arXiv:2601.01515v1 [astro-ph.GA] 4 Jan 2026

长波极限下椭球形核-壳粒子的吸收、散射和偏振

A.P. Jones[1] 和 N. Ysard[2]

[1] 巴黎萨克雷大学，法国国家科学研究中心，空间天体物理研究所，91405，法国奥赛。电子邮件：anthony.jones@universite-paris-saclay.fr[2] IRAP，图卢兹大学，法国国家科学研究中心，UPS，9号科隆内尔·罗什大道，BP 44346，31028图卢兹，法国

收稿日期：2025年2月10日；接受日期：2025年12月25日

摘要

背景。 对于非球形和非均匀粒子，数值计算其光学性质（消光、吸收、散射和偏振效率）通常非常耗时。因此，在可行的情况下，解析方法更值得采用。目的。 我们提供了一种解析工具，用于推导长波长极限（$a \ll \lambda$）下任意轴比的包覆椭球形粒子的光学性质，其中幔层形态相对于颗粒核可以是共焦、同轴或恒定厚度。方法。 我们开发了一种解析方法，用于计算椭球形核/幔层粒子的光学性质。

结果。 解析方法与 DDSCAT 数值计算结果吻合良好，并且在有限条件下也与采用布鲁格曼有效介质理论（EMT）得到的结果相当。

结论。 本文提出的解析方法为研究长波长（$\lambda \gtrsim 8\mu$m）下核/幔层椭球形粒子的光学性质和偏振性质提供了实用工具；与相应的数值方法相比，该方法更简单、实现速度更快。我们提醒读者，不宜使用有效介质理论方法来近似核/幔层粒子的光学性质。

关键词。 星际介质：丰度 – 星际介质：尘埃、消光

1. 引言

P星际尘粒和星周尘粒造成的偏振目前
a 是天文学领域备受关注的课题，因为新
d数据的到来已超出当前模型连贯解释这些
p数据的能力。显然，采用均质、单一的
c组成粒子过于简单化（例如，Jones 2011），而且
p或许这正是最限制我们当前认知的因素。宇宙
m尘埃确实远非简单，模拟真实的尘埃
s形状（准球形、椭球形、椭圆体形、不规则形，.....）
a以及复杂结构（均质、带幔层的、聚集体、聚
g集的核/带幔层结构等，例如 Ysard 等，2018、2019）可以
c计算成本高昂，尤其是使用离散
c偶极近似（例如 Draine 和 Flatau 000，DDSCAT）或 T 矩阵（Mishchenko 等，
2996）等工具时，计算成本取决于所需的体积单元分辨率。完整的
i取决于所需的体积元分辨率。完整的输入-
v调查因此需要耗时且计算量庞大的.....
t 探索过程，以遍历极其多样的参数空间（波长、尺寸、形状、结构；例如 Ysard 等，2018、2019；Carpine 等，2025）。

大约半个世纪前，Asano 和 Yamamoto（1975年）及 Asano（1979年）提出并评估了均质、各向同性椭球形颗粒的光散射性质理论及其精确解；不久之后，Onaka（1980年）和 van de Hulst（1981年）又给出了包覆椭球体散射与吸收性质的理论及精确解。借助这些方法，人们得以确定并探索尺寸参数为 $\pi(l/\lambda) < 30$的均匀椭球体的光学性质（例如 Asano 1979年），其中l 是表征粒子尺寸的量，λ是入射辐射的波长。利用 Asano 和 Yamamoto 的解析解（1975年），Rogers 和 Martin（1979年）研究了椭球形颗粒产生的消光和偏振，并通过假设尘埃由均质椭球形尘粒构成且尘粒排列良好，对星际尘粒可能的形状和折射率作出了一些限制。

遵循 THEMIS 模型（星际固体异质尘埃演化模型；Jones 等（2013）；Köhler 等，2015；Jones 等（2017）；Ysard 等（2024））的思路，我们不对尘埃的复杂性进行全面研究，而是朝这个方向迈出一小步，考察（氢化）非晶碳（a-C(:H)，Jones，2012a、b、c）[1] 带幔层的椭球形非晶硅酸盐（a-Sil）颗粒，以及核幔型碳质颗粒的光学和偏振特性（Q_i、i = 消光、散射和吸收，包括其 ∥ 和⊥分量），并使用这些材料推导出的光学常数（Jones，2012a、b、c；Demyk 等，2017a、b及2022）。

本文首先总结并明确列出推导核幔型球形颗粒光学性质所需的方程。van de Hulst（1981）和 Bohren & Huffman（1998）的开创性著作为我们提供了帮助，我们对此深怀感激。下文中，我们在这些作者的研究基础上，进一步拓展了对一些更特殊幔层形状的研究。

本文结构如下：第 2 节概述同轴、共焦和恒定深度包覆椭球体的基本方程；第 3 节给出包覆椭球体的消光、吸收、散射和偏振截面；第 4 节展示计算结果，并将其与

[1] 富脂肪族氢化非晶碳和富芳香族氢化非晶碳分别记为非晶碳和氢化非晶碳。

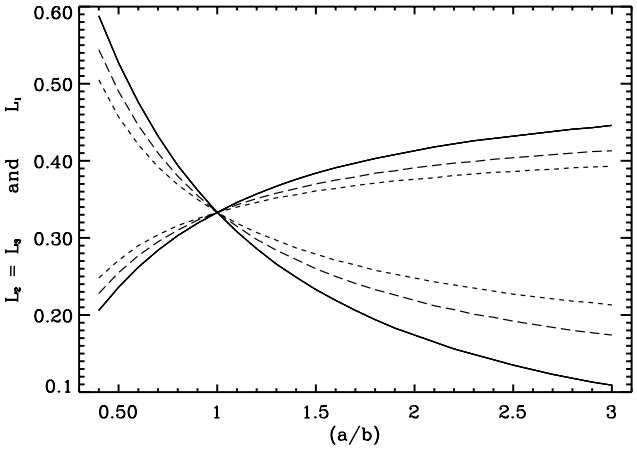


图1. 共轴、共焦和恒定厚度带幔层椭球粒子的 LL_i 因子与a 轴与幔层厚度之比a/d ≃ 3的关系。实线表示共轴情形下核和核&幔层的变化。短（长）虚线表示共焦（恒定厚度）情形下核&幔层的 L_i 因子。L_1 因子随a/b增大而减小，而L_2 和L_3 则增大。

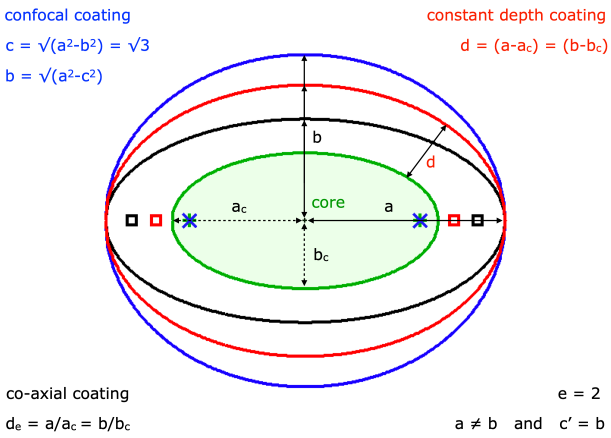


图2. 共焦（蓝色）、恒定厚度（红色）和共轴（黑色）的包覆或带幔层椭球核（绿色）的截面图。椭球半轴为a、b 和$c′$，其中$c′$ 轴垂直于图面。对于共焦情形，线性离心率为c （a^2 –b^2）。彩色符号表示核和核&幔层椭圆截面的焦点。

使用 DDSCAT 进行的数值计算结果以及有效介质理论和体积平均方法进行比较；第 5 节总结本文并给出结论。

2. 包覆椭球体的方程

我们首先考察未包覆或裸椭球体的一般方程，并重点关注后者。对于椭球形粒子，三个半长轴（a、b 和c）长度各不相同（$a \neq b \neq c$），粒子形状及体积V相对于正交笛卡尔坐标轴x、y和z定义如下

$$\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}+\frac{z^2}{c^2}=1 \quad \text{and} \quad V=\frac{4}{3}\pi(abc), \tag{1}$$

分别。表面积的确定要复杂得多（见后文）。对于两个半长轴长度相等的椭球形颗粒，其$a \neq b$ 且 $c = b$，其形状和体积定义如下

$$\frac{x^2}{a^2}+\frac{1}{b^2}(y^2+z^2)=1 \quad \text{or} \quad x^2+\left(\frac{a}{b}\right)^2(y^2+z^2)=a^2 \quad \text{and}$$

$$V=\frac{4}{3}\pi\left(a\,b^2\right), \tag{2}$$

分别为。长球形（e_P，$a > b$）和扁球形椭球体（e_o，$a < b$）的离心率为：

$$e_p=\left(1-\frac{b^2}{a^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{and} \quad e_o=\left(\frac{b^2}{a^2}-1\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{3}$$

