

时域有限差分法数值仿真单光镊中微球受到的光阱力*

胡耿军¹⁾ 李静^{1)†} 龙潜¹⁾ 陶陶¹⁾ 张恭轩¹⁾ 伍小平²⁾

1)(中国科学技术大学精密机械与精密仪器系,合肥 230027)

2)(中国科学技术大学近代力学系,合肥 230027)

(2010年3月23日收到;2010年5月26日收到修改稿)

本文采用三维时域有限差分法(FDTD)和Maxwell应力张量法建立了单光镊在焦点附近俘获球形微粒的光阱力模型,采用基于球矢量波函数(VSWF)的五阶高斯光源作为仿真光源,得到了准确的光场传播.讨论了光源的波长、束腰、偏振态和微球的半径、折射率对光阱力的影响,分析了在单光镊俘获微球时,邻近微球对光阱力的影响.特别研究了光源的偏振态对微球所受光阱力的作用效果,仿真结果表明圆偏振光比线偏振光对微球的俘获力更大;被光镊稳定俘获的微球,会受到邻近微球干扰,失去平衡状态,改变光源的偏振态可以改变微球的受力状态.

关键词: 光镊, 光阱力, 介质微球, 时域有限差分法(FDTD)

PACS: 03.50.De, 42.25.Gy, 42.62.-b

1. 引言

1970年, Ashkin 观察到了激光辐射力, 完成了激光悬浮微粒实验^[1], 提出了光镊技术或称光阱技术. 1986年, Ashkin 等人突破性地实现了单光束会聚光对水溶液中的介质微粒稳定俘获^[2]. 此后, 各国科学家利用光镊技术进行了冷却和操纵原子、测量DNA的拉伸特性等^[3-7]一系列研究, 推动了光镊技术的发展. 相对于光镊实验技术的快速发展, 对光镊的理论分析计算较为滞后. 目前根据光镊中被俘获微粒的尺度将光阱力的计算方法分为三类: 当微粒的尺寸远远大于入射光波长时, 满足米氏散射条件, 按几何光学近似算法来计算^[8,9]; 当微粒的尺寸远远小于入射光波长时, 满足瑞利散射条件, 把微粒看作电磁场中感应出的电偶极子, 受到洛伦兹力的作用^[10]; 而当微粒的尺寸落在这两个区域之间即微粒的尺寸在 $0.1-10\lambda$ (λ 为入射光波长)范围内时, 上述两种方法就不适用, 而实验中众多的研究对象在这个区域中, 近年来解决的办法是把光镊中光的传播看成是电磁散射过程, 通过求解Maxwell方程得到电磁场的分布, 再由坡印亭矢量或Maxwell

应力张量的方法获得光阱力. 求解电磁场分布的数值方法通常有有限元法(FEM)^[11], T矩阵法^[12-14], 时域有限差分法(FDTD)^[15-17]. 其中有限元法由于空间网格尺度和时间尺度都不能取太小导致应用范围受限, T矩阵适用于高度对称的微粒, 而FDTD可以处理复杂形状目标的电磁散射、辐射等问题, 同时给出电磁场的时间演化过程, 因而被用于本文中数值仿真光镊俘获微球的光阱力.

本文采用三维FDTD方法, 基于球矢量波函数描述不同偏振态的激光高斯光源, 仿真光镊光场在焦点前后的分布, 利用Maxwell应力张量方程计算微球受到的光阱力, 讨论了在单光镊中被俘获微球受到的光阱力与光源、微球参数的关系以及邻近微球对稳定俘获微球的作用力, 特别分析了光源的偏振态对力的作用效果影响.

2. 计算方法

2.1. FDTD 中高斯光源的设置

FDTD是一种电磁场数值计算方法, 是由Yee^[18]于1966年提出的, 它是从微分形式的

* 国家自然科学基金(批准号:50975271)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail:lijing@ustc.edu.cn

Maxwell 旋度方程出发进行时域差分离散,把计算域空间划分成包含电场和磁场的网格. 在本文中采用的是 PML 吸收边界^[19],为了保证仿真的准确度,网格的大小不大于 $\lambda/20$.

