

文章编号:1004-4213(2011)12-1884-4

# 利用光镊计算工具箱实现光镊系统的参量评价

郑明杰

(福建师范大学 物理与光电信息科技学院, 福州 350007)

**摘 要:**光镊所捕获的微球尺度常常落在中间尺度上,导致相关参量难于计算. OTT1 光镊工具箱是一种基于广义 Lorenz-Mie 理论的 T-matrix 方法,它的发展使得对光镊系统的详细计算和评价成为可能. 本文对光镊的轴向捕获特性曲线、线性性和刚度,以及杜克系列微球的互换性做了计算和评价. 结果表明:光镊所用物镜的数值孔径越接近水的折射率捕获效果越好;0.8~1.2  $\mu\text{m}$  的聚苯乙烯微球组成的光镊刚度较大;直径在 2  $\mu\text{m}$  以下的聚苯乙烯微球组成的光镊线性度较好;0.8~2  $\mu\text{m}$  的 Duke 系列聚苯乙烯微球的互换性较好,便于纳米光镊的修正与实验;要避免米共振微球的直径要在 2.5  $\mu\text{m}$  以下.

**关键词:**光镊;中间尺度;刚度;OTT1 工具箱;聚苯乙烯微球

**中图分类号:**O436.2

**文献标识码:**A

**doi:**10.3788/gzxb20114012.1884

## 0 引言

以一束高斯模式的激光,一个高数值孔径的物镜和微球为基本主体结构的光镊,由发明至今的 40 年间,它在微观世界尤其是生物微观世界发挥着巨大作用. 光镊的准确度在力上达到皮牛,空间尺度上达到埃,即 0.1 nm 的尺度,远远超过传统光学显微镜的衍射极限<sup>[1-4]</sup>. 大部分光镊捕获的微球其球径落在 100 nm 到 10  $\mu\text{m}$  区间,如果波长为 1 064 nm,则基本上落在中间尺度(intermediate range)  $0.1\lambda < D < 10\lambda$  上<sup>[5]</sup>. 落在这个范围内的粒子的捕获力的计算不能使用瑞利散射的计算公式或 A. Ashkin 的几何光学光镊理论来计算,而只能用直接求解较难的米散射理论来计算<sup>[6]</sup>. T-matrix 法是在广义 Lorenz-Mie 理论(Generalized Lorenz-Mie Theory, GLMT)基础上发展的一种计算方法,因为 T 矩阵计算和微球以及光束焦点的相对位置无关,因此特别适用于计算机的循环计算. OTT1 光镊计算工具箱就是基于 T-matrix 方法建立的工具箱<sup>[7-10]</sup>. 由于激光场不满足亥姆霍兹方程,因此在近轴聚焦光场中多极子展开上只能做近似的展开. 而对于强聚焦的情形仍然存在问题<sup>[11]</sup>,但可使用点匹配法(point-matching method)求得入射激光场的近似多极子展开. 点匹配法有两种,第一种是焦面匹配法,第二种是无限远场匹配法. 这两种方法都提供了一

个过决定系统(over-determined system)来决定有限的多极子展开系数. OTT1 工具箱使用的是无限远场匹配法.

需要说明的是,因为在微观生物学研究中,主要利用的是光镊的轴向特性,所以本文利用这个工具箱对光镊的轴向主要参量做了详细地计算和评价,主要的计算和评价对象有光镊的轴向捕获特性曲线,光镊刚度(stiffness)以及轴向捕获效率. 同时,考虑到光镊主要应用于生物学,而 800~1 064 nm 的近红外波段是生物样本吸收较少的一个波段;且入射光波长越长,粒子的参量尺寸越小,米共振(Mie resonance)的影响也就越小;因此以下的计算均设定所用的高斯激光波长为 1 064 nm. 因为调整激光功率可以线性改变光镊的刚度,所以在程序中激光功率统一设为 1 mW. 又由于激光的偏振态对捕获效率有影响,因此激光的偏振态均设置为线偏光. 再者,相比 silica 球等其它种类微球,聚苯乙烯微球在水中的相对折射率为 1.2,根据 A. Ashkin<sup>[6]</sup>及 T. A. Nieminen<sup>[12]</sup>的计算结果,聚苯乙烯微球的捕获效果最稳定,受米共振影响最小. 因此以下的计算对象均为聚苯乙烯微球. 此外,关于显微镜结构的选择上,倒置与正置各有优势都可以选择. 单单从光学角度看,倒置的光镊的作用范围上较大,因此较有优势. 这一点可以从捕获效率曲线上看出,  $-z$  方向的捕获范围总是较大. 但是在这种显微镜结构下物

