

多分散生物凝聚粒子 10.6 μm 激光消光性能研究陆卫¹, 顾有林^{1,2*}, 方佳节¹, 胡以华^{1,2}, 丁婉莹¹, 王新宇¹, 陈曦¹¹国防科技大学脉冲功率激光技术国家重点实验室, 安徽 合肥 230037;²先进激光技术安徽省实验室, 安徽 合肥 230037

摘要 基于弹道粒子-团簇模型,模拟了多分散生物凝聚粒子模型,采用离散偶极子近似方法计算了具有不同孔隙率、原始颗粒数量、粒径分布方式的多分散生物凝聚粒子模型的消光系数,分析了孔隙率、原始颗粒数量和粒径分布对凝聚粒子消光特性的影响。结果表明:多分散生物凝聚粒子的消光系数随着孔隙率的增大而减小;凝聚粒子包含的原始颗粒数量越多,粒径分布的均值越大,消光系数越大;粒径分布方差对消光系数没有明显的影响。本研究结果为全面理解生物凝聚粒子的消光性能以及生物消光材料的制备提供了参考。通过改变生物凝聚粒子的孔隙率、原始颗粒数量和粒径分布可以提高生物材料的消光性能。

关键词 材料; 凝聚粒子; 离散偶极子近似; 消光系数; 影响因素

中图分类号 O436

文献标志码 A

doi: 10.3788/CJL202148.0401019

1 引言

生物材料是一些小的生物颗粒在静电、碰撞、黏附作用下形成的具有分形特征、复杂空间结构的随机取向凝聚粒子体系。与传统的无机消光材料相比,生物材料具有环保无毒、成本低、形态可控等优势,已成为一种被广泛使用的新型消光材料。胡以华研究团队^[1-3]计算了生物材料在红外波段的消光性能,顾有林等^[4-5]研究了灭活特性对生物材料消光性能的影响,Wang 等^[6-7]分析了环境因素对生物材料消光性能的影响。目前,生物材料的消光性能已成为国内外学者的研究热点,而生物凝聚粒子消光性能的研究是生物材料消光性能研究的关键。赵欣颖等^[8]利用团簇-团簇凝聚模型模拟了黑曲霉孢子的空间结构,并采用离散偶极子近似(DDA)方法计算了其单次散射参量。黄朝军等^[9]分析了原始颗粒数量和粒子空间结构对烟尘气溶胶凝聚粒子孔隙率的影响,并分析了孔隙率变化对消光性能的影响。Wang 等^[10]先基于团簇-团簇模型和弹道团簇-团簇模型模拟了生物凝聚粒子的空间结构,然后研究了不同模型孔隙率的变化规律及其对凝聚粒子消光性

能的影响。陈曦等^[11]采用团簇-团簇凝聚模型模拟了具有不同分形维数的生物粒子的凝聚模型,并采用 DDA 方法计算了生物粒子的消光性能,结果显示,消光性能随着分形维数的增大而增大。以上研究成果主要集中在单分散生物凝聚粒子方面,但实际生活中所有原始颗粒均为相同凝聚粒子的情况几乎不存在,而多分散生物凝聚粒子更接近实际情况,具有更大的研究价值。鉴于此,本文基于弹道粒子-团簇(BPCA)模型构建了多分散生物凝聚粒子模型,采用 DDA 方法计算了原始颗粒数目、孔隙率和粒径分布对多分散生物凝聚粒子消光性能的影响,目的是通过计算得出生物凝聚粒子消光性能的影响因素,为下一步深入研究生物材料的消光性能提供参考。

2 基本原理

2.1 生物粒子凝聚模型

生物凝聚粒子内部结构的疏松程度可以用孔隙率来描述。生物凝聚粒子的回旋半径 R_g 与凝聚粒子中的原始颗粒个数 N 之间的关系式可以表示为^[12]

$$R_g^2 = \frac{1}{2N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2, \quad (1)$$

收稿日期: 2020-08-13; 修回日期: 2020-08-27; 录用日期: 2020-09-04

基金项目: 国家自然科学基金(62075241)、先进激光技术安徽省实验室基金(20191003)

