

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В.ЛОМОНОСОВА»**

**ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

**КАФЕДРА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРОЦЕССОВ И ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ВЕЩЕСТВА**

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

# **Экспериментальное определение функций рассеяния тетрапиррольных соединений**

***выполнил:***

***Кравцов Даниил Валерьевич 404 группа***

**Научный руководитель:**

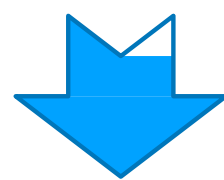
**доц., к.ф.-м.н.**

**Федорова Ксения Вячеславовна**

***МОСКВА 2020***

# Проблематика в исследованиях

- Злокачественное образование – бич XXI века
- Методы лечения: хирургическое вмешательство, химические препараты, лучевая терапия — много побочных эффектов
- Появление принципиально нового подхода — **тераностики (терапия+диагностика)**
- Решение: ФДТ: фотосенсибилизатор и источник мощного излучения



## Поиск ФС нового поколения,

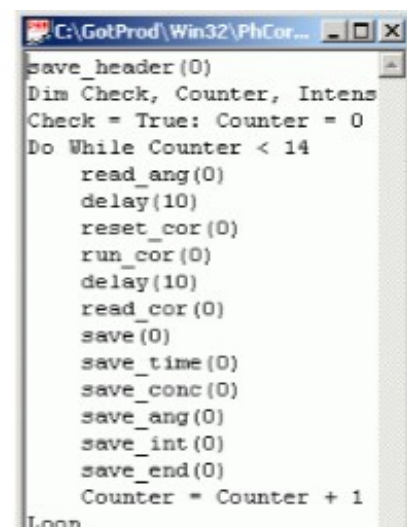
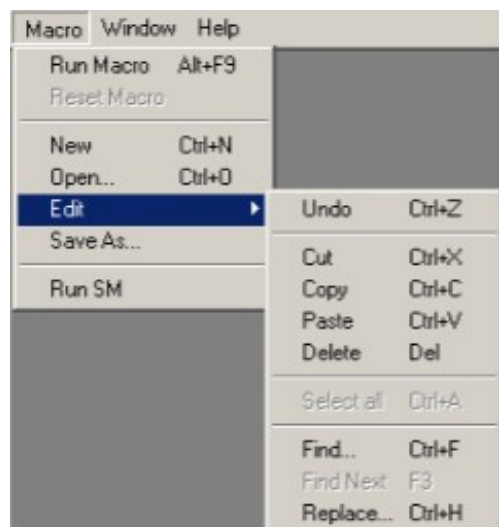
*отвечающего ряду фотофизических и биологических критериев, в том числе:*

- Стабильность в организме при облучении.
- Стабильность при хранении.
- Отсутствие накопления в здоровых тканях и быстрое выведение из организма.
- Соответствующий размер для “пассивной” доставки (диаметр до 200 нм).

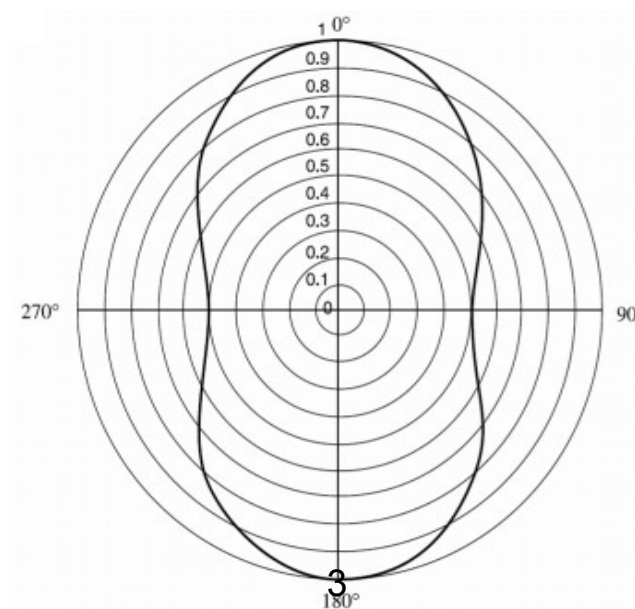
# Постановка задачи

- Исследование оптических характеристик (индикатрис рассеяния) качественно новых фотосенсибилизаторов на основе тетрапиррольных соединений, разрабатываемых ИФАВ РАН в качестве потенциальных фармакоформ.
- Оптимизация дальнейшей работы с экспериментальной установкой: написание и отладка макроса для автоматического получения данных по многоугловому рассеянию и программы на языке Python для обработки и визуализации результатов.

## Написание макроса



## Измерение функции рассеяния



## Программа обработки

```
1 import pandas
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt # импорт библиотек
4 N = 14 # задание константы нормировки для значений интенсивности
5 M = 21 # задание количества строк в файле
6 Index_I = 4 # задание порядкового номера столбца со значениями интенсивности в файле
7 Index_phi = 3 # и угла (отсчет от 0)
8 data = [] # выбрать путь к файлу в строке ниже
9 with open('/path/to/file') as file:
10     for line in file:
11         data.append([str(x) for x in line.split()])
12         # чтение строк из файла
13     i = 1
14 while i < 5:
15     # удаление лишних строк: опционально в зависимости от наличия лишних строк в файле
16     data.pop(0)
17     i += 1
18 I = []
19 for i in range(0, M):
20     I.append(data[i][Index_I])
21 Int = list(map(float, I))
```

# Индикатриса рассеяния

Индикатриса рассеяния - кривая, графически отображающая зависимость интенсивности рассеянного света от угла рассеяния.

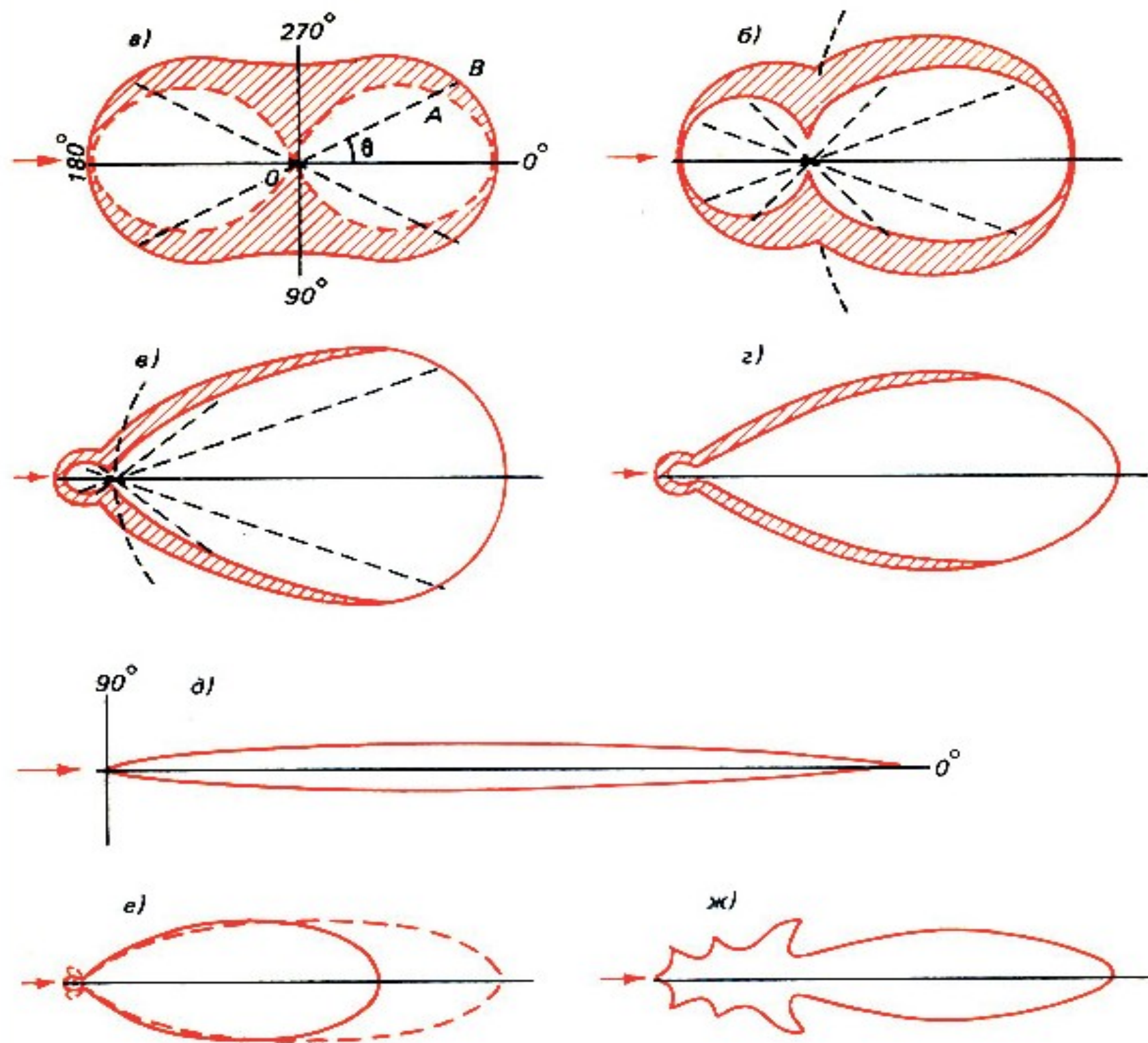
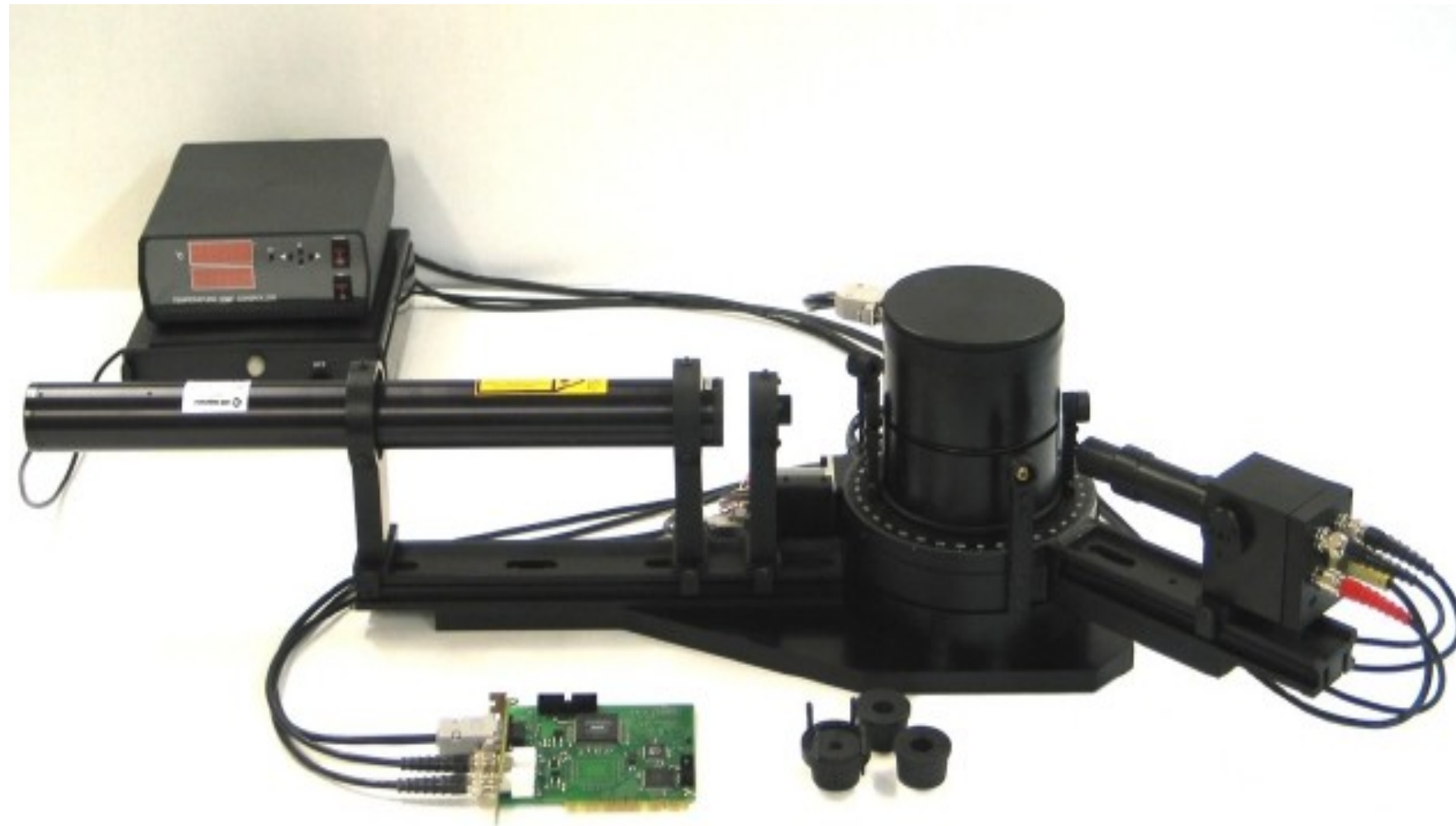


