

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

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРОЦЕССОВ И ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ВЕЩЕСТВА

Экспериментальное определение функций рассеяния тетрапиррольных соединений

выполнил:

Кравцов Даниил Валерьевич 404 группа

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: ФТД: фотосенсибилизатор и источник мощного излучения



Поиск ФС нового поколения,

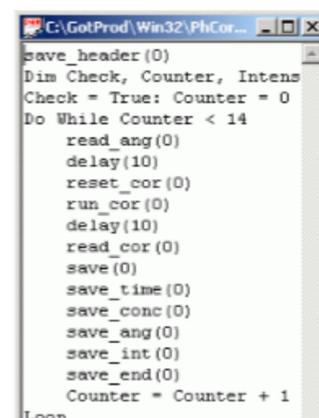
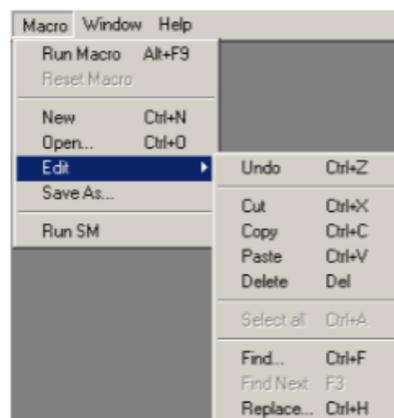
отвечающего ряду фотофизических и биологических критериев, в том числе:

- Отсутствие темновой токсичности.
- Стабильность в организме при облучении.
- Стабильность при хранении.
- Отсутствие накопления в здоровых тканях и быстрое выведение из организма
- Отсутствие сильного агрегирования ФС.

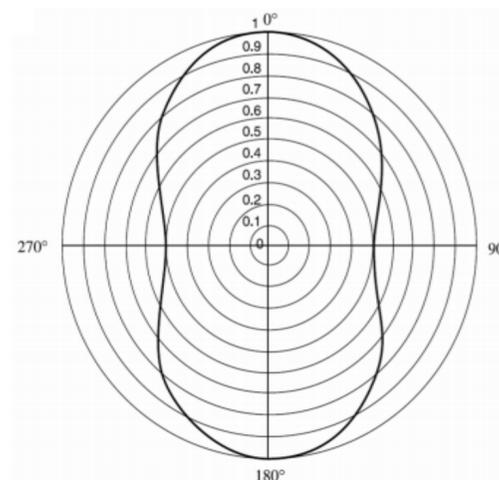
Постановка задачи

- 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 константа нормировки для значений интенсивности
5 M = 21 # задание количество 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