*E-mail: ylg0912@163.com

式中： r_i 和 r_j 分别表示生物凝聚粒子中第 i 个和第 j 个原始颗粒的坐标向量。生物凝聚粒子的孔隙率可以表示为^[13]

$$P = 1 - \frac{1}{a_c^3} \sum_{i=1}^N a_i^3, \quad (2)$$

式中： a_i 为生物凝聚粒子原始颗粒的半径； a_c 为生物凝聚粒子的特征半径，可以表示为^[13]

$$a_c = \sqrt{5/3} R_g. \quad (3)$$

生物凝聚粒子具有疏松多孔结构，导致入射光在凝聚粒子内部发生多次散射，光的衰减增强，因而凝聚粒子的复折射率与材料本身的复折射率不相等。若假设生物材料的复折射率为 m ，则生物凝聚粒子的等效复折射率可以表示为^[8,14]

$$m_{\text{eff}} = 1 + \frac{3(1-P)(m^2-1)/(m^2+2)}{1-(1-P)(m^2-1)/(m^2+2)}, \quad (4)$$

生物凝聚粒子等效半径的计算公式为

$$R_{\text{eff}} = \sqrt[3]{\sum_{i=1}^N a_i^3}. \quad (5)$$

本研究采用 BPCA 模型模拟粒子的凝聚过程。在 BPCA 模拟过程中，单个初级粒子在随机的线性弹道中沉降，形成一个团簇。所有颗粒均为大小不同的球体，以 1 为黏附概率合并到团簇中。图 1 分别给出了由 20、30、40、50、60 和 70 个原始颗粒构成的粒径服从正态分布、均值为 2.50、方差为 0.50 的多分散生物凝聚粒子模型。

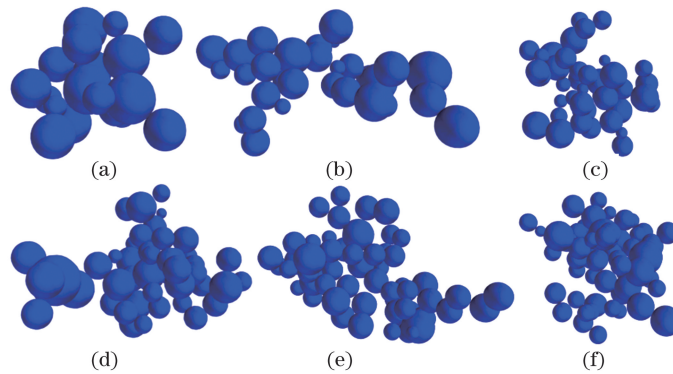


图 1 多分散生物凝聚粒子模型。(a)原始颗粒数量为 20；(b)原始颗粒数量为 30；(c)原始颗粒数量为 40；(d)原始颗粒数量为 50；(e)原始颗粒数量为 60；(f)原始颗粒数量为 70

Fig. 1 Polydisperse biological aggregation particles models. (a) Original particles of 20; (b) original particles of 30; (c) original particles of 40; (d) original particles of 50; (e) original particles of 60; (f) original particles of 70

2.2 DDA 方法

DDA 方法被广泛应用于任意形状粒子消光特性的计算。DeVoe^[15] 在利用单体的光学性质求解凝聚体光学性质时提出了 DDA 方法的框架。在此基础上，Purcell 等^[16] 提出了 DDA 的概念。Draine 等^[17-18] 对 DDA 进行了改进和完善，形成了一套较为完备的 DDA 理论体系。DDA 计算方法的基本原理为：用有限个相互作用的、离散的小偶极子形成的阵列来近似表征实际粒子，而且需要使小偶极子阵列在电磁特性上充分匹配欲描述的实际粒子。

可以用 M 个离散的偶极子表示生物凝聚粒子。

假设第 i 个偶极子的坐标为 r_i ($i=1, 2, \dots, M$)，其产生的极化率为 α_i ，则生物粒子中第 i 个偶极子的偶极矩为^[19]

$$P_i = \alpha_i E_i, \quad (6)$$

式中： $E_i = E_{\text{inc},i} + E_{\text{sca},i}$ 为第 i 个偶极子的总电场强度，为入射场电场强度 $E_{\text{inc},i}$ 与其他所有偶极子产生的散射场强度 $E_{\text{sca},i}$ 之和。

