



## フラクタル微粒子の光散乱

向井 正・小笹 隆司・岡本 創

神戸大学理学部地球惑星科学教室 〒657 神戸市灘区六甲台町 1-1

(1994年11月2日受理)

### Light Scattering by Fractal Aggregate

Tadashi MUKAI, Takashi KOZASA and Hajime OKAMOTO

Department of Earth and Planetary Sciences, Faculty of Science,  
Kobe University, Nada, Kobe 657

#### 1. はじめに

空に星があるように、星と星との間に広がる空間には無数の固体微粒子がある。この中で、大きさが数十オングストロームから、数百マイクロンまでの微粒子を塵と呼んでいる。これらは星の光を散乱し、吸収する。こうして背景の星の光が減光する様子から、塵の大きさや組成が推定される。また、これらの塵の熱放射を測定することによって、塵の空間分布や塵の物理・鉱物特性が調べられている。

この固体微粒子（塵）には、進化した星の大気で生まれ、その後、大気から飛び出したものや、寿命が尽きて爆発した新星や超新星から放出されたガスの中で生まれたものが含まれている。ガス雲が収縮し、新しい星を産み出し、新しい惑星を作る。これらの天体の誕生と、その後の進化の過程において、塵が果たす役割が重要であるといわれている。従来、ガスの中から星が生まれ、惑星が作られるというシナリオの中に、塵を登場させる試みが、最近、熱心に取り組まれるようになった。

さてそれでは、これらの塵をモデルとして扱うにはどうしたらよいだろう？ 星の光を減光する散乱体である塵をモデル化するために、塵は球粒子と近似された。これは、光散乱を理論的に扱いやすいようにするためである。滑らかな表面をした、波長と同じ程度の大きさの均質球による光散乱は、ミー (Mie) 理論によって正確に扱うことができる。その変形として、楕円体や殻構造体を扱うことも可能である。こうして Mie 理論は、塵が関与する天体現象の解析手段として、広く実用化されて

きた<sup>1)</sup>。

宇宙空間に存在する塵の形を直接測定することは難しい。惑星間飛翔体が塵測定器を載せて、衝突する塵の質量や化学組成、速度や飛来方向といった情報を、金星から木星にわたる広い空間で集めている。しかし、測定器に飛び込む塵の衝突速度は、秒速数十キロメートルを越すので、塵は瞬時にプラズマとなる。衝突直前の塵の形状を測定する試みは未だない。一方、地球は大きな塵の捕獲器である。ただ、高速度で地球大気に飛び込んだ塵は、空気分子によって衝突加熱され、昇華してしまう。これはちょうど、塵より大きい隕石が、地球大気に入って、流れ星となって輝くのと似ている。しかし、塵の中には、うまく地球大気に潜り込むものがある。このため地球上層大気中に漂う塵の中には、宇宙起源のものが混じっている。これらの塵を採集し、その化学組成を基に宇宙からやってきた塵を選び出すことができるようになった。その一例<sup>2)</sup>を図1に示す。地球大気に突入した際に、塵が被った形状や構造の変化が小さいと仮定すると、このような不規則形状が、宇宙の塵の一般的な形であるらしい。

さて、本稿では、不規則形状微粒子による光散乱の取扱いについて解説する。光の波長と同じ程度の大きさを持った不規則塵をモデル化するために、フラクタル集合体を用いる。まず、そうした集合塵 (aggregates) の生成のシミュレーションについて述べ、その結果作られる集合塵の構造を解析する。次いで、その集合塵を用いて光散乱を扱う。ここでは、1973年に Purcell と Pennypacker<sup>3)</sup>によって提案され、その後改良が加えられて<sup>4)</sup>、

