

УДК 551.508

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ AG, AU

Л.А ТРУСЕВИЧ, М.М. КУГЕЙКО

Белорусский государственный университет, пр-т Независимости 4, 220030, Минск, Беларусь

Аннотация. Проведено исследование оптических характеристик спектральных свойств монодисперсных и полидисперсных частиц серебра и золота в крови человека, используемых в качестве контрастных агентов для методов оптической визуализации (флуоресцентная микроскопия, спектроскопия с пространственным разрешением) и терапии патологических очагов. Оценены максимальные сечения рассеяния и поглощения в крови для них.

Ключевые слова: моно и полидисперсные наночастицы серебра и золота, плазмонный резонанс, сечения рассеяния и поглощения.

MODELING OF OPTICAL PROPERTIES OF AG, AU NANOPARTICLES

L.A. TRUSEVICH, M.M. KUGEIKO

Belarusian State University, Nezalezhnosti Ave. 4, 220030, Minsk, Belarus

Abstract. The study of optical characteristics of spectral properties of monodisperse and polydisperse silver and gold particles in human blood used as contrast agents for methods of optical imaging (fluorescence microscopy, spectroscopy with spatial resolution, etc.) and therapy of pathological foci has been carried out. The maximum scattering and absorption cross sections in blood for them have been estimated.

Keywords: mono- and polydisperse silver and gold nanoparticles, plasmon resonance, scattering and absorption cross sections.

Введение

Биомедицинская оптика является одной из наиболее быстро развивающихся областей науки и техники. Неразрушающая природа света, используемого для исследования и детектирования аномалий в тканях человека, делает ее весьма привлекательной для разработки новых неинвазивных диагностических и терапевтических методов. Следует выделить такое направление в биомедицинской оптике как тераностика, которая объединяет диагностику заболевания и персонализированное лечение пациента с улучшенной эффективностью и безопасностью [1].

Одним из ключевых компонентов тераностики является диагностический имиджинг (визуализация патологических очагов и их мониторинг в процессе лечения) с высокой чувствительностью и молекулярной специфичностью [2]. Этому способствует также значительный прорыв в нанотехнологиях при разработках целого ряда материалов нового вида, представляющих собой частицы различной природы (квантовые точки, нанозолото, наносеребро, магнитные частицы, наноалмазы, апконвертирующие нанофосфоры, полимерные наночастицы) с размерами 1–200 нм, обладающие уникальными физико-химическими характеристиками, не свойственными их аналогам большого размера.

Для биомедицинского применения наночастицы, как правило, покрывают полимерами с различными реакционноспособными группами, которые предоставляют широкую возможность интегрировать в наночастицы дополнительные функциональные модули, сообщая им новые свойства. Такая функциональная гибкость наночастиц позволяет использовать их в качестве диагностических или терапевтических агентов, а также одновременно в обоих качествах. Благодаря своим нанометровым размерам наночастицы способны проникать в микроциркуляторное русло в организме, а также преодолевать различные биологические барьеры для достижения тканей мишеней.

Суммируя выше изложенное, можно сказать, что тераностический агент должен одновременно обеспечивать следующие возможности [1]: 1) направленную доставку к молекулярной мишени, 2) визуализацию патологического очага и его прижизненный имиджинг в процессе лечения, 3) эффективное и селективное воздействие на молекулярную мишень.

По прежнему существует разрыв между технологическими достижениями и клиническими применениями. Это требует как проведения научных исследований, так и разработки технических средств тераностики. В докладе рассматриваются возможности настраиваемости свойств плазмонного резонанса с использованием металлических наночастиц (Ag, Au) путем изменения их размера, формы, состава и среды, что позволяет создавать наноструктуры, предназначенные для конкретных биологических применений в терапии и визуализацию патологических очагов, так и их мониторинг в процессе лечения.

Моделирование оптических свойств наночастиц

Исследование возможностей настраиваемости свойств плазмонного резонанса проведено сравнением оптических свойств для монодисперсных наночастиц серебра и золота, а также и для нормального распределения наночастиц серебра и золота по размерам. Использовался программный пакет MiePlot [3]. Этот пакет позволяет проводить моделирование редких оптических явлений, получать различные зависимости физических величин, рассчитывать факторы эффективности рассеяния Q_{sca} , поглощения Q_{abs} и экстинкции Q_{ext} в зависимости от длины волны. Метод расчета по умолчанию, используемый в программном пакете MiePlot – теория Ми.

Используя программный пакет MiePlot созданы две компьютерные модели (КМ), каждая из которых состояла из двух слоёв. Один слой выделен для сферической металлической наночастицы, другой – для среды. В качестве металлических наночастиц выбраны наночастицы серебра и золота. Рассматривались наночастицы в диапазоне от 10 нм до 100 нм, с радиусами 5 – 50 нм с шагом 5 нм. Данный диапазон рассматривается исходя из того что существует минимальный радиус частицы, при котором она может быть захвачена внутрь клетки, и «оптимальный» радиус, при котором захват происходит с максимальной эффективностью. Для сферических и цилиндрических частиц такие оптимальные размеры равны 15 и 30 нм, соответственно, но для наночастиц, «укрытых» слоем трансферрина, этот радиус составляет ~50 нм [1].