计算获得每个偶极子的电偶极矩 P_i 后，可以通过这些电偶极矩求得生物凝聚粒子的消光截面 C_{ext} 、吸收截面 C_{abs} 和散射截面 C_{sca} ^[20]。计算公式分别为

$$C_{\text{ext}} = \frac{4\pi k}{|E_0|} \sum_{i=1}^M \text{Im}(E_{\text{inc},i}^* \cdot P_i), \quad (7)$$

$$C_{\text{abs}} = \frac{4\pi k}{|E_0|} \sum_{i=1}^M \left\{ \text{Im}[P_i \cdot (\alpha_i^{-1})^* \cdot P_i^*] - \frac{2}{3} k^3 |P_i|^2 \right\}, \quad (8)$$

$$C_{\text{sca}} = \frac{k^4}{|E_{\text{inc}}|^2} \int d\Omega \left| \sum_{i=1}^M [P_i - n(n \cdot P_i)] \exp(-ikn \cdot r_i) \right|^2, \quad (9)$$

式中： $k=2\pi/\lambda$ ， λ 为入射电磁波的波长； \mathbf{E}_0 为入射电场强度； α_i 指的是第 i 个偶极子的极化率；上标 * 表示取复共轭； $d\Omega$ 为立体角微元； n 为散射方向。

3 分析与讨论

3.1 孔隙率对多分散生物凝聚粒子消光特性的影响

在生物凝聚粒子的凝聚过程中，每个颗粒或小

凝聚体的运动方向都是无规则的，因此产生的凝聚模型也具有随机性，凝聚粒子的空间结构也必然存在差异，孔隙率也会随之发生改变。

图 2 给出了用 BPCA 模型模拟得到的由 50 种粒径分布相同的原始颗粒形成的凝聚模型，从中可以很明显地看出，各模型之间存在较大差异。

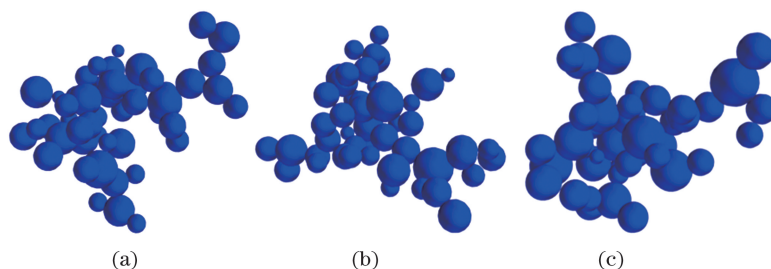


图 2 三种多分散生物凝聚粒子模型 ($N=50$)。 (a) 模型 1；(b) 模型 2；(c) 模型 3

Fig. 2 Three kinds of polydisperse biological aggregation particles models ($N=50$). (a) Model 1; (b) model 2; (c) model 3

表 1 给出 8 次随机生成的凝聚模型的回旋半径 R_g 、孔隙率 P 以及等效折射率的实部 $\text{Re}(m_{\text{eff}})$ 和虚部 $\text{Im}(m_{\text{eff}})$ ，该模型是由 50 种粒径分布相同的原始颗粒凝聚而成的。本研究选择某生物材料为实验样本，测量其反射光谱，并通过 Kramers-Kronig 关系计算其复折射率^[20]的实部和虚部，计算得出实部 $\text{Re}(m)=1.5133$ ，虚部 $\text{Im}(m)=0.1868$ 。从表 1 数据可以看出，各模型之间的参数存在较大的差异，且凝聚粒子孔隙率随回旋半径的增大而增大，等效折射率的实部和虚部均随回旋半径的增大而减小。

表 1 各模型的参数分析

Table 1 Parameter analysis of each model

Model	$R_g/\mu\text{m}$	P	$\text{Re}(m_{\text{eff}})$	$\text{Im}(m_{\text{eff}})$
a	12.5615	0.8841	1.1103	0.0344
b	12.4814	0.8819	1.1126	0.0351
c	12.1734	0.8727	1.1216	0.0381
d	12.0567	0.8690	1.1253	0.0393
e	11.4862	0.8485	1.1458	0.0460
f	11.0710	0.8308	1.1637	0.0520
g	10.3889	0.7952	1.2001	0.0644
h	10.0872	0.7762	1.2198	0.0712

为研究孔隙率对生物凝聚粒子消光特性的影响，选取了三种粒径分布都满足正态分布的生物粒子，研究其在 $10.6 \mu\text{m}$ 波长处孔隙率与消光系数 Q_{ext} 的关系。在第一种粒径分布中，均值为 2.00，方差为 0.50，原始颗粒数量为 40；在第二种粒径分布中，均值为 2.20，方差为 0.40，原始颗粒数量为

