

有核细胞对偏振光的散射强度分布

丁驰竹^{1,2} 杨克成¹ 李 微^{1*} 夏 珉¹

(¹ 华中科技大学光学与电子信息学院, 湖北 武汉 430074
² 武汉软件工程职业学院光电子与通信工程系, 湖北 武汉 430205)

摘要 根据海水中浮游微生物的结构特征及尺寸大小,建立了含有同心球核的椭球体模型,使用离散偶极子近似(DDA)方法,对不同形状、大小细胞的光散射 Mueller 矩阵进行计算,分析了线偏振光入射下散射光强空间分布的变化。结果表明,偏振光散射特征对有核细胞的方向、形状、大小、细胞核大小具有灵敏性。研究颗粒对偏振光的散射特征,可以对被测细胞做更细致的分类,对海水中浮游微生物和其他生物细胞的鉴定、研究具有实际应用价值。

关键词 散射;偏振光;颗粒;离散偶极子近似

中图分类号 O436.2 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.1129001

Intensity Distribution of Polarized Light Scattering for a Nucleated Cell

Ding Chizhu^{1,2} Yang Kecheng¹ Li Wei¹ Xia Min¹

¹ School of Optical and Electronic Information, Huazhong University of Science and Technology,
Wuhan, Hubei 430074, China

² Department of Optoelectronics and Communication Engineering, Wuhan Vocational College of Software and
Engineering, Wuhan, Hubei 430205, China

Abstract A model is established as a spheroid with a concentric spherical core according to the morphology and size of marine microbes. The calculation of cells with different sizes and morphologies are implemented using the discrete dipole approximation (DDA) method. With the resulting Mueller matrices, the distributions of polarized light scattering intensity are analyzed. The results show that the polarized light scattering characteristics are sensitive to the orientation, shape, size and size of the nucleated cell. The study on polarized light scattering can be used in classification and research of marine microbes and other cells.

Key words scattering; polarized light; particle; discrete dipole approximation

OCIS codes 010.4458; 290.5850

1 引 言

光散射法是研究水体中浮游微生物的重要手段^[1-6]。例如流式细胞仪将单个细胞的悬液在气压下约束成单列,由喷嘴喷入散射腔,用光电探测器接收多个方向的散射光,可反演细胞的大小^[7]。常规的粒径分析方法往往基于假设被测颗粒为球形,或者可以近似认为是球形颗粒^[8-9],但是细胞的形态

多种多样,且往往含有细胞核。研究已经证明不同模型对散射特性的影响很大^[10-12],简单地用球体来模拟细胞必然产生误差。且目前的检测主要利用细胞对非偏振光的散射,而细胞对偏振光的散射包含了细胞性质更丰富的信息。因此,建立合适的有核细胞模型,研究细胞对偏振光的散射特征,对海水中浮游微生物和其他生物细胞的鉴定、研究具有实际

收稿日期: 2013-05-13; 收到修改稿日期: 2013-07-13

基金项目: 国家自然科学基金(41006019,41276042,61008050)

作者简介: 丁驰竹(1984—),女,博士研究生,讲师,主要从事光电子技术方面的研究。E-mail: bamboodcz@gmail.com

导师简介: 杨克成(1962—),男,教授,博士生导师,主要从事光电子技术和激光技术等方面的研究。

E-mail: keyang@hust.edu.cn

* 通信联系人。E-mail: weili@hust.edu.cn

应用价值。

散射体为均匀球形粒子时,可以用米氏理论得到颗粒散射的精确解。用 T 矩阵方法对散射体表面进行离散化,适用于计算旋转对称小颗粒的散射^[13]。结合瑞利-德拜近似和广义洛伦兹-米氏理论,Rayleigh-Mie (RM)I 方法可计算均匀椭球颗粒的散射,扩展 RM-I 方法可计算分层椭球颗粒散射^[14]。离散偶极子近似(DDA)^[15-16]、有限时间域差分(FDTD)^[17-18]、离散源方法(DSM)^[19]等将散射体离散成小的体积元,每个体积元受相邻体积元的电磁场作用。这类基于体积的计算方法可用于计算形状、结构稍复杂的颗粒散射。