鉴于在椭球体方程中不再需要考虑c 轴，按照惯例，我们用c 表示线性离心率$c = \sqrt{}$（a^2 –b^2）。在以下任一方程中提及第三个半长轴时，现将其标记为$c′$。

对于椭球形粒子，用于计算粒子极化率的形状相关因子L_i （i =1、2 或 3）之和为 1，即：

$$\sum_{i=1,2,3} L_i = 1. \tag{4}$$

对于球形粒子（$a = b = c′$），沿粒子三个正交轴的形状因子相等，即 $L_1 = L_2 = L_3 = \frac{1}{3}$，LL。

对于长旋转椭球（$a\,b$ 且 $b\,c$），沿 a 轴（即对称轴）的形状因子 L为

$$L_1=\frac{(1-e_p^2)}{e_p^2}\left[-1+\frac{1}{2e_p}\log\left\{\frac{(1+e_p)}{(1-e_p)}\right\}\right], \tag{5}$$

对于扁旋转椭球（$a < b$ 且 $b = c′$），沿对称轴的形状因子 L_1,同样可表示为

$$L_1=\frac{(1+e_o^2)}{e_o^2}\left[1-\frac{1}{e_o}\arctan(e_o)\right]. \tag{6}$$

此处采用 van de Hulst（1981年）的半轴约定，而非 Bohren & Huffman（1998年）的约定。对于长旋转椭球和扁旋转椭球，L_2 和 L_3 因子都只是 $L_2 = L_3 = \frac{1}{2}$（1 − L_1）。对于包覆或带幔层的椭球形粒子，形状因子 L_i对于所讨论的特定类型的旋转椭球核和幔层具有相同的数学形式[2]，但当核与幔层的偏心率不同时，其数值显然不同。下文将把颗粒包覆层称为幔层，以避免与颗粒核的下标混淆；从此以后，这些非均质结构称为核-幔层结构或 CM 粒子。按照 THEMIS 对 CM颗粒的命名惯例，非晶硅酸盐核和氢化非晶碳核上的非晶碳幔层分别记为 a-Sil/a-C 和 a-C:H/a-C。

图1展示了共轴、共焦和等深包层椭球形粒子情形下 L_i 因子随(a/b)的变化，其中幔层深度比(a/d)为 ≃ 3，即采用相对较厚的幔层，以凸显核与整体（核+幔层）因子之间的差异。在共轴情形下，各个方向上的外半径与核半径之比均固定，因此核和幔层的L_i 因子相同。

[2] 注意：这仅在核与幔层均为椭球形时严格成立。对于椭球形核心上的恒定厚度幔层，这一结论不再成立，因为幔层严格来说并非椭球形，尽管在薄幔层情况下，其表面非常接近椭球形。

如图2所示，共焦幔层会使粒子趋于球形，等深包层也有此作用，但效果不如共焦形式明显。请注意，随着a/b 增大，L_1 因子减小，而L_2 和L_3 增大。值得特别注意的是，在等深包层和共焦幔层情形下，核与幔层的L_i 因子存在偏移，且在共焦形式下这一效应更为明显。

现在我们重点讨论椭球形颗粒的包幔形态，以下称为核，其半轴为 a_c 和 b_c，并带有厚度均匀或不均匀的幔层 d；幔层的离心率不一定与核相同。图2展示了本文考虑的三种不同幔层厚度情形：

– 同轴：幔层与核的轴比恒定，d_e；– 共焦：核与幔层具有相同的线性离心率c；以及– 恒定厚度：垂直于表面的幔层厚度d恒定。

以下各小节将分别介绍这三种幔层形态的细节。

2.1. 同轴包幔椭球体

对于同轴 CM 椭球形粒子，核与幔层半轴之比d_e固定，即

$$d_e = \left(\frac{a}{a_c}\right) = \left(\frac{b}{b_c}\right) \tag{7}$$

幔层形状由以下方程定义：

$$\frac{x^2}{(a_c\, d_e)^2} + \frac{1}{(b_c\, d_e)^2}(y^2 + z^2) = 1 \quad \text{or}$$

$$x^2 + \frac{(a_c\, d_e)^2}{(b_c\, d_e)^2}(y^2 + z^2) = (a_c\, d_e)^2 = a^2. \tag{8}$$

核、整体（核 + 幔层）和幔层的体积 V_c、V_t 和 V_m 分别为

$$V_c = \frac{4}{3}\pi\,(a_c\, b_c^2) = \frac{4}{3}\pi\,\frac{(a\, b^2)}{d_e^3}, \quad V_t = \frac{4}{3}\pi\left(a\, b^2\right), \quad \text{and}$$

$$V_m = (V_t - V_c) = \frac{4}{3}\pi\left(a\, b^2\right)\left(1 - \frac{1}{d_e^3}\right). \tag{9}$$

对于共轴椭球体，各方向上的比值 d_e 相同，幔层厚度取决于径向，在长旋转椭球的长轴 a 方向最厚，在短轴 b 和 c' 方向最薄（见图2）。扁旋转椭球则相反。对于同轴包幔长扁椭球体（$a > b$），核与幔层具有相同的轴比，即 $d_e = b_c/a_c = b/a$，L 因子（$L_1, L_2 = L_3$）中的偏心率 e^p 对颗粒核及其幔层相同，

$$e_p^2 = \left[1 - \left(\frac{b}{a}\right)^2\right] = \left[1 - \left(\frac{b_c}{a_c}\right)^2\right]. \tag{10}$$

对于同轴包覆扁长椭球体（$a < b$），L 因子（$L_1, L_2 = L_3$）中的偏心率e_o与同轴包覆长椭球体的情况一样，对粒子核和幔层相同，

$$e_o^2 = \left[\left(\frac{b}{a}\right)^2 - 1\right] = \left[\left(\frac{b_c}{a_c}\right)^2 - 1\right]. \tag{11}$$

2.2. 共焦包覆椭球体

对于共焦椭球形颗粒，核与幔层的焦点重合，也就是说，它们具有相同的线性离心率c，短半轴长度可表示为

$$b_c = \sqrt{(a_c^2 - c^2)} \quad \text{and} \quad b = \sqrt{(a^2 - c^2)}. \tag{12}$$

长轴和短轴方向上的幔层厚度（$a - a_c$）和（$b - b_c$）不相等，核与幔层的半轴比之比也不相等，即（a/a_c）≠（b/b_c）。在这种情况下，核形状由以下方程定义：

$$\frac{x^2}{a_c^2} + \frac{y^2}{(a_c - c)^2} + \frac{z^2}{(a_c - c)^2} = 1 \quad \text{or}$$

$$x^2 + \frac{a_c^2}{(a_c - c)^2}(y^2 + z^2) = a_c^2 \tag{13}$$

而地幔形状为

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{(a - c)^2} + \frac{z^2}{(a - c)^2} = 1 \quad \text{or}$$

$$x^2 + \frac{a^2}{(a - c)^2}(y^2 + z^2) = a^2. \tag{14}$$

核、整体和地幔的体积分别为 V_c、V_t 和 V_m，由下式给出

$$V_c = \frac{4}{3}\pi\,(a_c\, b_c^2) = \frac{4}{3}\pi\left[a_c\,(a_c^2 - c^2)\right],$$

$$V_t = \frac{4}{3}\pi\left[a\,(a^2 - c^2)\right], \quad \text{and}$$

$$V_m = (V_t - V_c) = \frac{4}{3}\pi\left[a^3 - c^2\,(a - a_c) - a_c^3\right]. \tag{15}$$

线性离心率 c 在$a_c \geqslant b_c$ 以及 $a \geqslant b$时为实数，因此，式（12）严格来说仅适用于长旋转椭球。然而，鉴于c^2 对于扁旋转椭球为负值，并且在式（13）至（15）中始终作为减项，式（15）确实可为所有带地幔的椭球形尘粒给出有效体积。[3] 对于此类椭球体，地幔厚度取决于径向方向；对于长旋转椭球，沿短轴方向的地幔较厚（见图2）。对于扁旋转椭球，沿长轴方向的地幔较厚。对于共焦带地幔长旋转椭球，地幔和核的偏心率 $e_{p,m}$ 和 $e_{p,c}$ 为

$$e_{p,m}^2 = \left[1 - \left(\frac{a^2 - c^2}{a^2}\right)\right] = \left(\frac{c}{a}\right)^2 \quad \text{and}$$

$$e_{p,c}^2 = \left[1 - \left(\frac{a_c^2 - c^2}{a_c^2}\right)\right] = \left(\frac{c}{a_c}\right)^2. \tag{16}$$

对于共焦带地幔扁旋转椭球，整个颗粒和核的偏心率 $e_{o,m}$ 和 $e_{o,c}$ 为

$$e_{o,m}^2 = \left[\left(\frac{a^2 - c^2}{a^2}\right) - 1\right] = -\left(\frac{c}{a}\right)^2 \quad \text{and}$$

$$e_{o,c}^2 = \left[\left(\frac{a_c^2 - c^2}{a_c^2}\right) - 1\right] = -\left(\frac{c}{a_c}\right)^2. \tag{17}$$