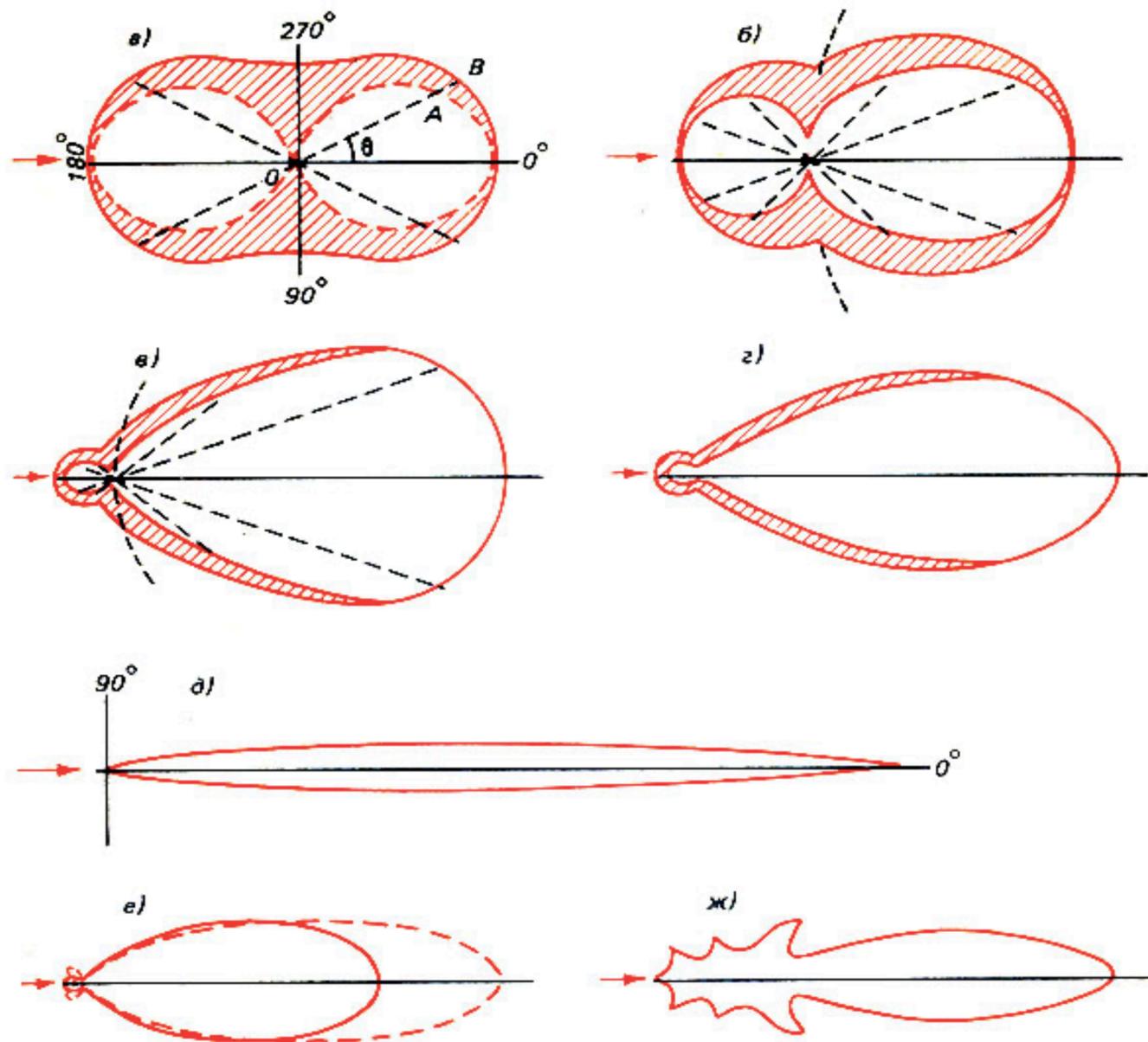