В качестве окружающей среды выбрана среда, показатель преломления которой соответствует показателю преломления крови человека. Значения показателя преломления крови, в зависимости от длины волны, выбор металла наночастицы, радиус наночастицы для созданных компьютерных моделей представлены в таблице.

Таблица 1. Параметры наночастиц серебра и золота

№	Металл НЧ	$n_{\text{среды}}$, отн.ед.	λ , нм	r , нм
1	Ag	1,3593	550	5 – 50 с шагом 5
		1,3533	650	
		1,352	700	
		1,35067	750	
2	Au	1,3593	550	5 – 50 с шагом 5
		1,3533	650	
		1,352	700	
		1,35067	750	

Примеры расчета оптически спектро рассеяния и поглощения, полученные в результате моделирования в крови человека, приведены на рис. 1 для частиц серебра и рис. 2 для золота.

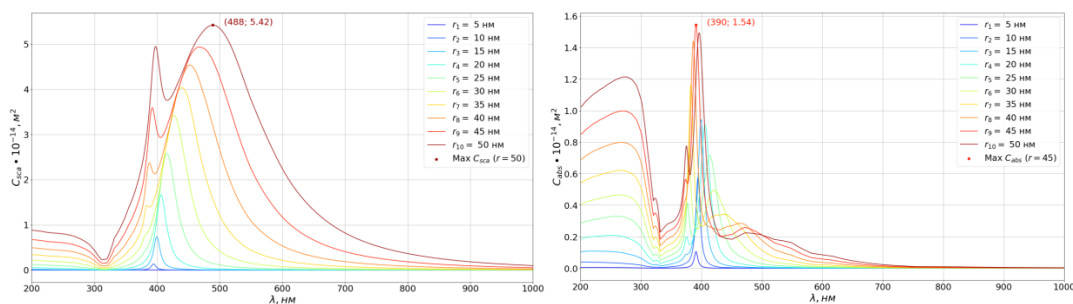


Рис. 1. Оптические спектры рассеяния и поглощения при нормальном распределении наночастиц серебра в крови человека

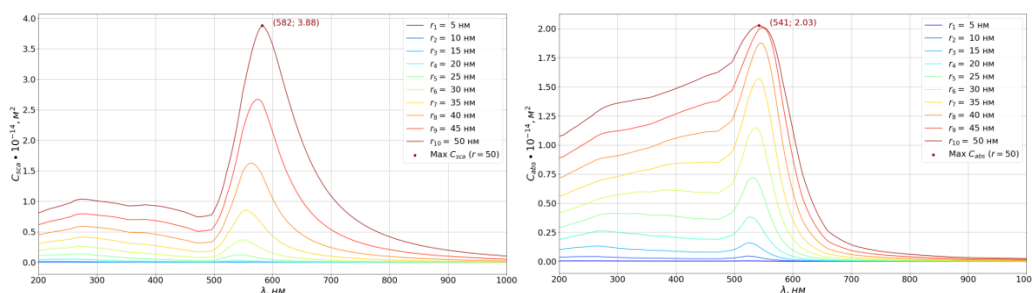


Рис. 2. Оптические спектры рассеяния и поглощения при нормальном распределении наночастиц золота в крови

Заключение

В результате численного математического моделирования плазмонных свойств наночастиц серебра и золота (Ag, Au) в организме человека показано: максимальные сечения рассеяния оптического излучения для монодисперсных и полидисперсных частиц серебра (Ag), распределенных по нормальному закону, достигаются и имеют практически одинаковые значения соответственно для длин волн 490 нм и 488 нм при одинаковых радиусах (для полидисперсных частиц среднем), равным 50 нм, максимумы же сечений поглощения достигаются на длинах волн 390 нм и 391 нм для радиусов наночастиц равных 45 нм; для монодисперсных и полидисперсных частиц золота (Au) максимумы рассеяния достигаются на длине волны 582 нм для наночастиц золота с радиусами 50 нм, максимумы же поглощения на длинах волн 542 нм и 541 нм для наночастиц золота с радиусами 50 нм (среднем для полидисперсных частиц).

Сказанное выше позволяет заключить – для быстроты расчёта оптических спектров наночастиц серебра и золота (Ag, Au) в программном пакете MiePlot можно использовать режим моделирования наночастиц одинакового размера. Кроме того, полученные результаты имеют важную практическую значимость в разработке устройств тераностики (в плане оптимального выбора спектрального диапазона), позволяющих объединять диагностику заболевания и персонализированное лечение пациента.

Список литературы

1. Будкевич Е. В. Биоконпоненты наносистем: учебное пособие (курс лекций) .Ставрополь: СтГУ, 2017. 118 с.
2. Карякин А.А., Уласова Е.А., Вагин М. Ю., Карякина Е. А. Биосенсоры: устройство, классификация и функциональные характеристики. // Сенсор. № 1, 2002. С.16-24.
3. Mie scattering and the Debye series [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.philiplaven.com/index1.html> . – Дата доступа: 10.04.2021.