本文根据海水中浮游微生物的结构特征及尺寸大小,建立含有同心球核的椭球体模型,使用离散偶极子近似方法,对线偏振光入射到不同形状、大小细胞的光散射 Mueller 矩阵进行计算,得到了不同情况下的散射光强空间分布。研究表明偏振光散射特征对有核细胞的方向、形状、大小、细胞核大小具有灵敏性。

2 有核细胞理论模型与计算方法

许多学者对细胞的散射模型展开了研究^[14,20-21],常见的模型有球体、圆柱体、椭球体、同心双球体、同心双椭球体等。根据海洋中浮游微生物的形体特征,采用了具有同心球核的椭球体模拟海水中的有核细胞^[14]。

内部的球核表示细胞核,其数学表达式为

$$\frac{x^2}{r^2} + \frac{y^2}{r^2} + \frac{z^2}{r^2} = 1, \quad (1)$$

式中 r 表示细胞核半径,无核细胞可认为是内球核半径 $r=0$ 的特例;细胞核的折射率为 m_a 。外椭球表示细胞质,其数学表达式为

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} = 1, \quad (2)$$

其中 a, b 分别为旋转椭球体赤道半径和极半径, $v = b/a$ 称为纵横比;细胞质的折射率为 m_b 。

2.1 DDA 方法简介

DDA 方法于 1973 年由 Purcell 等^[15]提出。其基本思想是将微粒用有限个位于间隔为 d 的立方体网格上的偶极子来近似。每个偶极子受入射场和其他偶极子产生的电场作用。在有限离散化网格的条件下可采用晶格色散关系(LDR)计算极化率 α_j^{LDR} 和介质介电常数 ϵ_j 之间的关系^[22]。将颗粒视为 N 个偶极子的集合,任一个偶极子处的极化强度 $P_j =$

$\alpha_j E_j$, 其中 E_j 是该处的电场。 E_j 由入射光电场 $E_{\text{inc},j}$ 和其他的 $N-1$ 个偶极子作用的电场组成:

$$E_j = E_{\text{inc},j} - \sum_{k \neq j} A_{jk} P_k, \quad (3)$$

式中 $A_{jk} P_k$ 是位于 r_k 处的偶极子在位置 r_j 引起的电场。

定义 $A_{jj} = \alpha_j^{-1}$, 则(3)式变为

$$E_{\text{inc},j} = \sum_{k=1}^N A_{jk} P_k, \quad (4)$$

若(4)式被求解,通过 P_j 可以计算出颗粒的散射场。

DDA 方法计算的重点在于对(4)式求解。当偶极子是等距的,可以使用复共轭梯度、快速傅里叶变换(FFT)等算法大大提高计算速度^[16]。DDA 算法在微粒折射率 $m \approx 1$ 时精度最高,随着 $|m-1|$ 增大,计算精度降低。对于大折射率 $|m|$,以及大的 ka_{eff} ,需要更多的偶极子才能对颗粒光散射进行更精确的近似。

Draine 等^[23]用 Fortran 编写了公开的 DDA 计算程序 DDSCAT,可以计算不同形状、大小、折射率的多层介质颗粒的散射特性。

2.2 散射光强空间分布计算

任意形状颗粒的散射特性可通过 Stokes-Mueller 方程描述:

$$\begin{bmatrix} I_s \\ Q_s \\ U_s \\ V_s \end{bmatrix} = \frac{1}{k^2 r^2} \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_i \\ Q_i \\ U_i \\ V_i \end{bmatrix}. \quad (5)$$

用 Mueller 矩阵进行分析,涉及到 16 个参数,测量是非常困难的^[24]。在实际应用中,只需要关注其中几个特征明显的偏振分量。散射光强的空间分布受入射光和散射体性质影响显著,且相对容易测量,故探讨线偏振光入射下的散射光强分布特性。

