

Связь видности дифракционной картины с дисперсией размеров частиц в эктацитометре

С.Ю.Никитин, А.Е.Луговцов, А.В.Приезжев, В.Д.Устинов

Рассчитано угловое распределение интенсивности света в дифракционной картине, возникающей при рассеянии лазерного пучка на суспензии эритроцитов в эктацитометре. Вычислена видность дифракционной картины в области первого дифракционного минимума и первого дифракционного максимума как функция разброса частиц по размерам. Показано, что в этом фрагменте дифракционной картины уменьшение ее видности в два раза происходит уже при стандартном отклонении размеров частиц от среднего размера, равном 8%.

Ключевые слова: дифракция, частица, эритроцит, эктацитометр, видность картины, разброс частиц по размерам.

1. Введение

Лазерная дифрактометрия эритроцитов (эктацитометрия) [1–3] представляет собой метод исследования красных клеток крови, основанный на анализе дифракционных картин. Дифракционная картина наблюдается при рассеянии лазерного пучка на тонком слое суспензии эритроцитов, заключенной между стенками двух прозрачных стаканов, один из которых неподвижен, а другой вращается (так называемая ячейка Куэтта). Вращение стакана вызывает течение жидкости и появление в ней сдвиговых напряжений. Ориентация эритроцитов в потоке жидкости определяется направлением этого потока, а именно, эритроциты выстраиваются в потоке так, что их сопротивление движению жидкости становится минимальным. Лазерный пучок в эктацитометре направлен перпендикулярно потоку, поэтому оси симметрии частиц параллельны или почти параллельны лазерному пучку. При небольших скоростях вращения подвижного стакана эритроциты сохраняют свою естественную форму (двояковогнутый диск). В таком режиме рассеяния наблюдаемая дифракционная картина похожа на картину дифракции света на круглом отверстии (так называемая картина Эри).

Измерения проводят следующим образом. Постепенно увеличивая скорость вращения подвижного стакана ячейки Куэтта, увеличивают сдвиговые напряжения в суспензии эритроцитов. Это приводит к деформации частиц, которые начинают вытягиваться в направлении потока жидкости. Деформация частиц вызывает соответствующие изменения формы интерференционных линий на экране наблюдения, которые становятся эллипсо-

образными. Измеряя оси этих эллипсов a и b , находят параметр деформируемости эритроцитов, определяемый как $D = (a - b)/(a + b)$. Отношение параметра деформируемости к сдвиговому напряжению характеризует деформируемость эритроцитов, которая и измеряется в подобных экспериментах (подробнее см. [4]).

В нашей работе [5] установлена связь между дисперсией размеров эритроцитов и видностью дифракционной картины, наблюдаемой при рассеянии лазерного пучка на суспензии эритроцитов в эктацитометре. Возникает вопрос: нельзя ли использовать данные лазерной дифрактометрии эритроцитов для оценки дисперсии этих частиц по размерам? Центральная часть дифракционной картины (центральное светлое пятно и первое темное кольцо на экране наблюдения) неудобна для решения этой задачи, поскольку видность данного фрагмента дифракционной картины слабо зависит от дисперсии размеров частиц [5]. В то же время видность других частей дифракционной картины может зависеть от дисперсии размеров частиц значительно сильнее. В настоящей работе мы даем аналитическую оценку видности дифракционной картины в районе первого дифракционного максимума с учетом разброса частиц по размерам.

2. Модель ансамбля эритроцитов

Представим отдельный эритроцит в виде круглого прозрачного диска. Средний радиус диска $\bar{R} = 4$ мкм, толщина диска $h = 1.5$ мкм, относительный показатель преломления материала частицы $\bar{n} = 1.05$. Радиус эритроцита R будем считать случайной величиной. Предположим для простоты, что величина R равномерно распределена в некотором интервале, а именно

$$w(R) = \frac{1}{2\Delta R} \begin{cases} 1, & |R - \bar{R}| \leq \Delta R \\ 0, & |R - \bar{R}| > \Delta R \end{cases}$$

где \bar{R} – среднее значение радиуса частицы; ΔR – максимальное отклонение радиуса частицы от его среднего значения. Дисперсия радиусов частиц $\sigma^2 = (\Delta R)^2/3$. Предположим также, что $\Delta R \ll \bar{R}$, т.е. неоднородность ансамбля по размерам частиц является относительно слабой.

