

人工制备生物颗粒结构对宽波段消光性能的影响

黄宝锟, 胡以华, 顾有林, 赵义正, 李 乐, 赵欣颖

- (1. 脉冲功率激光技术国家重点实验室, 安徽 合肥 230037;
2. 电子制约技术安徽省重点实验室, 安徽 合肥 230037)

摘 要: 为研究多态生物颗粒对目标探测等电磁设备的影响, 将制备出的絮状生物颗粒等效为子弹玫瑰花型粒子, 构建不同分枝数目和分枝长度的生物颗粒, 采用离散偶极子近似法计算生物颗粒消光效率因子。结果表明: 生物颗粒结构对宽波段消光性能存在较大影响。远红外波段, 生物颗粒消光性能与分枝数目和分枝长度成正相关; 毫米波段, 生物颗粒消光性能与颗粒分枝长度成正相关, 与分枝数目关系很小。在研究消光效率因子与分枝数目和分枝长度关系的基础上, 构建了生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型。模型的构建将为生物颗粒宽波段消光性能研究以及形态控制提供参考。

关键词: 生物颗粒; 消光效率因子; 宽波段; 消光性能; 离散偶极子近似

中图分类号: O433.1; O436.2 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201847.0321002

Influences of artificial biological particles structures on broadband extinction performance

Huang Baokun, Hu Yihua, Gu Youlin, Zhao Yizheng, Li Le, Zhao Xinying

- (1. State Key Laboratory of Pulsed Power Laser, Hefei 230037, China;
2. Key Laboratory of Electronic Restriction of Anhui Province, Hefei 230037, China)

Abstract: To study the impact of the polymorphic biological particles on the electromagnetic equipment such as target detection, the artificially prepared flocculent biological particles were equivalent to bullet rosette particles. Then the biological particles with different number and length of branches were built, and the discrete dipole approximation(DDA) method was used to calculate the extinction efficiency factor for biological particles. The results show that the structures of biological particles have great impact on the broadband extinction performance. The extinction performance of biological particles is positively correlated to the number and length of branches in the far infrared waveband and is positively correlated to its length of branches but independent of its number of branches in the millimeter waveband. Based on studying the relationship of extinction efficiency factor with the number and length of branches, the biological particles average extinction efficiency factor in the far infrared waveband was constructed. The model provides a reference for the further extinction performance study and morphology control of biological particles.

Key words: biological particles; extinction efficiency factor; broadband; extinction performance; discrete dipole approximation

收稿日期: 2017-10-05; 修订日期: 2017-11-03

基金项目: 国家自然科学基金(61271353, 60908033); 安徽省自然科学基金(1408085MKL47)

作者简介: 黄宝锟(1992-), 男, 硕士生, 主要从事生物材料消光方面的研究。Email: 479912155@qq.com

导师简介: 胡以华(1962-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事空间光电信息处理方面的研究。Email: skl_hyh@163.com

0 引言

生物气溶胶是指形体微小的单细胞或近似单细胞生物,包括空气中的细菌、真菌、病毒、尘螨、花粉、孢子、动植物碎裂分解体等,稳定地悬浮于气体介质中形成的分散体系^[1-2]。通常,大气中的生物颗粒浓度较低,不能对大气宏观特性产生影响,对遥感、探测、定位设备的使用影响同样较小。但在某些特定环境下,例如春季杨柳絮、花粉集中传播以及人为释放等因素,空气中局部区域的生物颗粒浓度迅速增大,这将对环境监测、大气遥感、目标探测等方面产生严重的不利影响。

目前,针对生物消光性能的研究已经取得了一些成果,采用不同的粒子散射计算方法得到了生物细胞的消光特性^[3-10]。K.P. Gurton^[11]等测量了光通过雾化枯草芽孢杆菌溶液的透过率,分析了其红外消光性能。Rebekah Drezek等^[12]利用有限时域差分法,计算了生物细胞宽波段光散射特性。Maxim Kalashnikov等^[13]通过实验得到了生物细胞光散射图,研究了细胞体和细胞器对后向散射的影响。W Wu等^[14]使用电子显微镜计算了生物样品的光学特性。李乐等^[15]计算了黑曲霉孢子的复折射率,求出了黑曲霉孢子红外波段的质量消光系数。顾有林等^[16]分析了黑曲霉孢子灭活前后的红外波段消光性能。