Рис. Индикатрисы рассеяния:

- а - при молекулярном рассеянии;
- б - для частиц диаметром, равным  $1/3\lambda$ ;
- в - для частиц диаметром  $\lambda$ ;
- г - для частиц диаметром  $3\lambda$ ;
- д - для частиц диаметром  $40\lambda$ ;
- е, ж - с дополнительными максимумами

# Экспериментальная установка



Основные результаты были получены на установке “Photocor-FC”, оснащенной диодным лазером с длиной волны 647 нм и мощностью в 25 мВт.

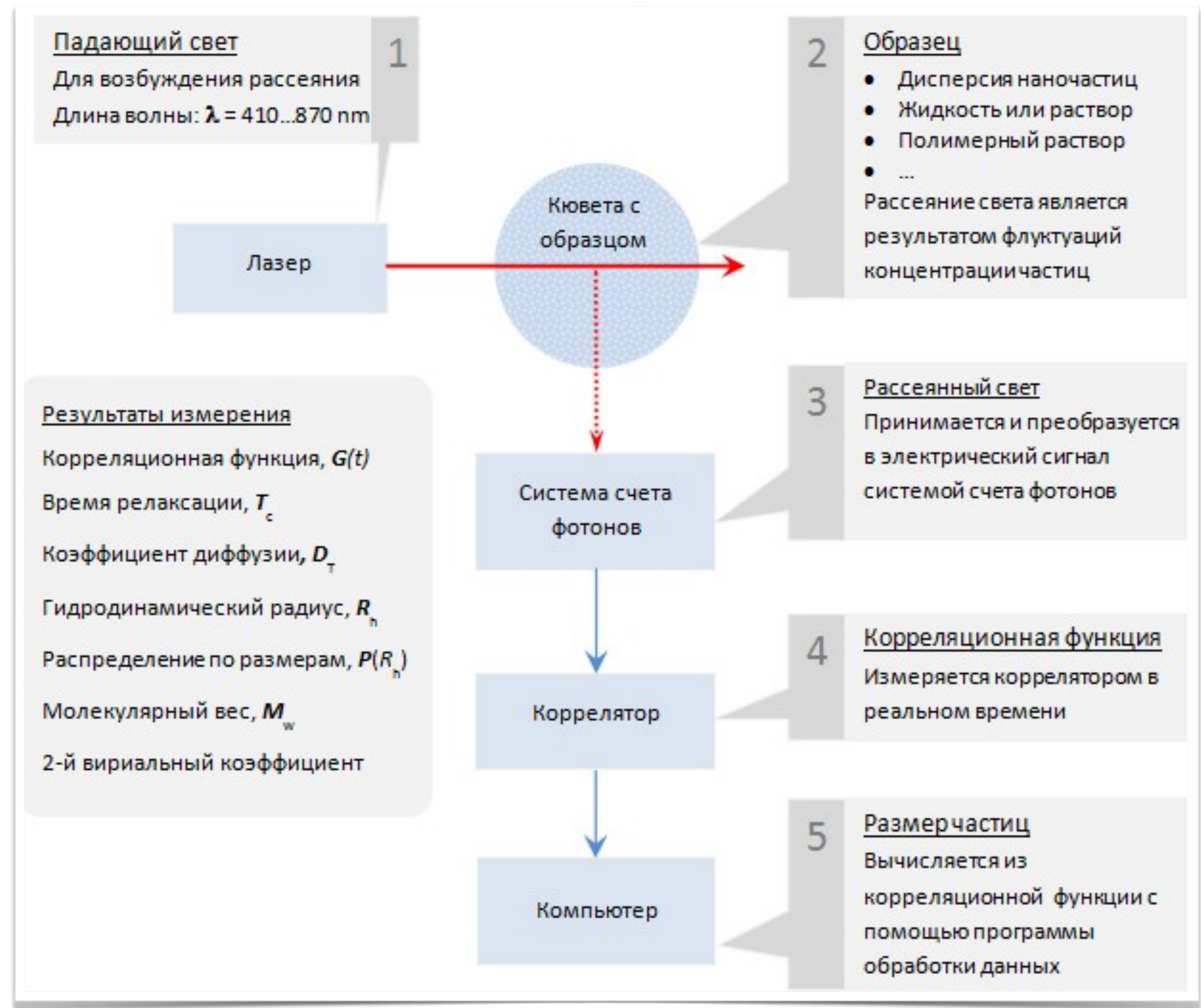


Рис. Схема процесса измерения размеров частиц

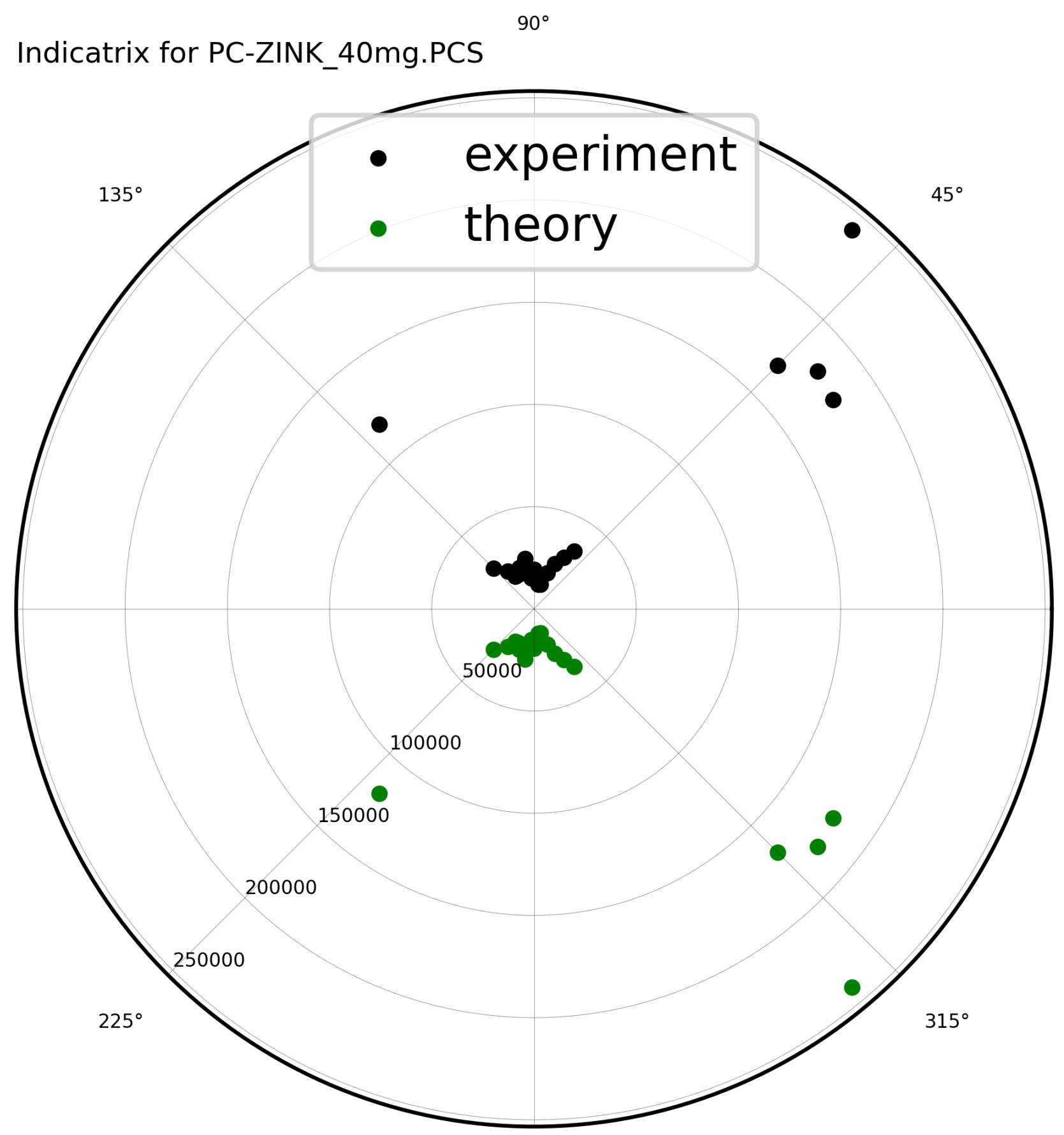
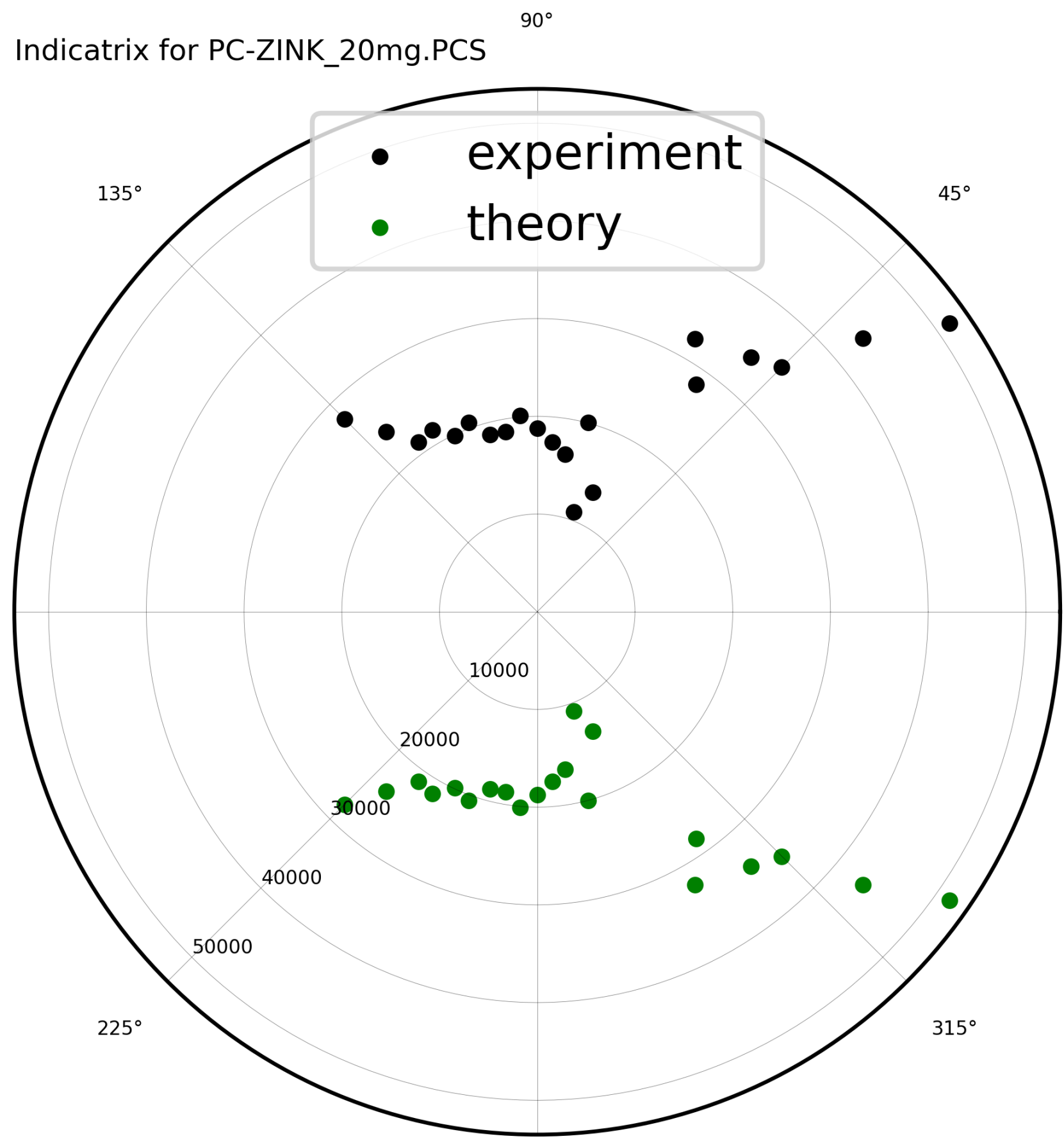
# Код программы для обработки результатов на языке Python 3

```
1 import pandas
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt #импорт библиотек
4 import os
5 from scipy.interpolate import interp1d
6 path_to_files = "/Users/pasdechlopez/Documents/Clean/";
7 obj = os.scandir(path=path_to_files);
8 files = []
9 folders = []
10 files_name = []
11 for entry in obj:
12     if entry.is_dir():
13         folders.append(entry.name)
14 for file in folders:
15     scan = os.scandir(path = path_to_files + file)
16     for result in scan:
17         if result.is_file() and ".PCS" in str(result) and ("YK") in str(result) and '40' not in str(result):
18             files.append(path_to_files + file + "/" + result.name)
19             files_name.append(result.name)
20 #вывод списка подходящих найденных файлов
21 files_name.sort(key=str.lower)
22 M = 21 #заданное количество строк в файле
23 Index_I = 4 #заданное порядкового номера столбца со значениями интенсивности в файле
24 Index_phi = 3 #и угла (отсчет от 0!)
25 data = [] #выбрать путь к файлу в строке ниже
26 ind = 0
27 for i in range(0, len(files)):
28     with open(files[i], "r") as file:
29         for line in file:
30             #чтение строк из файла
31             data.append([str(x) for x in line.split()])
32 clean_data = []
33 k = 0
34 for k in range(len(data)):
35     if (bool(data[k]) and data[k][0].isnumeric()):
36         clean_data.append(data[k])
37 #_____INTENSITY BLOCK_____
38 I = []
39 for i in range(len(clean_data)):