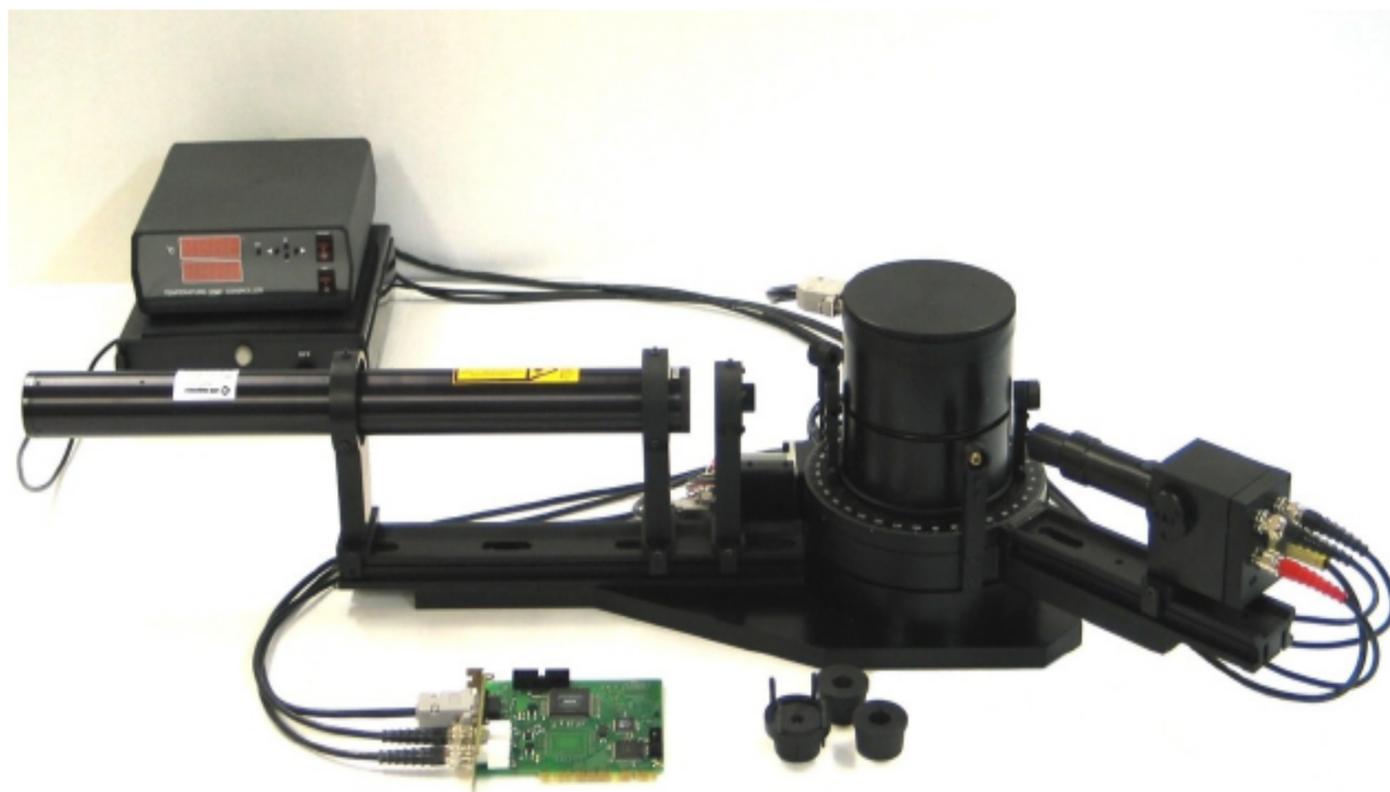


