

## T 矩阵在光阱分析中的应用

刘永红, 祖明焱, 史锦珊

(燕山大学电气工程学院, 河北 秦皇岛 066004)

**摘要:**光镊技术被广泛应用于许多生物领域。光镊本身结构简单,用单光束就可以捕获单个粒子,但对光阱力的精确计算却存在一定的难度。可以用一些近似的方法如几何光学或瑞利假设分析光阱力,但这些方法仅能在特定限制条件下适用。文中把电磁散射理论作为一种通用的方法来解决光阱力的计算问题。论述了如何使用 T 矩阵方法进行光阱力计算。计算结果为实验系统参量的选择提供了理论依据。

**关键词:**光镊;光阱力;T-矩阵;高斯光束;电磁散射

**中图分类号:**TN241 **文献标识码:**A

### Application of T-matrix method in the analysis of optical trapping

LIU Yong-hong, ZU Ming-yan, SHI Jin-shan

(College of Electrical Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China)

**Abstract:** The optical tweezers is widely used in many biological applications. Despite the apparent simplicity of a laser trap, a single particle is trapped with a single beam, exact calculation of the optical forces on particles is very difficult. Calculations can be performed by using some approximate methods such as Ray-Optics and Raleigh hypothesis, but these are only applicable within their ranges of validity. We can obtain a general theory for laser trapping by applying the electromagnetic scattering theory. In this paper, we describe how the T-matrix approach can be used to computer optical trapping force. According to the simulation results, we can easily choose parameters of the trapping system.

**Key words:** optical tweezers; trapping force; T-matrix; Gaussian beam; electromagnetic scattering

#### 1 引言

以激光微束光阱效应为基础的光镊技术<sup>[1-4]</sup>是生命科学和生物工程研究的有力工具。但是尽管光镊本身结构简单,但对光阱力的精确计算却存在相当的难度。目前采用的一些近似计算方法是:对 Mie 散射区的米氏粒子 ( $a \gg 5\lambda$ ), 采用几何光学模型 (Ray-Optic); 对于 Rayleigh 散射区的瑞利粒子 ( $a \ll \lambda/20$ ) 采用瑞利模型 (Rayleigh Scattering Theory)。人们对两种情况下的光捕获进行了大量的研究<sup>[5-8]</sup>, 但由于这两种方法计算模型相对简单, 计算准确性较差。更重要的是, 对于大量存在的大小与捕获光红外波长相近的粒子, 由于粒子大小不满足以上两种算法的近似条件, 因而这些近似方法无能为力。

本文采用电磁散射方法, 为微观粒子的光阱计算问题提供了一个通用的方法。由于光阱实质上也是一个散射场, 所以微粒的光捕获过程也是一个电磁散射过程。而在光阱力计算中, 需要在入射光不断改变情况下, 对光阱中同一粒子在不同位置和取向上的重复计算。在此<sup>[1]</sup>情况下, 与有限元<sup>[9-10]</sup>等其他光散射算法相比, 采用 T 矩阵算法, 无论入射光的特性如何改变, 只需要计算一次就可以多次使用以计算任意方向的入射和散射光束的振幅和向量矩阵, 从而大大减少了计算量<sup>[2,8]</sup>。另外, 由于轴对

基金项目:国家自然科学基金项目(No. 50575193)资助。

作者简介:刘永红(1974-),男,博士生,研究方向为激光微操纵。E-mail:liuyh@ysu.edu.cn

收稿日期:2009-01-24

称粒子所具有的旋转对称性使得 T 矩阵中包含大量的零元素。这样可进一步简化计算过程。

## 2 T 矩阵基本原理

T 矩阵<sup>[11-12]</sup>是由 Waterman 最先用来计算由单一均匀的非球面粒子引发的电磁散射的技术,其基本特征是矩阵元素仅仅取决于散射粒子的形状、尺寸、折射率等自身参数而与入射场和散射场无关。

T 矩阵中,入射与散射场正交变换后用矢量球谐函数  $\vec{M}_{mn}$  和  $\vec{N}_{mn}$  表示如下:

$$\vec{E}^{inc}(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [a_{mn} \text{Rg} \vec{M}_{mn}(kr) + b_{mn} \text{Rg} \vec{N}_{mn}(kr)] \quad (1)$$

$$\vec{E}^{scat}(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [p_{mn} \vec{M}_{mn}(kr) + q_{mn} \vec{N}_{mn}(kr)] \quad (2)$$

入射场扩展系数为:

$$a_{mn} = 4\pi (-1)^m i^n d_n \vec{C}_{mn}^*(\vartheta_{inc}) \vec{E}^{inc} \exp(-im\varphi_{inc}) \quad (3)$$

$$b_{mn} = 4\pi (-1)^m i^{n-1} d_n \vec{B}_{mn}^*(\vartheta_{inc}) \vec{E}^{inc} \exp(-im\varphi_{inc}) \quad (4)$$