上述研究只分析了生物颗粒在可见光和红外波段的消光性能,均未考虑在毫米波段的消光性能,然而大量探测设备工作于毫米波段。对于生物颗粒的建模,大部分应用于细胞,并将其等效为理想化的、对称的、均匀分布的球形、椭球形粒子或由球形粒子组成的复杂结构来处理,而未将生物颗粒的形状多样性突显出来。但是,大多数生物颗粒形态复杂多样,比如球状、杆状、链状、丝状以及絮状等,有的还有复合结构。球形粒子将不能逼真地表征这些生物颗粒,生物颗粒结构必将对其消光性能产生较大影响。

为了进一步研究生物颗粒结构对宽波段消光性能的影响,文中构建了不同分枝数目和分枝长度的生物颗粒,采用离散偶极子近似法(DDA)计算了生物颗粒的消光效率因子,进而构建了生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型。重点讨论生物颗粒分枝数目、分枝长度对宽波段消光性能的影响。

1 生物颗粒消光机理及其建模

1.1 生物颗粒电磁衰减机理

生物细胞由细胞核(或核区)、细胞壁、细胞膜、细胞基质以及随机分布在细胞质基质中的线粒体、高尔基体、核糖体等各种细胞器组成。由于生物细胞的多层结构,造成电磁波的多层反射折射散射衰减,使生物颗粒具有较强的消光能力,生物颗粒电磁衰减机理如图1所示。

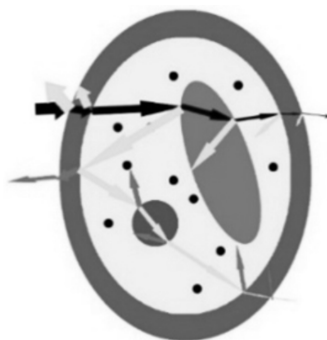


图1 生物颗粒电磁衰减机理

Fig.1 Electromagnetic attenuation mechanism of biological particles

1.2 离散偶极子近似法

在计算粒子散射问题上,主要有 Mie 散射理论^[17]、射线跟踪法^[18]、有限时域差分^[19]、T 矩阵^[20]和 DDA^[21]等方法。其中,DDA 适用于计算任意形状、任意组分粒子的散射。其基本思想可概括为:将任意形状的粒子离散成有限个规则排列的偶极子阵列,入射电磁波辐射场使偶极子极化,获得偶极矩。与此同时,其周围偶极子也被极化获得偶极矩^[10]。

1.3 生物颗粒几何描述模型

图2为该课题组制备出的某真菌菌丝类生物材

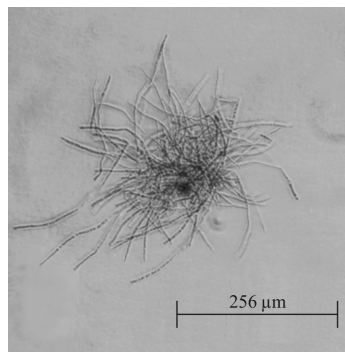


图2 某生物材料显微镜图

Fig.2 Microscope image of a biological material

料显微镜图。由图2可以看出该生物材料微观结构是由数个到数千个长度为100~200 μm的丝状物彼此交错缠绕在一起,形成的絮状结构。丝状物长度为几百微米,宽度为几微米,形成的絮状物空间尺寸在10~100 μm范围内。该絮状物尺度范围分布极其广泛,对多波段电磁波具有消光作用。