40     I.append(clean_data[i][4])
41 Intensity_Values = list(map(float, I))
42 Intensity = []
43 Intensity_Normed = []
44 print(max(Intensity_Values))
45 for i in Intensity_Values:
46     Intensity_Normed.append(((i)/max(Intensity_Values)))
47     Intensity.append(i)
```

```
48 #_____ANGLES BLOCK_____
49 theta = []
50 theta_reversed = []
51 angles = []
52 angles_reversed = []
53 for k in range(21):
54     theta.append(clean_data[k][3])
55
56 theta = list(map(int, theta))
57 print(theta.index(35), theta.index(45), theta.index(135), theta.index(125), 35+90)
58 for angle in theta:
59     angles.append((angle)*np.pi/180)
60     angles_reversed.append((-angle)*np.pi/180)
61 #_____PLOT BLOCK FOR NORMED GROUPED INDICATRICES_____
62 x_reversed = angles_reversed
63 x = angles
64 x_new_reversed = np.linspace(min(x_reversed), max(x_reversed), 5000)
65 x_new = np.linspace(min(x), max(x), 5000)
66 plt.figure(dpi=1000)
67 ax = plt.subplot(111, projection='polar')
68 k = 0
69 i = 0
70 j = 0
71 colour=['black', 'green', 'red', 'orange', 'purple', 'yellow', 'pink', 'magenta']
72 while k < len(files_name):
73     ax.scatter(angles, Intensity_Normed[i:i+21], s=2, color=colour[j], label=(files_name[k]))
74     ax.scatter(angles_reversed, Intensity_Normed[i:i+21], s=2, color=colour[j],)
75     f = interp1d(x, Intensity_Normed[i:i+21], kind='cubic')
76     y_smooth=f(x_new)
77     plt.plot(x_new, y_smooth, lw='0.2', ls='--', color=colour[j])
78     f_reversed = interp1d(x_reversed, Intensity_Normed[i:i+21], kind='cubic')
79     y_smooth_reversed=f_reversed(x_new_reversed)
80     plt.plot(x_new_reversed, y_smooth_reversed, lw='0.3', ls='--', color=colour[j])
81     k += 1
82     i += 21
83     j += 1
84 plt.tick_params(grid_linewidth="0.1", grid_color="black", grid_alpha=0.5, labelsz="6")
85 ax.set_rticks([0.5, 1])
86 ax.set_rmax(1.1) #опционально в зависимости от графика
87 ax.set_rlabel_position(0)
88 plt.title('Indicatrices normed grouped for c = 20mg/ml', loc="left", fontsize=7)
89 ax.legend(fontsize=5, loc="upper center")
90 plt.savefig(dpi=1000, bbox_inches='tight', fname='|')
91 plt.show()
```