基金项目:福建省教育厅(No. JB10019)资助

第一作者:郑明杰(1972-),男,讲师,博士研究生,主要研究方向为微纳米光学、信息光学、生物医学成像. Email: mj.zheng@189.cn

收稿日期:2011-09-28;修回日期:2011-11-21

镜被限制为只能用油浸物镜. 而油浸物镜捕获深度一般在较短的  $20\ \mu\text{m}$  范围内<sup>[13]</sup>, 且容易因玻片倾斜产生收差, 破坏聚焦与捕获效果. 而水浸物镜则没有这些缺点, 且对于纳米光镊 1 倍波长的  $+z$  捕获范围也足够, 但水浸只用于正置.

## 1 物镜数值孔径的计算和讨论

图 1 所示为  $1\ 064\ \text{nm}$  激光照射在水中的 1 倍波长直径的聚苯乙烯微球上的轴向捕获效率曲线, 即捕获效率随轴向位移变化曲线. 由曲线可以看出所使用的物镜的数值孔径 (NA) 越大, 光捕获的捕获曲线的中间部分的梯度就越大, 且有较大的最大捕获效率峰值. 但需要说明的是这不意味着 NA 值超过水折射率 1.33 的物镜就能取得更好的捕获效果. 对于油浸物镜通常有 1.4 的数值孔径, 但实际上在水中的不能达到这样数值, 而必定小于水的折射率 1.33. NA=1.4 是当物镜用于成像时所能达到的数值孔径, 而不是用于聚焦光束所能达到的数值孔径. 同样, 在全内反射显微镜中用到的 NA=1.6 或以上的物镜, 如果将它用于光镊其实际 NA 值也不会超过 1.33. 其原因是光线由光密介质到光疏介质运行时会出现全反射. 实际上, 对于水浸物镜, 因为受限于物镜的工作距离与物镜的直径, 其最大 NA 值只能达到 1.273. NA=1.25 比较靠近这个值, 因此 Leitz PLAPO NA1.25W 做为水浸物镜的代表在 A. Ashkin 的早期论文中有提到<sup>[6]</sup>.

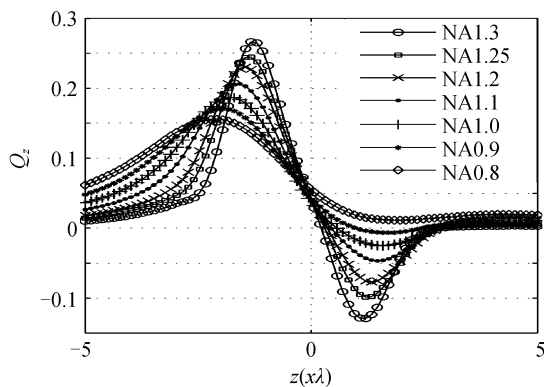


图 1 不同数值孔径下的轴向捕获特性曲线  
Fig. 1 Plotted axial trapping coefficient curves with different numerical apertures

## 2 纳米光镊的计算和讨论

首先, 纳米光镊的实验中很关键的是对轴向捕获特性曲线的线性部分做关于位移的修正. 光镊的轴向捕获特性曲线的线性越好, 光镊越接近与理想线性弹簧且修正的量就少. 光镊的轴向捕获效率为  $Q_z = F_z / (nP/c)$ , 其中  $F_z$  为轴向捕获力,  $n$  为水的折射率,  $P$  为激光功率,  $c$  为光速. 图 2 为各种具

有典型直径的聚苯乙烯微球的轴向捕获特性曲线. 由图 2 可以用肉眼初步判断微球直径在  $2\ \mu\text{m}$  以下, 都有较好的线性. 理论评价上尽管使用了拟合尤度 (goodness of fit statistics) 的统计方法, 仍没能得到有区分能力的结果. 原因是线性段选取上不得不掺入人眼的判断. 图 2 中对  $5\ \mu\text{m}$  和  $6\ \mu\text{m}$  的曲线, 横坐标 80 对应 10 倍波长的偏移. 对其他曲线 80 对应 5 倍波长的偏移. 横坐标 40 对应 0 偏移.