同样，负值并不会造成问题，因为c^2 对于扁旋转椭球而言为负。

[3] 唯一的不便之处在于，我们无法再绘制扁旋转椭球的焦点，因为它们落在复数域中。

2.3. 恒定深度包覆椭球体

在星际介质中，吸积（气相物种或纳米颗粒）、各向同性辐射场中的光处理，或溅射造成的侵蚀等物理过程，都会导致恒定深度表层的形成或侵蚀。因此，这似乎是最符合天体物理情形的情况。然而，这也是三种情况中最复杂的一种。这是因为，在恒定厚度的包覆核/幔层粒子中，核或幔层呈椭球形，而另一部分虽然在幔层很薄时其表面可能极其接近椭球面，却并非严格呈椭球形。因此，对于幔层厚度d恒定的包覆椭球粒子，存在两种可能的情况，而这两种情况都

$$d = (a - a_c) = (b - b_c) \tag{18}$$

由于该表达式只包含核心的半轴以及沿这些半轴方向的幔层厚度，因此并未说明中间区域的行为。两种可能情况之间的差异颇为微妙，因为无论是 a 和b ，还是 a_c 和 b_c ，都定义了一个椭球体。鉴于需要直接比较三种 CM 情况，而且幔层通常相对于核心尺寸较薄，例如 THEMIS 模型中的大颗粒（即，$130 - 150$ nm 半径的核心上包覆着厚度为 $5 - 20$ nm 的幔层），本文仅考虑椭球形核心的情况。此时，核心被视为具有精确的椭球形，其形状和体积 V_c由以下方程确定：

$$\frac{x^2}{a_c^2} + \frac{1}{b_c^2}(y^2 + z^2) = 1 \quad \text{or}$$

$$x^2 + \frac{a_c^2}{b_c^2}(y^2 + z^2) = a_c^2, \quad V_c = \frac{4}{3}\pi\,(a_c\, b_c^2). \tag{19}$$

正如上文所述，有趣之处就在这里。利用斯坦纳公式[4] 可以精确确定幔层体积。该公式适用于任何凸形状上的包覆层，只要幔层沿核心表面法线方向的厚度在该表面各点处均相同，其表达式为

$$V_{\rm coat} = S_c\, d + \pi\, l\, d^2 + \frac{4}{3}\pi\, d^3 \tag{20}$$

其中，S_c 是椭球形核心的表面积，l 是平均长度，d 是幔层厚度。第一项给出了薄幔极限（$d \ll a_c$，即体积 = 表面积 ×厚度），第三项则是厚幔极限（$d \gg a_c$，即适用于球形颗粒）。在讨论椭球体的表面积计算后，我们将回到第二项。长球形和扁球形椭球形核心的表面积$S_{c,p}$和$S_{c,o}$分别为

$$S_{c,p} = 2\pi\, b_c^2 \left(1 + \frac{a_c}{b_c\, e_p} \arcsin e_p\right) \quad \text{and}$$

$$S_{c,o} = 2\pi\, b_c^2 + \pi\, \frac{a_c^2}{\epsilon_o} \log\left(\frac{1+\epsilon_o}{1-\epsilon_o}\right) \ \text{where} \ \epsilon_o^2 = 1 - \frac{a_c^2}{b_c^2}. \tag{21}$$

为与上述定义的偏心率保持一致，e_o，其中$\epsilon_o = (a_c/b_c)\, e_o$，$S_{c,o}$ 的方程可改写为

$$S_{c,o} = 2\pi\, b_c^2 + \pi\, \frac{a_c\, b_c}{e_o} \log\left[\frac{(b_c/a_c) + e_o}{(b_c/a_c) - e_o}\right]. \tag{22}$$

[4] 事实证明，在糖果行业中，该公式对于确定覆盖一颗M&M所需的涂层用量至关重要。

回到式（20）中的第二项，这一项确实更复杂，但从几何角度看，式（20）中的平均长度l是平均曲率（长度的倒数）与表面积的乘积。对于椭球体（$a_c \geqslant b_c \geqslant c_c'$），可使用以下方程计算（参见下方相关脚注中的链接）：

$$l(a_c, b_c, c_c') = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\, \sqrt{([a_c^2\cos^2\phi + b_c^2\sin^2\phi]\sin^2\theta \ldots}$$

$$\ldots + (c_c')^2\cos^2\theta)\, d\theta\, d\phi, \tag{23}$$

该方程可以通过数值方法求解。因此，在此处给出的结果中，幔层体积是使用经过轻微修改的coating.f90代码计算的，该代码由F. X. Timmes公开提供。[5] 或者，使用Thomsen公式，椭球体表面积$S_{\rm ell}$可近似为，误差在 ≈ 1%以内：

$$S_{\rm ell} = 2\pi\, \left(a_c^p b_c^p + a_c^p c_c^p + b_c^p (c_c')^p\right)^{1/p}, \tag{24}$$

其中，将$p = 1.6075$设为该值时，相对误差小于1.42%（Thomsen，2004：见脚注）；将$p = 8/5$设为该值时，最大误差为 −1.178%（Cantrell，2004：见脚注）。[6] 粒子的核、幔层和总体（核 + 幔层）体积V_c、V_m 和V_t分别为

$$V_c = \frac{4}{3}\pi\,(a_c\, b_c^2), \quad V_m = V_{\rm coat}, \quad \text{and} \quad V_t = V_c + V_{\rm coat}. \tag{25}$$

对于恒定幔层厚度d的包覆长旋转椭球体，幔层和核的离心率$e_{p,m}$ 和$e_{p,c}$分别为

$$e_{p,m}^2 = \left[1 - \left(\frac{b_c + d}{a_c + d}\right)^2\right] \quad \text{and} \quad e_{p,c}^2 = \left[1 - \left(\frac{b_c}{a_c}\right)^2\right]. \tag{26}$$

对于等深包覆扁椭球体情形，幔层和核的离心率$e_{o,m}$ 和$e_{o,c}$分别为

$$e_{o,m}^2 = \left\{\left[\frac{(b_c + d)}{(a_c + d)}\right]^2 - 1\right\} \quad \text{and} \quad e_{o,c}^2 = \left[\left(\frac{b_c}{a_c}\right)^2 - 1\right]. \tag{27}$$

2.4. 地幔体积归一化

通过采用体积相等的幔层，对不同幔层情形进行了比较；幔层体积以三种情形中数学处理要求最高的等深包层情形下的幔层体积为准。因此，首先定义幔层厚度d，并按照上文所述（第2.3节）计算幔层材料体积V_m。随后利用该体积确定共轴情形下幔层的半轴比d_e（第2.1节），

$$d_e = \left(\frac{3}{4\pi}\,\frac{V_m}{a_c\, b_c^2} + 1\right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{V_t}{V_m}\right)^{\frac{1}{3}}, \tag{28}$$

随后用于确定共焦核心—地幔情形（第 2.2 节）中的核和幔层线性离心率 c，其为尚待确定的共焦情形幔层半轴比 d_{ec} 的函数，其中

$$c = \sqrt{(a_c^2 - b_c^2)}, \quad a = a_c\, d_{ec}, \quad \text{and}$$

$$b = \sqrt{(a^2 - c^2)} = \sqrt{(a_c^2\, d_{ec}^2 - c^2)}. \tag{29}$$

[5] http://cococubed.asu.edu/code_pages/coating.shtml 对 coating.f90 所做的唯一修改，是调整输入和输出函数，使其与本文开发的例程兼容。[6] http://numericana.com/answer/ellipsoid.htm#ellipsoid

鉴于共焦情形下的幔层体积可表示为

$$V_m = \frac{4}{3}\pi\left(a_c^3\, d_{ec}^3 - a_c\, c^2\, d_{ec} + a_c\, c^2 - a_c^3\right) \tag{30}$$

求得 d_{ec} 需要解一个形式为$d_{ec}^3 + p d_{ec} + q = 0$的三次方程，即

$$0 = d_{ec}^3 - \left(\frac{c}{a_c}\right)^2 d_{ec} + \left[\left(\frac{c}{a_c}\right)^2 - \frac{3\,V_m}{4\pi\, a_c^3} - 1\right],$$

$$\text{with} \quad p = -\left(\frac{c}{a_c}\right)^2 \quad \text{and} \quad q = \left[\left(\frac{c}{a_c}\right)^2 - \frac{3\,V_m}{4\pi\, a_c^3} - 1\right]. \tag{31}$$

利用卡尔达诺公式，这个三次方程有一个实数解

$$d_{ec} = C - \frac{p}{3C} \quad \text{where} \quad C = \left[-\frac{q}{2} + \left(\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^{\frac{1}{3}}. \tag{32}$$