振动方向平行于散射面的线偏振光的斯托克斯矢量为 $(1, 1, 0, 0)$, 振动方向垂直于散射面的线偏振光的斯托克斯矢量为 $(1, -1, 0, 0)$, 因此

$$I_{\parallel s} = (S_{11} + S_{12}) I_{\parallel i}, \quad (6)$$

$$I_{\perp s} = (S_{11} - S_{12}) I_{\perp i}. \quad (7)$$

在任意散射方向上,散射光强为

$$I_s(\theta, \varphi) = I_{\parallel s}(\theta, \varphi) + I_{\perp s}(\theta, \varphi). \quad (8)$$

如图 1 所示,以散射体质心为原点,光波入射方向为 z 轴建立直角坐标系。散射方向和入射方向形成的平面称为散射平面。入射光可分解为沿 x 轴和 y 轴的两个振动分量 E_{xi} 和 E_{yi} 。在方位角为 φ 的

散射平面内,入射光的平行振动分量 $E_{\parallel i}$ 和垂直振动分量 $E_{\perp i}$ 为

$$E_{\parallel i} = \cos \varphi E_{x i} + \sin \varphi E_{y i}, \quad (9)$$

$$E_{\perp i} = \sin \varphi E_{x i} - \cos \varphi E_{y i}. \quad (10)$$

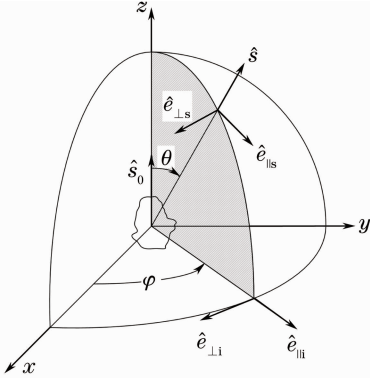


图1 光散射分布函数坐标系定义

Fig. 1 Coordinate system definition of the scattering distribution function

散射光强与入射光强的关系为

$$I(\theta, \varphi) = (S_{11} + S_{12}) |\cos \varphi E_{x i} + \sin \varphi E_{y i}|^2 + (S_{11} - S_{12}) |\sin \varphi E_{x i} - \cos \varphi E_{y i}|^2, \quad (11)$$

(11)式可用于计算光波入射到任意形状颗粒上的散射光强空间分布。

3 结果与分析

3.1 细胞形体模型的影响

分别采用球体、椭球体和具有同心球核的椭球体作为模型,用 DDA 方法计算海水中的一种真核细胞^[14]的散射光强分布。具体计算参数如表 1 所示。

表 1 真核细胞散射模型

Table 1 Scattering models for picoeukaryote

Sphere	Spheroid	Spheroid with a concentric spherical core
$r_{\text{equivalent-volume-sphere}} = 0.63 \mu\text{m}$	$a = 0.5 \mu\text{m}$	$a = 0.5 \mu\text{m}$
$m_b = 1.37$	$b = 1 \mu\text{m}$	$b = 1 \mu\text{m}$
$m_{\text{seawater}} = 1.339$	$v = 2$	$v = 2$
	$m_b = 1.37$	$r = 0.25 \mu\text{m}$
	$m_{\text{seawater}} = 1.339$	$m_a = 1.40$
		$m_b = 1.37$
		$m_{\text{seawater}} = 1.339$

令入射光为波长 $0.66 \mu\text{m}$ 的线偏振光,偏振方向平行于椭球体的极轴。与偏振方向平行的散射平面上散射光强分布如图 2 所示,不同线型代表不同散射模型的散射光强,横坐标表示散射角,纵坐标表示散射强度,采用对数坐标以便更清晰地对比散射