Рис. Индикатрисы рассеяния:

- а - при молекулярном рассеянии;
- б - для частиц диаметром, равным $1/3\lambda$;
- в - для частиц диаметром λ ;
- г - для частиц диаметром 3λ ;
- д - для частиц диаметром 40λ ;
- 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.

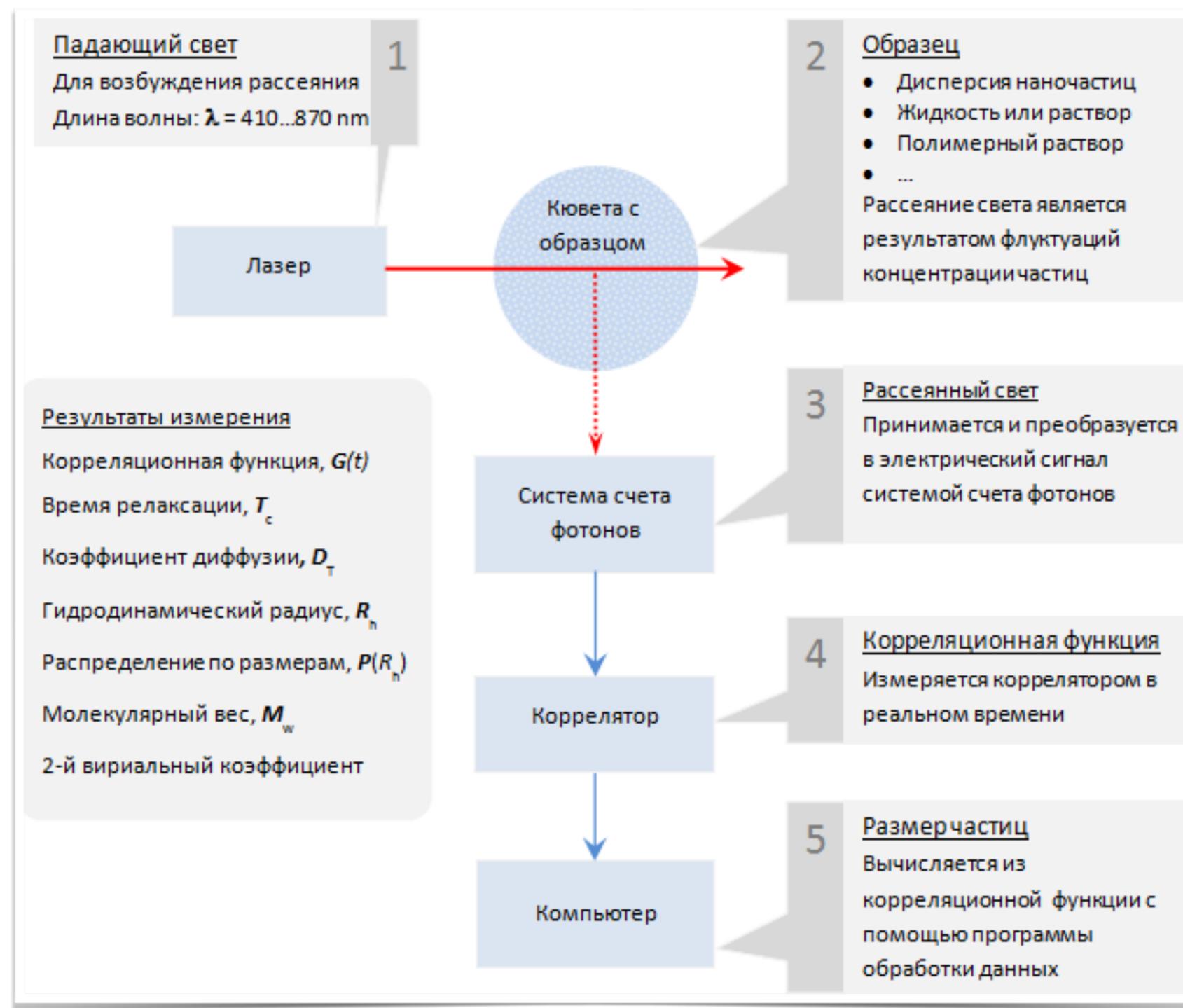


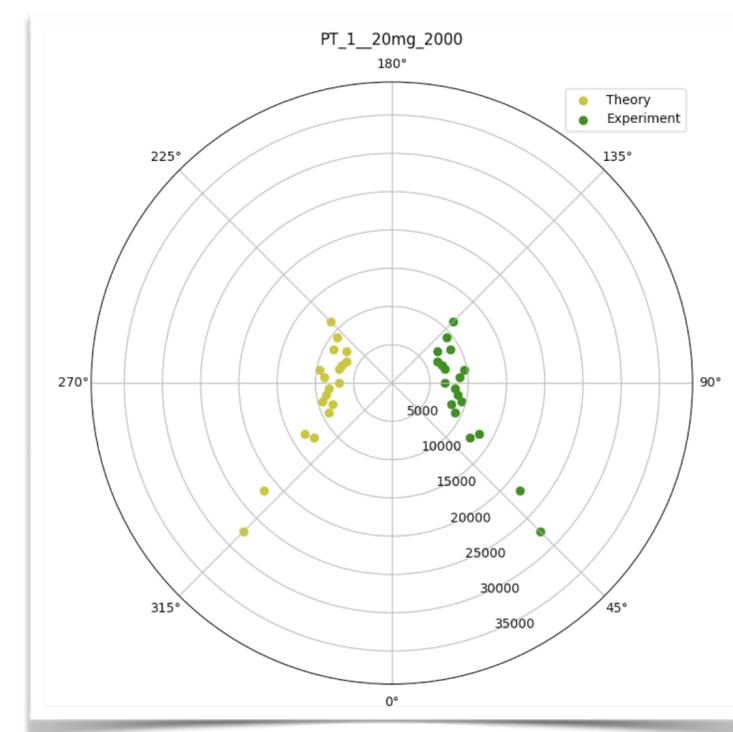
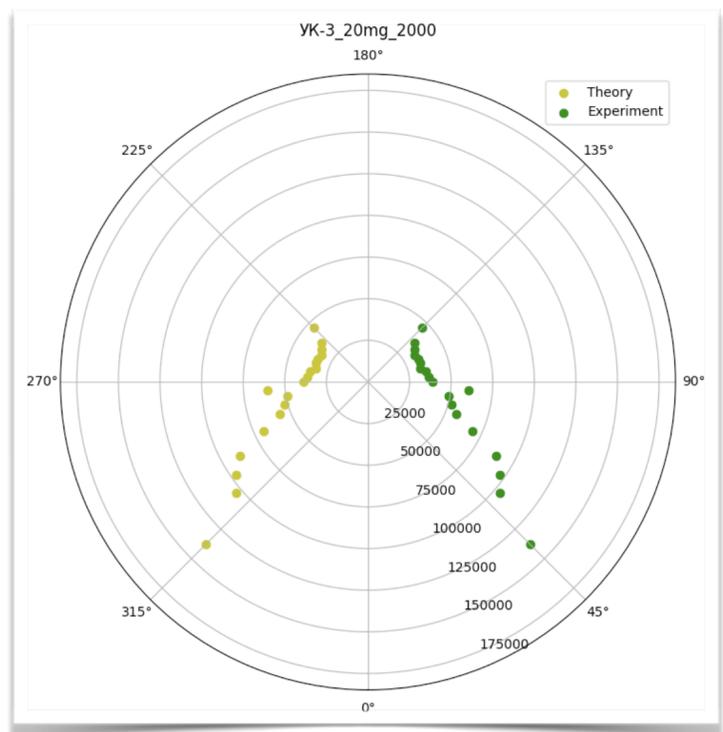