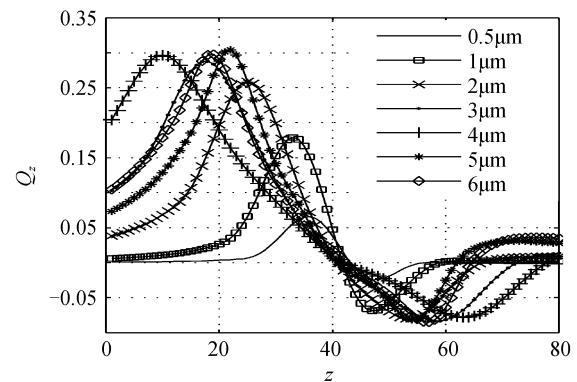


图 2 各种具有典型直径的聚苯乙烯微球的轴向捕获特性曲线

Fig. 2 Plotted the axial trapping coefficient curves of polystyrene sphere with typical diameters

其次, 纳米光镊的最重要参量是刚度  $\kappa_z = -F_z/z = -(nP/cz)Q_z$ , 其中  $z$  为轴向位移, 刚度越大光镊的敏感性越好或者说准确度越高. 因为这种光镊对很微小的位移都能产生较大的捕获力, 而生物学应用研究中的分子位移都是非常微小的, 因此刚度越高的光镊越适用于生物学测量实验. 对光镊刚度的评价是通过计算轴向捕获效率曲线上的直线部分的梯度间接进行的, 根据  $\kappa_z = -(nP/c)Q_z$ . 图 3 计算了  $1\ 064\ \text{nm}$  激光经 NA=1.2 的水浸物镜聚焦后捕获各种直径的聚苯乙烯微球的捕获曲线的斜率. 图中系列 1 使用 Matlab 的直线拟合功能由捕获曲线的最大点到最小点拟合计算其斜率; 系列 2 选择了捕获曲线的中间部分上线性较好的一段共 4 个计算点, 长度约  $400\ \text{nm}$  左右, 而后做直线拟合计算

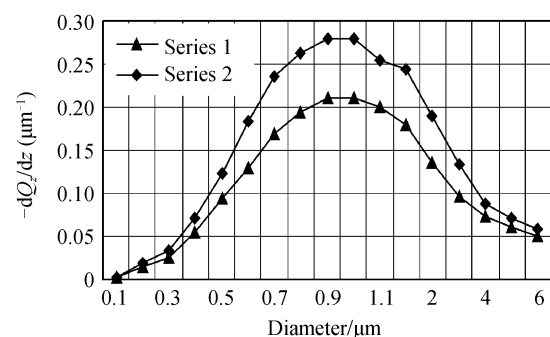


图 3 不同直径微球轴向捕捉特性曲线的中间部分的梯度  
Fig. 3 Calculated the gradient of the center part of the axial trapping coefficient curve varied with different diameters

斜率. 两条曲线的结果都表明聚苯乙烯微球直径在800~1 200 nm区间内有理想的捕获效果. 这个计算结果对于选择合适直径的微球来制作纳米光镊有指导意义.

再者, 光镊中常用的微球有 Polyscience, 杜克 (Duke) 和英杰 (Invitrogen) 产的系列微球. 无论哪一种, 由于微球分散系的生成原因, 都会存在直径上的偏差 (Variation). 这使得光镊的修正实际上存在一个问题, 就是微球的互换性. 在同一个系列的微球中, 不同微球可能有不同的捕获曲线, 曲线可能不重合而有差别. 而在进行光镊实验时, 不可能只限于使用一个修正过的微球来进行光镊实验. 最好在玻片上的同一系列的微球都可以用于捕获实验, 即最好能做到修正一个微球就等于修正整个系列的微球. 为此计算了 Duke 的各个系列微球的情况. 图 4 是 Duke4009A 系列中有微小直径差别的聚苯乙烯微球的捕获曲线, 每根曲线的微球的参量尺寸 (parameter size) 相差仅 0.05, 参量尺寸  $x=kr$ ,  $k$  为水中光的波长,  $r$  为微球半径. 由图可见 4 根曲线几乎重合, 这意味着这个系列中的所有微球可以互换,