在 FDTD 中,根据等效原理通过更新某一平面上的切向电场值和磁场值来加入光源. 通常的文献中选用以下零阶傍轴高斯光束截面振幅分布公式^[15]作为激励源:

$$A = A_0 e^{-\left(\frac{r}{W}\right)^2}, \quad (1)$$

式中 A 表示截面上某点的振幅, A_0 为光束截面中心的振幅, r 为截面上某点离中心的距离, W 为截面的束腰. 由于(1)式从傍轴波动公式中推导出来的,不是 Maxwell 方程的严格解,而光镊光源高度会聚,振幅发生剧烈变化,因此将在傍轴条件下得到的(1)式代入 FDTD 程序中模拟电磁场的传播形式不够准确. 为此,本文中选用以下球矢量波函数(VSWF)^[20,21]表达的五阶高斯光源作为入射场:

$$E_{\text{inc}} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [a_{mn} \text{Rg}M_{mn}(kr, \theta, \phi) + b_{mn} \text{Rg}N_{mn}(kr, \theta, \phi)], \quad (2)$$

$$H_{\text{inc}} = -j\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [b_{mn} \text{Rg}M_{mn}(kr, \theta, \phi) + a_{mn} \text{Rg}N_{mn}(kr, \theta, \phi)], \quad (3)$$

式中 $E_{\text{inc}}, H_{\text{inc}}$ 分别为入射场的电场和磁场分量, k 为波数, a_{mn}, b_{mn} 为展开系数, $\text{Rg}M_{mn}, \text{Rg}N_{mn}$ 为建立在球坐标系上的矢量波函数. 当采用 x 方向线偏振光时, m 取 1 和 -1 , 展开系数为^[22]

$$a_{1n} = a_{-1n} = -b_{1n} = b_{-1n} = -(-i)^{n+1} [4\pi(2n+1)]^{1/2} g_{5,n}, \quad (4)$$

式中

$$g_{5,n} = \exp[-s^2(n-1)(n+2)] \times \{1 + (n-1)(n+2)s^4\}$$

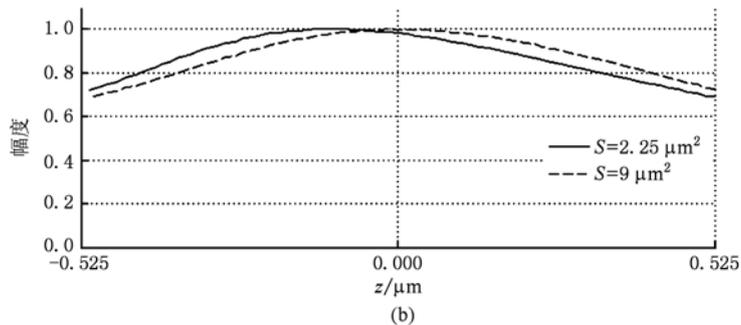
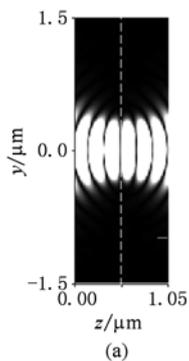


图1 (a)用 VSWF 公式仿真得到的会聚高斯光场强度分布;(b)源平面的尺寸对仿真计算准确性的影响

$$\begin{aligned} & \times [3 - (n-1)(n+2)s^2] \\ & + (n-1)^2(n+2)^2s^8 \\ & \times [10 - 5(n-1)(n+2)s^2 \\ & + 0.5(n-1)^2(n+2)^2s^4] \}, \quad (5) \\ s & = 1/k\omega_0, \quad (6) \end{aligned}$$

ω_0 为激光的束腰半径, n 为球面波的数量,当 $n \leq 25$ 时,得到的场值基本没有变化^[13],本文中取 $n = 30$. 图 1(a)为将 VSWF 公式代入 FDTD 中进行仿真,得到的会聚光场强度分布图,入射光波长为 600 nm,束腰为 300 nm,光源面设在 $z = 0$ 处,焦点在 $z = 0.525 \mu\text{m}$,经过 FDTD 仿真,光源准确地会聚在设定的焦点位置.