# Результаты работы

• PC-Zn

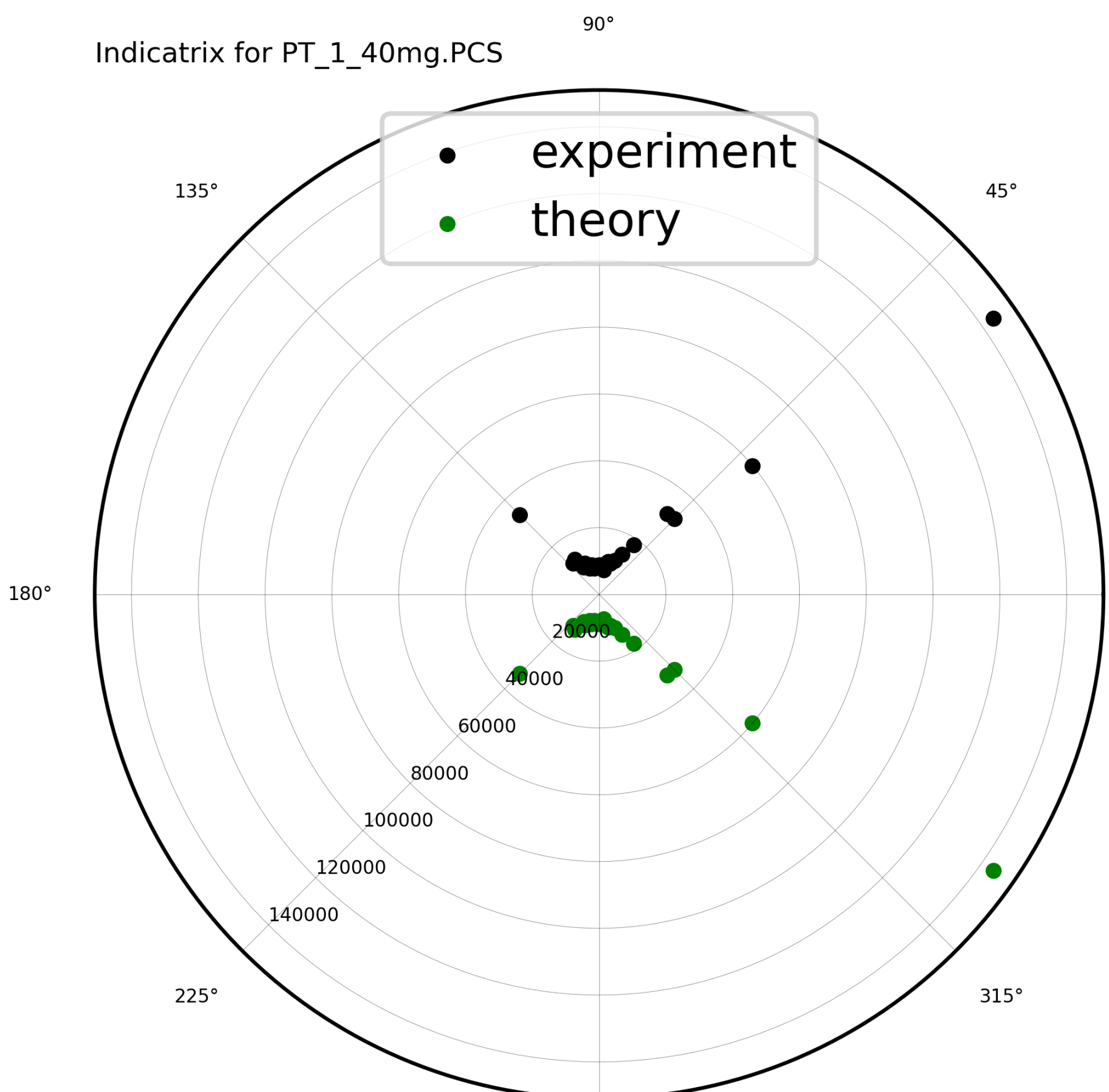
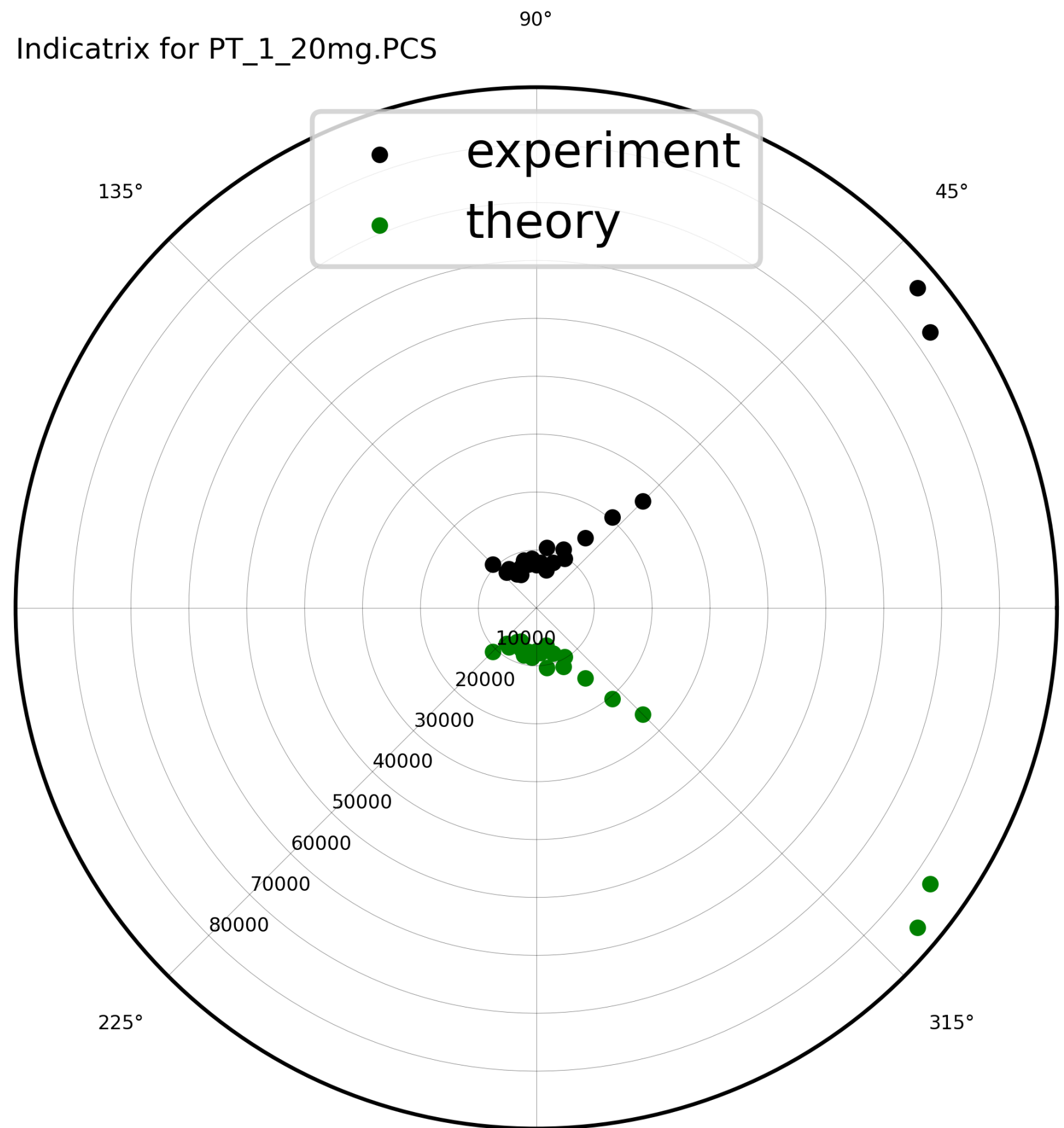


	Z
C = 20 mg/ml	1.81
C = 40 mg/ml	1.54

Средний гидродинамический радиус Rh, nm
37±3

# Результаты работы

• PT-1:



	Z
C = 20 mg/ml	10.65
C = 40 mg/ml	4.94

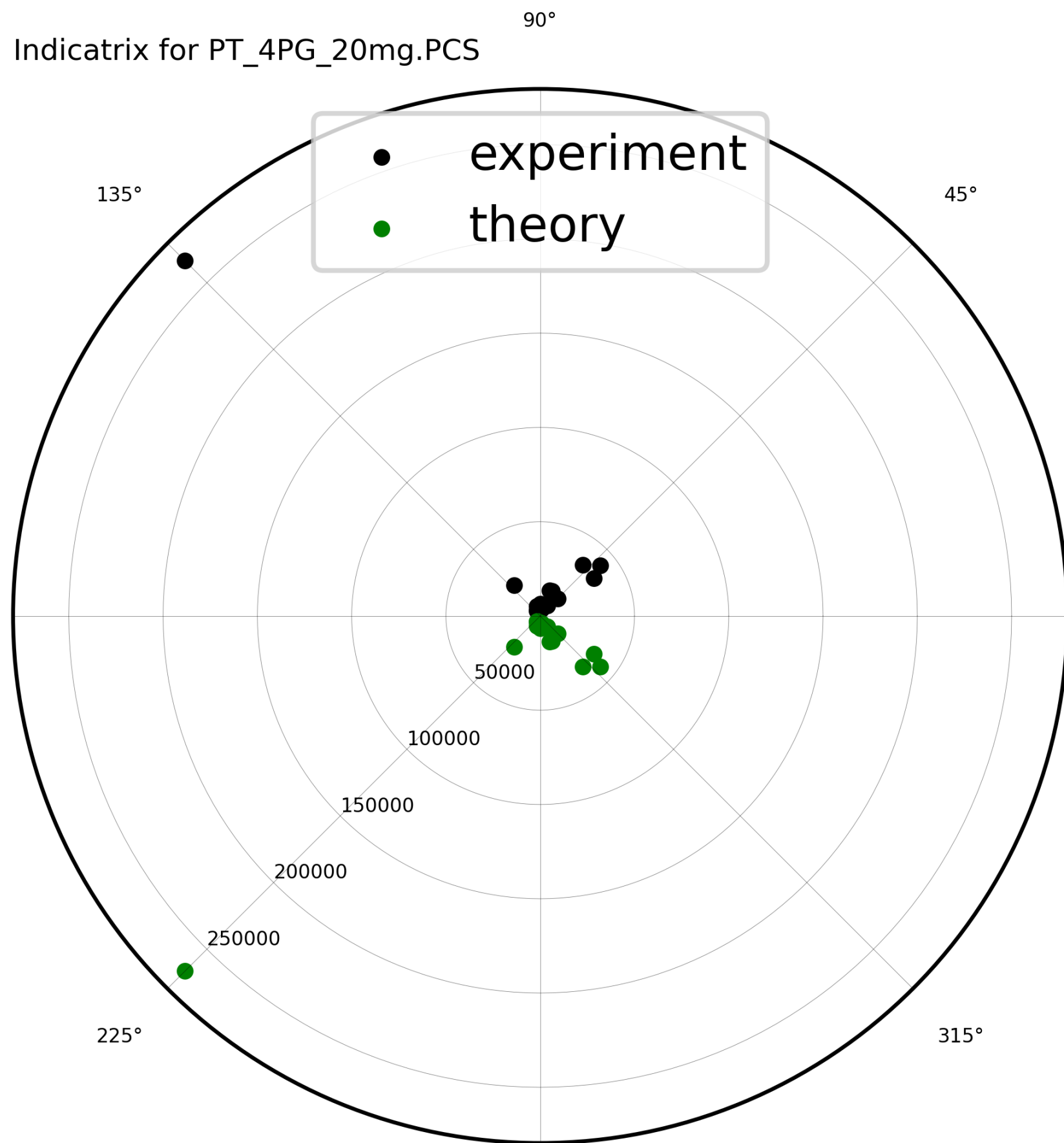
Средний гидродинамический радиус Rh, nm
22±5; 112±28