式中:

$$\text{Rg} \vec{M}_{mn}(kr) = (-1)^m d_n \exp(im\phi) j_n(kr) C_{mn}(\theta) \quad (5)$$

$$\text{Rg} \vec{N}_{mn}(kr) = (-1)^m d_n \exp(im\phi) \cdot$$

$$\left\{ \frac{n(n+1)}{kr} j_n(kr) P_{mn}(\theta) + [j_{n-1}(kr) - \frac{n}{kr} j_n(kr)] B_{mn}(\theta) \right\} \quad (6)$$

$$B_{mn}(\vartheta) = \hat{\vartheta} \frac{d}{d\vartheta} d_{0m}^n(\vartheta) + \hat{\varphi} \frac{im}{\sin\vartheta} d_{0m}^n(\vartheta) \quad (7)$$

$$\hat{C}_{mn}(\vartheta) = \hat{\vartheta} \frac{im}{\sin\vartheta} d_{0m}^n(\vartheta) - \hat{\varphi} \frac{d}{d\vartheta} d_{0m}^n(\vartheta) \quad (8)$$

$$P_{mn}(\vartheta) = r d_{0m}^n(\theta) \quad (9)$$

$$d_n = \left[ \frac{2n+1}{4\pi n(n+1)} \right]^{1/2} \quad (10)$$

式中,  $j_n(kr)$  为球贝塞尔函数;  $d_{0m}^n(\theta)$  为魏格纳  $d$  函数;  $k = 2\pi/\lambda$ , 为空间波数。

散射场扩展系数为:

$$p_{mn} = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} [T_{mnm'n'}^{11} a_{m'n'} + T_{mnm'n'}^{12} b_{m'n'}] \quad (11)$$

$$q_{mn} = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} [T_{mnm'n'}^{21} a_{m'n'} + T_{mnm'n'}^{22} b_{m'n'}] \quad (12)$$

$\text{Rg} \vec{M}_{mn}$  和  $\text{Rg} \vec{N}_{mn}$  为矢量球面波函数  $\vec{M}_{mn}$  和  $\vec{N}_{mn}$  取正则, 即谐波函数  $M_{mn}$  和  $N_{mn}$  中采用 Bessel 函数表示的

驻波函数。

入射场与散射场关系用矩阵表示即为:

$$\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (13)$$

式(13)为 T 矩阵的基本形式, 可以通过扩展边界条件法(EBCM)<sup>[11]</sup> 对其进行计算, 可得一个散射体的 T 矩阵, 适当考虑散射矩阵的展开系数可以从根本上解决 T 矩阵的计算收敛问题。

## 3 光阱分析数据处理

采用 Crichton 和 Marston 计算公式<sup>[13]</sup> 计算轴向捕获效率  $Q$  为:

$$Q = \frac{2}{P} \sum_n \sum_{m=-n}^n \frac{m}{n(n+1)} \text{Re}(a_{nm}^* b_{nm} - p_{nm}^* q_{nm}) - \frac{1}{n+1} \left[ \frac{n(n+2)(n-m+1)(n+m+1)}{(2n+1)(2n+3)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \text{Re}(a_{nm} a_{n+1,m}^* + b_{nm} b_{n+1,m}^* - p_{nm} p_{n+1,m}^* - q_{nm} q_{n+1,m}^*) \quad (14)$$

式中,  $n$  为散射场截断系数, 计算过程中选择  $n \approx kr$  取整为 10;  $P$  为激光捕获功率。

高斯激光传播方向为  $\hat{n}$  或  $(\theta, \varphi)$ 。入射激光波长  $1.064 \mu\text{m}$ , 光方向为  $\theta = 0.96 \text{ rad}$ ,  $\varphi = 1.00 \text{ rad}$ 。聚炳乙烯球形粒子置于水中, 相对折射率  $n = 1.59$ , 粒子半径  $2.0 \mu\text{m}$ , 相当于  $2.5 \lambda$ 。计算结果图 2 表明光阱阱深在  $\pm \lambda$  达到最大, 粒子横向位移超过平

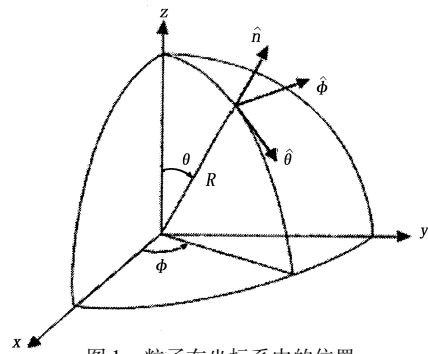


图1 粒子在坐标系中的位置

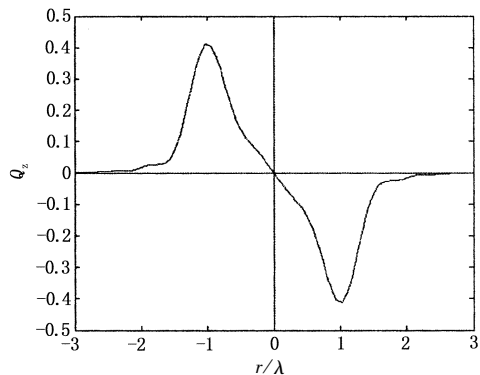


图2 高斯激光横向捕获效率

衡点  $\pm 3 \lambda$  时,粒子有可能脱离光阱。图3说明粒子径向位移时,由于重力作用使得正方向即激光近场方向更容易捕获,粒子位移超过  $\pm 4 \lambda$  时,激光可能脱离光阱。两种情况下的光波长粒子捕获与几何光学方法相比,捕获范围增大。计算结果同时表明横向捕获较径向捕获更容易实现。