50；在第三种粒径分布中，均值为 1.80，方差为 0.30，原始颗粒数为 45。用 DDA 进行消光系数计算时，因为模型的不对称性导致入射光方向不同，消光系数存在较大的差异，故在计算时需采用计算多个方向取平均值的方法，计算结果如图 3 所示。

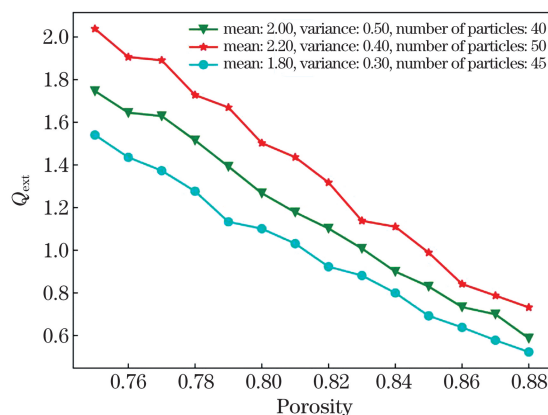


图 3 孔隙率对生物粒子消光系数的影响

Fig. 3 Influence of porosity on extinction coefficient of biological particles

从图 3 中可以看出，对于粒径分布和原始颗粒数量都相同的凝聚粒子，其在 $10.6 \mu\text{m}$ 波长处的消光系数随孔隙率的增加而降低。当原始颗粒数量相同时，凝聚粒子内部的孔隙越大，孔隙率就越大，对光的吸收与散射效果就越差。从图 3 中还可以发现，当凝聚粒子的孔隙率不同时，消光系数存在较大的差异：当孔隙率由 0.75 增大至 0.88 时，消光系数分别从 2.04、1.75、1.54 降至 0.73、0.59、0.52。

接下来研究孔隙率精度对消光系数的影响。选择的孔隙率精度分别为 0.01、0.001 和 0.0001，而

且采用由 50 种粒径满足正态分布(方差为 0.50, 均值为 2.00)的原始颗粒凝聚而成的多分散生物凝聚粒子, 其孔隙率分别为 0.71~0.80(间隔 0.01)、0.830~0.839(间隔 0.001)和 0.8350~0.8359(间隔 0.0001)。每个孔隙率间隔对应的消光系数的计算结果如表 2 所示。

表 2 不同孔隙率间隔对应的消光系数

Table 2 Extinction coefficient corresponding to different interval porosity

No.	Extinction coefficient		
	0.71~0.80 (interval:0.01)	0.830~0.839 (interval:0.001)	0.8350~0.8359 (interval:0.0001)
1	2.21	1.12	1.05
2	2.16	1.15	1.07
3	2.05	1.09	1.05
4	1.90	1.10	1.09
5	1.79	1.05	1.07
6	1.79	1.06	1.06
7	1.60	1.07	1.08
8	1.46	1.08	1.07
9	1.44	1.05	1.06
10	1.26	1.02	1.07

根据每个孔隙率对应的消光系数, 计算相邻孔隙率消光系数的差值占前一个孔隙率对应消光系数的比例, 计算结果如图 4 所示。

由表 2 和图 4 可知: 当孔隙率从 0.71 增加到 0.80 时, 消光系数从 2.21 降低到 1.26, 且呈单调下降的趋势, 不同孔隙率对应的消光系数的差异较大,

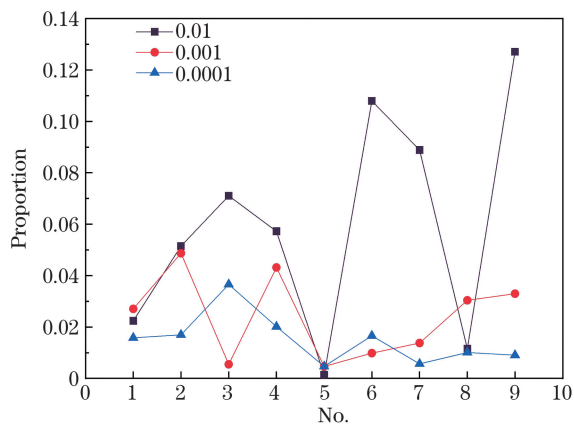


图 4 孔隙率精度对相邻孔隙率消光系数的差值占前一个孔隙率对应消光系数的比例的影响

Fig. 4 Influence of porosity accuracy on ratio of the extinction coefficient difference of adjacent porosity to the corresponding extinction coefficient of the previous porosity