将图2中絮状生物颗粒结构抽象简化,等效为子弹玫瑰花型粒子^[22],如图3所示。

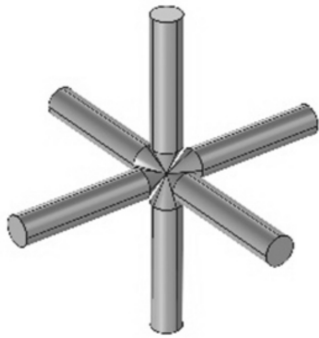


图3 一个六枝的子弹玫瑰花型粒子

Fig.3 Bullet rosette particle with six branches

子弹玫瑰花型粒子由尖角圆柱即圆柱加圆锥组合而成。尖角圆柱的个数为子弹玫瑰花型粒子的枝数 N 。分枝长度 L 和分枝半径 R 如图4所示。

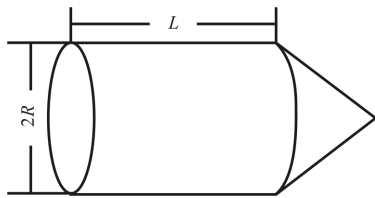


图4 子弹分枝结构参数

Fig.4 Bullet branches structural parameters

2 生物颗粒消光性能建模与计算

采用 DDA 法计算粒子的单次消光参量,有两个重要参数:复折射率和有效半径。由于该生物材料分别在远红外波段和毫米波段复折射率的变化不大,文中采用远红外波段和毫米波段平均复折射率计算。该生物材料远红外波段平均复折射率 m 为 $1.4993+0.4349i$,毫米波段平均复折射率 m 为 $1.2763+0.1587i$,均满足 DDA 算法的使用条件: $|m-1| \leq 2$ ^[23]。

有效半径采用以下公式计算^[24]:

$$r_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{5}{3N} \sum_{i=1}^N |r_i - \langle r \rangle|^2} \quad (1)$$

式中: N 为偶极子个数; r_i 为偶极子的相对位置; $\langle r \rangle$ 为粒子的中心位置。

2.1 生物颗粒消光性能与分枝数目间的关系

构建如图5所示六种不同分枝数目的颗粒。

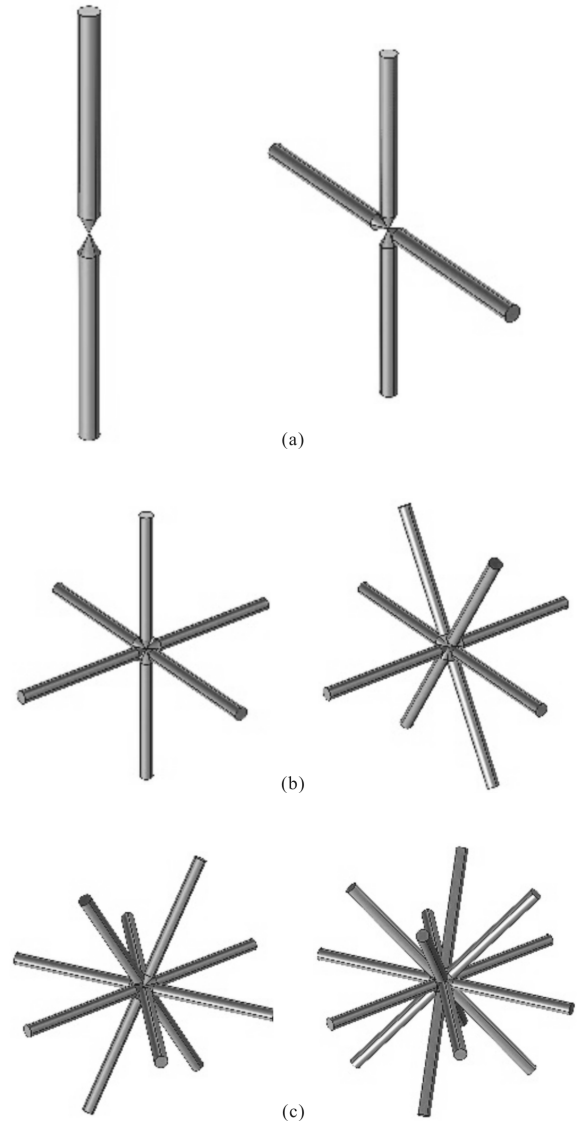


图5 不同分枝数目的子弹玫瑰花型粒子

Fig.5 Bullet rosette particle with different branches number

其他计算参数如表1所示。

表1 计算参数

Tab.1 Parameters value of calculation

| N | $L/\mu\text{m}$ | $R/\mu\text{m}$ | λ |
|------|-----------------|-----------------|----------------|
| 2-14 | 90 | 5 | 6-15 μm 3-8 mm |