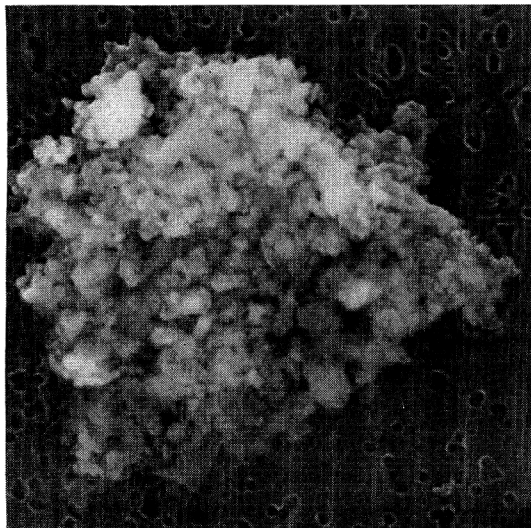


図1 地球上層大気中で採集された宇宙起源の集合塵<sup>2)</sup> (大きさは 12  $\mu\text{m}$ )

主に天文学, 惑星科学, 大気物理学の分野で広く用いられている discrete dipole approximation (DDA) 法を解説する. 次いで, 集合塵への DDA の適用に触れ, さらに, DDA の簡便法として有効な MG-Mie 法を紹介する.

## 2. フラクタル集合塵の生成

同じ大きさの基本粒子が, 衝突付着を繰り返しつつ成長し, 集合塵を形成していく過程を, 計算機を用いたモンテカルロ・シミュレーションで再現する. 二つの場合を取り上げる. (1) 入射粒子がいつも単一の基本粒子である場合 (ballistic particle-cluster aggregation を略して BPCA と呼ぶ). 標的粒子は, 基本粒子を一つずつ加えていながら大きくなる. (2) 入射粒子と, 標的粒子の構成粒子数が等しい場合 (すなわち, 衝突する両集合塵が等質量) (ballistic cluster-cluster aggregation を略して BCCA と呼ぶ). 標的粒子はその質量を倍増させつつ成長する. 入射粒子の入射方向は, 一様乱数を発生させて選び, 入射粒子と標的粒子が接触すると付着するとする (付着係数=1).

1,024 個の基本粒子の衝突付着 (付着係数=1) によって作られた BPCA 粒子と BCCA 粒子の形を図2に示す<sup>5)</sup> (以下では煩雑になるので, 粒子を省いて BPCA, BCCA と表記する). さて, このようにして作られた集合塵の形状・構造を解析するために, フラクタル次元解析を行う. 集合塵の重心の位置ベクトルを  $\mathbf{r}_g$  とし,  $i$  番目の基本粒子の位置ベクトルを  $\mathbf{r}_i$  とすると, 集合塵の

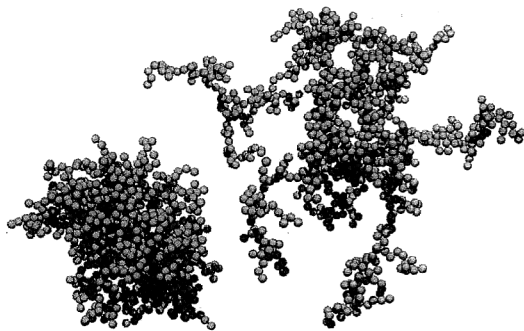


図2 計算機シミュレーションで作った1,024個の基本粒子からなるフラクタル塵 (BPCA (左), BCCA (右))<sup>5)</sup>

慣性半径  $r_g$  は,

$$r_g^2 = (1/N) \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_g)^2 \quad (1)$$

となる. 集合塵の大きさを表す指標として, 特性半径  $r_c$  を用いることがある. ここで  $r_c$  は,  $r_c^2 = Kr_g^2$  で定義され,  $K$  は数定数である.

集合塵の構成粒子数  $N$  から, その慣性半径  $r_g$  を求める. 次いで,  $r_g$  を基本粒子の半径 ( $r_0$ ) で規格化して横軸にとり,  $N$  を縦軸にとると, 対数表示において,  $N$  と  $r_g$  は比例することが知られている<sup>6)</sup>. これを式で表すと

$$N = \alpha (r_g/r_0)^D \quad (2)$$

となる. ここで  $D$  をフラクタル次元と呼ぶ.  $D$  の値は, BPCA では3に近く, BCCA ではおよそ2となる<sup>6)</sup>. このことは, BPCA が空間構造の相似性を保ちつつ, 3次元的に成長するのに対して, BCCA は2次元的に成長することを示唆する. 事実, 図2を見てわかるように, BPCA は, 球形のコンパクトな形状を示すのに対して, BCCA はより開放的な2次元構造である.