3. 带幔层椭球体的消光、吸收和散射截面

对于一个涂层球状粒子，其核材料的介电函数为 ε_c，幔层材料的介电函数为 ε_m，并嵌入介电函数为 ε_v 的介质中（真空时 $\varepsilon_v = 1$），根据 Bohren & Huffman（1998），该粒子的极化率为

$$\alpha_i = \frac{(V_t/4\pi)\,\{(\varepsilon_m - \varepsilon_v)\,[\varepsilon_m + (\varepsilon_c - \varepsilon_m)\,(L_{c,i} - (V_c/V_t)\,L_{m,i})]}{[\varepsilon_m + (\varepsilon_c - \varepsilon_m)\,(L_{c,i} - (V_c/V_t)\,L_{m,i})][\varepsilon_v + (\varepsilon_m - \varepsilon_v)\,L_{m,i}]} \cdots$$
$$\cdots \frac{+(V_c/V_t)\,\varepsilon_m\,(\varepsilon_c - \varepsilon_m)\}}{+(V_c/V_t)\,L_{m,i}\,(\varepsilon_c - \varepsilon_m)} \tag{33}$$

其中 $i = 1$、2 或 3，且 $\alpha_2 = \alpha_3$。当核与幔层由相同材料构成时，$\varepsilon_c = \varepsilon_m = \varepsilon$，该式简化为

$$\alpha_i = \frac{(V_t/4\pi)\,(\varepsilon - \varepsilon_v)\,\varepsilon}{\varepsilon\,[\varepsilon_v + (\varepsilon - \varepsilon_v)L_i]} = (V_t/4\pi)\,\left[L_i + \varepsilon_v\,(\varepsilon - \varepsilon_v)^{-1}\right]^{-1}, \tag{34}$$

均质椭球体的方程。对于椭球体的每个半长轴，$i = 1$、2 和 3，其中 1 平行于对称轴，2 和 3 垂直于该轴，因此彼此相等，吸收效率因子和散射效率因子分别为；在长波长下，吸收通常占主导地位，散射则相对较弱，具体表示为

$$Q_{\text{abs,i}} = -4x\,\text{Im}(\alpha_i) \quad \text{and} \quad Q_{\text{sca,i}} = \frac{8}{3}x^4\,\text{abs}(\alpha_i^2),$$

$$\text{where} \quad x = \frac{2\pi}{\lambda}\frac{(a+2b)}{3}. \tag{35}$$

相对于粒子对称轴，沿平行方向（||）和垂直方向（⊥）的吸收截面分别为

$$\sigma_{\text{abs},\parallel} = \pi\, b^2\, Q_{\text{abs},1} \quad \text{and}$$

$$\sigma_{\text{abs},\perp} = \pi\,(ab)\,Q_{\text{abs},2} = \pi\,(ab)\,Q_{\text{abs},3}. \tag{36}$$

请注意，在每种情况下，相关截面都是沿该轴投影的截面。同样，沿 ||和 ⊥方向的相应散射截面为

$$\sigma_{\text{sca},\parallel} = \pi\, b^2\, Q_{\text{sca},1} \quad \text{and}$$

$$\sigma_{\text{sca},\perp} = \pi\,(ab)\,Q_{\text{sca},2} = \pi\,(ab)\,Q_{\text{sca},3}, \tag{37}$$

沿 || 和 ⊥ 方向的消光截面为

$$\sigma_{\text{ext},\parallel} = \pi\, b^2\,(Q_{\text{abs},1} + Q_{\text{sca},1}) \quad \text{and}$$

$$\sigma_{\text{ext},\perp} = \pi\,(ab)\,(Q_{\text{abs},2} + Q_{\text{sca},2}) = \pi\,(ab)\,(Q_{\text{abs},3} + Q_{\text{sca},3}). \tag{38}$$

图 3 比较了三种幔层形状在平行方向和垂直方向上的吸收与散射效率因子。等权重的半长轴平均吸收、散射和消光截面可表示为

$$\langle\sigma_{\text{abs}}\rangle = \frac{1}{3}(\sigma_{\text{abs},\parallel} + 2\,\sigma_{\text{abs},\perp}), \quad \langle\sigma_{\text{sca}}\rangle = \frac{1}{3}(\sigma_{\text{sca},\parallel} + 2\,\sigma_{\text{sca},\perp}),$$

$$\text{and} \quad \langle\sigma_{\text{ext}}\rangle = \langle\sigma_{\text{abs}}\rangle + \langle\sigma_{\text{sca}}\rangle. \tag{39}$$

3.1. 幔层球状体的偏振

现在考虑包覆椭球体的偏振性质。鉴于通常认为粒子的消光偏振和吸收偏振分别与 $(\sigma_{\text{ext},\perp} - \sigma_{\text{ext},\parallel})/2$ 和 $(\sigma_{\text{abs},\perp} - \sigma_{\text{abs},\parallel})/2$ 成正比（例如 Guillet 等，2018），我们将消光偏振度定义为 f_{pol}，即

$$f_{\text{pol}} = \frac{\frac{2}{3}\sigma_{\text{ext},\perp} - \frac{1}{3}\sigma_{\text{ext},\parallel}}{\frac{2}{3}\sigma_{\text{ext},\perp} + \frac{1}{3}\sigma_{\text{ext},\parallel}} = \frac{2\pi ab Q_{\text{ext},\perp} - \pi b^2 Q_{\text{ext},\parallel}}{2\pi ab Q_{\text{ext},\perp} + \pi b^2 Q_{\text{ext},\parallel}}$$
$$= \frac{2aQ_{\text{ext},\perp} - bQ_{\text{ext},\parallel}}{2aQ_{\text{ext},\perp} + bQ_{\text{ext},\parallel}}. \tag{40}$$

4. 结果与比较

本研究的主要动机之一，是为在 THEMIS 星际尘埃模型框架[7]（Jones 等（2013年、2017年）；Köhler 等（2014年））及其更新版本 THEMIS 2.0（Ysard 等（2024年））中，高效计算椭球形 CM 尘粒在长波长（$\lambda \gtrsim 8\mu$m）下的光学性质（消光、吸收、散射和偏振）提供一种有效方法。我们采用 Demyk 等（2022年）推导的 10 K 非晶硅酸盐 a-Sil 光学常数，其成分为 80% 顽火辉石型硅酸盐和各 10% 的两种顽火辉石型硅酸盐。这种非晶硅酸盐混合物即 THEMIS 2.0 中的 a-Sil-1，方法比较采用了该混合物，但这并非对 THEMIS 2.0 的测试。对于氢化非晶碳 a-C(:H)，我们采用 Jones（2012a、b、c）的光学常数；对于 a-C 幔层材料，则采用随尺寸变化的有效带隙 0.1 eV，对应半径为 2.5 nm 和 10 nm，分别是 a-Sil 上 5 nm 和 a-C:H 上 20 nm 幔层厚度的一半，正如 Jones 等（2013年）所提出的那样。[8] 因此，按照 THEMIS 命名法，所考虑的具有共焦幔层的椭球形 CM 粒子结构为 a-Sil/a-C 和 a-C:H/a-C，其有效半径与幔层厚度a_{eff}/d 分别为 145 nm/5 nm 和 130 nm/20 nm。

采用离散偶极近似（DDA；Purcell 与 Pennypacker（1973）），并使用 DDSCAT 程序的 7.3.3 版本（Draine 和 Flatau（1994、2008）；Flatau 与 Draine（2012））计算尘粒的吸收效率和散射效率。在 DDA 中，假定尘粒可由一组点状电

[7] 星际固体非均质尘埃演化模型：https://www.ias.u-psud.fr/themis [8] 注：所采用的最佳拟合 THEMIS 2.0 模型实际上假设了 a-Sil-2 硅酸盐混合物（Ysard 等（2024））以及等效半径为 2.5nm 的非晶碳包层材料（Jones（2012c））。