Никитин С.Ю., Луговцов А.Е., Приезжев А.В. Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, физический факультет, Россия, 119991 Москва, Воробьевы горы; e-mail: sergeynikitin007@yandex.ru

Устинов В.Д. Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Россия, 119991 Москва, Воробьевы горы; e-mail: vladustinov90@gmail.com

Поступила в редакцию 15 июня 2011 г., после доработки – 11 июля 2011 г.

Аналогичное распределение имеет параметр размера частицы $\rho = kR$, где $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число; λ – длина волны излучения. Статистические моменты параметра размера можно рассчитать по формуле

$$\langle \rho^n \rangle = \langle \rho \rangle^n \frac{f_{n+1}(\varepsilon)}{n+1}.$$

Здесь n – любое натуральное число; $\varepsilon = \Delta\rho/\bar{\rho}$ – мера разброса частиц по размерам; $\bar{\rho} = k\bar{R}$ – среднее значение параметра размера частицы; $\Delta\rho = k\Delta R$ – максимальное отклонение параметра размера от его среднего значения. Положим, что длина волны лазерного излучения $\lambda = 0.633$ мкм. В этом случае $\bar{\rho} = 39.7$. Функция

$$f_n(\varepsilon) = \frac{(1+\varepsilon)^n - (1-\varepsilon)^n}{2\varepsilon}.$$

В частности, при $n = 2, 3, 4$

$$\begin{aligned} \langle \rho^2 \rangle &= \bar{\rho}^2(1 + \varepsilon^2/3), & \langle \rho^3 \rangle &= \bar{\rho}^3(1 + \varepsilon^2), \\ \langle \rho^4 \rangle &= \bar{\rho}^4(1 + 2\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (1)$$

Эти выражения записаны с точностью до слагаемых порядка ε^2 включительно. Целью работы является установление связи между величиной ε и видностью дифракционной картины, наблюдаемой в лазерной дифрактометрии эритроцитов.

3. Рассеяние света на ансамбле частиц

Рассмотрим рассеяние лазерного пучка на тонком слое суспензии эритроцитов в эктацитометре. Будем считать, что все частицы лежат в одной и той же плоскости так, что оси симметрии частиц параллельны лазерному пучку. Метод расчета углового распределения интенсивности рассеянного света изложен в нашей работе [5]. В частности, при рассеянии лазерного пучка на однородном по размерам ансамбле частиц угловое распределение интенсивности света описывается формулой

$$I(R, \theta) = I_0 N |\alpha|^2 \left(\frac{\pi R^2}{\lambda z} \right)^2 \left[\frac{J_1(kR\theta)}{0.5kR\theta} \right]^2. \quad (2)$$

Здесь I_0 – интенсивность лазерного пучка; θ – угол рассеяния; R – радиус частицы; N – число частиц, освещаемых лазерным пучком; z – расстояние от измерительного объема до экрана наблюдения; $J_1(x)$ – функция Бесселя первого порядка; $|\alpha|^2 = 4 \sin^2(\Delta\varphi/2)$; $\Delta\varphi = kn_0 h(\bar{n} - 1)$; \bar{n} – относительный показатель преломления частицы; n_0 – абсолютный показатель преломления окружающей частицу среды. Для интересующих нас условий $h = 1.5$ мкм, $n_0 = 1.33$, $\Delta\varphi \approx 1$ рад и $|\alpha|^2 \approx 1$. Распределение (2) можно представить в виде

$$I(\theta, \rho) = I_0 N |\alpha|^2 \left(\frac{\rho^2}{2kz} \right)^2 \left[\frac{2J_1(\rho\theta)}{\rho\theta} \right]^2. \quad (3)$$

Учет разброса частиц по размерам проведем путем усреднения выражения (3) по параметру размера частицы ρ . Возможность такой процедуры обоснована в работе [5].

Таким образом, получим следующую формулу для углового распределения интенсивности света:

$$I(\theta) = \langle I(\theta, \rho) \rangle_\rho.$$

Эта формула описывает дифракционную картину, возникающую при рассеянии лазерного пучка на неоднородном по размерам ансамбле частиц. Далее мы рассмотрим области дифракционной картины, близкие к первому дифракционному минимуму и к первому дифракционному максимуму. В этих областях функция Бесселя допускает простую (линейную или квадратичную) аппроксимацию.