文中采用消光效率因子表示颗粒的消光能力,用 DDA 法计算上述颗粒在远红外和毫米波段的消光效率因子。图 6 为上述六种颗粒的消光效率因子在远红外波段和毫米波段随波长的变化趋势。

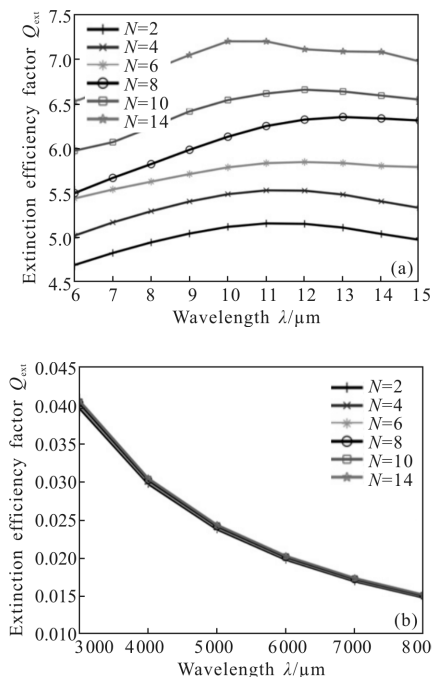


图 6 不同分枝数目的子弹玫瑰花型粒子的消光效率因子
Fig.6 Extinction efficiency factor of bullet rosette particle with different branches number

由图 6 可以看出,颗粒远红外波段消光性能远远好于毫米波段。这是由于在远红外波段,颗粒有效粒径和入射波长可比拟,而在毫米波段,颗粒有效粒径远远小于入射波长。在毫米波段,颗粒的消光性能随波长呈下降趋势,颗粒消光性能与分枝数目无关。这是因为入射波长远远大于颗粒有效粒径,并且它们的尺寸相对于波长变化很小。

在远红外波段,颗粒的消光性能随波长呈上升趋势,颗粒消光性能与分枝数目呈正相关。这是因为随着分枝数目的增加,颗粒有效半径增大,颗粒复杂度增加,加强了颗粒的吸收和散射作用,进而提高了其消光性能。

为进一步讨论颗粒分枝数目对颗粒消光性能的影响,取上述六种颗粒在远红外波段消光效率因子的平均值,如表 2 所示。

为构建平均消光效率因子与分枝数目之间的关系,对表 2 中数据进行拟合。根据数值拟合结果,在

表 2 远红外波段平均消光效率因子

Tab.2 Average extinction efficiency factor in the far infrared waveband

| N | 2 | 4 | 6 | 8 | 10 | 14 |
|---------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| $Q_{ext,ave}$ | 5.010 2 | 5.268 5 | 5.824 5 | 6.171 1 | 6.331 9 | 6.981 5 |

分枝长度一定的条件下,颗粒平均消光效率因子模型为:

$$Q_{ext,ave} = -0.005\ 05N^2 + 0.240N + 4.51 \quad (0 < N < 23) \quad (2)$$

远红外波段平均消光效率因子随分枝数目变化趋势如图 7 所示。其中, Adjusted R^2 为调整的拟合优度,它是表征模型对样本观测值拟合程度的量。 Adjusted R^2 值越接近于 1,表示拟合程度越好。由图 7 Adjusted R^2 值可以看出,该次拟合程度较好。

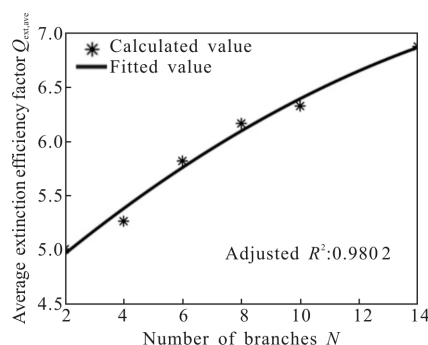


图 7 远红外波段平均消光效率因子
Fig.7 Average extinction efficiency factor in the far infrared waveband