在 FDTD 仿真中,光源面的大小影响光场传播的计算. 光源的面积越大,光场分布越正确. 图 1(b)表示的是光轴上电场的振幅分布图, $z = 0$ 为设定的焦点位置,实线表示的源面积为 $2.25 \mu\text{m}^2$,虚线表示的源面积为 $9 \mu\text{m}^2$,实线的会聚效果明显不如虚线的准确,所以在 FDTD 仿真中光源的面积要尽可能地大.

2.2. 光阱力的计算

浸没在液体中的介质微球所受的电磁场力可由以下的 Maxwell 应力张量积分公式求得:

$$F = \int_S \langle T \rangle \cdot dS, \quad (7)$$

式中 T 为 Maxwell 应力张量,

$$T = \epsilon(E \cdot n)E + \mu(H \cdot n)H - \frac{1}{2}(\epsilon E^2 + \mu H^2)n, \quad (8)$$

ϵ, μ 分别为背景介质的介电常数和磁导率, n 为微球外表面的法线矢量, dS 为微球表面法线方向向外的微面元, E 和 H 分别取电场和磁场的总场值,尖括号 $\langle \rangle$ 表示求时间平均值.

仿真计算所用的计算机配置如下: intel 双核 E5200 CPU, 主频 2.52 GHz, 3.50 G 内存. 采用 matlab 编程. 由于受到计算机内存的限制, FDTD 计算空间取为 $250 \times 250 \times 120$ 个网格.

仿真中采用的光镊光源波长 1200 nm, 束腰 600 nm, 功率 10 mW, x 方向线偏振, 硅微球半径 600 nm, 折射率 $n_s = 1.46$, 浸没在水中 (水的折射率 $n_b = 1.33$), 光场沿 z 轴正方向传播.

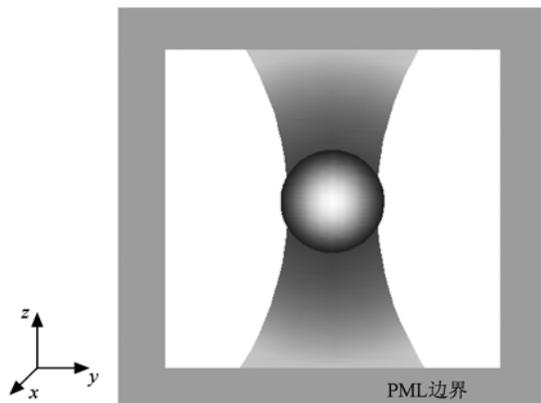


图2 光镊仿真计算区域示意图

3. 数值仿真结果

3.1. 光源参数和微球参数对光阱力的影响

仿真计算区域如图 2 所示. 表 1 中列出了在焦点附近分别沿三坐标方向上移动微球得到的相应方向上的光阱刚度系数. 从表 1 中可见, 当光源是 x 方向线偏振时, 在 xy 截面上平行于 x 轴和 y 轴的光阱刚度相差不多, y 方向的光阱刚度略大, 但 z 方向即轴向光阱刚度要比 x 和 y 方向上的小很多, 这说明光镊轴向俘获微球的能力相对于径向俘获能力要弱, 因此以下主要讨论的是轴向俘获力 F_z 受各因素影响情况. 以下各图中横坐标表示沿轴向小球球心与激光焦点间的距离, $z = 0$ 是焦点的位置, 纵坐标是微球受到的轴向力 F_z , 正值表示光阱力的方向与光传播方向相同, 微球受到推力, 负值表示光阱力方向与光传播方向相反, 微球受到拉力.

聚焦光斑即束腰的大小对微球所受轴向力 F_z 的影响如图 3(a) 所示. 从图中可以看出在焦点前硅微球受到推向焦点的力, 而在焦点后受到的是拉向焦点的回复力, 这与其他文献报道一致^[2]. 当束腰为 600 nm 时, 小球所受到的轴向力平衡位置在焦点

附近, 而当束腰为 700 nm 时, 力平衡点显著后移, 且最大轴向推力和拉力变小. 束腰越小, 光场会聚得越强, 光强梯度大, 引起的梯度力增大, 与形成推力的散射力易平衡, 在光传播方向易形成稳定的俘获. 而当束腰变大时, 光场会聚弱, 梯度力减少. 如果激光会聚得很弱, 则微球在光传播方向将主要受到产生推力的散射力, 这样在光轴方向就不能形成稳定的俘获, 这也是 Ashkin 在 1970 年所做的光悬浮实验结果^[1].