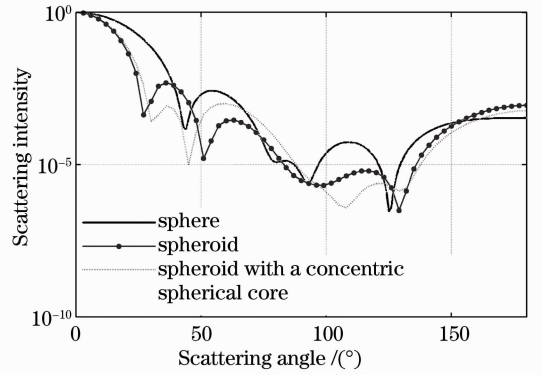


图 2 不同散射模型的散射光强对数分布

Fig. 2 Logarithm distribution of scattering intensity for different simulation models

光强分布。

可见,采用不同的计算模型,所得的散射光强分布是不同的。考虑到细胞的实际形状和细胞核对光散射分布的影响,以具有同心球核的椭球体作为模型,能更真实地模拟有核细胞的散射特性。

3.2 入射光偏振模式的影响

以下均采用具有同心球核的椭球体模型,对真核细胞进行仿真。令入射光为图 1 中沿 x 轴振动的线偏振光。选择如图 3 所示的入射光偏振方向垂直于极轴 (TE 模式)、入射光偏振方向平行于极轴 (TM 模式) 两种特殊情况仿真计算。

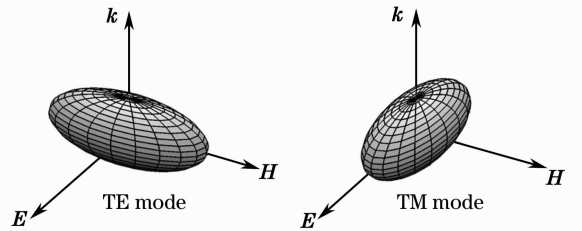


图 3 入射和偏振方向示意图

Fig. 3 Schematic of incident and polarization orientation

图 4 给出了方位角 $\varphi = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ 和 90° 的散射平面上的散射光强分布,不同线型代表不同散射面上的光强。可见散射光强主要集中在前向散射区域;入射光的偏振性质显著影响散射光强分布;在线偏振光入射下,各散射平面上的散射光强分布均不同,尤其是侧向和后向区域差异更为明显。

3.3 细胞形状的影响

保持细胞体积不变,细胞核半径与细胞质短轴半径比为 $1:2$ 不变,改变细胞的纵横比 v ,进行数值计算。图 5 是 $v = 1.5$ 和 1.2 时 TE 模式和 TM 模式下方位角 $\varphi = 0^\circ$ 的散射平面上的散射光强分布图。随着细胞形状趋近于球形,同一种细胞 TE 模

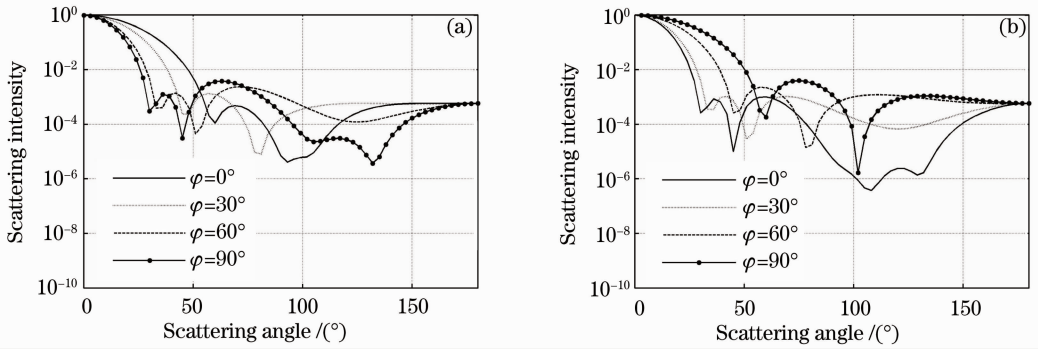


图 4 不同偏振模式入射下的散射光强对数分布。(a) TE 模式;(b) TM 模式

Fig. 4 Logarithm distribution of scattering intensity with different polarization incident modes. (a) TE mode; (b) TM mode