一例として, 2,048 個の基本粒子からなる BPCA, BCCA について, 集合塵の密度の半径依存性を計算した. その結果から, 集合塵の密度が, 内部では一定 (BCCA の方が低密度) であるが, 外殻部分で急激に減少することがわかった. また, 外殻部分の大きさは, BCCA の方が広がっている.

次に, 集合塵の断面積  $A$  を求める. 不規則形状をした集合塵の断面積は方向によって異なる. そこで, 直交する3軸方向について以下の操作を行い, 得られた値の平均値を断面積と定義する. まず, ある軸方向に直交する面上に集合塵の射影を作り, これを囲む最小の円を描く. この円内にランダムに点を振り, 影の黒い部分に当たった場合と空白の白い部分に当たった場合との比から

影の部分の面積を推定する。これをこの方向への集合塵の断面積とする。

一般に、空隙のない均質な球粒子では  $A/N \sim N^{-1/3}$  となり、個々の基本粒子が識別できるほどに希薄な密度を持った集合体では、 $A/N \sim$ 一定となる。シミュレーションの結果によると、BPCA では集合塵の断面積  $A$  が、構成粒子数が増すにつれて  $A \sim N^{2/3}$  という球粒子の特徴に近づき、BCCA では  $A \sim N$  という希薄集合体の特徴に近づくことがわかった。

もちろん、計算機の中で作られたような生成過程を経て、現実の集合塵が生まれたという直接的な証拠はない。ただ、このようにして定義された不規則さを持った塵を、一つのモデルとして、従来の均質球モデルの塵とは異なる特性を扱うことができる。例えば、これらのフラクタル塵モデルを用いると、光散乱において、球とは異なる集合塵の形状・構造が引き起こす不規則さの特徴を定量的に予測することができる。これらを用いて、不規則形状塵が関与する室内実験や天体現象の観測量から、塵の特徴を推測する試みが広く行われている。

### 3. フラクタル集合塵による光散乱

#### 3.1 Discrete dipole approximation (DDA)

さて、上記のようにして定義されたフラクタル塵の光散乱特性を検討しよう。一般に、不規則形状体の光散乱特性を、波動方程式の境界値問題として扱うことは難しい。そこで、discrete dipole approximation (DDA) という手法が提唱された<sup>3)</sup>。これは、立方格子状に並べた微小電気双極子の集団で、不規則形状体を近似し、これらの双極子の集団と、外部からの電磁波の相互作用を数値計算によって求めていく手法である。詳しい定式化の内容は文献<sup>4)</sup>を参照していただくとして、ここでは、まず DDA の骨格を簡単に説明する。

まず、不規則形状体を立方格子状に並んだ  $N$  個の微小電気双極子で表す。配置する双極子の間隔は対象とする波の波長よりも小さくなければいけない。個々の双極子  $j$  は、偏極テンソル (polarizability tensor)  $\alpha_j$  を持つので、位置  $j$  における電場を  $\mathbf{E}_{\text{ext},j}$  とすると、双極子  $j$  の双極子モーメント (dipole moment) は、 $\mathbf{P}_j = \alpha_j \mathbf{E}_{\text{ext},j}$  となる。ここで、 $\mathbf{E}_{\text{ext},j}$  は、入射波の電場と他の  $(N-1)$  の双極子が作る電場の重ね合せである。 $\alpha_j$  は、塵を構成する巨視的な物質質量である光学特性 (誘電率  $\epsilon$ ) から、Clausius-Mossotti の関係に、放射反跳 (radiative reaction) の項を加えた形で定義される<sup>4)</sup>。

