INVESTIGATION ON LIGHT SCATTERING FROM TURBID MEDIA THROUGH EXPERIMENTS AND MONTE CARLO SIMULATIONS

KALPAK GUPTA

DEPARTMENT OF PHYSICS
INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI
APRIL 2022

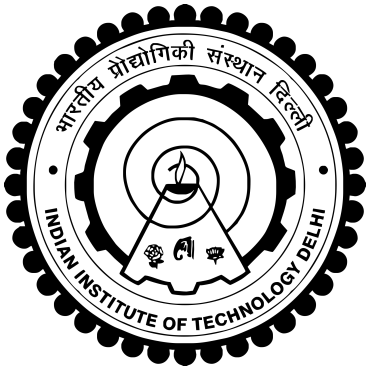
INVESTIGATION ON LIGHT SCATTERING FROM TURBID MEDIA THROUGH EXPERIMENTS AND MONTE CARLO SIMULATIONS

by

KALPAK GUPTA

Department of Physics

Submitted
in fulfillment of the requirements of the degree of ***Doctor of Philosophy***
to the



INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI
APRIL 2022

Dedicated to my parents

Certificate

This is to certify that the thesis titled **"Investigation on light scattering from turbid media through experiments and Monte Carlo simulations"**, being submitted by **Kalpak Gupta** to the Indian Institute of Technology Delhi, for the award of the degree of **Doctor of Philosophy**, is a record of bonafide research work carried out by him. He has worked under my guidance and supervision and has fulfilled the requirements, which to my knowledge, have reached the requisite standard for the submission of this thesis. The results contained in this thesis have not been submitted in part or full to any other University or Institute for the award of any degree or diploma.

Date:

Place: New Delhi

Prof. M. R. Shenoy
Department of Physics
Indian Institute of Technology Delhi
New Delhi – 110016, India

Acknowledgements

First and foremost, I would like to express my deepest gratitude to my supervisor Prof. M. R. Shenoy for providing me the opportunity to work on the very fascinating field of light scattering and its applications. His ardent encouragement and support throughout the tenure of my Ph.D. enabled me to reify and explore my research problems from different perspectives, succoured by his vast experience, innovative ideas, and impeccable passion for research, which immensely helped in improving my knowledge and skills. I consider myself most fortunate to have worked under the kind guidance of Prof. Shenoy, who always gave me an affable milieu along with the freedom to work in my own style, while at the same time felicitously steering me towards my objectives whenever I required a boost of motivation. His unrelenting patience and positivity allayed much of the consternations one usually faces in a journey such as this, which has made him a source of inspiration I will cherish throughout my life.

I also give my sincere thanks to my SRC members, Prof. D. S. Mehta, Prof. Bhaskar Kanseri and Prof. R. Elangovan; the faculty members of the Fiber Optics Group, Prof. K. Thyagarajan, Prof. Anurag Sharma, Prof. Arun Kumar, Prof. B. D. Gupta and Prof. Ajit Kumar; and all the faculties of the Physics Department for providing me with their valuable insights and constructive suggestions during my Ph.D. tenure.

Though it is difficult to mention the name of all the individuals who contributed directly or indirectly towards this achievement, I would like to thank my seniors and colleagues at the Fiber Optics Group—Dr. Dinesh Sharma, Dr. Manoj Kumar, Dr. Ajanta Barh, Dr. Rana Tabassum, Dr. Divya Bharadwaj, Dr. Anand Mohan, Dr. Ranjeet Dwivedi, Dr. Parvinder Kaur, Dr. Deepa Chaturvedi Pandey, Dr. Pragati Aashna, Dr. Nabarun Saha, Dr. Jitender, Dr. Ramesh Kumar, Dr. Sugeet Sunder, Dr. Babita Bakshi (nee Kumari), Dr. Sruthi Prasood Usha, Dr. Ravi Kant, Dr. Vivek Semwal, Dr. Anisha Pathak, Nithin, Vikas, Subhajit, Priyadarshini, Ajay, Sukhvinder, Pratiksha, Anjali and Jully—as well as my seniors and friends from other research groups of IIT Delhi—Dr. Soumik Adhikary, Dr. Swagato Sarkar, Dr. Shashank Gahlaut, Dr. Mayank Gupta, Dr. Atul Kumar Dubey, Dr. Sethuraj R., Shahrukh Salim, Rajni, Gayatri, Hemant, Sunaina,

Mansi, and Deepika—for the enriching discussions and light hearted moments which obviated the sporadic ennui during the strenuous periods of work during the last few years.