4. Первый дифракционный минимум

В области первого минимума дифракционной картины (первое темное кольцо на экране наблюдения) функцию Бесселя можно аппроксимировать линейной функцией

$$J_1(x) = \beta(x - x_1). \quad (4)$$

Здесь x_1 – значение аргумента функции Бесселя, при котором она обращается в ноль; β – величина производной функции Бесселя в точке $x = x_1$. Известно [6], что $x_1 = 3.82$ и $\beta = -0.4$. Угол θ_1 , под которым виден первый дифракционный минимум, определяется формулой $\theta_1 = x_1/\bar{\rho}$. В интересующем нас случае $\theta_1 = 0.09$ рад. Подставив (4) в (3), получим

$$I_1(\theta, \rho) = I_0 N |\alpha|^2 \left(\frac{1}{2kz} \right)^2 (2\beta)^2 \left(\rho^4 - 2\rho^3 \frac{x_1}{\theta} + \rho^2 \frac{x_1^2}{\theta^2} \right).$$

Усреднив эту функцию по ρ и учтя формулы (1), найдем

$$\begin{aligned} I_1(\theta) &= I_0 N |\alpha|^2 \left(\frac{1}{2kz} \right)^2 (2\beta)^2 \bar{\rho}^4 \\ &\times \left[(1 + 2\varepsilon^2) - 2(1 + \varepsilon^2) \frac{x_1}{\bar{\rho}\theta} + \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{3}\right) \frac{x_1^2}{\bar{\rho}^2\theta^2} \right]. \end{aligned}$$

Эта функция описывает угловое распределение интенсивности света вблизи первого дифракционного минимума. Для оценки величины минимума положим $\theta = \theta_1$. Тогда

$$I(\theta_1) = I(0) (2\beta)^2 \frac{\varepsilon^2}{3}, \quad (5)$$

где

$$I(0) = I_0 N |\alpha|^2 \left(\frac{\bar{\rho}^2}{2kz} \right)^2$$

– интенсивность света в нулевом (центральном) максимуме дифракционной картины.

5. Первый дифракционный максимум

В области первого дифракционного максимума (первое светлое кольцо на экране наблюдения) функцию Бесселя можно аппроксимировать квадратичной функцией

$$J_1(x) = a + \frac{1}{2} b(x - x_2)^2,$$

где x_2 – значение аргумента, при котором функция Бесселя достигает минимума; $a = J_1(x_2)$; b – величина второй производной функции Бесселя в точке $x = x_2$. Известно [6], что $x_2 = 5.32$, $a = -0.346$ и $b = 0.4$. Угол θ_2 , под которым виден первый дифракционный максимум, определяется формулой $\theta_2 = x_2/\bar{\rho}$. В интересующем нас случае $\theta_2 = 0.13$ рад. Квадрат функции Бесселя можно приближенно представить в виде

$$J_1^2(x) = a^2 + ab(x - x_2)^2. \quad (6)$$

Подставив (6) в (3), получим

$$I_2(\theta, \rho) = I_0 N |\alpha|^2 \left(\frac{\bar{\rho}^2}{2kz} \right)^2 \left(\frac{2a}{\bar{\rho}\theta} \right)^2 \left(\frac{1}{\bar{\rho}^2} \right) \times \left(\rho^2 + \frac{b}{a} \rho^4 \theta^2 - 2 \frac{b}{a} x_2 \rho^3 \theta + \frac{b}{a} x_2^2 \rho^2 \right).$$

Усреднив эту функцию по ρ и учтя формулы (1), найдем

$$I_2(\theta) = I_0 N |\alpha|^2 \left(\frac{\bar{\rho}^2}{2kz} \right)^2 \left(\frac{2a}{\bar{\rho}\theta} \right)^2 \times \left[1 + \frac{\varepsilon^2}{3} + (1 + 2\varepsilon^2) \frac{b}{a} \bar{\rho}^2 \theta^2 - 2(1 + \varepsilon^2) \frac{b}{a} x_2 \bar{\rho} \theta + \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{3} \right) \frac{b}{a} x_2^2 \right].$$

Эта функция описывает угловое распределение интенсивности света вблизи первого дифракционного максимума. Для оценки его величины положим $\theta = \theta_2$. Тогда

$$I(\theta_2) = I(0) \left(\frac{2a}{x_2} \right)^2 \left[1 + \frac{\varepsilon^2}{3} \left(1 + \frac{b}{a} x_2^2 \right) \right]. \quad (7)$$