入射波の電場によって、個々の双極子が励起され、そ

の効果は他の双極子に与えられる。ある双極子に着目すると、入射する外場とともに、他の双極子の放つ電場によって励起された電場を、他の双極子に与返すので、再度その反作用を受ける。これを繰り返しつつ、ある平衡状態の双極子モーメントが達成される。すなわち、

$$\mathbf{P}_j = \alpha_j (\mathbf{E}_{\text{inc},j} - \sum_{k \neq j} A_{jk} \mathbf{P}_k), \quad (3)$$

$\mathbf{E}_{\text{inc},j}$  は、 $j$  番目の双極子の位置における入射波の電場である。行列  $A_{jk}$  は、 $A_{jk} \mathbf{P}_k$  が、 $k$  番目の双極子が、 $j$  番目の位置に作る電場を表すように定義される。DDA を解くということは、平衡状態における個々の双極子の  $\mathbf{P}_j$  を正確に求める、ということになる。

すぐ気付くことだが、この近似法の精度をみるには、球粒子について DDA を実行し、Mie 法で得られた結果と比較すればよい。図 3 は、 $N=136$  から 2,320 にしたとき、DDA で計算した  $Q_{\text{ext}}$  (減光係数) と、 $Q_{\text{abs}}$  (吸収係数) を、Mie の計算結果と比較したものである<sup>4)</sup>。横軸はサイズパラメータ  $x$  で  $x=2\pi a/\lambda$  ( $a$  は集合塵と等質量の球の半径、 $\lambda$  は波長) である。ここで、減光係数は、前方散乱光の強度とエネルギー保存則から求め、吸

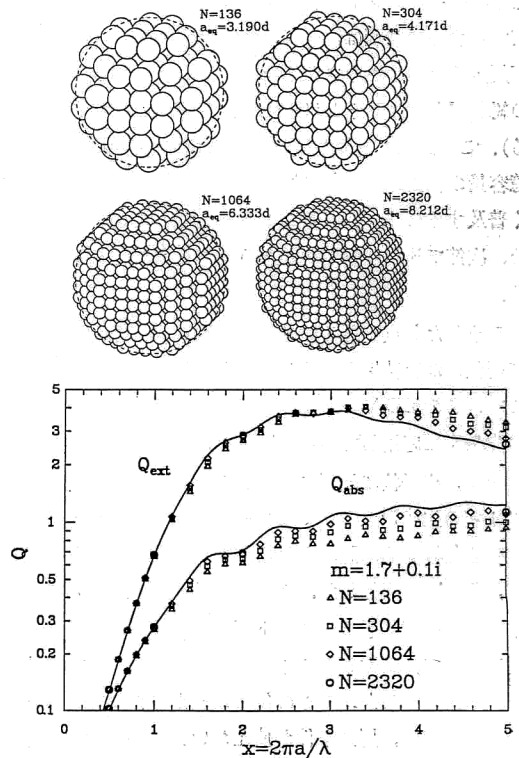


図 3 Mie の計算結果 (実線) と、DDA (構成粒子数  $N$ ) との比較<sup>4)</sup> ( $Q_{\text{ext}}$ ,  $Q_{\text{abs}}$  の定義は本文参照)

収係数は、個々の双極子によるエネルギー減衰の和として表される。詳しい導き方は文献<sup>4)</sup>を参照されたい。

さて図3を見て気付くことは、サイズパラメータ  $x$  が小さい範囲では、 $N$  が小さくても DDA は Mie と同じ結果を与えることである。また、 $x$  が大きくなると両者の差は増し、この傾向は  $N$  が小さいほど著しいこともわかった。DDA では、散乱体の境界面を立方格子上に置いた双極子群で表現するために、実際の表面の滑らかさを十分に表現できない。このことがここで現れた差の一因である。また、電気双極子だけを考慮して、他の多重極子（例えば磁気双極子や電気四重極子など）を無視したために生じた誤差だとも考えられる<sup>7)</sup>。これらを考慮した DDA の改良作業が現在も続いている。