与之前的结论相符; 当孔隙率从 0.830 增加到 0.839 以及由 0.8350 增加到 0.8359 时, 孔隙率在一个数值附近小范围波动, 孔隙率的误差都在 0.05 以内, 此时孔隙率对消光系数的影响可以忽略不计。造成消光系数波动的主要原因有以下两点: 一是用 DDA 计算时偶极子数量不够多带来了计算误差; 二是选定几个方向计算消光系数并取平均值时存在误差。

3.2 原始颗粒数量对多分散生物凝聚粒子消光特性的影响

为研究凝聚粒子中包含的原始颗粒数量对其消光特性的影响, 需要避免凝聚粒子的粒径分布和孔隙率等因素给研究结果带来的误差, 需要控制不同原始颗粒构成的凝聚粒子的粒径分布和孔隙率相同。然而, 粒子凝聚过程具有随机性, 孔隙率无法保持一致。在 3.1 节已经得出结论, 孔隙率差值小于 0.001 时, 孔隙率对消光系数的影响可以忽略不计, 因此这里挑选孔隙率差值小于 0.001 且粒径分布相同的凝聚粒子进行计算。在入射光波长为 $10.6 \mu\text{m}$ 的条件下, 选取三组粒子凝聚模型进行计算。三组粒子凝聚模型的信息如下: 第一组模型中的原始颗粒数量为 20~100, 孔隙率为 0.8450~0.8459, 粒径满足方差为 0.50、均值为 2.00 的正态分布; 第二组模型中的原始颗粒数量为 20~100, 孔隙率为 0.8050~0.8059, 粒径满足方差为 0.50、均值为 2.00 的正态分布; 第三组模型中的原始颗粒数量为 20~100, 孔隙率为 0.8450~0.8459, 粒径满足方差为 0.40、均值为 2.20 的正态分布。计算结果如图 5 所示。

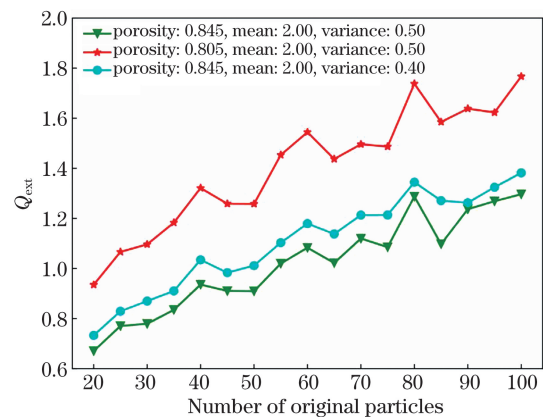


图 5 原始颗粒数量对生物粒子消光系数的影响

Fig. 5 Influence of the number of original particles on extinction coefficient of biological particles

由图 5 可知, 对于粒径分布方式相同且孔隙率差值在 0.001 以内的多分散生物凝聚粒子, 其在 $10.6 \mu\text{m}$ 波长的消光系数随着粒子数的增加而增

大:随着原始颗粒数量从 20 增加到 100,消光系数分别从 0.67、0.73、0.94 增大到 1.30、1.38、1.77。

3.3 粒径分布对多分散生物凝聚粒子消光特性的影响

在研究粒径分布对多分散生物凝聚粒子消光特性的影响时,在控制凝聚粒子原始颗粒数量相同的前提下,同样需要保持不同凝聚模型的孔隙率差值在 0.001 以内。实际上,多分散生物凝聚粒子的粒径分布主要是正态分布,因此本节的研究建立在粒径分布为正态分布的基础之上。

首先采用三组凝聚模型研究正态分布方差对凝聚粒子消光特性的影响。三组凝聚模型的信息如下:第一组模型的孔隙率为 0.8450~0.8459,原始颗粒数量为 50,粒径分布均值为 2.00;第二组模型的孔隙率为 0.8450~0.8459,原始颗粒数量为 40,粒径分布均值为 2.00;第三组模型的孔隙率为 0.8050~0.8059,原始颗粒数为 50,粒径分布均值为 2.00。计算结果如图 6 所示。由图 6 可以看出:对于原始颗粒数量相等、粒径分布均值相同、孔隙率差值在 0.001 以内的多分散生物凝聚粒子,在 10.6 μm 波长处,粒径分布方差对消光特性几乎不产生影响。当粒径分布方差从 0.20 增加到 0.50 时,消光系数分别在 0.917、0.844、1.28 上下波动,各点消光系数与消光系数平均值的误差分别为 2.82%、3.58%、2.60%。