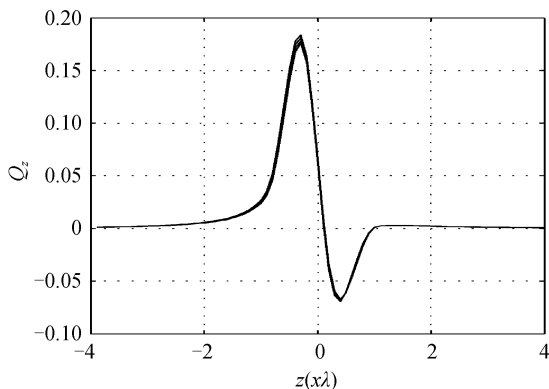


图 4 直径约为 1 000 nm 的杜克 4009A 系列聚苯乙烯微球的 4 条轴向捕获效率曲线

Fig. 4 Four axial trapping efficiency curves of Duke 4009A series polystyrene sphere with a diameter of about 1  $\mu\text{m}$

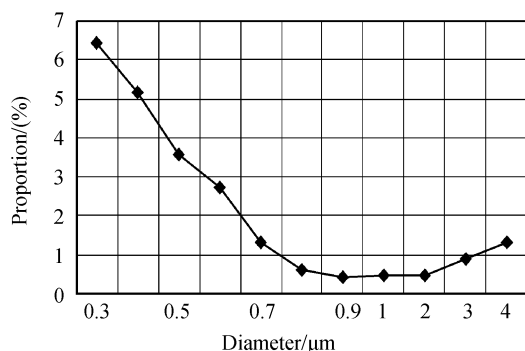


图 5 杜克各系列微球的梯度标准偏差和平均梯度的比例

Fig. 5 The proportion of the gradient deviation and the averaged gradient were calculated for different Duke series

因此引起的刚度误差很小. 图 5 是对 Duke 各个不同尺寸系列微球的具体计算结果. 纵坐标表示的是同系列中由于微球直径微小不同引起的捕获曲线斜率的变化占平均斜率的百分比. 由图可见 800~2 000 nm 的误差较小, 在 1% 以下, 就是说直径在这个范围中的聚苯乙烯微球较适合用于构建纳米光镊.

最后, 米共振是米散射的特有现象, 瑞利散射中没有这种现象. 当微球的直径或参量尺寸达到一定程度这种现象就开始逐渐表现出来. 图 6 计算了最大捕获效率随参量尺寸的变化情况. 整个计算在中间尺度即  $0.1\lambda < D < 10\lambda$  中进行, 每个计算点的参量尺寸间隔为 0.05. 图上右侧部分可见由米共振造成的快速震荡的光镊捕获效果. 震荡周期对应参量尺寸  $x$  约为 1. 为了避免米共振对光镊的影响, 保守地可以选择微球的参量尺寸在 10 以下, 对于 1 064 nm 激光在水中波长约 800 nm, 根据  $\chi = (\pi/\lambda)D$ , 可算出参量尺寸 10 对应  $D$  约为  $2.54 \mu\text{m}$ . 即纳米光镊的聚苯乙烯微球直径应在  $2.54 \mu\text{m}$  以下, 以避开米共振的影响. 此外又因为米共振是光电场共振, 有可能导致微球吸热进而导致折射率变化, 因此在制作纳米光镊时应该避开米共振.

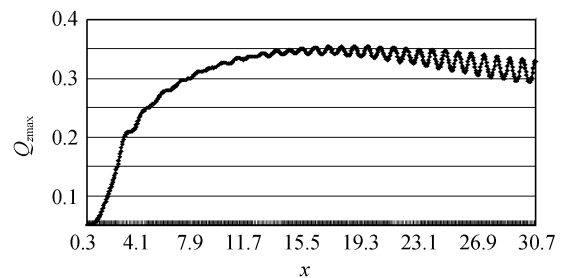


图 6 最大轴向捕获效率随参量尺寸变化的曲线 (曲线的计算范围为中间尺度)

Fig. 6 Curve of the maximum of the axial trapping efficiency as a function of parameter size  $x$

### 3 结论

本文的结果是理论的近似计算结果, 和实际值有偏差, 但是这些结果有助于了解光镊, 掌握关于纳米光镊设计上必要的知识. 下一步研究的问题主要是物镜焦点直径的问题. 在所使用的算法中并没有考虑到光学衍射极限,  $\text{NA}=1.25$  水浸物镜聚焦 1 064 nm 激光时工具箱算出的焦点直径仅有  $0.118 \mu\text{m}$ , 远远超过衍射极限的 400 nm. 这个问题和前文提到的强聚焦光束的多极子展开是下一步的研究方向.