表 1 三坐标方向的光阱刚度

方向	光阱刚度系数/(N/m)
x	1.0814×10^{-5}
y	1.1544×10^{-5}
z	4.5145×10^{-6}

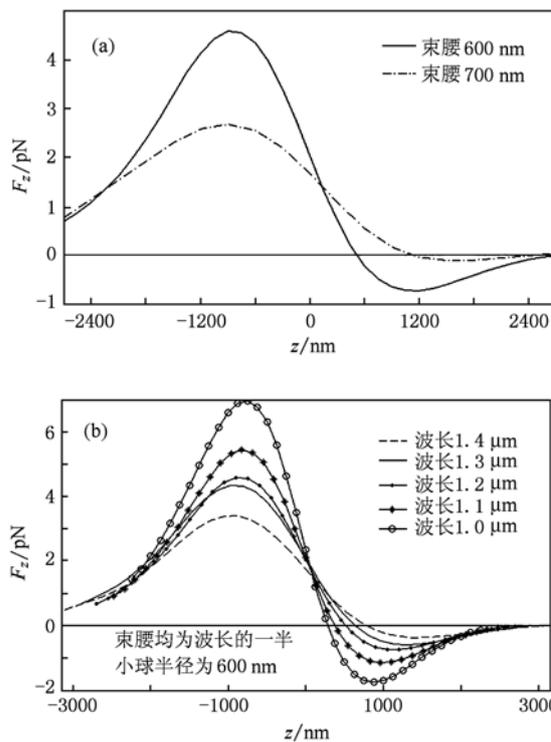


图3 (a) 高斯光束取不同束腰时微球所受到的轴向力; (b) 高斯光束取不同波长时微球所受到的轴向力

不同的激光波长下微球所受到的轴向力也不同, 如图 3(b) 所示. 图中束腰都取为波长的一半, 从图中可见, 在 1000—1400 nm 波长范围内, 随着波长的增大, 微球受到的轴向力出现下降, 平衡位置远离焦点.

微球的光学参数折射率对光阱力的影响如图 4(a) 所示. 从图中可以看出随着折射率的增加, 微球

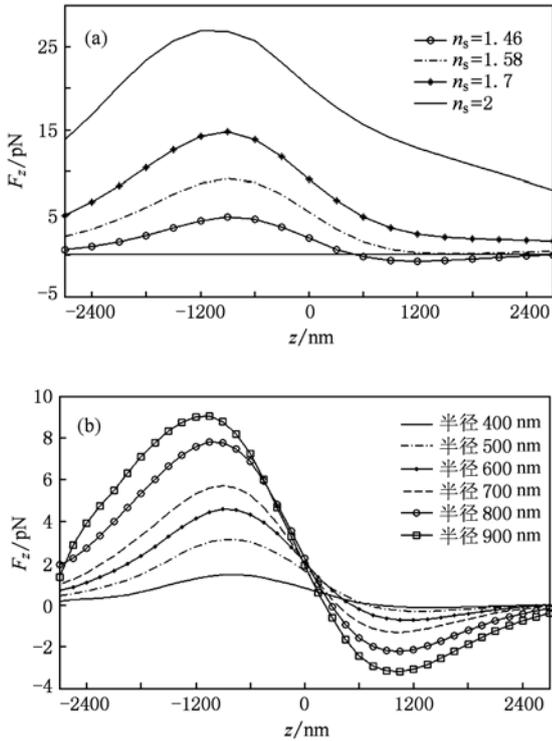


图4 (a)不同折射率微球所受的轴向力;(b)不同半径微球所受轴向力

受到的推力增大,而受到的拉力减小,当折射率大到一定程度时(如图中的折射率为2的微球)微球只受推力作用,此时光镊不能俘获微球.此外,随着折射率的增加,小球轴向俘获的平衡位置逐渐远离焦点.