然后研究粒径分布均值对凝聚粒子消光特性的影响,这里采用三组多分散凝聚模型进行计算。三组模型的信息如下:第一组模型的孔隙率为 0.8450~0.8459,原始颗粒数量为 50,粒径分布方差为 0.50;第二组模型的孔隙率为 0.8450~0.8459,原始颗粒

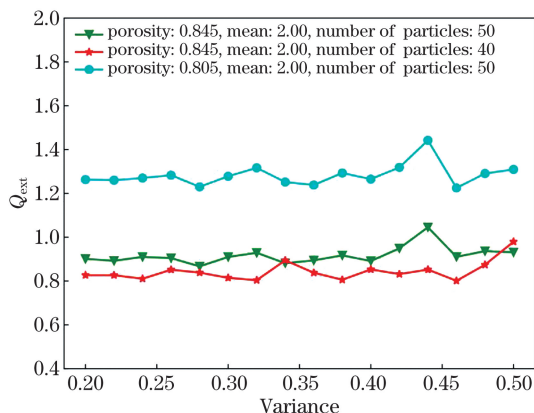


图 6 粒径分布方差对生物粒子消光系数的影响

Fig. 6 Influence of particle size distribution variance on extinction coefficient of biological particles

数量为 40,粒径分布方差为 0.50;第三组模型的孔隙率为 0.8050~0.8059,原始颗粒数量为 50,粒径分布方差为 0.50。计算结果如图 7 所示。

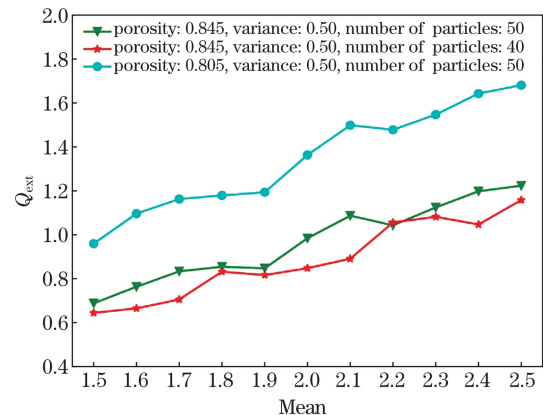


图 7 粒径分布均值对生物粒子消光系数的影响

Fig. 7 Influence of particle size distribution mean on extinction coefficient of biological particles

由图 7 可以看出,对于原始颗粒数量相等、粒径分布方差相同、孔隙率差值在 0.001 以内的多分散生物凝聚粒子,在 10.6 μm 波长处,其消光系数随粒径分布均值的增大而增大;当粒径分布均值从 1.5 增加到 2.5 时,消光系数分别从 0.644、0.688、0.960 增加到 1.16、1.22、1.68。但图 7 中仍有部分曲线呈下降趋势,这主要是因为均值取值范围小,间隔密,均值对消光系数的影响不足以消除计算本身存在的误差。

4 结 论

本研究基于弹道粒子-团簇模型,模拟了多分散凝聚粒子,讨论了由相同数量原始颗粒构成的凝聚粒子模型的孔隙特征,分析了凝聚粒子的回旋半径对孔隙率及等效复折射率的影响。利用 DDA 方法计算了不同凝聚粒子的消光系数,重点分析了 10.6 μm 激光波长下孔隙率、原始颗粒数量和粒径分布对消光性能的影响。结果显示:凝聚粒子的孔隙率随回旋半径的增大而增大,其等效折射率的实部和虚部随回旋半径的增大而减小;凝聚粒子的消光性能随孔隙率的增加而降低,随原始颗粒数量的增加和粒径分布均值的增加而提高。