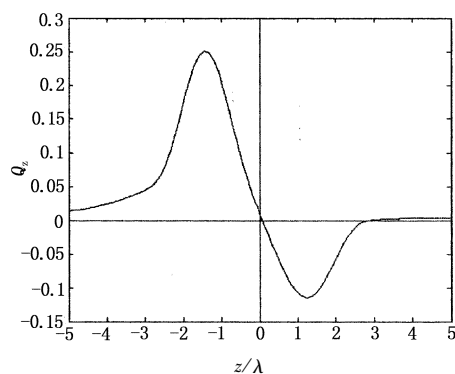


图3 高斯激光径向捕获效率

图4为粒子半径与相对折射率对轴向光阱效率计算的理论关系图,计算结果表明当粒子半径较小时,捕获力会急剧减小,而当粒子较大时捕获效率较高且基本不受相对折射率的影响,说明在大粒子情况下可以根据实验需要灵活选择介质溶液而不影响捕陷。

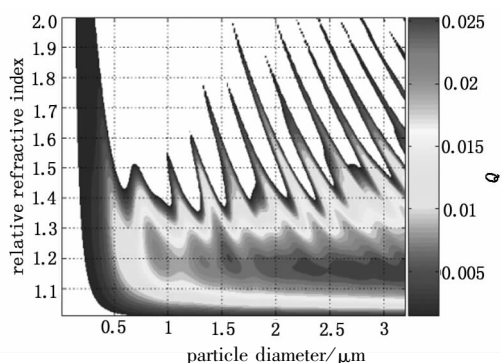


图4 轴向捕获效率与直径和相对折射率关系

#### 4 结论

本文针对大小介于米氏粒子与瑞利粒子之间的光波长粒子,应用T矩阵的散射方法进行了光阱捕获效率的计算仿真。对于受捕获的一个粒子,T矩阵只需计算一次,就可以对任何方向的光的入射和散射的计算,是散射法应用于光阱分析的理想工具。尤其是球形粒子情况下,计算矩阵更加简单。仿真实验研究了粒子在高斯光阱中横向与轴向的捕获效率,以及捕获效率和介质折射率及粒子尺寸间的综

合关系,为系统参数选择提供了理论参考。

#### 参考文献:

- [1] A Ashkin, J M Dziedzic, J E Bjorkholm. Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectrical particles[J]. Optics Letters, 1986, 11: 288 - 290.
- [2] H Felgner, F Grolig, O Muller, et al. In vivo manipulation of internal cell organelles[J]. Methods in Cell Biology, 1998, 55: 167 - 170.
- [3] Gustavson T L, Chikkatur A P, Leanhardt A E, et al. Transport of bose-einstein condensates with optical tweezers[J]. Phys. Rev. Lett., 2002, 88(2): 020401.
- [4] Fallman E, Schedin S, Jass J, et al. Optical tweezers based force measurement system for quantization binding interactions: system design and application for the study of bacterial adhesion[J]. Biosensors and Bioelectronics, 2004, 19(11): 1429 - 1437.
- [5] A Ashkin. Forces of a single-beam gradient laser trap on a dielectric sphere in the ray optics regime[J]. Biology. J., 1992, 61: 569 - 582.
- [6] Yasuhiro Harada. Radiation forces on a dielectric sphere in the Rayleigh scattering regime[J]. Optics Communication, 1996, 124: 529 - 541.
- [7] 高秋娟, 朱艳英, 李亚林. 光镊对血红细胞横向光阱力的研究[J]. 激光与红外, 2008, 38(3): 208 - 210.
- [8] 王子刚, 徐建波. 光镊中轴向光阱力的研究[J]. 激光与红外, 2008, 38(2): 109 - 111.
- [9] White D A. Numerical modeling of optical gradient traps using the vector finite element method[J]. Computer Phys., 2000, 159: 13 - 37.
- [10] Taflove A. Computational electrodynamics-the finite difference time-domain method[M]. New York: Elsevier, 1995.
- [11] P C Waterman. Symmetry, unitarity and geometry in electromagnetic scattering[J]. Phys. Rev., 1971, 3: 825 - 839.
- [12] A G Ramm. Numerically efficient version of the T-matrix method[J]. Applicable Analysis, 2002, 80(3): 385 - 393.
- [13] Crichton J H, P L Marston. The measurable distinction between the spin and orbital angular momentum of electromagnetic radiation[J]. Elec. J. Diff. Eq., 2000(4): 37 - 50.