# Результаты работы

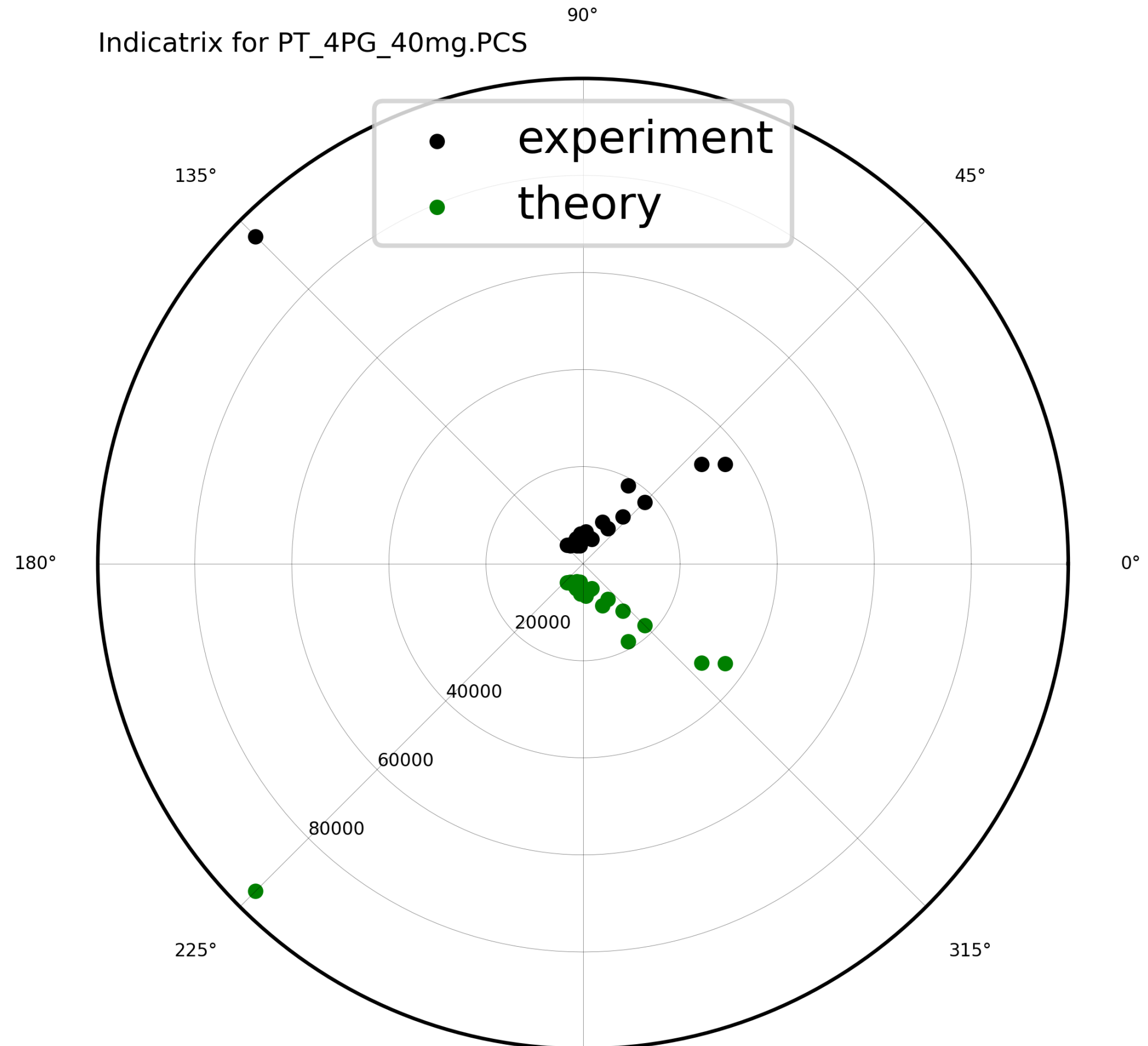
• PT-4-PG:

Indicatrix for PT\_4PG\_20mg.PCS



	Z
C = 20 mg/ml	1.94
C = 40 mg/ml	6.32

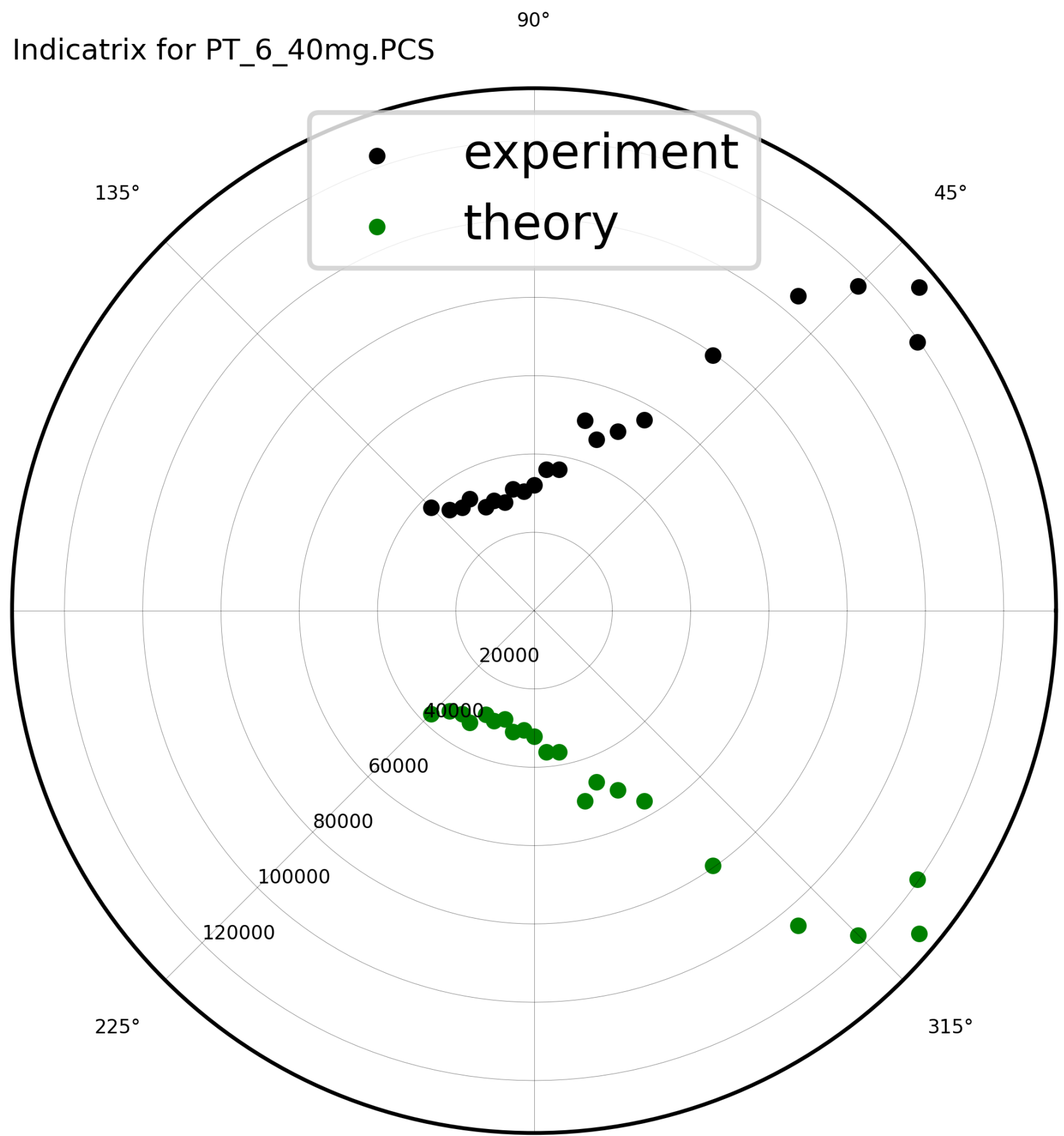
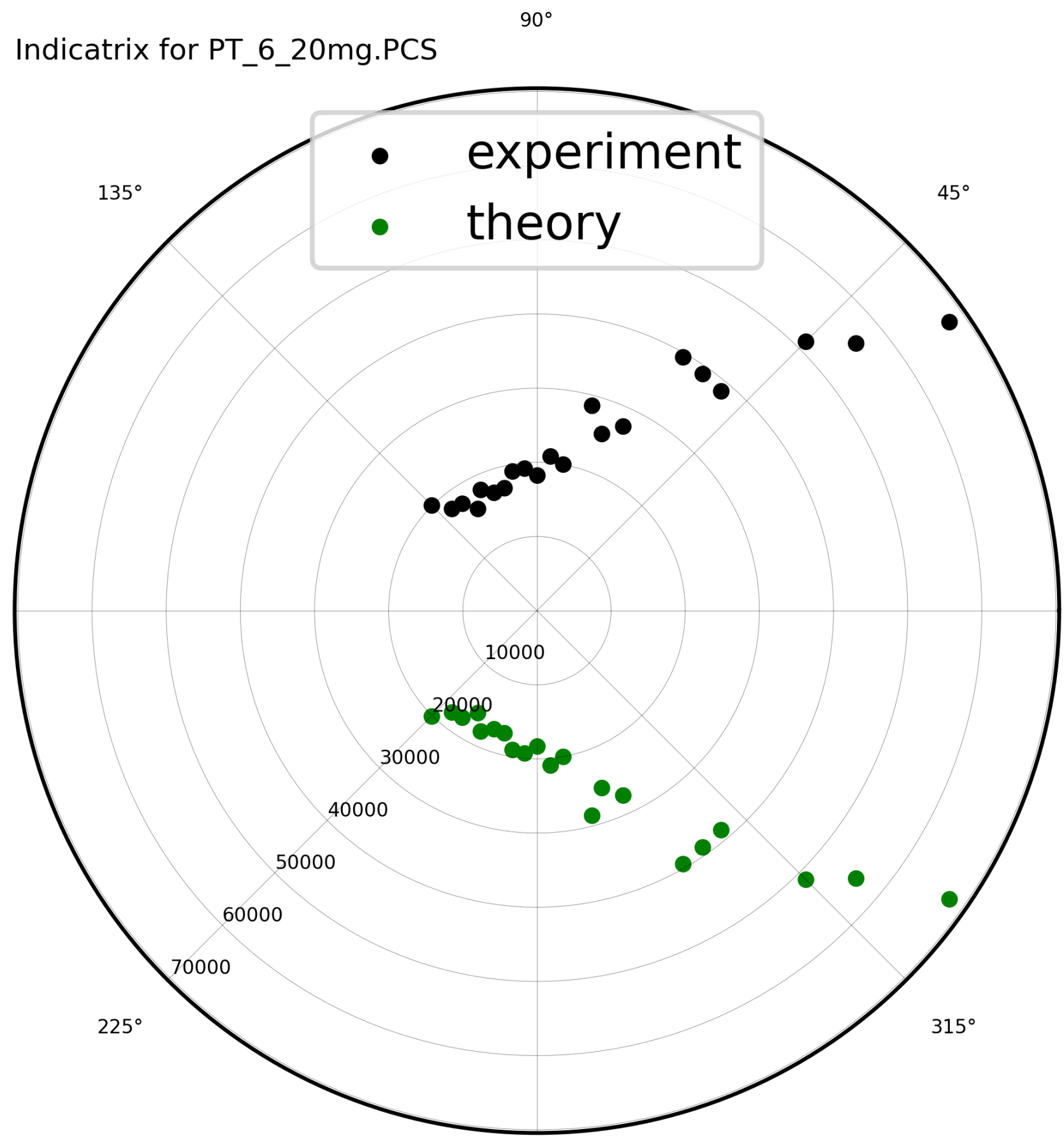
Indicatrix for PT\_4PG\_40mg.PCS



Средний гидродинамический радиус Rh, nm
79±15

# Результаты работы

• PT-6:

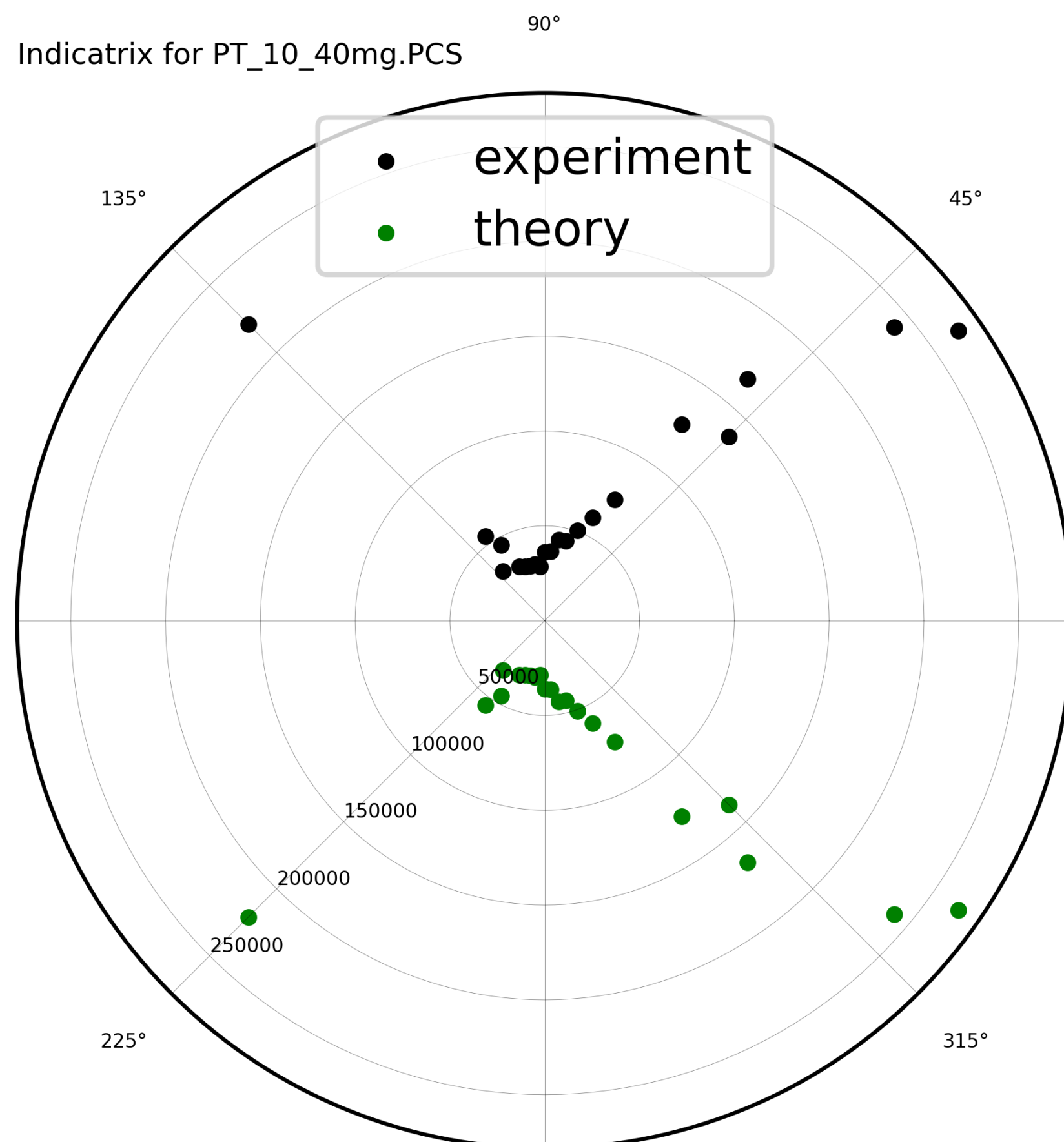
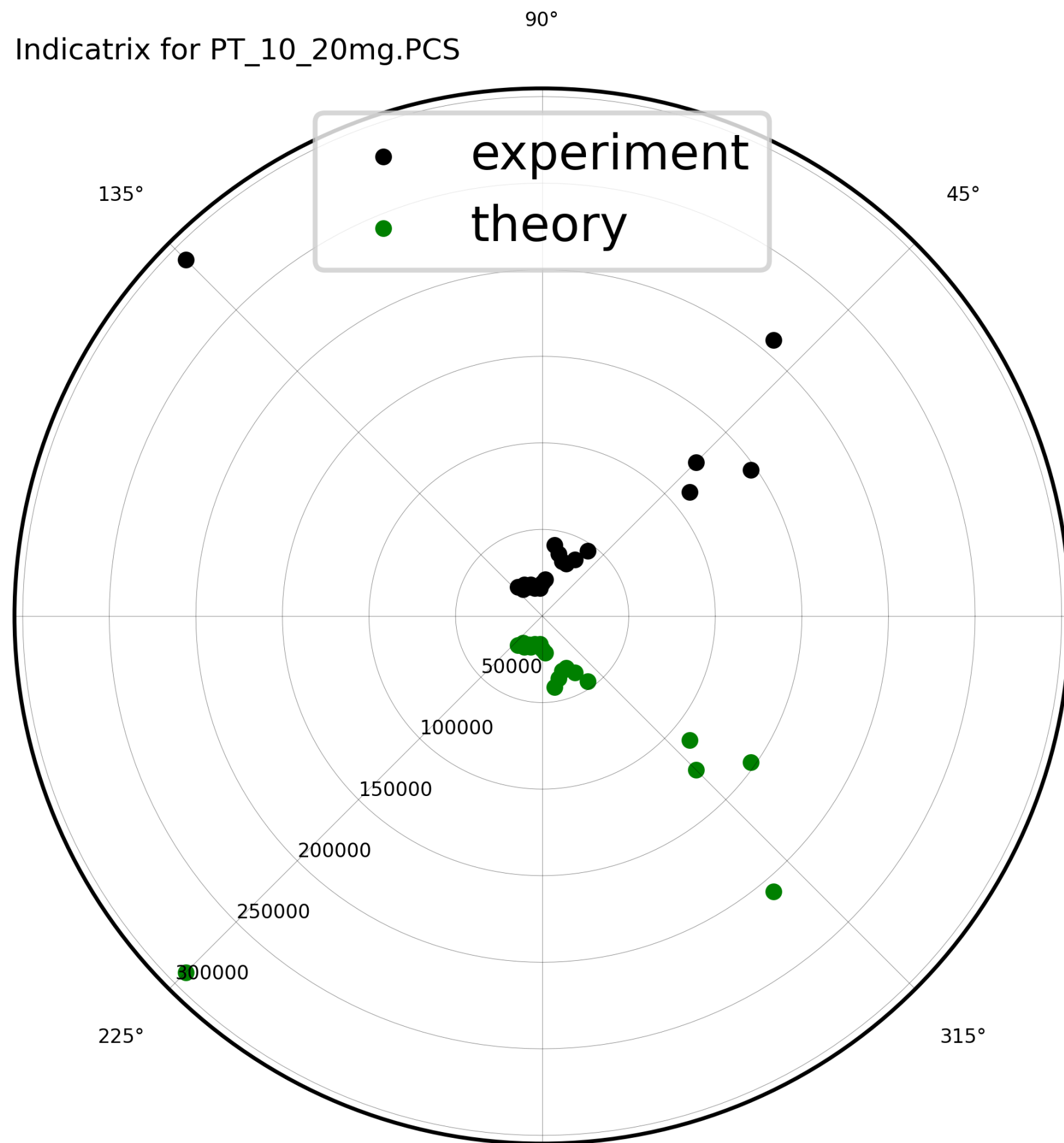


	Z
C = 20 mg/ml	3.13
C = 40 mg/ml	3.83

Средний гидродинамический радиус Rh, nm
4±2; 92±16

# Результаты работы

• PT-10:



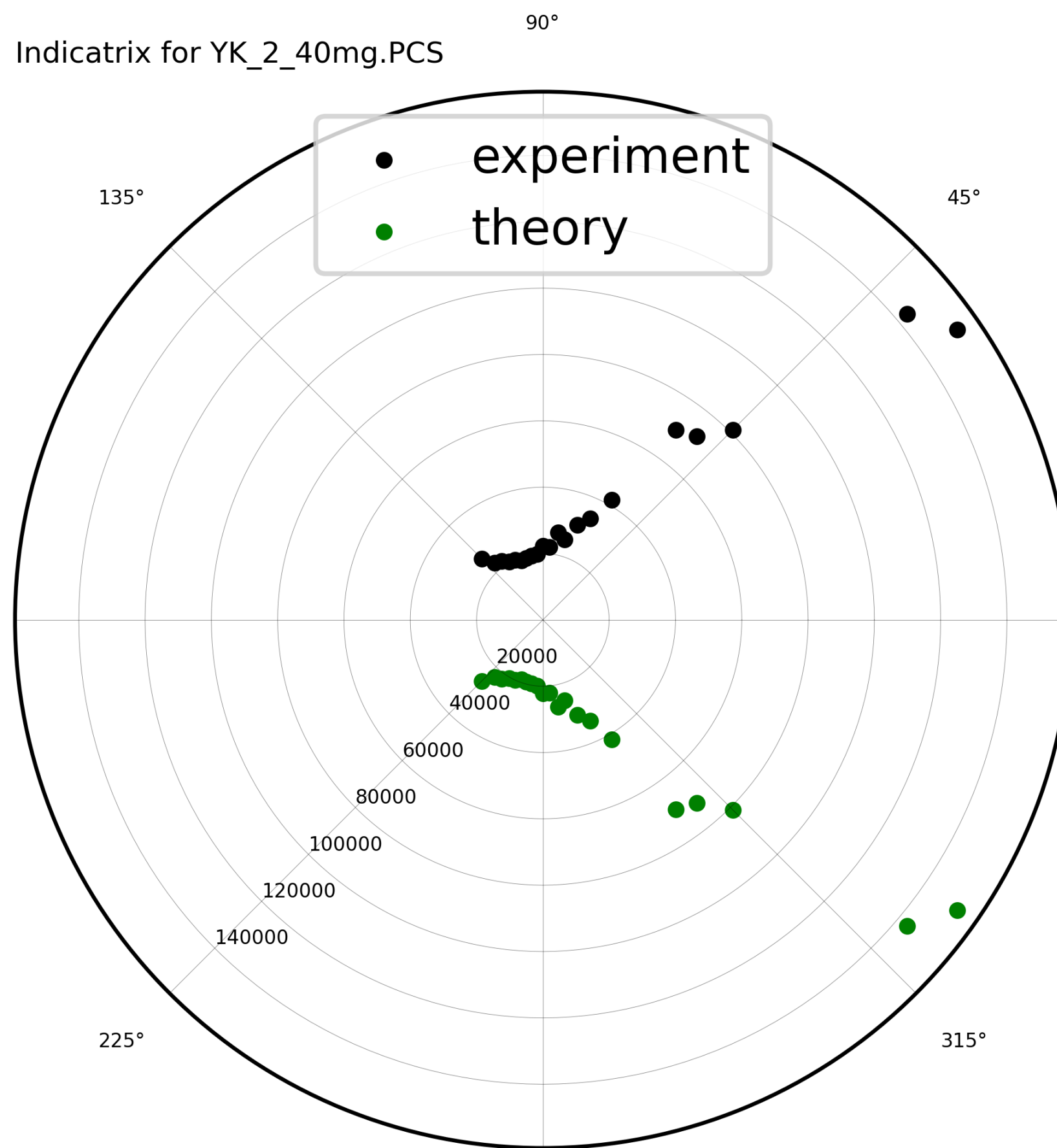
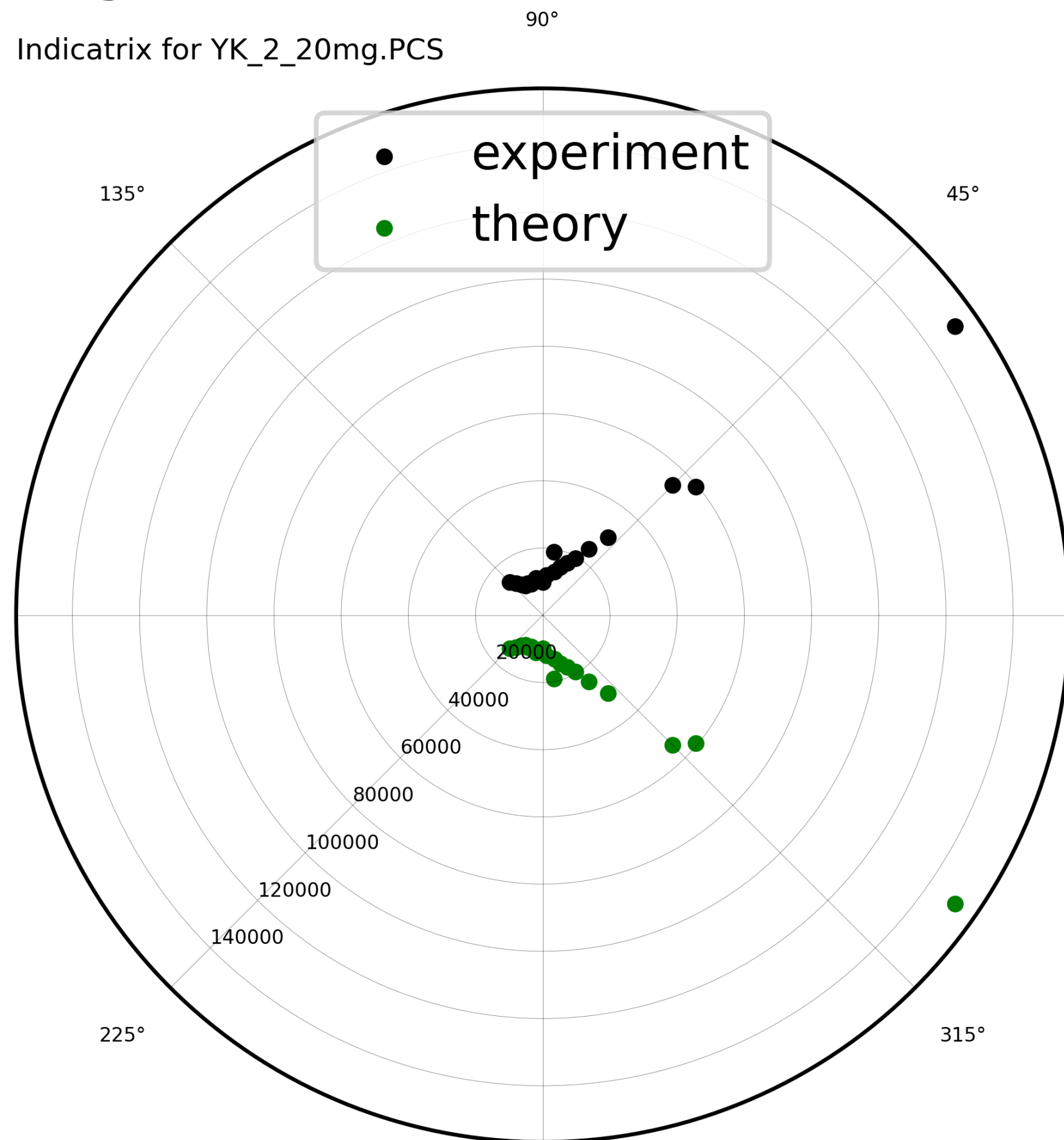
	Z
C = 20 mg/ml	5.06
C = 40 mg/ml	7.04

Средний гидродинамический радиус Rh, nm

УК-3 < PT-10 < PT-1

# Результаты работы

• YK-2:

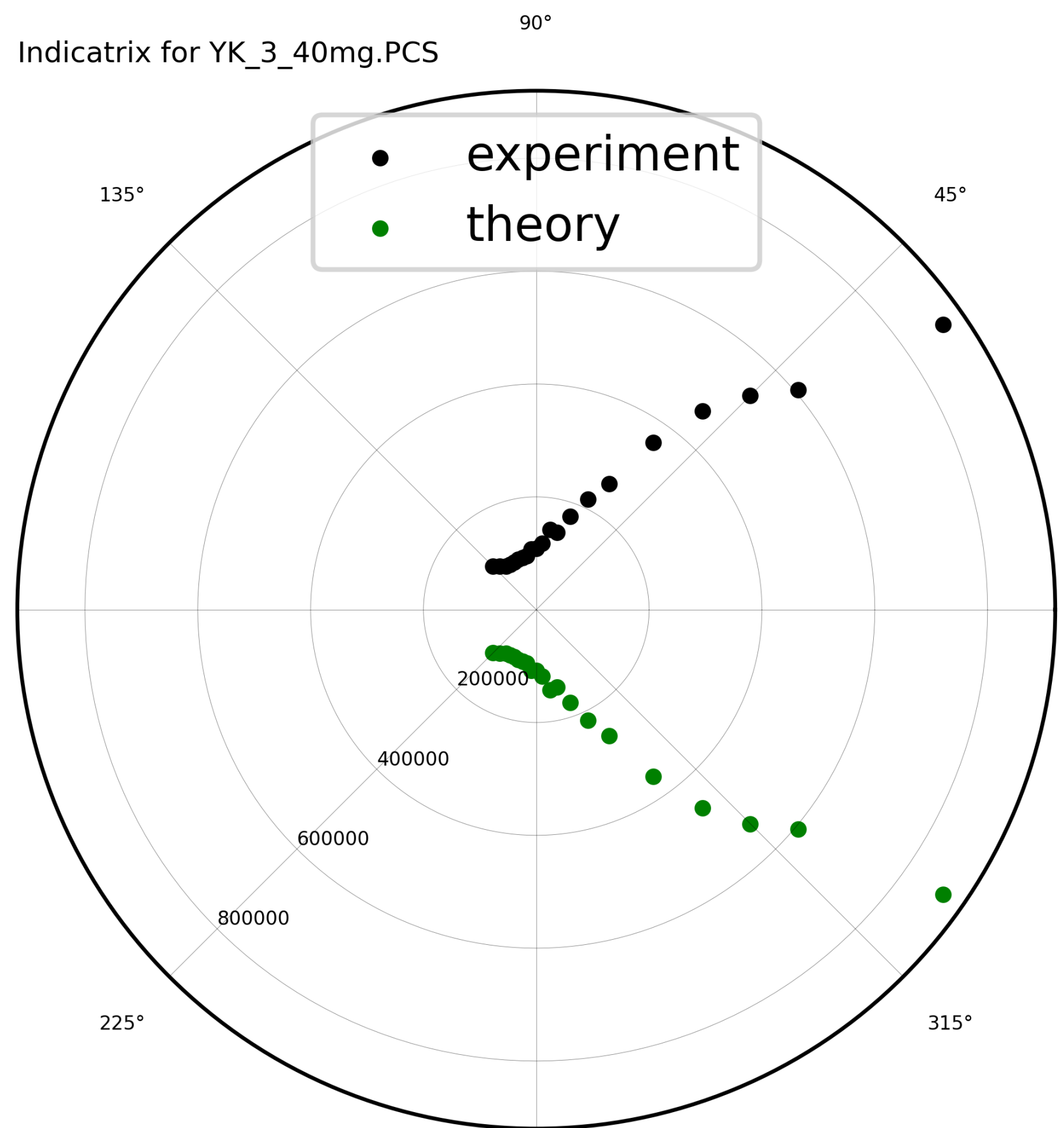
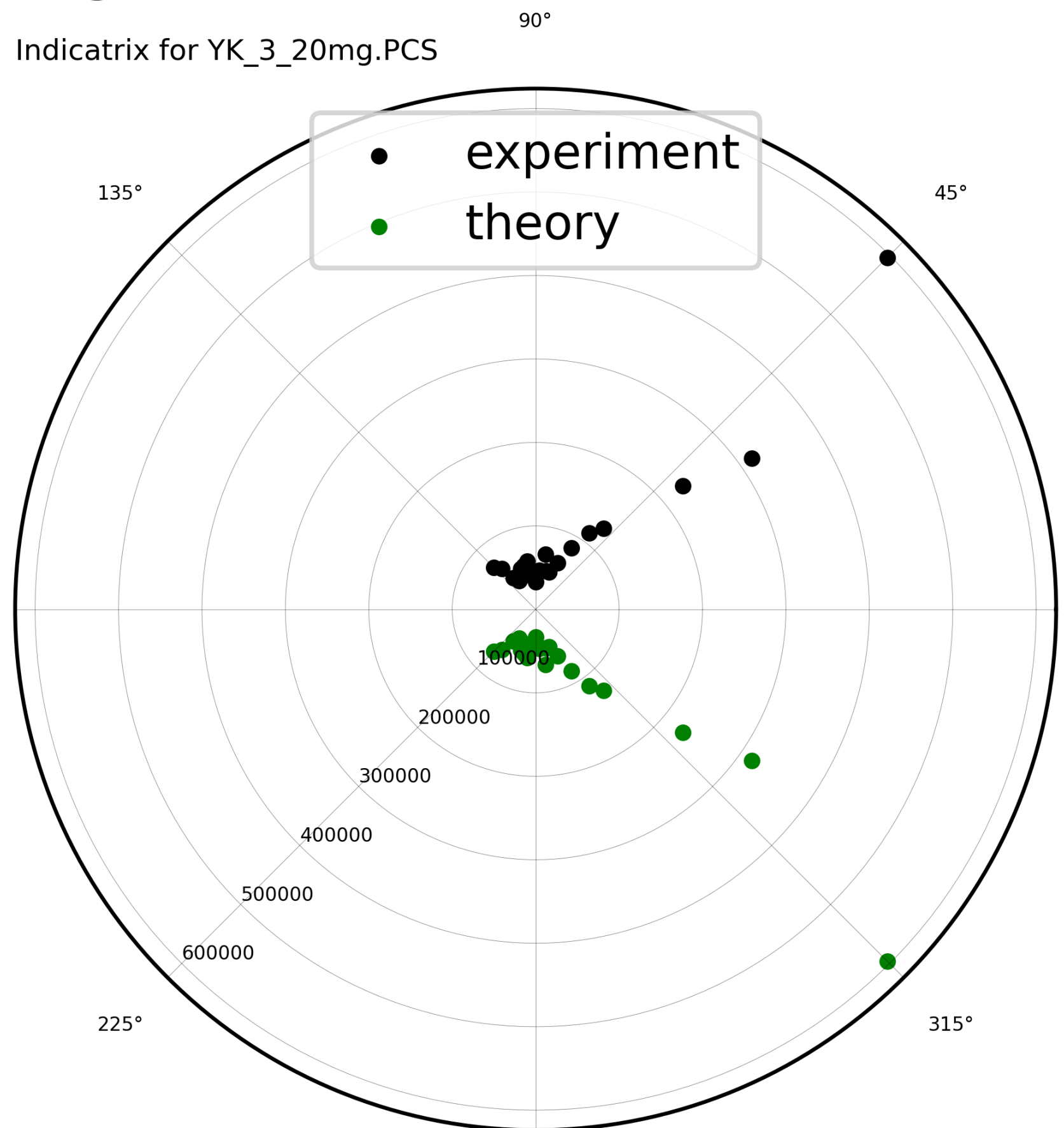


