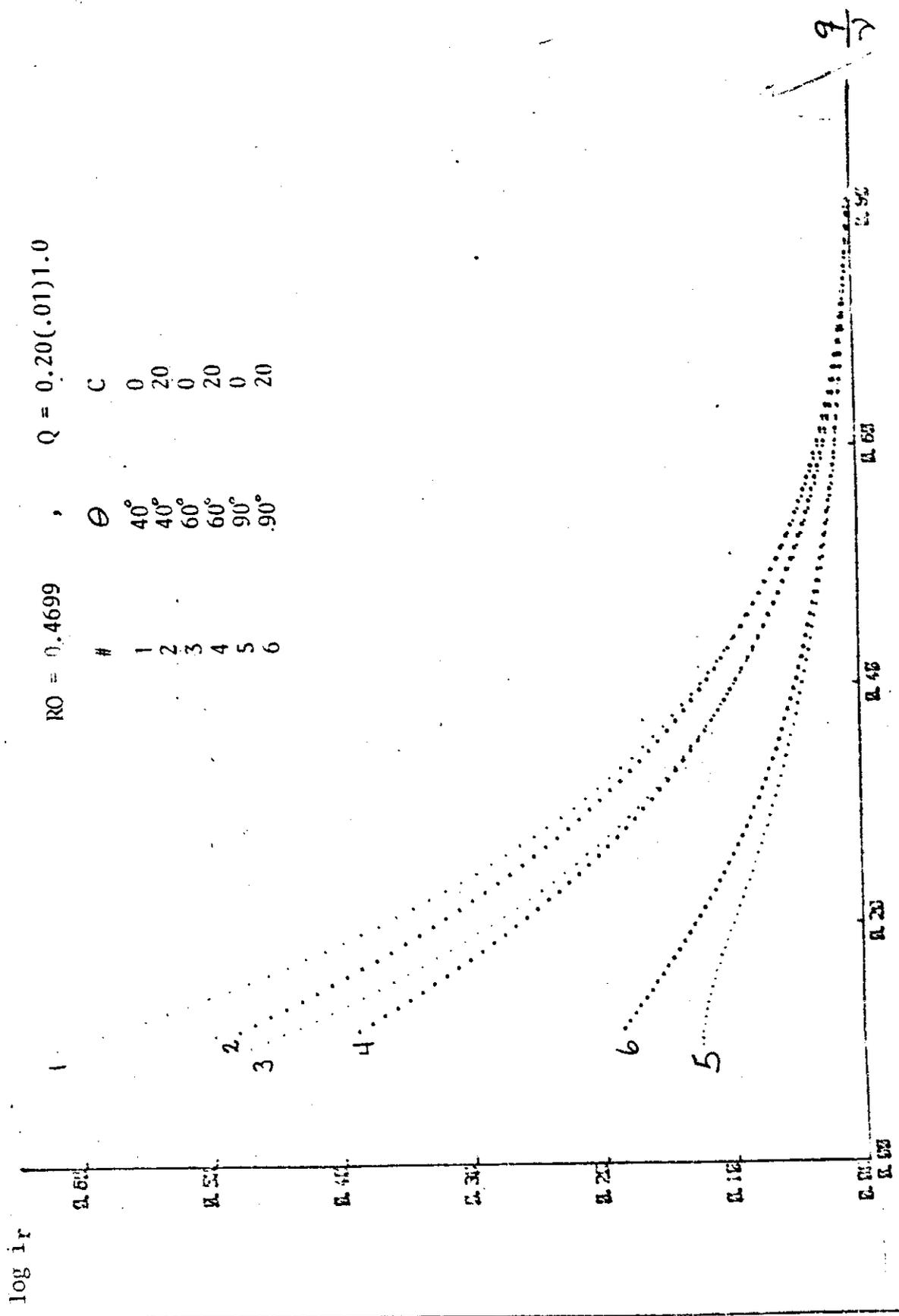


Figura 3-38. Comparación de las tres figuras anteriores.

9/7

CONCLUSIONES

En este trabajo se ha reproducido la teoría de la dispersión que produce una partícula esférica general cuando se le hace incidir una onda electromagnética plana monocromática. Se analizan dos tipos de partículas: cuando es una esfera homogénea y cuando está formada por un núcleo esférico cubierto por una cáscara concéntrica.