2.2 生物颗粒消光性能与分枝长度间的关系

构建九种不同分枝长度的颗粒,分枝长度为 10、20、30、40、50、60、70、80、90 μm 。计算参数如表 3 所示。

表 3 计算参数

Tab.3 Parameters value of calculation

| N | $L/\mu\text{m}$ | $R/\mu\text{m}$ | λ |
|-----|-----------------|-----------------|---------------------------|
| 14 | 10-90 | 5 | 6-15 μm 3-8 mm |

为简单起见,图 8 中只显示其中五种结构颗粒的消光效率因子在远红外波段和毫米波段随波长的变化趋势。

由图 8 可以看出,在毫米波段,颗粒的消光性能随波长呈下降趋势,颗粒消光性能与分枝长度成正

相关。这说明,分枝长度越长,颗粒尺寸越大,颗粒消光性能越好。

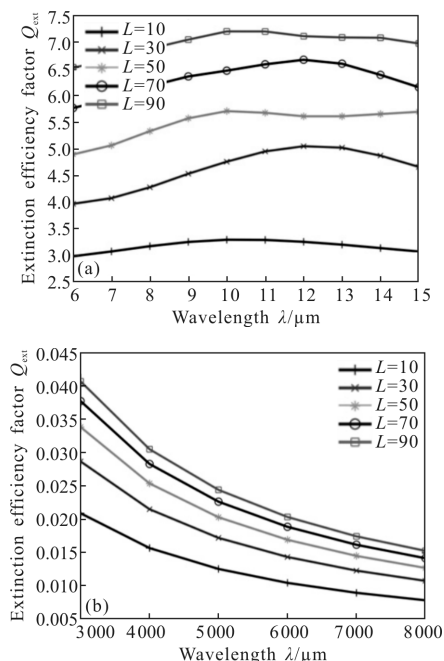


图8 不同分枝长度的子弹玫瑰花型粒子的消光效率因子

Fig.8 Extinction efficiency factor of bullet rosette particle with different branches length

在远红外波段,颗粒的消光性能随波长呈上升趋势,颗粒消光性能与分枝长度呈正相关。这同样是因为随着分枝长度的增加,颗粒有效半径增大,颗粒复杂度增加,尺寸变大,加强了颗粒的吸收和散射作用,进而提高了其消光性能。

为进一步讨论颗粒分枝长度对颗粒消光性能的影响,取上述九种颗粒在远红外波段平均消光效率因子的平均值,如表4所示。

表4 远红外波段平均消光效率因子

Tab.4 Average extinction efficiency factor in the far infrared waveband

| L | $Q_{ext,ave}$ |
|----|---------------|
| 10 | 3.185 4 |
| 20 | 3.986 8 |
| 30 | 4.624 4 |
| 40 | 5.144 8 |
| 50 | 5.486 8 |
| 60 | 5.870 2 |
| 70 | 6.313 1 |
| 80 | 6.665 5 |
| 90 | 6.981 5 |

为构建平均消光效率因子与分枝长度之间的关系,对表4中数据进行拟合。根据数值拟合结果,在分枝数目一定的条件下,颗粒平均消光效率因子模型为:

$$Q_{ext,ave} = -0.000273L^2 + 0.0729L + 2.58 \quad (0 < L < 130) \quad (3)$$

红外波段平均消光效率因子随分枝数目变化趋势如图9所示。由图9 Adjusted R^2 值可以看出,该次拟合程度较好。

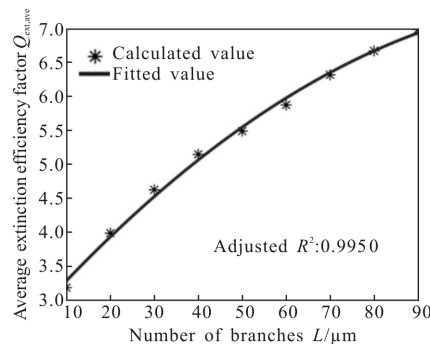


图9 远红外波段平均消光效率因子

Fig.9 Average extinction efficiency factor in the far infrared waveband

2.3 生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型

综合2.1、2.2节所得,生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型为:

$$Q_{ext,ave} = -0.00505N^2 + 0.240N - 0.000273L^2 + 0.0729L + \varphi \quad (0 < N < 23, 0 < L < 130) \quad (4)$$