上記の議論を参照すると、できるだけ多くの双極子（大きな  $N$ ）を用いて不規則形状体を表せば、DDA の精度の向上が期待できる。しかし、構成双極子の総数  $N$  を大きくすることは、数値計算に用いる計算機の能力の点から制約される。まず、 $N$  を大きくすれば、必要な記憶容量が大きくなる。おおまかにいって、計算に必要な記憶容量は、ほぼ  $N$  の3乗で増えていく。一方、平衡な双極子モーメント  $P_j$  を得るために行う反復計算が収束するまでの時間は、 $\sim N \ln N$  で増加する。すなわち、不規則形状体の大きさが10倍になると、構成基本粒子の総数  $N$  はおよそ1,000倍となる（BPCA を考えている）。この結果、計算時間は6,900倍にも増大する。記憶容量の膨大さとこの計算時間の長大さが、DDA が広く普及することを妨げるネックとなっている。このため、次節で述べる簡便法がどうしても必要になるのである。

こうした欠点があるにせよ、DDA が Mie と比較して遜色のない結果を与えることが理解されたと思う。そこで、この DDA を、1節で求めたようなフラクタル塵の光散乱に応用してみた。問題は、フラクタル塵の構成粒子が、格子状に配列されていないことである。フラクタル塵の生成過程のシミュレーションでは、個々の構成粒子の位置座標は記録される。この位置に双極子を置いて、DDA を実行した。格子状に並んだ双極子群では、平衡状態の双極子モーメント  $P_j$  を反復計算で求める過程において、周期条件を用いて計算を簡略化することができる。ところが、任意の位置に置かれたフラクタル塵の双極子では、周期条件が使えない。このため、通常の DDA に用いる双極子を格子状に配列した場合に比べて、フラクタル塵の光散乱を扱う際に、必要となる計算機容量・計算時間は多くなる。こうした事情から、大き

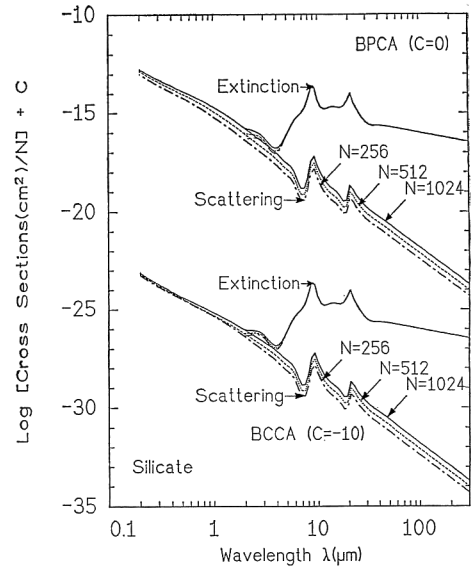


図4 DDA で計算したフラクタル塵の散乱特性<sup>8)</sup> “Cross sections” は、 $C_{\text{ext}}=Q_{\text{ext}} \times$  断面積、 $C_{\text{sca}}=Q_{\text{sca}} \times$  断面積と定義。BCCA の値は、対数目盛で  $-10$  だけ移動 ( $C=-10$ )。

なフラクタル塵の光散乱特性を DDA で計算することがますます難しくなっている。

図4は、図2に示したようなフラクタル塵の  $C_{\text{ext}}/N$  (図では extinction)、 $C_{\text{sca}}/N$  (図では scattering) を DDA で計算した結果である<sup>8)</sup>。  $N$  によらずに結果の曲線が重なることは、基本粒子の大きさ（ここでは半径  $0.01 \mu\text{m}$ ）にあまりよらずに散乱の諸特性が決まることを示している。構成粒子数が256個から1,024個と小さいのは、DDA の計算を実行した計算機の制約のためである。この構成粒子数  $N$  を特性半径  $r_s$  に換算すると、BPCA で  $0.13 \sim 0.19 \mu\text{m}$ 、BCCA で  $0.20 \sim 0.53 \mu\text{m}$  である。