本文的研究成果对人工制备生物消光材料具有一定的指导意义,可以通过控制生物材料中凝聚粒子的孔隙率、粒径分布、原始颗粒数量等参数使其具有更理想的消光效果。

参 考 文 献

- [1] Hu Y H, Huang B K, Gu Y L, et al. Model construction of biological particles' average extinction efficiency factor in far infrared band[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2018, 47(10): 1004003.
胡以华, 黄宝锬, 顾有林, 等. 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型构建[J]. *红外与激光工程*, 2018, 47(10): 1004003.
- [2] Li L, Hu Y H, Gu Y L, et al. Infrared extinction performance of biological materials[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2017, 37(11): 3430-3434.
李乐, 胡以华, 顾有林, 等. 生物材料红外波段消光性能分析[J]. *光谱学与光谱分析*, 2017, 37(11): 3430-3434.
- [3] Gu Y L, Hu Y H, Zhao X Y, et al. Combined analysis of static and dynamic extinction characteristics of microbial spores and mycelia as a mid-infrared extinction material [J]. *Optik*, 2019, 176: 535-541.
- [4] Gu Y L, Wang C, Yang L, et al. Infrared extinction before and after *aspergillus niger* spores inactivation [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44(1): 36-41.
顾有林, 王成, 杨丽, 等. 黑曲霉孢子灭活前后红外消光特性[J]. *红外与激光工程*, 2015, 44(1): 36-41.
- [5] Gu Y L, Hu Y H, Zhao X Y, et al. Discrimination of viable and dead microbial materials with Fourier transform infrared spectroscopy in 3-5 micrometers [J]. *Optics Express*, 2018, 26(12): 15842-15850.
- [6] Wang X Y, Hu Y H, Gu Y L, et al. Analysis of factors affecting the broadband extinction performance of bioaerosol[J]. *Optik*, 2020, 201:163527.
- [7] Wang X Y, Wang X Y, Hu Y H, et al. Effects of relative humidity on the broadband extinction performance of bioaerosol[J]. *Optics Express*, 2019, 27(17): 23801-23813.
- [8] Zhao X Y, Hu Y H, Gu Y L, et al. Transmittance of laser in the microorganism aggregated particle swarm [J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35 (6): 0616001.
赵欣颖, 胡以华, 顾有林, 等. 微生物凝聚粒子群的激光透射率研究 [J]. *光学学报*, 2015, 35 (6): 0616001.
- [9] Huang C J, Wu Z S, Liu Y F, et al. Effect of porosity on optical properties of aerosol aggregate particles [J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33 (1): 0129001.
- [10] Wang X Y, Hu Y H, Gu Y L, et al. Comparison of two agglomerated particle simulation models for extinction performance calculation of bioaerosol[C]// *International Photonics and OptoElectronics Meeting, Wuhan*. Washington, D. C.: Optical Society of America, 2019, JW4A: JW4A.25.
- [11] Chen X, Hu Y H, Gu Y L, et al. Extinction characteristics of biological aggregated particles in the far infrared band[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2019, 48(7): 0704002.
陈曦, 胡以华, 顾有林, 等. 生物凝聚粒子远红外波段消光特性 [J]. *红外与激光工程*, 2019, 48(7): 0704002.
- [12] Meakin P. Formation of fractal clusters and networks by irreversible diffusion-limited aggregation [J]. *Physical Review Letters*, 1983, 51(13): 1119-1122.
- [13] Kozasa T, Blum J, Mukai T. Optical-properties of dust aggregates. 1. Wavelength dependence [J]. *Astronomy and Astrophysics*, 1992, 263: 423-432.
- [14] Hage J I, Greenberg J M. A model for the optical properties of porous grains [J]. *The Astrophysical Journal Letters*, 1990, 361: 251-259.
- [15] DeVoe H. Optical properties of molecular aggregates. I. Classical model of electronic absorption and refraction [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1964, 41(2): 393-400.
- [16] Purcell E M, Pennypacker C R. Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains [J]. *The Astrophysical Journal Letters*, 1973, 186: 705-714.
- [17] Draine B T. The discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains [J]. *The Astrophysical Journal*, 1988, 333(3): 1491-1499.
- [18] Draine B T, Goodman J. Beyond Clausius-Mossotti-Wave propagation on a polarizable point lattice and the discrete dipole approximation [J]. *The Astrophysical Journal Letters*, 1993, 405: 685-697.
- [19] Draine B T, Flatau P J. Discrete-dipole approximation for scattering calculations [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1994, 11(4): 1491-1499.
- [20] Gu Y L, Hu Y H, Zhao X Y, et al. Determination of infrared complex refractive index of microbial materials [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2018, 217: 305-314.