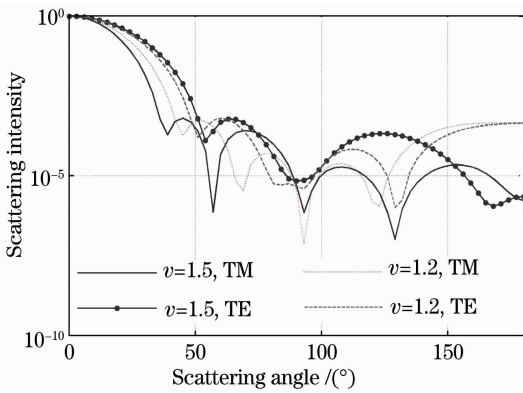


图 5 不同纵横比下的散射光强对数分布

Fig. 5 Logarithm distribution of scattering intensity with different aspect factors

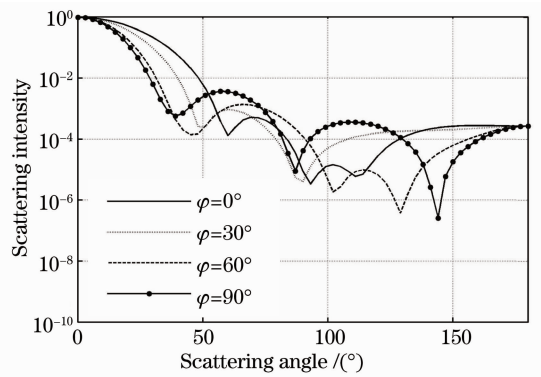


图 6 细胞核半径为 0.35 μm 时 TE 模式的散射光强对数分布

Fig. 6 Logarithm distribution of scattering intensity for $r=0.35 \mu\text{m}$ with TE mode

式和 TM 模式下散射光强分布的差异性减小; $v=1.2$ 时不同散射平面上的后向散射分布几乎相同,但在侧向散射分布上仍有较大差异。

3.4 细胞核大小的影响

保持外椭球的长短轴半径分别为 $1 \mu\text{m}$ 和 $0.5 \mu\text{m}$ 不变,将细胞核半径 r 改为 $0.35 \mu\text{m}$,TE 模式下数值计算的结果如图 6 所示。与图 4 相比,前向散射光分布基本相同,但是侧向和后向散射分布发生了变化。TM 模式与 TE 模式呈类似的变化规律。

3.5 细胞质厚度的影响

保持细胞纵横比 $v=2$,核半径 $r=0.25 \mu\text{m}$ 不变,将外椭球增大至 1.5 倍,即长短轴半径分别为 $1.5 \mu\text{m}$ 和 $0.75 \mu\text{m}$,进行数值计算,TE 模式下的结果如图 7 所示,光强曲线的振荡加剧,振荡峰数目增多。TM 模式的变化趋势与 TE 模式类似。

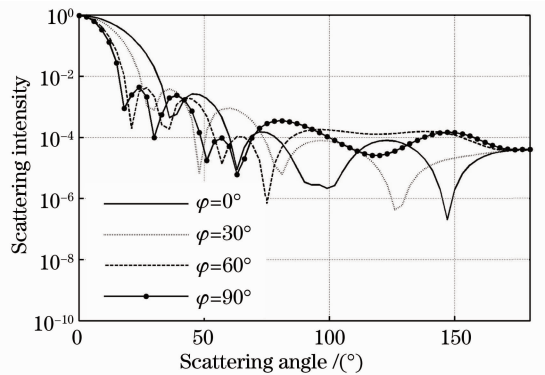


图 7 $a=0.75 \mu\text{m}, b=1.5 \mu\text{m}$ 时 TE 模式的散射光强对数分布

Fig. 7 Logarithm distribution of scattering intensity for $a=0.75 \mu\text{m}, b=1.5 \mu\text{m}$ with TE mode