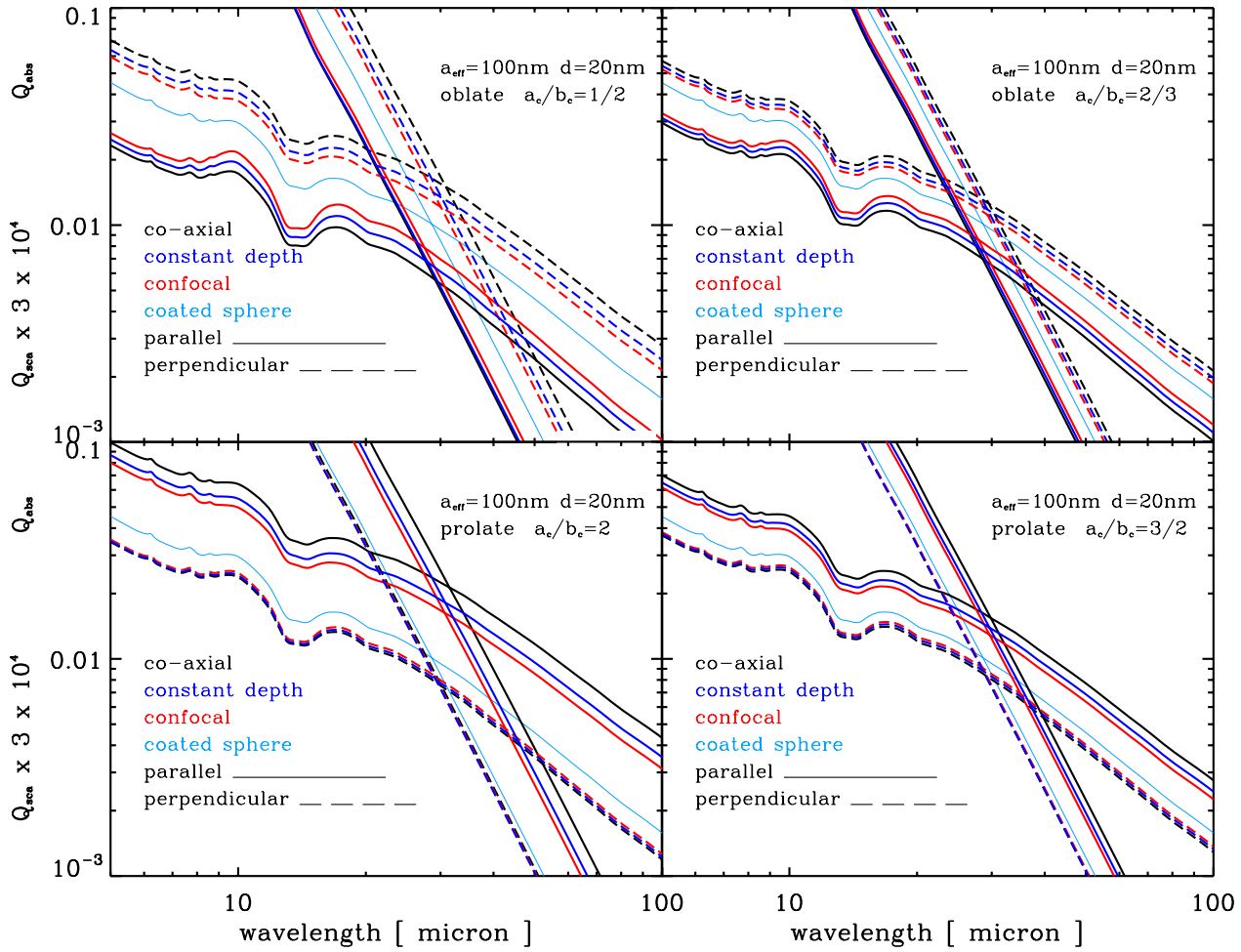


图 3。 椭球体和包覆球的 Q_{abs} 因子与 Q_{sca} 因子；为便于观察，后者乘以 3×10^4；分别对应平行方向（实线）和垂直方向（虚线）情形，并按相同的核与幔层体积进行归一化。所示数据为非晶硅酸盐（a-Sil）核（有效半径为 80nm）与厚度为 20nm 的富芳香族碳（a-C）幔层（假定半径为 10nm，见第 4 节），其随波长和 e = 0, 0.5, 0.667, 1, 1.5, 2 （a/b）.....的变化；幔层分别为同轴（黑色）、恒定厚度（蓝色）和共焦（红色）构型。作为比较，还给出了外部有效半径为 a_{eff} = 80 + 20 = 100nm 的带幔层球体（钴色）数据。

偶极振子精确表示，偶极尺寸 δ 根据以下准则设定：$|m|2\pi\delta/\lambda < 1/2$，其中 m 表示材料复折射率。吸收效率和散射效率必须针对尘粒的自旋动力学取平均：DDSCAT 程序通过改变尘粒相对于入射电磁波的取向来计算这些效率。利用椭球形尘粒的对称性，只需进行 10 次旋转，每次旋转角度为 10°。尘粒取向和旋转的详细信息见 Ysard 等人（2024）第 3 节。

下文中，我们假设核+幔层的有效半径为 $a_{eff} = (ab^2)^{1/3} = [(a_c + d)(b_c + d)^2]^{1/3}$，其中 d 为幔层厚度，并据此比较不同方法（解析法、DDSCAT 和有效介质理论）。核和幔层的体积 V_c 和 V_M 分别为

$$V_c = (4/3)\pi(a_{eff} - d)^3 \text{ and } V_m = (4/3)\pi[a_{eff}^3 - (a_{eff} - d)^3]. \quad (41)$$

对于给定的有效半径粒子，在每种特定椭球体椭率和幔层厚度情况下，即同轴、共焦或等深包层，以及包覆球中，核和幔层体积均相同，因此与粒子的轴比（a/b）无关，且有效半径归一化——

那么，鉴于

$$V = \frac{4}{3}\pi a_{eff}^3 = \frac{4}{3}\pi(a\,b^2), \quad \text{for a given} \quad e = (a/b)$$

$$\text{it follows that} \quad a = e^{\frac{2}{3}} a_{eff} \quad \text{and} \quad b = e^{-\frac{1}{3}} a_{eff}. \quad (42)$$

将上述结果代入式（39），等权重截面可一般性地重写为

$$\langle\sigma_i\rangle = \frac{1}{3}\pi a^2 + \frac{2}{3}\pi(a\,b) = \frac{\pi a^2}{3}\frac{1}{e}(e+2) = \frac{\pi a_{eff}^2}{3} e^{\frac{1}{3}}(e+2), \quad (43)$$

其中 i = 表示吸收或散射。将有效半径归一化为 1，即 $a_{eff} = 1$，并按照图 3 令 $e = \frac{1}{2}$ 分别取 2、3、1、$\frac{1}{3}$ 和 $\frac{1}{2}$，则相应结果为 $\langle\sigma_i\rangle/\pi$ = 0.66、0.78、1、1.34 和 1.68。换言之，与核和幔层体积相同的带幔层球形粒子相比，等体积、等轴加权的扁球形和长球形椭球体的净几何截面分别减小和增大。此外，光学性质 Q_{abs} 和 Q_{sca} 也会产生影响，它们对总截面的作用各不相同，并可根据平行方向或垂直方向，减小或放大这些差异的幅度（见图 3）。