6. Оценка видности дифракционной картины

Согласно стандартному определению [7], оценка видности дифракционной картины в районе первого минимума и первого максимума интенсивности света дается формулой

$$v = \frac{I(\theta_2) - I(\theta_1)}{I(\theta_2) + I(\theta_1)}. \quad (8)$$

Подставив (5) и (7) в (8), получим

$$v = \left\{ 1 + \frac{\varepsilon^2}{3} \left[1 + \frac{b}{a} x_2^2 - \left(\beta \frac{x_2}{a} \right)^2 \right] \right\} \times \left\{ 1 + \frac{\varepsilon^2}{3} \left[1 + \frac{b}{a} x_2^2 + \left(\beta \frac{x_2}{a} \right)^2 \right] \right\}^{-1}$$

или, приближенно,

$$v = 1 - 2 \frac{\varepsilon^2}{3} \left(\beta \frac{x_2}{a} \right)^2.$$

Эта формула определяет видность дифракционной картины в районе первого дифракционного минимума и первого дифракционного максимума, вычисленную с уче-

том разброса частиц по размерам. Полученный результат можно представить в виде

$$v = 1 - \gamma \delta_R^2, \quad (9)$$

где $\delta_R = \sigma_R/\bar{R}$ имеет смысл относительного разброса частиц по размерам. Параметр γ определяется формулой

$$\gamma = 2 \left(\beta \frac{x_2}{a} \right)^2 \approx 76. \quad (10)$$

Например, полагая $v = 1/2$, получаем $\delta_R = 0.08$. Таким образом, двукратное уменьшение видности дифракционной картины в районе первого минимума и первого максимума интенсивности происходит уже при стандартном отклонении размеров частиц от среднего значения, равном 8%.

Заметим, что согласно формулам (9) и (10) видность дифракционной картины не зависит от таких параметров, как средний радиус частиц \bar{R} , длина волны лазерного излучения λ и расстояние z от измерительного объема до экрана наблюдения. В рамках нашей модели видность дифракционной картины зависит только от разброса частиц по размерам. Аналитическая оценка видности (9) получена в предположении прямоугольного распределения частиц по размерам.

7. Численное моделирование рассеяния лазерного излучения на неоднородном по размерам ансамбле частиц

Для того чтобы учесть возможный разброс частиц по размерам, следует выполнить усреднение выражения (2) по радиусам частиц R . При компьютерных расчетах будем считать радиус частицы дискретной случайной величиной, которая может принимать значение R_j с вероятностью p_j . Тогда угловое распределение интенсивности света, рассеянного неоднородным ансамблем частиц, можно представить в виде

$$I(\theta) = \sum_{j=-m}^m I(R_j, \theta) p_j, \quad (11)$$

где

$$I(R_j, \theta) = I_0 N |\alpha|^2 \left(\frac{\pi R_j^2}{\lambda z} \right)^2 \left[\frac{J_1(k R_j \theta)}{0.5 k R_j \theta} \right]^2. \quad (12)$$

Вероятности p_j подчиняются условию нормировки $\sum_{j=-m}^m p_j = 1$. Ансамбль частиц будем характеризовать средним значением радиуса частицы \bar{R} , дисперсией размеров частиц σ_R^2 и полным числом типов частиц M . Величина $\delta_R = \sigma_R/\bar{R}$ имеет смысл относительного разброса частиц по размерам. Возможные значения радиусов частиц определим формулой $R_j = \bar{R} + jr$, где $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm m$. В рассмотренных ниже примерах мы полагаем $\bar{R} = 4$ мкм, $\lambda = 0.63$ мкм, $z = 10$ см.

1. Ансамбль частиц содержит частицы только двух типов (бимодальный ансамбль). В этом случае мы имеем $M = 2$, $R_{-1} = \bar{R} - \sigma_R$, $R_1 = \bar{R} + \sigma_R$ и $p_{-1} = p_1 = 1/2$. При заданных значениях \bar{R} и σ_R эти формулы позволяют вычислить угловое распределение интенсивности света, рассеянного данным ансамблем частиц, и найти зависимость видности дифракционной картины (того или иного ее

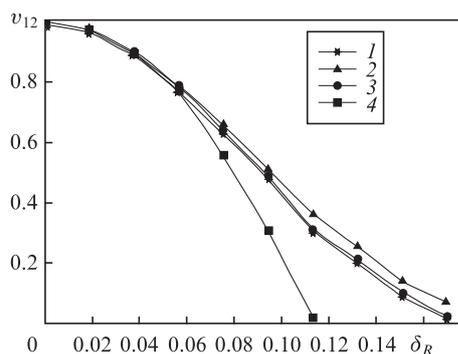


Рис.1. Зависимости видности дифракционной картины от величины разброса частиц по размерам. Кривые 1–3 получены численно по формулам (11), (12) и соответствуют различным формам распределений частиц по размерам – бимодальному (1), однородному (2), гауссову (3); кривая 4 построена по формулам (9), (10).