	Z
C = 20 mg/ml	4.80
C = 40 mg/ml	6.38

Средний гидродинамический радиус Rh, nm
23±7; 107±37

# Результаты работы

• YK-3

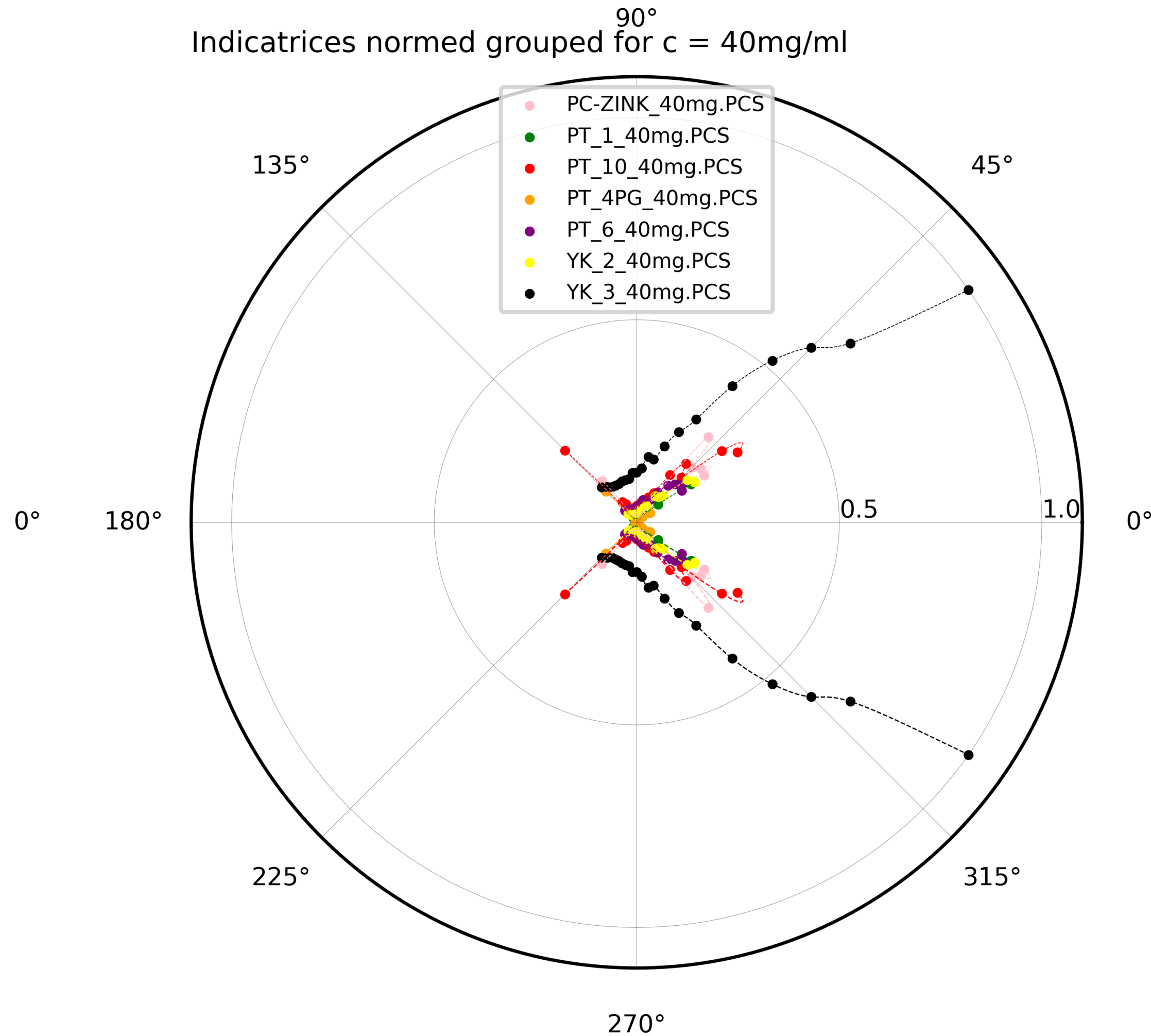
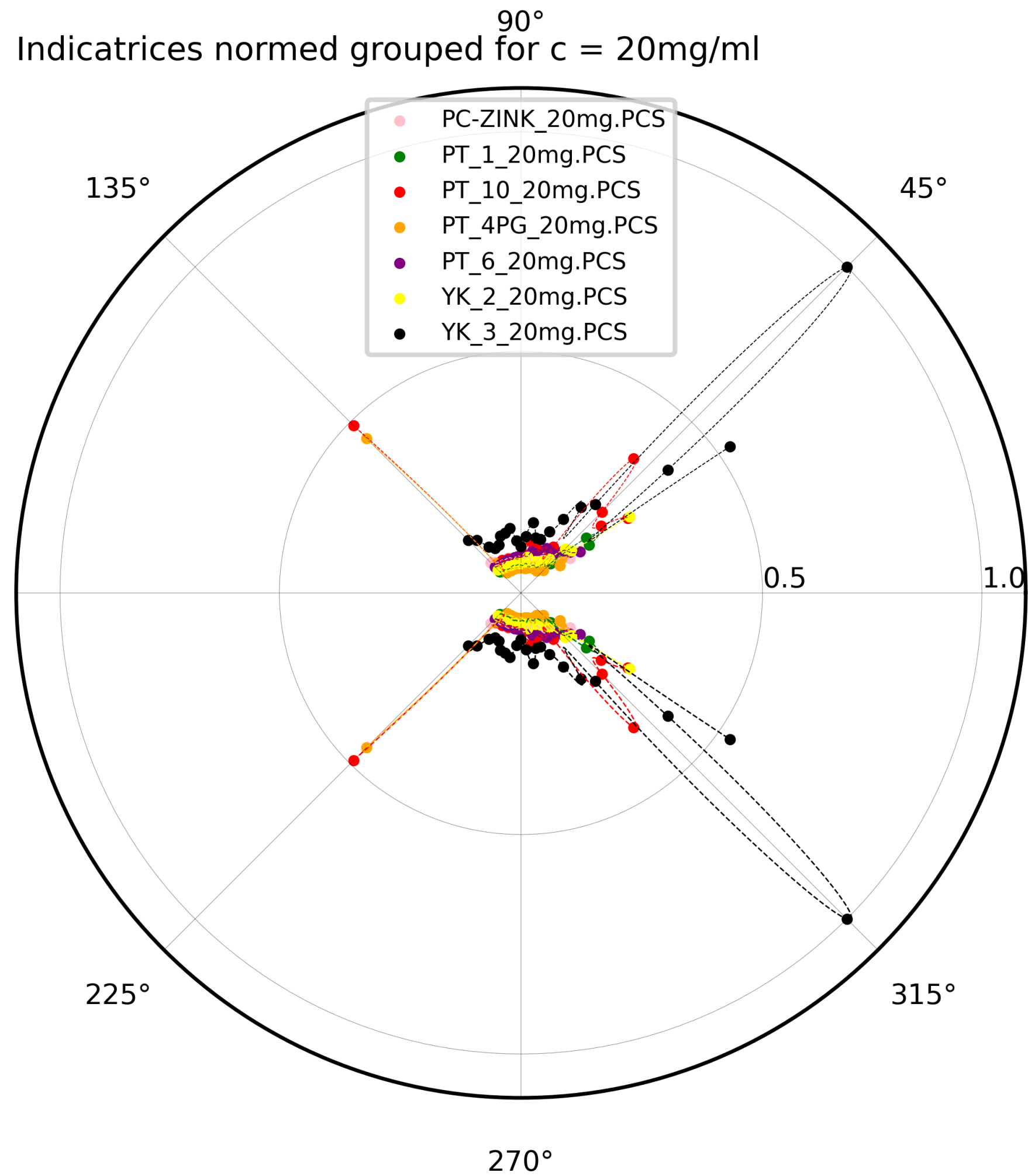


	Z
C = 20 mg/ml	3.62
C = 40 mg/ml	6.03

Средний гидродинамический радиус Rh, nm
10±4; 104±8

# Результаты работы

- Индикатрисы изучаемых веществ в приведенном масштабе для двух концентраций



# Результаты и Выводы

- Оптимизирована работа на установке с помощью макросов.
- Получены данные о распределении интенсивности лазерного излучения от угла при рассеянии на ряде веществ.
- Получено значение  $Z$  для изучаемых форм фотосенсибилизаторов — наблюдается корреляция формы индикатрисы с размером рассеивающих частиц в растворе.
- Написана программа обработки экспериментальных данных.
- Из формы индикатрисы можно сделать вывод, что мы имеем дело с рассеивающими частицами размер которых меньше длины волны.
- Подтверждена устойчивость исследуемых веществ под действием внешних факторов — важно для последующих медицинских исследований.

*Спасибо за внимание!*