I would like to acknowledge Mr. Vijay Kumar for his technical help and thank him for providing me with the various components of my experiments in the lab. I am also thankful to University Grants Commission (UGC), India for providing financial support through the award of JRF/SRF during the tenure of my Ph.D.

Lastly and most importantly, I am extremely thankful and grateful to my parents, Mr. Amitava Gupta and Mrs. Indrani Gupta, for their unwavering moral support and gracious blessings throughout the duration of my Ph.D.

Finally, I pay my humble obeisance to the almighty, without whose mercy this work would never have been possible.

Kalpak Gupta

Abstract

Over the last few decades, light scattering techniques have become ubiquitous in a variety of applications, such as characterization of biological tissues, detection and analysis of particles and sediments in water, including sea water, and monitoring of air pollution. When light interacts with matter, the phenomena of scattering and absorption occur, and the characteristics of the interaction depend on the physical properties of the scattering particle. The general aim of various light scattering methodologies is to use the measurement of scattered light to obtain information about such scattering particles, especially in the case of a turbid medium, which consists of suspended particles undergoing random motion inside it.

A turbid medium is characterized by scattering parameters—such as the interaction coefficient μ_t and the anisotropy parameter g—which describe the propagation of light inside the medium. μ_t is proportional to the concentration of particles, and determines the amount of extinction that light suffers while propagating through the medium, while g is a measure of the angular anisotropy of the scattered light. These scattering parameters depend on the properties of the scattering particles present in the medium, such as their shape, size, and concentration. Currently, there exists several methods to characterize a turbid medium, i.e., to determine the scattering parameters of the medium, from which various physical properties of the constituent particles can be obtained. However, most of the reported methods to characterize such media are either expensive or complex, which vary in accordance to the desired accuracy and robustness for a given application. In this thesis, we present our investigation on light scattering from turbid media using experimental measurements in conjunction with analytical and numerical calculations, with the aim of establishing methods which are relatively simpler, require fewer components, and are easier to implement.

Our methodologies involve the measurement of the scattered light from a turbid medium using appropriately placed photodetectors, and comparing the measured power with numerically obtained scattered power for different combinations of the scattering parameters. The simulations are performed by using the Monte Carlo method, and the scattering parameter(s)

for which the scattered power at the detector(s) match with the measured power are inferred to be the correct scattering parameter(s) of the given turbid medium. In our studies, we first apply the methodology to measure the scattered light from a given turbid medium at a detector, for determination of the anisotropy parameter g of the medium. In the proposed method, the interaction coefficient μ_t of a given sample is first determined from the measurement of the unscattered light by using the Beer-Lambert law; then the scattered power from the sample at an angle θ is measured using a photodetector. The g of the medium is estimated corresponding to the measured scattered power from a calibration curve relating the scattered power to g, which is obtained from Monte Carlo simulations. It is also discussed that the same methodology can be applied to obtain the particle size in the case of monodisperse turbid solutions comprising spherical particles. However, it is seen that there are two possible values of g (or particle size) corresponding to a single position of the detector. Subsequently, we show that by using two detectors placed at two different positions to measure the scattered power, the g or the particle size can be uniquely determined.

The estimation of μ_t requires the measurement of the undeviated transmitted light, for which the corresponding detector has to be placed far away ($\approx$1 m) from the turbid sample. To reduce the bulk of the experimental setups due to this requirement, we also propose the use of a pair of parallel mirrors to multifold the transmitted beam from the given sample, to increase the effective path length of the beam. This makes it possible to estimate μ_t accurately by keeping the detector relatively close to the sample, leading to a compact setup. We further present a method to determine the size of microspheres in a turbid solution by using analytical calculations instead of simulations, with the restriction that the particles are concentrated within a very small region inside the sample. The method requires two detectors placed close to the sample, to measure the scattered power at two different positions; in the proposed scheme, the estimation of μ_t is not required at all, which again leads to a compact setup.

Studies on mixtures are performed as well, where a mixture refers to a turbid medium comprising different types of particles. From first principles, we arrive at a scheme to simulate light propagation in a mixture using the Monte Carlo model, and then apply it to determine the

concentrations of known type of constituents in a bidisperse mixture, by following a similar methodology of comparing the measured scattered power to the simulated power for different relative concentrations of the constituent particles. Finally, we make use of the Monte Carlo simulations to simulate the calibration curve relating the scattered power to the particle size or g for different operating wavelengths and detector positions, and show that our method can be optimized in terms of the dynamic range and sensitivity by appropriately choosing these physical factors in the experimental setup. We further show that the experimental setup can be implemented using optical fibers to transport light to/from the sample, which provides additional advantages like robustness, durability, and scope of telemetry for remote sensing applications.