### 3.2 簡便法

DDA を適用する際、配置する双極子の間隔は、対象とする波の波長よりも小さくしなければいけない。このため、一つの双極子が占める空間は小さくなり、大きな不規則体の形状を表すためには数多くの双極子が必要となる。上でみたように、多くの双極子が関与してくると、DDA を実行するうえで不都合が生じる。計算機の容量や計算時間の制限は、大きな不規則塵の光散乱を DDA で扱うことが困難であることを示唆する。そこで、より簡便な方法で不規則塵の光散乱を扱う手法が提案された<sup>6)</sup>。

まず、任意のフラクタル塵について、式(1)を参照し

つつ、その特性半径  $r_c$  を求める。ここで、 $K$  は  $5/3$  とした。次いで、フラクタル塵の空隙率  $p$  を求める。その後、このフラクタル塵を、半径  $r_c$  で誘電率  $\bar{\epsilon}$  を持った均質な球で置き換える。誘電率  $\bar{\epsilon}$  は、真空基盤内に、誘電率  $\epsilon$  の微粒子が体積充填率  $f(=1-p)$  で混在するとして、Maxwell-Garnett の平均誘電率近似 (以下 MG 則) から求める<sup>8)</sup>。

ここで、MG 則が成り立つためには、誘電率  $\epsilon$  の微粒子 (ここではフラクタル塵の基本粒子に対応) の大きさは波長よりも小さくなければならない。最後に、この仮想球粒子に Mie 理論を適用して、各種の散乱に関する係数を計算する。この手法を MG-Mie 法と呼ぶ。このような簡易な方法で、複雑な形状・構造を持ったフラクタル塵の光散乱が扱えるということは驚きである。以下では、DDA で得られた結果と、MG-Mie で得られた結果とを簡単に比較検討してみる。

図 5 には、図 4 で使った BPCA と BCCA のフラクタル塵について、二つの方法で求めた  $C_{abs}$  と  $C_{sca}$  の波長依存性が比較されている<sup>8)</sup>。 $C_{abs}$  については、サイズパラメータが増加する単波長側を除いて、広い波長域において、両者の結果はよい一致を示している。波長  $10 \mu\text{m}$  および  $28 \mu\text{m}$  付近のずれは、塵物質の例として用い

たシリケート鉱物の光学定数の吸収ピークの位置に対応する。MG-Mie 法では、物質の光学定数を“真空で薄める”ような操作をしているために、物質固有の強いスペクトル特性は再現できない。

$C_{sca}$  についての計算結果を見ると、BPCA のような空隙率の小さい集合塵では、MG-Mie で求めた  $C_{sca}$  の値と、DDA で求めた値との一致はよい。また、BCCA でも、ある波長より長い波長域では、二つの方法で求めた  $C_{sca}$  の値は一致する。しかし、サイズパラメータが大きくなると、MG-Mie が DDA に比べて小さい値をとる。この傾向は  $N$  の増加によって顕著となる。これは、MG-Mie 法で用いる仮想球の大きさの定義の仕方によると思われるが、定量的な検討はまだない。

このように、MG-Mie 法はその簡易な計算方法にもかかわらず、DDA の結果とよく似た値を与える。大きなサイズパラメータ領域や塵物質の強い吸収特性領域では、MG-Mie の結果に誤差が入ることを覚えておけば、この手法を不規則塵の光散乱特性を近似的に求める手段として利用できる。さらに加えると、 $C_{abs}$  のように、入射エネルギーを散乱角について積分したような量を推定する際には、MG-Mie 法は威力を発揮する。一方、散乱角度ごとの分配にかかわる量を調べる場合には、 $C_{sca}$  で見たように、MG-Mie と DDA との差は大きい。この差を小さくする試みが提案されている<sup>8)</sup>。

#### 4. おわりに

以上見てきたように、不規則形状体の形状・構造の不規則さをフラクタル次元表示で定量化し、DDA 法を用いてその光散乱特性を推定することができる。もちろん、フラクタル塵に限らず、波長と同程度の大きさの任意の形状体に対しても、微小電気双極子群の配置によって、その形状・構造を近似することができれば、その光散乱特性は DDA によって導くことができる。