4 结 论

建立含有同心球核的椭球体模型,使用 DDA 方法,对不同形状、大小细胞的光散射 Mueller 矩阵

进行计算,分析了线偏振光入射下散射光强空间分布的变化。计算结果表明,入射光的偏振性质显著影响散射光强分布;对于同一种颗粒,在线偏振光入射下,方位角不同的散射面上的散射光强分布不同。偏振光散射特征对有核细胞的形状、大小、方向和细胞核大小具有灵敏性。当细胞接近球形时,不同散射面上光强分布差异较小,而随着细胞纵横比的增大,不同散射面上光强分布差异增大,尤其是侧向和后向散射区域更为明显;细胞核大小主要影响的是侧向和后向散射光分布;细胞质厚度增加,光强曲线的振荡加剧,振荡峰数目增多。

可见,测量颗粒的三维体散射函数,比仅测量一个散射平面上的散射光强分布,能提供更多的信息,有助于确定细胞的大小、形状、方位取向、细胞核大小等参数;测量侧向和后向散射区域光强分布,对了解细胞的形状和内部结构信息尤为重要。因此可以根据线偏振光入射下散射光的空间分布,对海水中浮游微生物和其他生物细胞进行鉴定、研究。该方法有望在其他物质的研究上推广使用。

参 考 文 献

- 1 J Uitz, D Stramski, A C Baudoux, *et al.*. Variations in the optical properties of a particle suspension associated with viral infection of marine bacteria [J]. *Limnology and Oceanography*, 2010, 55(6): 2317-2330.
- 2 H Loisel, X Mériaux, J F Berthon, *et al.*. Investigation of the optical backscattering to scattering ratio of marine particles in relation to their biogeochemical composition in the eastern English Channel and southern North Sea [J]. *Limnology and Oceanography*, 2007, 52(2): 739-752.
- 3 L Karp-Boss, L Azevedo, E Boss. LISST-100 measurements of phytoplankton size distribution: evaluation of the effects of cell shape [J]. *Limnol Oceanogr Methods*, 2007, 5: 396-406.
- 4 M E Zügger, A Messmer, T J Kane, *et al.*. Optical scattering properties of phytoplankton: Measurements and comparison of various species at scattering angles between 1 and 170 [J]. *Limnology and Oceanography*, 2008, 53(1): 381-386.
- 5 Shi Kun, Li Yunmei, Wang Qiao, *et al.*. Study of scattering coefficients model in inland eutrophic lake [J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, 30(9): 2478-2485.
- 6 施 坤, 李云梅, 王 桥, 等. 内陆湖泊富营养化水体散射系数模型研究[J]. *光学学报*, 2010, 30(9): 2478-2485.
- 7 Liu Zhonghua, Li Yunmei, Tan Jing, *et al.*. Simulation of backscattering properties of particles in Taihu Lake based on optical closure principle [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(7): 0701002.
- 8 刘忠华, 李云梅, 檀 静, 等. 基于光学闭合原理的太湖水体颗粒物后向散射特性模拟[J]. *光学学报*, 2012, 32(7): 0701002.
- 9 Wang Yawei, Cai Lan, Wu Dajian. Influencing upon light scattering of variety of cell's body and cytoplasm's thickness in measurement of their size distribution [J]. *Chinese J Lasers*, 2005, 32(9): 1300-1304.
- 10 王亚伟, 蔡 兰, 吴大建. 细胞形体和胞质厚度变化对光散射法测量细胞大小分布的影响[J]. *中国激光*, 2005, 32(9): 1300-1304.
- 11 Zheng Gang, Zhang Zhiwei, Cai Xiaoshu, *et al.*. On line particle size analysis and concentration measurement with light scattering