सार

पिछले कुछ दशकों में, विभिन्न प्रकार के अनुप्रयोगों में प्रकाश प्रकीर्णन की तकनीक सर्वव्यापी हो गई है, जैसे कि जैविक ऊतकों का लक्षण वर्णन, समुद्र के पानी सहित पानी में कणों और तलछट का पता लगाना और विश्लेषण करना, और वायु प्रदूषण की निगरानी करना। जब प्रकाश पदार्थ के साथ अंतःक्रिया करता है, तो प्रकीर्णन और अवशोषण की घटनाएं होती हैं, और वह क्रिया की विशेषताएं बिखराने वाले कणो के भौतिक गुणों पर निर्भर करती हैं। विभिन्न प्रकाश प्रकीर्णन पद्धतियों का सामान्य उद्देश्य ऐसे प्रकीर्णन कणों के बारे में जानकारी प्राप्त करने के लिए प्रकीर्ण प्रकाश के माप का उपयोग करना है, विशेष रूप से एक पंकिल माध्यम के मामले में, जिसके अंदर यादृच्छिक गति से गुजरने वाले निलंबित कण होते हैं।

एक पंकिल माध्यम का प्रकीर्णन का मापदंडों की विशेषता होती है प्रकीर्णन प्राचल—जैसे अंतःक्रिया गुणांक μ_t और अनिसोट्रॉपी प्राचल g—जो उस माध्यम के अंदर प्रकाश के प्रचार का वर्णन करते है। μ_t कणों की सांद्रता के समानुपाती होता है, और माध्यम में प्रचार होता हुआ प्रकाश के विलुप्त होने की मात्रा को निर्धारित करता है, जबकि g प्रकीर्ण प्रकाश के कोणीय अनिसोट्रॉपी का एक मात्रा है। ये प्रकीर्णन प्राचल माध्यम में मौजूद प्रकीर्णन कणों के गुणों पर निर्भर करते हैं, जैसे कि उनका आकार, आकृति और सांद्रता। वर्तमान में, एक पंकिल माध्यम के विशेषता चिह्नित करने लिए, अर्थात, माध्यम के प्रकीर्णन प्राचल को निर्धारित करने के लिए, कई तरीके मौजूद हैं, जिससे घटक कणों के विभिन्न भौतिक गुण प्राप्त किए जा सकते हैं। हालांकि, इस तरह के माध्यमों के विशेषताए चिह्नित करने के लिए विवरण की गई अधिकांश विधियां या तो महंगी या जटिल हैं, जो किसी दिए गए अनुप्रयोग के लिए वांछित यथार्थता और मजबूती के अनुसार भिन्न होती हैं। इस थीसिस में, हम विश्लेषणात्मक और संख्यात्मक गणनाओं के संयोजन के साथ प्रयोगात्मक मापो का उपयोग करके पंकिल माध्यम से प्रकाश के प्रकीर्णन पर अपनी जांच प्रस्तुत करते हैं, इस लक्ष्य के साथ की वह तरीके अपेक्षाकृत सरल हो, कम घटकों की आवश्यकता रखती हो, और लागू करने में आसान होती हो।

हमारी कार्यप्रणाली में उचित रूप से रखे गए प्रकाश संसूचक का उपयोग करके एक पंकिल माध्यम में से आती हुई प्रकीर्ण रोशनी की माप करना शामिल है, और मापी गई शक्ति के साथ प्रकीर्णन प्राचल के विभिन्न संयोजनों के लिए संख्यात्मक रूप से प्राप्त प्रकीर्ण शक्ति की तुलना करना शामिल है। सिमुलेशनो को मोंटे