对于薄包层（$d < (a_c + 2b_c)/3$），正如 CM星际尘粒通常的情况一样，

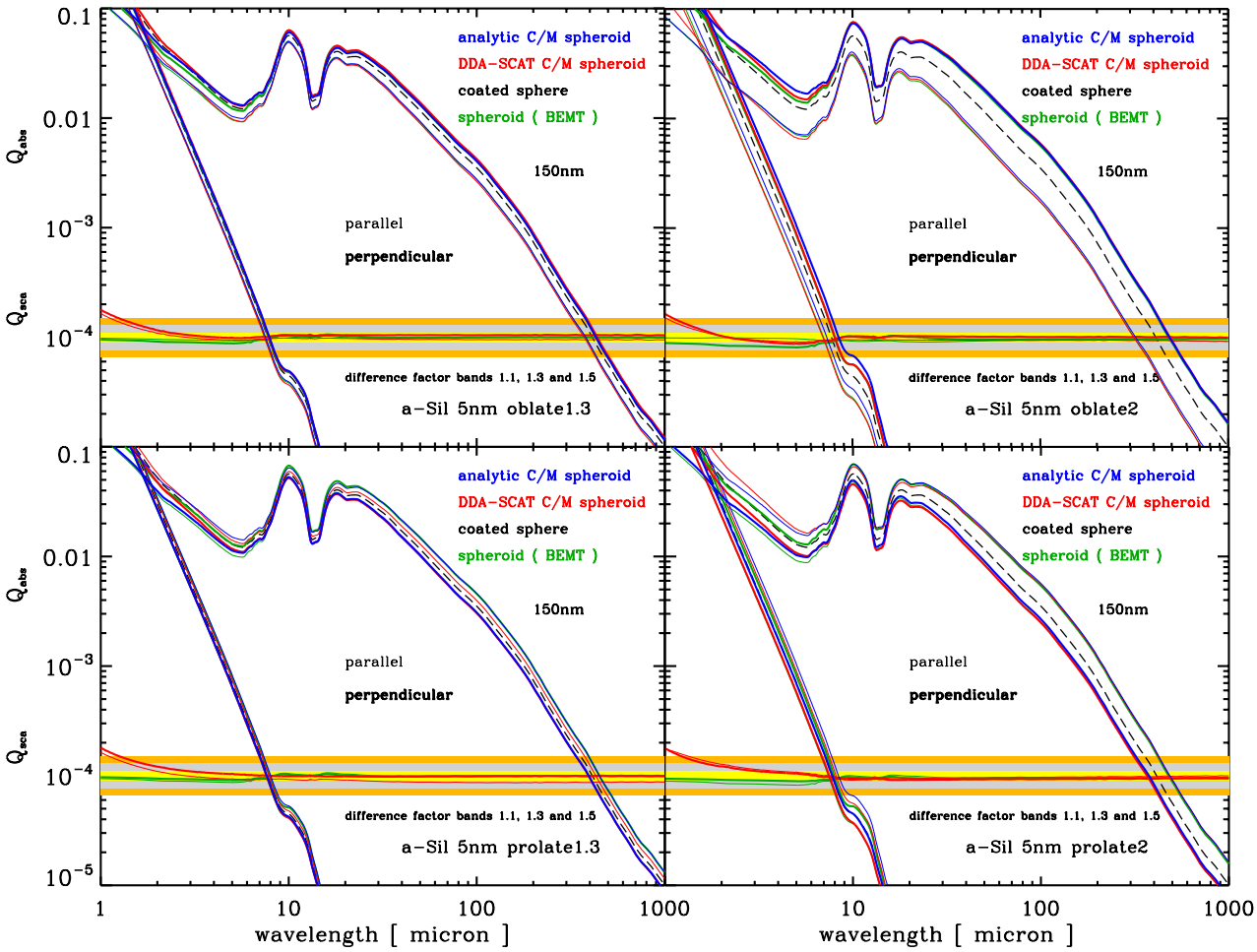


图4. 椭球体和包覆椭球体在平行方向（细线）和垂直方向（粗线）的光学性质 $Q_{\rm abs}$ 和 $Q_{\rm sca}$。图中展示的是尺寸为$a_{\rm eff}$ = 150nm、带有5nm厚非晶碳共焦幔层的非晶硅酸盐（非晶硅酸盐）粒子；扁球形和长球形粒子轴比分别为1.3和2。各子图标出了关键参数。每幅图下部的水平色带表示 DDA/解析法（红色）和有效介质理论/解析法（绿色）的$Q_{\rm abs}$ 值之比。水平色带标示的差异因子范围分别为0.9 – 1.1（黄色）、0.7 – 1.3（灰色）和0.5 – 2 （橙色）。

将平行方向和垂直方向因子合并后，同轴、共焦和恒定厚度幔层所得结果之间几乎没有明显差异。从图1中绘制的L_i 因子（对于a/d = 3）可以推知，情况必然如此，因为对于更薄的包层（即a/d > 30），所有幔层形态下核与核+幔层L_i 因子之间的差异都会小得多。

将核与幔层设为相同材料，并将结果与使用 BHCOAT 程序（Bohren & Huffman 1998年）对球形核幔粒子（a = b）进行精确计算所得的结果进行比较，二者完全一致。对于相同的材料和相同的轴比（a/b），椭球体 CM 计算结果也与具有a ≠ b的均质椭球体计算结果相同。

4.1 与*DDSCAT*结果的比较

为了将解析结果与 DDSCAT 代码的数值结果（Draine 和 Flatau，2000年）进行比较，我们在计算截面时不采用上述 $\bar{2}_{3\perp}$和 $\bar{1}_{3\parallel}$简化方法，而是通过绕主轴旋转积分来计算。椭球体绕a轴和c' 轴旋转时，截面保持不变，也就是说，两种情况下都是ab σ_i = π，因此只需绕b 轴积分。截面积分最好按以下方式进行

进行

$$\langle\sigma_i\rangle = \frac{1}{3}\left[\, 2\,\sigma_{\perp,i}(ab)\,Q_{\perp,i}(ab) \;+\; \int_0^{\pi/2} \sigma_{\parallel,i}(\theta)\,Q_i(\theta)\,d\theta \,\right] \quad \text{and}$$

$$\sigma_{\parallel,i}(\theta) = \pi\, b\, \sqrt{[a^2\cos^2\theta + b^2\sin^2\theta]} = \pi\, b\, A, \qquad (44)$$

其中，A = $\sqrt{[a^2\cos^2\theta + b^2\sin^2\theta]}$ 是半轴 a 在 ac′ 平面上的投影（即对于 $\theta = 0$）。项$\sigma_{\parallel,i}(\theta)$在 $\theta = 0$ 时取预期的极限值 π ab，在 $\theta = \pi/2$ 时取 πb^2。该积分的精确形式要求效率因子 $Q_i(\theta)$在任意角度 θ下均为已知。然而，对于此处采用的解析方法，Q_i 只能在正交的 ⊥ 和 ∥ 方向上确定（见上文），因此，每个角度步长处的截面取 $Q_{\perp,i}$ 和 $Q_{\parallel,i}$ 因子的角度加权和。具体做法是将积分替换为对 N_θ 个步长求和，每个步长的权重为 N_θ^{-1}，如下所示

$$\sigma_{\parallel,i}(\theta) = \frac{1}{N_\theta}\sum_0^{\pi/2}\left[\, f_a\, Q_{\perp,i} + f_b\, Q_{\parallel,i}\,\right]$$

$$\text{where} \quad f_a = \left(\frac{A}{b} - 1\right) \quad \text{and} \quad f_b = (1 - f_a). \qquad (45)$$

我们发现，绕b 轴旋转约 40 个角度步长（N_θ =40）足以实现令人满意的收敛。在

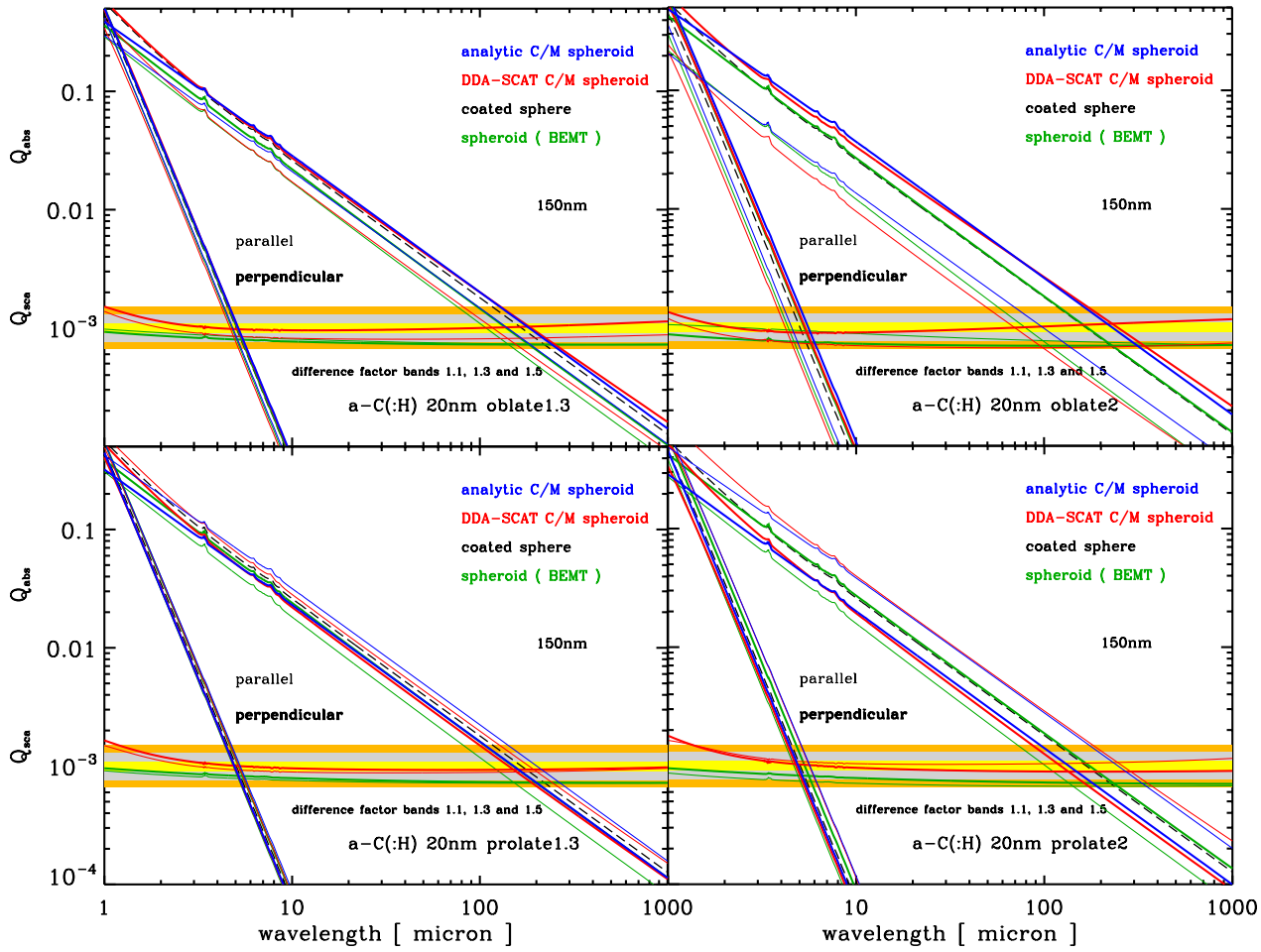


图5。 与图4相同，但对象为非晶碳（a-C:H）颗粒，$a_{\rm eff}$ = 150nm，具有深度为20nm的共焦非晶碳幔层。

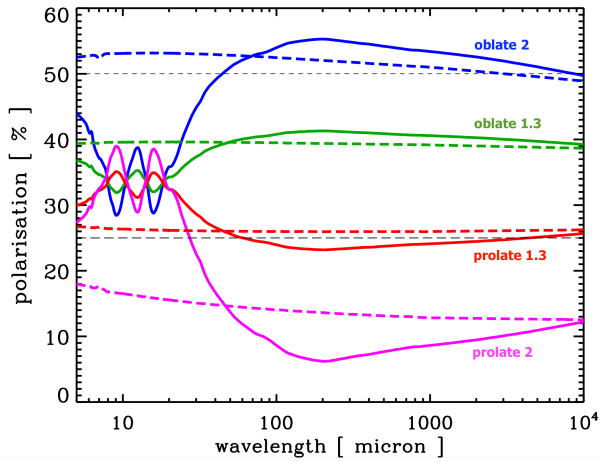


图6。 图4所示 a-Sil/a-C 颗粒（实线）和图5所示 a-C:H/a-C 颗粒（虚线）的波长相关偏振因子，以百分比表示，并按公式（40）定义；其中$a_{\rm eff}$ = 150，共焦幔层的扁球颗粒轴比为1.3（绿色）和2（蓝色），长球颗粒轴比为1.3（红色）和2（紫色）。长、短灰色虚线分别表示25%和50%的偏振度。