不同半径的微球所受轴向力也不同.图4(b)中线型分别是微球半径为400 nm,500 nm,600 nm,700 nm,800 nm,900 nm时所受的轴向力.从图中可见随着半径的增大,最大推力和拉力也在变大,平衡位置逐渐靠近焦点.

光源的偏振态对光阱力的影响近年来越来越

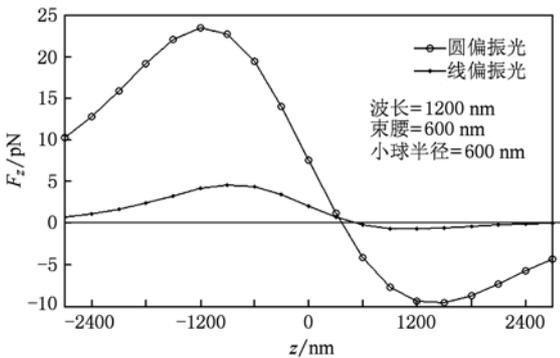


图5 不同光源偏振态下微球所受轴向力

引起重视,光阱力常常被看作是梯度力、散射力和偏振态所产生的力之和^[16].图5是分别采用左旋圆偏振光和线偏振光时得到的仿真结果,从图中可以看出当光源为左旋圆偏振光时微球受到的最大轴向力比光源为线偏振时高出一个数量级.

3.2. 相邻微球对被俘获微球所受光阱力影响

通常在样品池中含有一定样品,当俘获某一特定样品进行操纵时,周围其它样品对被俘获对象受力状况会产生影响,为此进行了仿真,并分析了光源偏振态对力的作用效果.

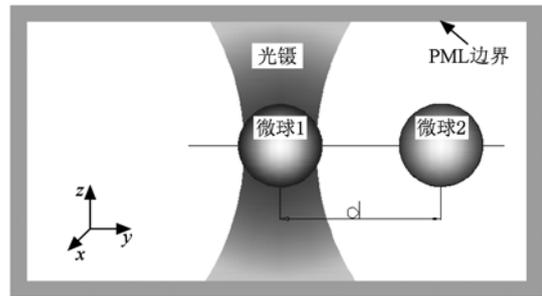


图6 单光镊中双微球仿真计算区域示意图

仿真示意图如图6所示, z 为光源传播方向,原点在微球1受力的平衡位置处即微球1球心的位置.分别沿着 x,y 和 z 轴正方向移动另一个相同的微球2, d 为两球间的距离,微球1和微球2各项参数设置相同.得到的微球1受力情况如图7所示.图7(a),(b),(c)是在 x 方向线偏振光源下,微球2分别沿着 x,y,z 轴方向远离微球1移动时,微球1所受相应的 F_x,F_y,F_z 力.图7(d),(e),(f)图是在左旋圆偏振光源的情况下,微球1所受的力.横坐标分别是沿各方向移动时两个微球中心的距离 d ,纵坐标分别是与移动方向相对应的力.正值表示微球1受到微球2的吸引力,负值则代表排斥力.从图7(a),(b)中可以看出当微球2分别沿 x,y 轴方向移动时微球1先受到的是微球2的排斥力,随着两微球间距离的增大,力振荡衰减为零, x 方向受到的最大力略大于 y 方向.图7(c)图是微球2沿着 z 轴移动时微球1受到的 F_z ,随着两球间距离的增大 F_z 出现波动,而且微球1所受最大轴向力显著小于(a),(b)图中最大横向力.由图7(a),(b),(c)可见,当光镊俘获微球时,作用于微球的光阱力受到周围粒子的影响,而且在不同方向上受力情况也不同,微球1将失去平衡状态.将(a),(b),(c)图中的线偏