कार्लो विधि का उपयोग करके किया जाता है, और वह प्रकीर्णन प्राचल(ऐ) जिसके लिए संसूचक(ओं) पर प्रकीर्ण शक्ति मापी गई शक्ति के साथ मेल खाती है, उनको दिए गए पंकिल माध्यम के सटीक प्रकीर्णन प्राचल(ओं) के रूप में अनुमान लगाया जाता है। हमारे अध्ययन में, हम पद्धति को एक संसूचक पर दिए गए पंकिल माध्यम से बिखरे हुए प्रकाश को मापने के लिए लागू करते हैं, उस माध्यम के अनिसोट्रॉपी प्राचल g के निर्धारण के लिए। प्रस्तावित विधि में, किसी दिए गए नमूने के अंतःक्रिया गुणांक μ_t को पहले बीयर-लैम्बर्ट नियम का उपयोग करके प्रकीर्ण ना हुआ प्रकाश के मापन से निर्धारित किया जाता है; फिर नमूने से किसी एक कोण पर प्रकीर्ण शक्ति को एक प्रकाश संसूचक का उपयोग करके मापा जाता है। मापी गई प्रकीर्ण शक्ति को शक्ति के अनुरूप माध्यम का g का अनुमान लगाया जाता है प्रकीर्ण शक्ति को शक्ति की g से संबंधित अंशांकन वक्र से, जो मोंटे कार्लो सिमुलेशन से प्राप्त होता है। यह भी चर्चा की जाती है कि येही पद्धति लागू की जा सकती है गोलाकार कणों वाले मोनोडिस्पर्स पंकिल समाधानों के मामले में कण आकार प्राप्त करने के लिए। हालांकि, यह देखा जाता है कि संसूचक की एकल स्थिति के अनुरूप g (या कण आकार) के दो संभावित मान हैं। इसके बाद, हम दिखाते हैं कि प्रकीर्ण शक्ति को मापने के लिए दो अलग-अलग स्थानों पर रखे गए दो संसूचकों का उपयोग करके, g या कण आकार को विशिष्ट रूप से निर्धारित किया जा सकता है।

μ_t के अनुमान के लिए अविचलित संचरित प्रकाश की माप की आवश्यकता होती है, जिसके लिए संबंधित संसूचक को पंकिल नमूने से काफी दूर (≈1 मीटर) रखना होता हैं। इस आवश्यकता के कारण प्रायोगिक व्यवस्थाओं के थोक को कम करने के लिए, हम दिए गए नमूने से संचरित किरण को एकाधिक बार मोरने के हेतु समानांतर दर्पण की एक जोड़ी के उपयोग का भी प्रस्ताव करते हैं, किरण की प्रभावी पथ की लंबाई को बढ़ाने के लिए। यह संसूचक को नमूने के अपेक्षाकृत करीब रखकर μ_t का सटीक अनुमान लगाना संभव बनाता है, जिससे व्यवस्था सघन हो जाता है। हम और आगे सिमुलेशन के बजाय विश्लेषणात्मक गणनाओं का उपयोग करके एक पंकिल समाधान में सूक्ष्मवृत्त के आकार को निर्धारित करने के लिए एक विधि प्रस्तुत करते हैं, इस प्रतिबंध के साथ कि कण नमूने के अंदर एक बहुत छोटे क्षेत्र में केंद्रित हैं। इस विधि मैं नमूने के करीब रखे गए दो संसूचक की आवश्यकता होती है, अलग-अलग पदों में प्रकीर्ण शक्ति को मापने के लिए; प्रस्तावित योजना में, μ_t के अनुमान की बिल्कुल भी आवश्यकता नहीं है, जो फिर से एक सघन व्यवस्था की ओर ले जाता है।

मिश्रणो पर भी अध्ययन किया जाता है, जहां मिश्रण विभिन्न प्रकार के कणों से युक्त एक पंकिल माध्यम को संदर्भ करता है। मौलिक सिद्धांतों से, हम मोंटे कार्लो मॉडल का उपयोग करके मिश्रण में प्रकाश की प्रसार को सिमुलेट करने के लिए एक योजना पर पहुंचते हैं, और फिर इसे एक द्वि-फैलाव मिश्रण में स्थित ज्ञात प्रकार के घटकों की सांद्रता निर्धारित करने के लिए लागू करते हैं, पहले समान पद्धति का पालन करते हुए घटक कणों की विभिन्न सापेक्ष सांद्रता के लिए प्रकीर्ण शक्ति की मापी गई शक्ति से तुलना करके। अंत में, हम मोंटे कार्लो सिमुलेशन का उपयोग करके अलग-अलग परिचालन तरंग दैर्ध्य और संसूचक स्थितियों के लिए प्रकीर्ण शक्ति से संबंधित कण आकार या फिर g की अंशांकन वक्र को सिमुलेट करते हैं, और दिखाते हैं कि प्रायोगिक वयवस्था में इन भौतिक कारकों को उचित रूप से चुनकर हमारी पद्धति को डायनामिक रेंज और सेंसिटिविटी के संदर्भ में अनुकूलित किया जा सकता है। हम और आगे दिखाते हैं कि प्रयोगात्मक वयवस्था को ऑप्टिकल फाइबर के द्वारा नमूने से/तक प्रकाश की परिवहन करके लागू किया जा सकता है, जो मजबूती, स्थायित्व और रिमोट सेंसिंग अनुप्रयोगों के लिए टेलीमेट्री के दायरे जैसे अतिरिक्त लाभ प्रदान करता है।

Contents

List of Figures

List of Tables