Esta teoría la aplicaremos al estudio de partículas de látex. Se ha predicho que cuando al látex se le agrega solvente; la distribución de éste al interior de la partícula es no uniforme. En el modelo que construimos se concibe a la partícula resultante como un núcleo de polímero rodeado de una cáscara formada por una mezcla de polímero y solvente. Hemos calculado los valores que la teoría predice para el factor de eficiencia de dispersión y para la intensidad cuando el polímero es poliestireno y el solvente es tetracloruro de carbono. Los resultados principales son los siguientes:

a. Esfera homogénea. Dependiendo del tamaño (α) de la partícula, la gráfica de intensidad vs. ángulo presenta máximos y mínimos cuyas posiciones y número cambian al cambiar α . Se grafica la posición de estos extremos como función del tamaño para así conocer inmediatamente su valor a partir del espectro que se obtenga con dispersión de luz. Para otros valores del índice de refracción se obtienen curvas similares.

b. Esfera con cáscara. En este caso se encuentra que existen intervalos de valores de tamaño de partícula (ν), espesor de cáscara (q) e índice de refracción de la cáscara (m_2) en que la posición angular de los primeros mínimos se mantiene fija. Al graficar la intensidad relativa de un mínimo con posición fija vs. q/ν , se obtiene que los puntos caen aproximadamente sobre una misma curva sin importar el valor de m_2 , en un intervalo de éste, i.e. la curva

representa a familias de partículas. Este parámetro adimensional q/γ es proporcional al cociente del radio del núcleo y la superficie de la partícula.

Cuando el valor de ν es pequeño, el patrón de dispersión no presenta mínimo alguno. Se hace el análisis de la intensidad relativa en distintos ángulos arbitrarios y en cada uno de ellos se obtienen resultados como los obtenidos en el caso de un mínimo fijo, pero ahora en mayores intervalos de variación de q , γ y m_2 . En estos intervalos la intensidad relativa se comporta como una función de solamente q/γ , i.e. parece depender de estas variables a través de otra función de esas variables.

Todo esto ayudará en la interpretación de los datos experimentales para la caracterización de las partículas.

REFERENCIAS

1. Abramowitz, Milton y Stegun, Irene A., editores. Handbook of Mathematical Functions. Dover, New York, 1970.
2. Aragón S., Sergio R. y Elwenspoek, Michael. J. Chem. Phys., 77, (7), 3406-3413, 1982.
3. Arfken, George. Mathematical Methods for Physicists. Academic, New York, 1968.
4. Born, Max y Wolf, Emil. Principles of Optics. 5 ed., Pergamon, Oxford, 1975.
5. Brandrup, K. e Immergut, E.H., editores. Polymer Handbook, 2 ed., John Wiley-Sons, New York, 1975.
6. Deirmendjian, Diran. Electromagnetic Scattering on Spherical Polydispersions. American Elsevier Publishing Co., New York, 1969.
7. Denman, Harry H., Heller, Wilfried y Pangonis, William J. Angular Scattering Functions for Spheres. Wayne State University, Detroit, 1966.
8. Grancio, M.R. y Williams, D.J. J. Polym. Sci. A-1, 8, 2617-2629, 1970.
9. Gray, Dwight E., editor. American Institute of Physics Handbook. 3 ed., McGraw-Hill, New York, 1972.
10. Jackson, John David. Classical Electrodynamics. John Wiley-Sons, New York, 1962.
11. Jenkins, Francis A. y White, Harvey E. Fundamentals of Optics. 3 ed., McGraw-Hill, New York, 1957.
12. Kerker, Milton. The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation. Academic, New York, 1969.
13. Keusch, Preston, Graff, Robert A. y Williams, David J. Macromolecules, 7, 304-310, 1974.
14. Pangonis, William J., Heller, Wilfried y Jacobson, Arvid. Tables of Light Scattering Functions for Spherical Particles. Wayne State University, Detroit, 1957.
15. Stratton, J. Electromagnetic Theory. McGraw-Hill, New York, 1941.
16. Van de Hulst, H.C. Light Scattering by Small Particles. John Wiley-Sons, New York, 1964.
17. Weast, Robert C., editor. Handbook of Chemistry and Physics. 59 ed., CRC, 1974.
18. Wickramasinghe, N.C. Light Scattering Functions for Small Particles. John Wiley-Son, New York, 1973.