振光源改为左旋圆偏振光得到相应的受力情况如(d),(e),(f)图所示。(d),(e)图中微球1受力情况相同,这是由于光源为圆偏振光,具有对称性,都

是先受到吸引力然后又受到排斥力,最后趋近于零.图7(f)中,当微球2离开微球1时,微球1受到的排斥力先变大,后又出现波动.比较左右图可见,

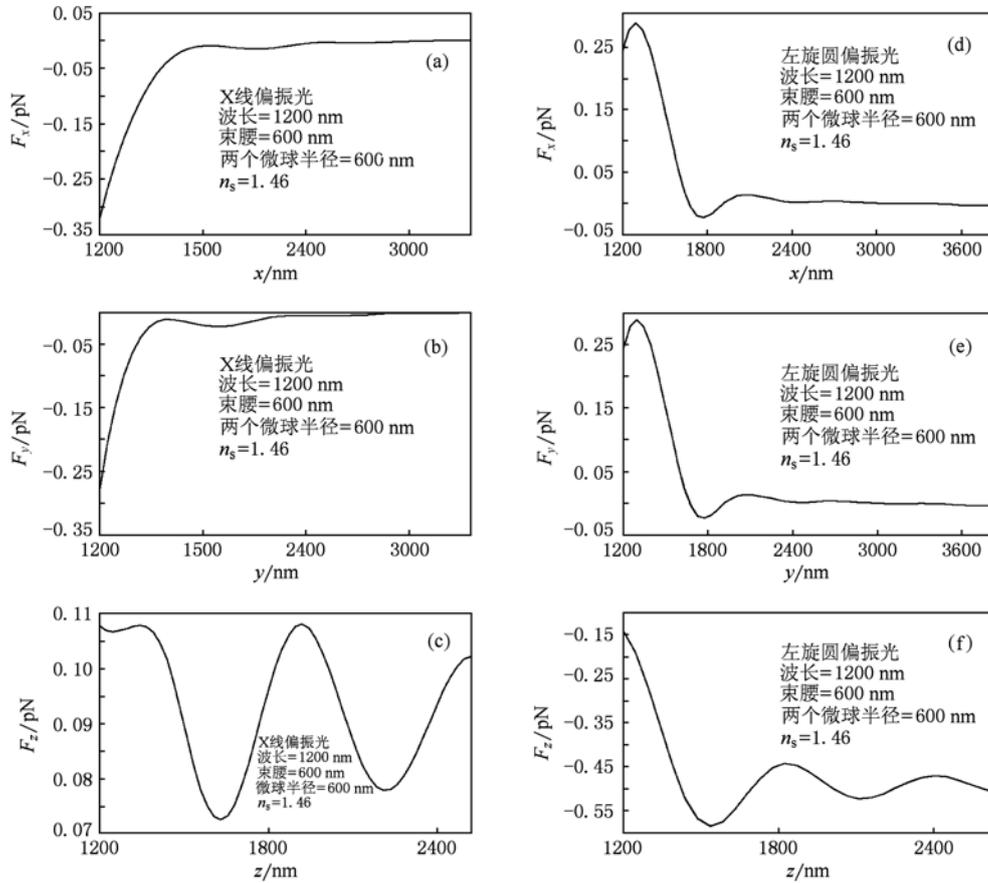


图7 当微球2移动时被光阱俘获的微球1所受光阱力 (a)微球2沿x方向移动;(b)微球2沿y方向移动;(c)微球2沿z方向移动((a),(b),(c)光源为x线偏振);(d)微球2沿x方向移动;(e)微球2沿y方向移动;(f)微球2沿z方向移动((d),(e),(f)光源为左旋圆偏振)

光的偏振态对微球1的受力情况有很大影响.

4. 结 论

本文用三维 FDTD 方法和基于球矢量波的五阶高斯光源得到了准确的光镊光场分布,代入 Maxwell 应力张量公式后求出微球所受的光阱力. 仿真结果表明:光源的正确仿真设置、束腰、波长、偏振态、微

球的半径和折射率对光阱力都有影响;当光镊稳定俘获微球时,被俘获微球受力状况受到相邻的微球和光的偏振态影响. 本文特别讨论了单光镊中光源的偏振态对光阱力的影响,圆偏振光对微球的俘获能力要高于线偏振,当被俘获的微球周围有其他微球时,圆偏振光对光阱力的大小和方向影响与线偏振光相比有显著差别. 本文的仿真结果对于实验研究具有指导作用.