фрагмента) от разброса частиц по размерам. Соответствующая зависимость $v_{12}(\delta_R)$ показана на рис.1 (кривая 1).

2. Частицы однородно распределены по размерам в некотором интервале. Чтобы промоделировать это распределение, положим $M = 100$ и $p_j = 1/M$. Полуширину распределения ΔR определим по формуле $\Delta R = \sigma_R \sqrt{3}$, и величину r найдем из соотношения $\Delta R = \frac{1}{2}Mr$. Таким образом, $r = 2\sqrt{3}\sigma_R/M$. Зависимость $v_{12}(\delta_R)$ для этого случая показана на рис.1 кривой 2.

3. Гауссово распределение частиц по размерам. Для его моделирования положим

$$p_j = \frac{r}{\sigma_R \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{r^2 j^2}{2\sigma_R^2}\right)$$

и $M = 100$. Выбор коэффициента пропорциональности между σ_R и $\Delta R = \frac{1}{2}Mr$ в значительной степени произволен. Для наших расчетов мы выбрали его равным 3. Тогда $r = 6\sigma_R/M$. Зависимость $v_{12}(\delta_R)$ для этого случая показана кривой 3. Здесь же для сравнения приведена кривая 4, построенная по формулам (9), (10). Видно, что в области малых разбросов частиц по размерам все показанные зависимости хорошо согласуются между собой.

Мы провели аналогичные расчеты для различных значений таких параметров, как средний радиус частиц \bar{R} , длина волны лазерного излучения λ и расстояние z от измерительного объема до экрана наблюдения. Анализ полученных данных позволяет сделать вывод о том, что

указанные параметры практически не влияют на вид функции $v = v(\delta_R)$, выражающей зависимость видности дифракционной картины от разброса частиц по размерам. Результаты численных расчетов, представленные на рис.1, показывают, что вид функции распределения частиц по размерам также мало влияет на видность дифракционной картины, по крайней мере для исследованных нами случаев.

8. Заключение

Получена аналитическая оценка видности дифракционной картины, наблюдаемой в лазерном экситометре в окрестности первого дифракционного максимума. Показано, что видность дифракционной картины весьма чувствительна к величине разброса частиц по размерам. Такие параметры, как средний радиус частиц, длина волны лазерного излучения, расстояние от измерительного объема до экрана наблюдения, а также вид распределения частиц по размерам мало влияют на вид функции, выражающей зависимость видности дифракционной картины от величины разброса частиц по размерам. Это открывает возможность измерения дисперсии размеров эритроцитов методом лазерной дифрактометрии.

Реализация этого метода означала бы расширение функциональных возможностей лазерной дифрактометрии как метода диагностики красных клеток крови. Мы полагаем, что в дополнение к уже существующим функциям лазерный дифрактометр должен обеспечивать возможность измерения видности (контрастности) дифракционной картины. Для повышения достоверности получаемых данных целесообразно проводить калибровку прибора путем наблюдения картины рассеяния света на суспензии эталонных монодисперсных или полидисперсных частиц.

Работа частично поддержана грантом РФФИ №08-02-91760_АФ_а.

1. Bessis M., Mohandas N. *Blood Cells*, **1**, 307 (1975).
2. Bessis M., Mohandas N. *Blood Cells*, **1**, 315 (1975).
3. Groner W., Mohandas N., Bessis M. *Clinical Chem.*, **26** (9), 1435 (1980).
4. Фирсов Н.Н., Джанашия П.Х. *Введение в экспериментальную и клиническую гемореологию* (М.: изд-е РГМУ, 2008).
5. Никитин С.Ю., Луговцов А.Е., Приезжев А.В. *Квантовая электроника*, **40** (12), 1074 (2010).
6. Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. *Специальные функции* (М.: Наука, 1977).
7. Ахманов С.А., Никитин С.Ю. *Физическая оптика* (М.: Наука, 2004).