- [J]. *Chinese J Lasers*, 1998, 25(3): 285-288.
- 12 郑 刚, 张志伟, 蔡小舒, 等. 颗粒浓度及粒度的光散射在线测量[J]. *中国激光*, 1998, 25(3): 285-288.
- 13 Zhang Yingying, Wang Qinghua, Lu Hongyan, *et al.*. Equivalent particle's model of biological tissue and calculation of Mie phase function [J]. *Acta Laser Biology Sinica*, 2007, 16(1): 79-83.
- 14 张颖颖, 王清华, 陆红艳, 等. 生物组织光散射等效颗粒模型及 Mie 相函数计算[J]. *激光生物学报*, 2007, 16(1): 79-83.
- 15 R Drezek, A Dunn, R Richards-Kortum. A pulsed finite-difference time-domain (FDTD) method for calculating light scattering from biological cells over broad wavelength ranges [J]. *Opt Express*, 2000, 6(7): 147-157.
- 16 H He, W Li, X Zhang, *et al.*. Light scattering by a spheroidal bubble with geometrical optics approximation [J]. *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*, 2012, 113(12): 1467-1475.
- 17 J D Keener, K J Chalut, J W Pyhtila, *et al.*. Application of Mie theory to determine the structure of spheroidal scatterers in biological materials [J]. *Opt Lett*, 2007, 32(10): 1326-1328.
- 18 Shao Shiyong, Huang Yinbo, Wei Heli, *et al.*. Phase function of prolate spheroidal mono-disperse aerosol particles [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, 29(1): 108-113.
- 19 邵士勇, 黄印博, 魏合理, 等. 单分散长椭球形气溶胶粒子的散射相函数研究[J]. *光学学报*, 2009, 29(1): 108-113.
- 20 B Shao, J S Jaffe, M Chachisvilis, *et al.*. Angular resolved light scattering for discriminating among marine picoplankton: modeling and experimental measurements [J]. *Opt Express*, 2006, 14(25): 12473-12484.
- 21 E M Purcell, C R Pennypacker. Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains [J]. *The Astrophysical Journal*, 1973, 186: 705-714.
- 22 B T Draine, P J Flatau. Discrete-dipole approximation for scattering calculations [J]. *J Opt Soc Am A*, 1994, 11(4): 1491-1499.
- 23 M A Yurkin, A G Hoekstra, R S Brock, *et al.*. Systematic comparison of the discrete dipole approximation and the finite difference time domain method for large dielectric scatterers [J]. *Opt Express*, 2007, 15(26): 17902-17911.
- 24 R S Brock, X-H Hu, P Yang, *et al.*. Evaluation of a parallel FDTD code and application to modeling of light scattering by deformed red blood cells [J]. *Opt Express*, 2005, 13(14): 5279-5292.
- 25 K V Gilev, E Eremina, M A Yurkin, *et al.*. Comparison of the discrete dipole approximation and the discrete source method for simulation of light scattering by red blood cells [J]. *Opt Express*, 2010, 18(6): 5681-5690.
- 26 Yuan Run, Wang Yawei, Cai Lan. Several optical approximate model and light message distribution characteristics of red blood cells [J]. *Chinese J Lasers*, 2009, 36(10): 2614-2618.
- 27 袁 润, 王亚伟, 蔡 兰. 红细胞的几种光学近似模型及其光信息分布特征[J]. *中国激光*, 2009, 36(10): 2614-2618.
- 28 Wu Dajian, Wang Yawei, Han Guangcai. Model for elastic light scattering from nucleated cells [J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, 25(12): 1670-1675.
- 29 吴大建, 王亚伟, 韩广才. 有核细胞的弹性光散射模型[J]. *光学学报*, 2005, 25(12): 1670-1675.
- 30 B T Draine, J Goodman. Beyond Clausius-Mossotti: wave propagation on a polarizable point lattice and the discrete dipole approximation [J]. *The Astrophysical Journal*, 1993, 405: 685-697.
- 31 B T Draine, P J Flatau. User Guide for the Discrete Dipole Approximation Code DDSCAT 7.1 [OL]. arXiv:1002.1505v1 [astro-ph.IM], 2010-02-08.
- 32 Wu Yunzhi, Wei Qingnong, Wang Shimei, *et al.*. Measurement of material surface's Mueller matrix by Fourier decomposition [J]. *Chinese J Quantum Electronics*, 2007, 24(6): 714-720.
- 33 吴云智, 魏庆农, 汪世美, 等. 用 Fourier 分解法测量材料表面的 Mueller 矩阵[J]. *量子电子学报*, 2007, 24(6): 714-720.