由于计算时间限制，DDSCAT 计算中绕*b*轴仅采用了 10 个角度步长，这解释了比较结果中一些细微差异，但除此之外影响不大。

我们将包覆幔层的椭球解析方法的结果与 DDSCAT 工具（Draine 和 Flatau 2000年）生成的结果进行了比较；后者针对体积离散分辨率足够高的颗粒，以确保能够准确逼近精确的椭球形状。对于包覆球体，我们还可以与 Bohren & Huffman（1998）提供的米氏散射程序 BHCOAT 进行比较。对于球形 CM颗粒，这三种方法在5 – 300μm波长范围内的结果差异不超过3%，在延伸至厘米波长时差异不超过10%。对于椭球形 CM 粒子，将解析结果与 DDSCAT 的结果进行比较（如图4和图5所示）后，我们发现，长波解析方法能够可靠应用的最短波长为$\lambda_{\rm lim} \simeq 8$ μm，并且在所有 $\lambda > 8$μm波长下均表现良好（见图4和图5）。

鉴于 THEMIS 大型硅酸盐和碳尘粒的对数正态分布峰值分别位于接近 140 和 160nm 的半径处（Jones 等（2017）），我们采用 150nm 作为标准测试半径，并考察 DDSCAT 计算中所使用的、包覆于 a-Sil 和 a-C:H 核上的 5nm 和 20nm 共焦非晶碳幔层。对于 $\lambda = 1 - 1000$μm 波长下 150nm 的非晶硅酸盐/非晶碳尘粒，DDSCAT 结果以及长波解析方法所得结果见图4；对于富氢非晶碳/非晶碳尘粒的结果见图5。我们注意到，尽管解析方法能够为核幔椭球体提供精确解，但 DDSCAT 至多只能为这些理想形状提供良好的近似。我们发现，DDSCAT 与精确解析方法之间总体上存在约 10% 的固有差异；对于非晶硅酸盐/非晶碳尘粒，通常为 3% 至 6%；对于富氢非晶碳/非晶碳尘粒，大多在 4% 至 15% 以内（始终为 $\leqslant$ 26%）

CM颗粒。[9] 在大多数情况下，差异相对较小，但在毫米至厘米波长下确实会增大。对于其他薄幔层非晶硅酸盐/非晶碳尘粒，两种方法之间的差异幅度相近，且不取决于轴比（a/b），也不取决于扁球形或长球形。对于富氢非晶碳/非晶碳尘粒，这些差异约大 2 倍。

与厚幔层碳尘粒相比，解析法结果与 DDSCAT 结果在薄幔层硅酸盐椭球体上的吻合度更高。对于后者，差异会随波长增加而增大，这可能是因为在 DDSCAT 计算中，较厚的幔层离散得更粗糙，无法充分解析幔层。例如，幔层深度与半径之比为 0.07–0.4 时，计算可能会耗费大量时间。[10]

我们注意到，在 a-Sil 核上添加深度固定的非晶碳幔层，实质上会使硅酸盐 $Q_{\rm abs}$ 在双对数图上增加一条斜率恒定、幂律指数为 $\simeq 1-1.5$ 的直线；这一效应显然在较小粒子上更为显著。最终结果是，a-Sil/a-C 椭球体中的硅酸盐特征因谱带与连续谱对比度降低而减弱；由于幔层体积相对于核心的比例增加，椭球体越小，这一效应就越明显。

图6展示了图4和图5所示同一批颗粒的偏振特性。从图6可以看出，对于带有5 nm非晶碳幔层的 a-Sil/非晶碳粒子，偏振从远红外到厘米波长范围内相当平坦；而对于带有20 nm幔层的氢化非晶碳/非晶碳粒子，准平坦的偏振特性则延伸至红外波长。随着形状从长球形转变为扁球形，在这些相同波长范围内，偏振度随之增加；对于 a/b = 2,1.3、0.8 和 0.5，长球形 2、长球形 1.3、扁球形 1.3 和扁球形 2 的偏振度分别为 $\simeq$ 10、25%、40% 和 50%。两种成分差异很大的粒子之间仅存在相对较小的差异。

因此，对于非晶硅和氢化非晶碳幔层尘粒而言，其偏振度似乎对粒子形状比对核的组成或幔层厚度更为敏感。

4.2. 与体积归一化包覆球的比较

在 THEMIS 模型的框架下，了解非球形性对 CM 尘粒颗粒可能产生的影响是有益且有趣的。为估算这种影响，我们比较了具有相同核体积和幔层体积的包覆球与椭球体的精确米氏计算结果。图4和图5中的黑色虚线表示包覆球的结果。对于非晶碳包覆非晶硅酸盐以及氢化非晶碳颗粒，包覆球结果与带幔层的椭球体结果十分接近，在波长依赖行为上没有可辨别的差异。因此，除无法提供偏振数据外，包覆球似乎能够很好地表征碳幔层包覆椭球体的光学性质。

4.3. 与体积归一化的有效介质体积平均方法的比较

推导双组分尘埃颗粒，乃至多层包覆颗粒（Jones 2011）的光学性质时，一种常用方法是利用有效介质理论对各组分的复介电函数进行平均。在此情境下，或许最有用的是Bruggemann有效介质理论（有效介质理论，Brugge mann 1935）；它针对基质中介电函数为 ϵ_m 的夹杂物所占的体积分数 f_i，求得有效介电函数 ϵ_{av}，其中夹杂物的介电函数为 ϵ_i。有效介电函数通过求解 Bruggemann 方程得到：

$$f_i\left[\frac{\epsilon_i-\epsilon_{av}}{\epsilon_i+2\epsilon_{av}}\right]+(1-f_i)\left[\frac{\epsilon_m-\epsilon_{av}}{\epsilon_m+2\epsilon_{av}}\right]=0. \quad (46)$$

不同于 Maxwell-Garnett 有效介质理论（Garnett 1904），Bruggemann方程关于夹杂物与基质的互换是对称的。对于二元混合物，式（46）要求求解二次方程；对于多于两种组分，则需要求解更高阶多项式（例如 Jones 2011）。然而，正如 Jones（2011）所指出的，如果以组分材料中耐火性最强者为起点，并以成对方式依次处理至耐火性最弱者，则可递归应用 Bruggemann方程来处理多于二元的混合物。

Bruggemann有效介质理论平均的均匀椭球体结果由图4和图5中的细、粗绿色线表示。对于 a-Sil/a-C 颗粒（图4），在很宽的半径范围内（$a_{\rm eff}=50-300$；此处仅显示 150nm 的数据），有效介质理论、DDSCAT 和解析方法的结果吻合良好。因此，对于椭球形耐火非晶硅酸盐核上的薄吸收性幔层，当幔层/（核+幔层）体积比在$a_{\rm eff}$ = 50、150 和 300nm 时分别为 0.27、0.10 和 0.05，我们发现所有方法之间具有良好的一致性。对于 150nm 的 a-C:H/a-C 颗粒（图5），我们发现有效介质理论方法低估了吸收效率因子$Q_{\rm abs}$，低估幅度至少达到 50%。对于等效的 50nm 颗粒，$Q_{\rm abs}$（未显示）通常在 ±10% 以内，结果总体良好。然而，对于半径为 300nm 的尘粒，在毫米波至厘米波长范围内，$Q_{\rm abs}$ 系统性地被低估了一个数量级或更多。对于这些颗粒，幔层/（核+幔层）体积比在$a_{\rm eff}$ = 50、150 和 300nm 时分别为 0.78、0.35 和 0.19。因此，在椭球形 a-C:H/a-C CM 有效介质理论计算中，对于固定厚度（20nm）的吸收性幔层，随着半径增大，差异似乎显著增加；而且，吸收性质始终被有效介质理论方法系统性地低估。

对于尘粒上厚吸收幔层，有效介质理论结果不理想的原因，同样适用于球形和椭球形颗粒：稀释效应会导致低估幔层对吸收光学性质的贡献。对粒子的各组成部分的介电函数取平均，以得到有效介电函数，这种方法原本是为紧密混合但彼此独立的组分混合物设计的，例如基质中的夹杂物，而非宏观上区分明显的CM结构。将其用于后者时，幔层的介电函数会被稀释到核的介电函数中，而核的介电函数可能与之大不相同。[11] 这会导致低估周围幔层的影响；在CM颗粒中，幔层可能主导光学性质，并有效屏蔽核。