[1] Ashkin A 1970 *Phys. Rev. Lett.* **24** 156
 [2] Ashkin A, Dziedzic J M, Bjorkholm J E, Chu S 1986 *Opt. Lett.* **11** 288

[3] Chu S, Bjorkholm J E, Ashkin A, Cable A 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 314
 [4] Chu S 1991 *Science* 253 861

- [5] Horst A, Campbell A, Vugt L K, Vanmaeckelbergh D A M, Dogterom M, Blaaderen A 2007 *Opt. Exp.* **15** 11629
- [6] Pauzauskis P J, Radenovic A, Trepagnier E, Shroff H, Yang P, Liphardt J 2006 *Nature* **5** 97
- [7] Zhang Y L, Zhao Y Q, Zhan Q W, Li Y P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1253 (in Chinese) [张艳丽、赵逸琼、詹其文、李永平 2006 物理学报 **55** 1253]
- [8] Ashkin A 1992 *J. Biophys.* **61** 569
- [9] Gussgard R, Lindmo T 1992 *J. Opt. Soc. Am. B* **9** 1922
- [10] Harada Y, Asakura T 1996 *Opt. Commun.* **124** 529
- [11] White D A 2000 *Comput. Phys. Commun.* **128** 558
- [12] Nieminen T A, Rubinsztein-Dunlop H, Heckenberg N R, Bishop A I 2001 *Comput. Phys. Commun.* **142** 468
- [13] Simpson S H, Hanna S 2006 *J. Opt. Soc. Am. A* **23** 1419
- [14] Nieminen T A, Rubinsztein-Dunlop H, Heckenberg N R 2003 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **79** 1005
- [15] Gauthier R C 2005 *Opt. Exp.* **13** 3707
- [16] Benito D C, Simpson S H, Hanna S 2008 *Opt. Exp.* **16** 2942
- [17] Yan H, Feng G Y, Zhu Q H, Zhang D Y, Zhou S H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5506 (in Chinese) [杨浩、冯国英、朱启华、张大勇、周寿桓 2008 物理学报 **57** 5506]
- [18] Yee K S 1966 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **14** 302
- [19] Taflov A, Hagness S C 2005 *Computational electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* (Third Edition) (Norwood, MA: Artech House)
- [20] Yang R G, Cheng D Z, Liu P C 1991 *Electromagnetic Theory* (Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press) p53 (in Chinese) [杨儒贵、陈达章、刘鹏程 1991 电磁理论(西安:西安交通大学出版社)第53页]
- [21] Han Y P, Du Y G, Zhang H Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4557 (in Chinese) [韩一平、杜云刚、张华永 2006 物理学报 **55** 4557]
- [22] Simpson S H, Hanna S 2007 *J. Opt. Soc. Am. A* **24** 430

FDTD numerical simulation of the trapping force of microsphere in single optical tweezers*

Hu Geng-Jun¹⁾ Li Jing^{1)†} Long Qian¹⁾ Tao Tao¹⁾ Zhang Gong-Xuan¹⁾ Wu Xiao-Ping²⁾

1) (Department of Precision Machinery and Precision Instrumentation, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

2) (Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

(Received 23 March 2010; revised manuscript received 26 May 2010)

Abstract

In this paper the model of trapping force on microsphere near focus in single optical tweezers is built by three dimensional finite-difference time-domain (FDTD) and Maxwell stress tensor methods. Fifth order Gaussian beam based on spherical vector wave function (VSWF) is adopted as simulation light source; the correct light field transmission is obtained. The influences of the wavelength, waist and polarization of light sources, the radius and refractive index of the microsphere on the optical trapping force are discussed. The influence of nearby microsphere and beam polarization on the trapping force of the trapped microsphere in single optical tweezers is analyzed. The effect of beam polarization working on the trapping force of the trapped microsphere is specially analyzed. As results of simulation, the trapping force acting on the microsphere by the circularly polarized beam is larger than that by the linearly polarized beam. The stability of the trapped microsphere in single optical tweezers will be disturbed by the nearby microsphere and lose its balance. Varying the beam polarization will lead to the change of the trapping force of the trapped microsphere.

Keywords: optical tweezers, optical trapping force, dielectric microsphere, FDTD

PACS: 03.50.De, 42.25.Gy, 42.62.-b

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50975271).

† Corresponding author. E-mail: lijing@ustc.edu.cn