ただ、DDA には、数値計算を実行するために大きな計算機容量と長い計算時間を必要とするという弱点がある。このため、DDA を簡単に使いこなせないという雰囲気がある。しかしながら、最近のパーソナルコンピュータの精度向上をみれば、ここで挙げた記憶容量や計算時間の制約を、それほど重大に考える必要もないであろう。DDA のプログラムは Draine らの努力によって公開されており、容易に手に入る。手元に、独りで使用できるコンピュータがあれば、試しに DDA を走らせてみるのもおもしろい。また、MG-Mie 法は、Mie の計算ができる環境では今すぐにも取り組むことができる。

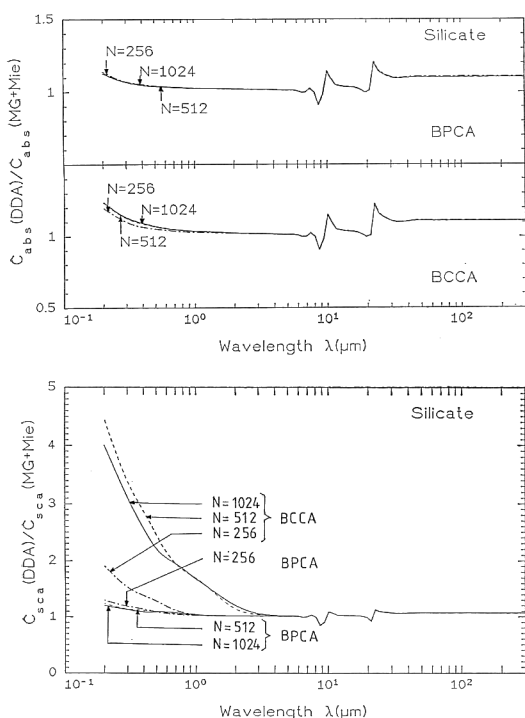


図 5 図 4 と同じフラクタル塵について DDA と MG-Mie の計算結果の比較<sup>8)</sup>

その適用限界に注意しつつ、不規則体による光散乱の実用例にチャレンジされることをお勧めしたい。

### 文 献

- 1) H. C. van de Hulst: *Light Scattering by Small Particles* (Dover Publ., Inc., New York, 1981).
- 2) *Cosmic Dust Catalog*, Vol. 10 (No. 1), W7074F6 (NASA, Johnson Space Center, Texas, 1989).
- 3) E. M. Purcell and C. R. Pennypacker: "Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains," *Astrophys. J.*, **186** (1973) 705-714.
- 4) B. T. Draine: "The discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains," *Astrophys. J.*, **333** (1988) 848-872.
- 5) J. Blum, Th. Henning, V. Ossenkopf, R. Sablotny, R. Stognienko and E. Thamm: "Fractal growth and optical behaviour of cosmic dust," *IFIP Trans. A*, **Comput. Sci. Technol.**, **A-41** (1994) 47-59.
- 6) T. Mukai, H. Ishimoto, T. Kozasa, J. Blum and J. M. Greenberg: "Radiation pressure forces of fluffy porous grains," *Astron. Astrophys.*, **262** (1992) 315-320.
- 7) H. Okamoto, A. Macke, M. Quante and E. Raschke: "Modeling of backscattering by non-spherical ice particles for the interpretation of cloud radar signals at 94 GHz. An error analysis," submitted to *Contrib. Atmos. Phys.*
- 8) T. Kozasa, J. Blum and T. Mukai: "Optical properties of dust aggregates I. Wavelength dependence," *Astron. Astrophys.*, **263** (1992) 423-432; T. Kozasa, J. Blum, H. Okamoto and T. Mukai: "Optical properties of dust aggregates II. Angular dependence of scattered light," *Astron. Astrophys.*, **276** (1993) 278-288.