式中: φ 为常数,根据表2、表4中数据可求得15组 φ 值,取平均值 $\varphi=0.1955$ 。因此,生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型为:

$$Q_{ext,ave} = -0.00505N^2 + 0.240N - 0.000273L^2 + 0.0729L + 0.1955 \quad (0 < N < 23, 0 < L < 130) \quad (5)$$

为验证该模型,重新构建了十种不同分枝数目和分枝长度的颗粒,用公式(5)与DDA法分别计算其平均消光效率因子。经比较,两者误差在10%以内,能够满足使用要求,体现了分枝数目和分枝长度对颗粒消光性能的影响。因此公式(5)所示的生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型可用于快速计算颗粒消光效率因子,计算时间相比于DDA法大大缩短,对颗粒消光性能进行有效评估和比较。

综合2.1、2.2、2.3节所述,分枝数目和分枝长度对生物颗粒的消光性能存在较大影响。远红外波段,生物颗粒的消光性能与分枝数目和分枝长度成正相关,消光效率因子可用公式(5)所示的生物颗粒远红

外波段平均消光效率因子模型简化计算。毫米波段,生物颗粒的消光性能与分枝长度成正相关。文中所得模型适用于计算该结构颗粒远红外波段平均消光效率因子,对于其他结构颗粒平均消光效率因子的计算,可采用同样方法拟合出 $Q_{\text{ext,ave}}=f(N,L)$ 即可。

3 结论

将絮状结构生物颗粒等效为子弹玫瑰花型粒子,利用 DDA 计算复杂结构生物颗粒的消光效率因子,构建生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型,讨论颗粒结构对宽波段消光性能的影响。结果表明:分枝数目和分枝长度对生物颗粒的消光性能存在较大影响。

(1) 远红外波段,生物颗粒消光性能与分枝数目和分枝长度成正相关;

(2) 远红外波段,该结构生物颗粒平均消光效率因子可用公式 $Q_{\text{ext,ave}}=-0.00505N^2+0.240N-0.000273L^2+0.0729L+0.1955$ 所示的生物颗粒远红外波段平均消光效率因子模型简化计算,计算时间相比于 DDA 法大大缩短,与 DDA 法相比计算误差小于 10%;

(3) 毫米波段,生物颗粒消光性能与颗粒分枝长度成正相关。

上述结论可为生物颗粒的宽波段消光性能研究及其形态控制提供理论依据。文中旨在提出一种计算絮状生物颗粒消光性能的方法,下一步工作中,将充分考虑复杂结构絮状生物颗粒的分枝弯曲程度以及生物聚集颗粒的宽波段消光性能进行研究,探究多态生物颗粒对目标探测等电磁设备的影响。

参考文献:

[1] Feng Mingchun, Xu Liang, Gao Minguang, et al. Optical properties research of Bacillus subtilis spores by fourier transform infrared spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(12): 3193-3196. (in Chinese)
冯明春, 徐亮, 高闽光, 等. 傅里叶红外变换光谱仪对枯草芽孢杆菌的光学特性研究 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, 32(12): 3193-3196.

[2] Du Xi, Li Jinsong. Research progress of microbial aerosol pollution monitoring and detection technology [J]. *J Prev Med Chin PLA*, 2011, 29(6): 455-458. (in Chinese)
杜茜, 李劲松. 微生物气溶胶污染监测检测技术研究进展

[J]. *解放军预防医学志*, 2011, 29(6): 455-458.

[3] Ross K F A, Eve Billing. The water and solid content of living bacterial spores and vegetative cells as indicated by refractive index measurement[J]. *J Gen Microbiol*, 1997, 16: 418-525.

[4] Velazco-Roa M A, Zhongova E D, Thennadil S N. Complex refractive index of nonspherical particles in the visible near infrared region-application to Bacillus subtilis spores[J]. *Appl Opt*, 2008, 47(33): 6183-6189.

[5] Tuminello P S, Arakawa E T, Khare B N, et al. Optical properties of Bacillus subtilis spores from 0.2-2.5 μm [J]. *Appl Opt*, 1957, 36(3): 2818-2824.