[9] 严格来说，不能将两种方法所得结果之间的差异视为误差。一方面，本文所介绍的方法假设形状完美的模型，而星际尘粒和大气气溶胶的实际形状并不完美。另一方面，DDSCAT中经数字化处理、由离散单元构成的粒子虽然只是对理想椭球体的近似，但或许更符合实际情况。[10] 例如，为了让DDSCAT充分分辨粒子上厚度为5nm（20nm）的幔层，通常需要在幔层横向布置3个（12个）体积元（偶极子），因此核半径方向需要布置87个（78个），因为偶极子的尺寸在整个粒子中保持固定，这需要总计 $\approx$ 3 百万个偶极子。若使用3个体积元来分辨20nm厚的幔层，则总共只需 $\approx 5\times10^4$ 个偶极子，但此时对平滑CM结构的近似较差。

[11] 例如，绝缘核心上的半导电幔层，正如大型 a-Sil/a-C 和 a-C:H/a-C THEMIS 核幔尘粒中所示。

这一效应解释了为何在幔层厚度固定时，吸收性质的低估程度会随粒径增大而加剧。这是因为在任何有效介质处理中，随着粒径增大，核的介电函数被进一步稀释到核的介电函数中。

因此，不应将 Bruggemann 有效介质理论和 Maxwell-Garnett 有效介质理论用于耐火核心上覆盖厚吸收性包层的情况。更一般地说，对于核与幔层材料的介电函数差异很大的 CM颗粒结构，无论其为球体、椭球体还是任意形状，任何有效介质理论方法都无法给出可靠结果。

5. 总结与结论

本文所提出的解析方法，可用于推导任意半轴比的包覆椭球粒子的长波光学性质和偏振性质，并为其消光、吸收、散射和偏振性质提供精确的数学解。虽然耗时更长，但也可以采用数值方法计算这些相同的性质，例如 DDSCAT（Draine 和 Flatau，2000年）。该方法通过体积单元离散化来近似这些相同的数学形状。然而，星际尘粒显然并非精确或完美的数学图形，因此，将结果与 DDSCAT 的结果进行比较，可以让我们大致了解：将解析法计算出的椭球体光学性质应用于真实星际尘粒时，可能存在多大的不确定性。较为复杂的数值方法有一个显而易见的优势：与本文提出的方法不同，它们可用于研究各种形状、结构和组成，直至紫外波长。

在本文的分析中，我们发现，对于波长为⩾ 8μm的情况，解析方法与 DDSCAT 方法对5nm碳幔层（a-C）非晶硅酸盐颗粒（a-Sil）的结果吻合良好；从红外波长到厘米波长，差异通常小于 ±6%。相比之下，对于具有20nm富芳香族 a-C 幔层、包覆在富脂肪族 a-C:H 核上的氢化非晶碳颗粒，差异约大2倍。在这两种情况下，差异均趋于随波长增加而增大。因此，本文建立的解析方法与 DDSCAT 数值计算在 CM颗粒的粒子吸收与散射性质方面表现出良好的一致性。完美椭球体的精确解析方法与更不规则的体素化椭球体方法之间的差异表明，尘埃模型所采用的光学性质总体不确定度约为 ±10%；在红外波长处通常为几个百分点，而在毫米至厘米波长处则最高可达 ±25%。这些是由于在任何特定尘埃模型框架内，对未知星际尘粒形状与结构进行建模时存在不精确性而产生的内在不确定度。从这个意义上说，所研究方法之间的差异反映了对真实星际尘粒不规则本质进行建模时固有的不确定度；我们不太可能在现实中做到比这更好。

这种针对椭球形 CM 粒子的新解析方法，相较于 DDSCAT 和 T 矩阵等数值方法，具有易于编写代码且计算速度快的主要优势。因此，它可用于快速探索广阔的参数空间，涵盖尘埃颗粒成分、尺寸、椭球形状，以及红外至厘米波长（$\lambda = 8 - 10^4 \mu m$）范围内的幔层成分、形态和厚度。由此得到的光学性质和偏振预测，将有助于研究和模拟银河系中各种弥散星际介质及星周介质以及河外环境中的尘埃性质；尤其是在解读行星形成星周盘观测中的尘埃偏振时，这种方法可能特别适用，因为预期其中可能存在 CM 型颗粒结构。

本文提出的解析方法与利用米氏理论推导的包覆球结果高度吻合，这表明 CM 球形粒子可作为 CM 椭球形粒子的良好近似。然而，这种新的解析方法还有一个优点，即也可用于计算椭球形粒子的偏振性质。

我们将解析方法和 DDSCAT 方法与 Bruggemann 有效介质理论的介电函数平均法进行了比较，发现对于薄幔层粒子，三者结果相当一致。然而，对于厚吸收幔层，有效介质理论结果会大幅低估吸收性质，因此不应在这种情况下使用。误差如此之大的原因，是关键的吸收性幔层性质被稀释到有效或平均介电函数中。

我们提醒，在使用有效介质理论方法近似任意形状的 CM 颗粒的光学性质时应谨慎，尤其是在幔层占总体积相当大比例且核与幔层的介电函数差异显著的情况下。对于吸收性幔层，吸收性质总会被低估；对于吸收性核心，则总会被高估。因此，在研究由核心及其外包幔层构成的颗粒时，使用有效介质理论方法务必格外谨慎。

致谢。 若非站在巨人的肩膀上，这项工作便不可能完成。

参考文献

Asano, S. 1979, Appl. Opt., 18, 712 Asano, S. & Yamamoto, G. 1975, Appl. Opt., 14, 29 Bohren, C. F. & Huffman, D. R. 1998, 《小颗粒对光的吸收与散射》(Wileyand Sons: New York – Chichester– Brisbane – Toronto – Singapore)Bruggemann, D. A. G. 1935, Ann. Phys., 24, 636 Carpine, M. A., Ysard, N., Maury, A., & Jones, A. 2025, 《天文学与天体物理学》, 698, A200 Demyk, K., Gromov, V., Meny, C., et al. 2022, 《天文学与天体物理学》, 666, A192 Demyk, K., Meny, C., Leroux, H., et al. 2017a, 《天文学与天体物理学》, 606, A50 Demyk, K., Meny, C., Lu, X.-H., et al. 2017b, 《天文学与天体物理学》, 600, A123 Draine, B. T. & Flatau, P. J. 1994, 《美国光学学会杂志 A 》 , 11, 1491Draine, B. T. & Flatau, P. J. 2000, DDSCAT: 用于不规则形颗粒光散射与吸收的离散偶极近似, 天体物理学源代码库 Draine, B. T. & Flatau, P. J. 2008, 《美国光学学会杂志 A》, 25, 2693Flatau, P. J. & Draine, B. T. 2012, 《光学快报》, 20, 1247 Garnett, J. C. M. 1904, 《皇家学会哲学汇刊 A 辑》: Math- ematical, 203, 385 Guillet, V., Fanciullo, L., Verstraete, L., et al. 2018, 天文学与天体物理学, 610, A16 Jones, A. P. 2011, 《天文学与天体物理学》, 528, A98 Jones, A. P. 2012a, 《天文学与天体物理学》, 540, A1 Jones, A. P. 2012b, 《天文学与天体物理学》, 540, A2 (545, C2) Jones, A. P. 2012c, 《天文学与天体物理学》, 542, A98 (545, C3) Jones, A. P., Fanciullo, L., Köhler, M., et al. 2013, 《天文学与天体物理学》, 558, A62 Jones, A. P., Köhler, M., Ysard, N., Bocchio, M., & Verstraete, L. 2017, 《天文学与天体物理学》, 602, A46Köhler, M., Jones, A., & Ysard, N. 2014, 《天文学与天体物理学》, 565, L9 Köhler, M., Ysard, N., & Jones, A. P. 2015, 《天文学与天体物理学》, 579, A15 Mishchenko, M. I., Travis, L. D., & Mackowski, D. W. 1996, J. Quant. Spectr. Rad. Transf., 55, 535 Onaka, T. 1980, 《东京天文台年报》, 18, 1 Purcell, E. M. & Pennypacker, C. R. 1973, ApJ, 186, 705 Rogers, C. & Martin, P. G. 1979, ApJ, 228, 450 van de Hulst, H. C. 1981, 《小颗粒的光散射》 (Dover Publica- ti ons, Inc. New York) Ysard, N., Jones, A. P., Demyk, K., Boutéraon, T., & Koehler, M. 2018, 《天文学与天体物理学》, 617, A124Ysard, N., Jones, A. P., Guillet, V., et al. 2024, 《天文学与天体物理学》, 684, A34 Ysard, N., Koehler, M., Jimenez-Serra, I., Jones, A. P., & Verstraete, L. 2019, 《天文学与天体物理学》, 631, A88