10.6 μm Laser Extinction Performance of Polydisperse Biological Aggregate Particles

Lu Wei¹, Gu Youlin^{1,2*}, Fang Jiajie¹, Hu Yihua^{1,2}, Ding Wanying¹, Wang Xinyu¹,
Chen Xi¹

¹ State Key Laboratory of Pulsed Power Laser Technology, National University of Defense Technology,
Hefei, Anhui 230037, China;

² Advanced Laser Technology Laboratory of Anhui Province, Hefei, Anhui 230037, China

Abstract

Objective Compared to traditional inorganic extinction materials, biomaterials have advantages relative to environmental protection, non-toxicity, low cost, and controllable form. Thus, biomaterials have become a new type of extinction material. Research into the extinction properties of biomaterials has received increasing attention. And research into the extinction properties of biological aggregate particles is key to studying the extinction properties of biomaterials. The current research results primarily focus on monodisperse biological agglomerate particles; however, in the real-world, there are almost no agglomerate particles with the same radius. Therefore, polydisperse biological agglomerate particles are closer to the actual situation and have greater research value. This paper simulates the polydisperse biological aggregation particles model and calculates the influence of the number of original particles, porosity, and particle size distribution on the extinction performance of polydisperse biological aggregate particles. The purpose of the paper is to calculate factors affecting the extinction performance of biological aggregate particles and provide a reference for future in-depth studies of the extinction properties of biomaterials.

Methods The polydisperse biological aggregation particles model is simulated based on the ballistic particle-cluster aggregation model. The influence of the gyration radius on the porosity and equivalent complex refractive index of aggregate particles is studied. Using the discrete dipole approximation method, we analyze the influence of porosity accuracy on extinction coefficient. In addition, we calculate the extinction coefficient of the polydisperse biological aggregation particles model with different porosity, different numbers of original particles, and different particle size distributions, and we analyze the influence of porosity, particle number, and size distribution on the extinction characteristics of aggregate particles.

Results and Discussions The results demonstrate that the porosity of polydisperse biological aggregate particles increases with increasing gyration radius, and the real and imaginary parts of the equivalent refractive index decrease with increasing gyration radius (**Table 1**). To study the effect of porosity accuracy on the extinction coefficient, we analyze the influence of porosity accuracy of 0.01, 0.001, and 0.0001 on extinction coefficient. The results demonstrate that, when the porosity error range is within 0.001, the influence can be negligible (**Fig. 4**). For aggregate particles with the same size distribution and the same number of original particles, the extinction coefficient at the wavelength of 10.6 μm decreases with increasing porosity (**Fig. 3**). For polydisperse biological aggregate particles with the same particle size distribution and porosity error range within 0.001 at a wavelength of 10.6 μm , the extinction coefficient of aggregate particles increases with an increasing number of original particles (**Fig. 5**). For polydisperse biological aggregate particles with the same number of original particles, the same mean of the particle size distribution, and error range in porosity within 0.001 at a wavelength of 10.6 μm , the variance of the particle size distribution has nearly no effect on the extinction characteristics (**Fig. 6**). For polydisperse biological aggregate particles with the same number of original particles, the same variance in particle size distribution, and an error range in porosity within 0.001 at a wavelength of 10.6 μm , the extinction coefficient increases with the increasing mean of the particle size distribution (**Fig. 7**).

Conclusions Based on the ballistic particle-cluster model, which is used to simulate polydisperse aggregate particles, this paper discusses the pore characteristics of the aggregation particles model comprising the same number of original particles and analyzes the influence of the radius of aggregate particles on porosity and equivalent complex refractive index. The discrete dipole approximation method is employed to calculate the extinction coefficient of different aggregate particles, and the influence of porosity, the number of original particles, and the particle size

distribution on the extinction performance at the 10.6- μm laser wavelength is analyzed. The study finds that the porosity of polydisperse biological aggregate particles increases with increasing radius of gyration, and the real and imaginary parts of the equivalent refractive index decrease with increasing radius of gyration. The extinction performance of aggregate particles decreases with the increasing porosity and increases with an increasing number of original particles and increasing mean of the particle size distribution. The results provide a reference for comprehensive understanding of the extinction properties of biological aggregate particles and for the preparation of biological extinction materials. The extinction performance of biomaterials can be improved by changing the porosity of biological aggregate particles, the number of original particles, and the distribution of particle size.

Key words materials; aggregate particles; discrete dipole approximation; extinction coefficient; influencing factors

OCIS codes 160.1435; 290.2200; 290.5850