[6] Zhao Xinying, Hu Yihua, Gu Youlin, et al. Transmittance of laser in the microorganism aggregated particle swarm [J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(6): 0616001. (in Chinese)
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.

[7] Sun Dajuan, Hu Yihua, Wang Yong, et al. Sub-microstructures' influences on cell's scattering prosperities [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2013, 42(6): 710-714. (in Chinese)
孙杜娟, 胡以华, 王勇, 等. 生物细胞亚显微结构对光散射特性的影响[J]. *光子学报*, 2013, 42(6): 710-714.

[8] Feng Chunxia, Huang Lihua, Zhou Guangchao, et al. Computation and analysis of light scattering by monodisperse biological aerosols [J]. *Chinese J Lasers*, 2010, 37(10): 2592-2598. (in Chinese)
冯春霞, 黄立华, 周光超, 等. 单分散生物气溶胶光散射特性的计算与分析[J]. *中国激光*, 2010, 37(10): 2592-2598.

[9] Bu Min. The approximate model of blood cells and its light scattering characteristics [D]. Zhenjiang: Jiangsu University, 2011. (in Chinese)
卜敏. 血液细胞逼近模型及其光散射特征的研究[D]. 镇江: 江苏大学, 2011.

[10] Liu Jianbin, Zeng Yingxin, Yang Chuping. Light scattering study of biological cells with the discrete dipole approximation[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2014, 43(7): 2204-2208. (in Chinese)
刘建斌, 曾应新, 杨初平. 基于离散偶极子近似生物细胞光散射研究[J]. *红外与激光工程*, 2014, 43(7): 2204-2208.

[11] Gurton K P, Ligon D A, Kvilavilashvili R. Measured infrared spectral extinction for aerosolized Bacillus subtilis var. niger endospores from 3 to 13 μm [J]. *Appl Opt*, 2001, 40(15): 4443-4448.

[12] Drezek R, Dunn A, Richardskortum R. A pulsed finite-difference time-domain (FDTD) method for calculating light

- scattering from biological cells over broad wavelength ranges. [J]. *Optics Express*, 2000, 6(7): 147.
- [13] Kalashnikov M, Choi W, Hunter M, et al. Assessing the contribution of cell body and intracellular organelles to the backward light scattering. [J]. *Optics Express*, 2012, 20(2): 816.
- [14] Wu W, Radosevich A J, Eshein A, et al. Using electron microscopy to calculate optical properties of biological samples [J]. *Biomedical Optics Express*, 2016, 7(11): 4749–4762.
- [15] Li Le, Hu Yihua, Gu Youlin, et al. Infrared extinction performance of *Aspergillus niger* spores [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2014, 43(7): 2175–2179. (in Chinese)
李乐, 胡以华, 顾有林, 等. 黑曲霉孢子红外波段消光性能研究[J]. 红外与激光工程, 2014, 43(7): 2175–2179.
- [16] Gu Youlin, Wang Cheng, Yang Li, et al. Infrared extinction before and after *aspergillus niger* spores inactivation [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44(1): 36–41. (in Chinese)
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.
- [17] Wiscombe W J. Improved Mie scattering algorithms [J]. *Applied Optics*, 1980, 19(9): 1505–1509.
- [18] Yong P, Liou K N. Parameterization of the scattering and absorption properties of individual ice crystals [J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 2000, 105 (D4):4699–4718.
- [19] Gedney S D. An anisotropic perfectly matched layer absorbing medium for the truncation of FDTD lattices [J]. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 1996, 44 (12): 1630–1639.
- [20] Karsten Schmidt, Jochen Wauer. Scattering database or spheroidal particles [J]. *Applied Optics*, 2009, 48(11): 2154–2164.
- [21] Hannakaisa Lindqvist. Light scattering by coated Gaussian and aggregate particles [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2009, 110 (9–11): 262–273.
- [22] Iaquina J, Isaka H, Personne P. Scattering phase function of bullet rosette ice crystals [J]. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 1995, 52(9): 1401–1413.
- [23] Draine B T. User Guide for the Discrete Dipole Approximation Code DDSCAT 7.3 [Z].
- [24] Honeyager R, Liu G, Nowell H. Voronoi diagram-based spheroid model for microwave scattering of complex snow aggregates [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2015, 170: 28–44.