#### 参考文献

- [1] MATTHEW J L, POLLY M F, ANITA M E, *et al.* Simultaneous, coincident optical trapping and single-molecule fluorescence[J]. *Nature Methods*, 2004, 1(2): 133-139.

- [2] KEYSER U F, KOELEMAN B N, DORP S V, *et al.* Direct force measurements on DNA in a solid-state nanopore[J]. *Nature Physics*, 2006, **2**(7): 473 - 477.
- [3] MEHTA A D, RIEF M, SPUDICH J A, *et al.* Single-molecule Biomechanics with optical methods [J]. *Science*, 1999, **283**(5408): 1689-1695.
- [4] FAZAL F M, BLOCK S M. Optical tweezers study life under tension[J]. *Nature Photonics*, 2011, **5**(6): 318 - 321.
- [5] KAWATA S. Near-field optics [M]. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2001: 123.
- [6] ASHKIN A. Forces of a single-beam gradient laser trap on a dielectric sphere in the ray optics regime [J]. *Biophysical Journal*, 1992, **61**(2): 569-582.
- [7] NIEMINEN T A, LOKE V L Y, STILGOE A B, *et al.* Optical tweezers computational toolbox[J]. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 2007, **9**(8): 196-203.
- [8] NIEMINEN T A, RUBINSZTEIN-DUNLOP H, HECKENBERG N R. Calculation of the T-matrix: general considerations and application of the point-matching method [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2003, **79-80**: 1019-1029.
- [9] NIEMINEN T A, RUBINSZTEIN-DUNLOP H, HECKENBERG N R. Hybrid T-matrix methods [C]. *Electromagnetic and Light Scattering Theory and Applications VII*, Universitat Bremen, Bremen, T. Writ(ed). 2003: 263-266.
- [10] NIEMINEN T A, LOKE V L Y, KNAONER G, *et al.* Toolbox for calculation of optical forces and torques [J]. *Piers Online*, 2007, **3**(3): 338-342.
- [11] NIEMINEN T A, RUBINSZTEIN-DUNLOP H, HECKENBERG N R. Vector spherical wavefunction expansion of a strongly focused laser beam[C]. Presented at 6th Conference on Electromagnetic and Light Scattering by Nonspherical Particles: Theory, Measurements, and Applications Gainesville, Florida, USA, 2002.
- [12] STILGOE A B, NIEMINEN T A, KNONER G, *et al.* The effect of Mie resonances on trapping in optical tweezers[J]. *Optics Express*, 2008, **16**(19): 15039-15051.
- [13] MAHMOUDI A, NADER S, REIHANI S. The effect of immersion oil in the optical tweezers [J]. *Optics Express*, 2011, **19**(16): 14794-14800.

## Parameter Evaluation of Optical Tweezers System Using Optical Tweezers Computational Toolbox

ZHENG Ming-jie

(College of Physics and Opto-electronic Information, Fujian Normal University, Fuzhou 350007, China)

**Abstract:** Because the diameter of the trapped sphere obtained by the optical tweezer usually locates in the intermediate range, theoretical calculation was difficult. OTT1 optical tweezers computational toolbox is a kind of T matrix method based on the GLMT theory. The development of the OTT1 optical tweezers computational toolbox makes detailed calculation and evaluation feasible. In this paper, the optical trapping efficiency curve, its linearity and stiffness, and the interchangeability of Duke series polystyrene sphere were calculated and evaluated. The results show that when the numerical aperture becomes closer to the refractive index of water, a better trapping effect will be achieved; when an 800 ~ 1 200 nm polystyrene sphere is trapped, the stiffness of optical tweezers is larger; when a PS sphere with diameter smaller than 2 000 nm is used, the linearity of optical tweezers is better; when Duke series sphere with a 800 ~ 2 000 nm diameter is adopted, the interchangeability between the same series spheres is better, which will be convenient to calibrate the nanometer optical tweezers; for avoiding Mie resonance, the sphere diameter should be smaller than 2 500 nm.

**Key words:** Optical tweezers; Intermediate range; Stiffness; Optical tweezers computational toolbox; Polystyrene microsphere