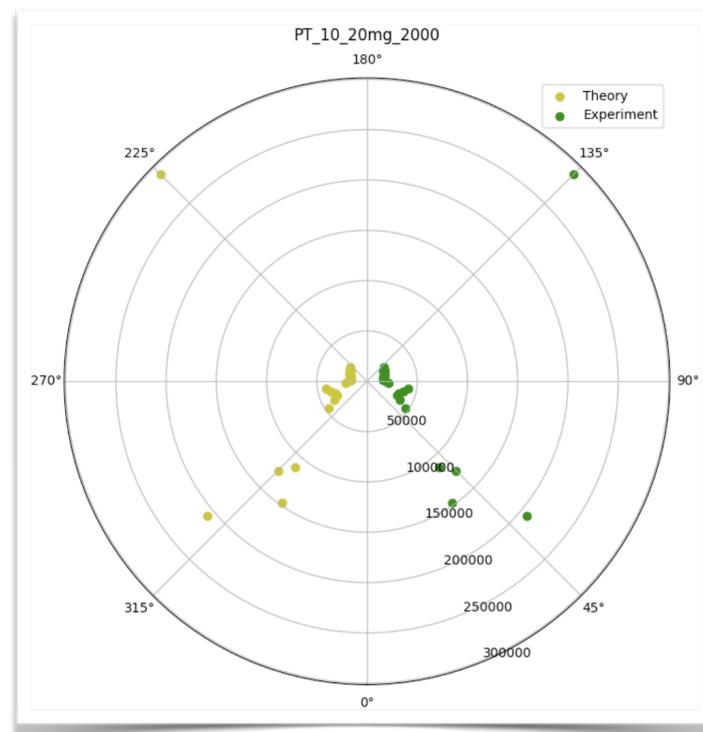
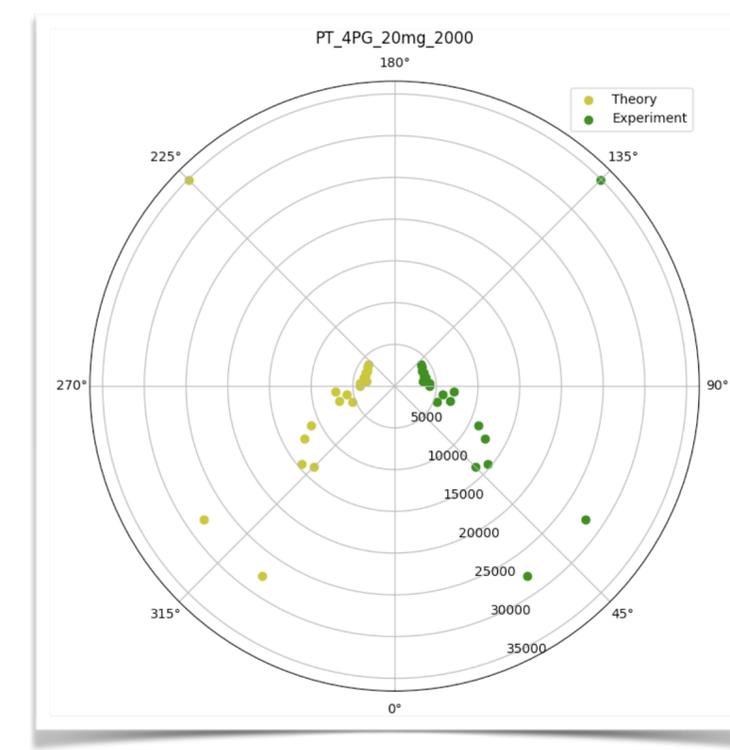
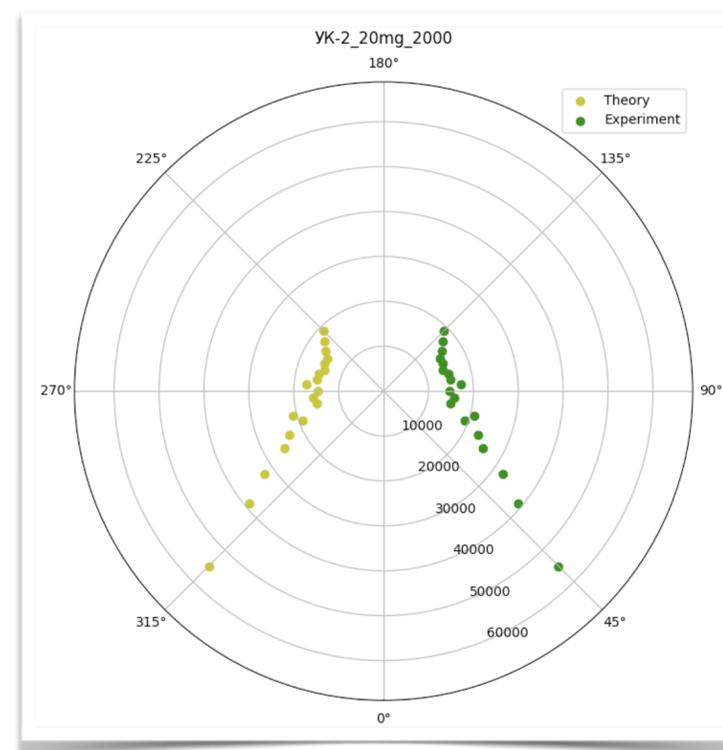
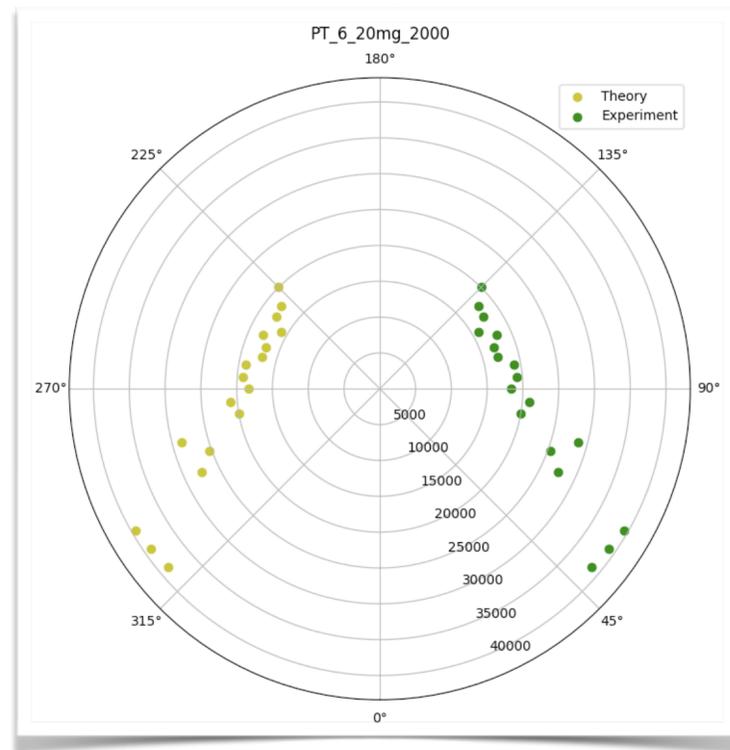
Рис. Схема процесса измерения размеров частиц

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 N = 14 # задание константа нормировки для значений интенсивности +
5 M = 21 # задание количество 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))
22     Intensity = []
23     Intensity_Normed = []
24     for i in Int:
25         # заполнение массива значениями до 4 значений после запятой
26         Intensity.append('% .4g' % ((i) * N / max(Int)))
27     Intensity = list(map(float, Intensity))
28     Intensity_reversed = []
29     for i in Intensity:
30         Intensity_reversed.append(i)
31     Intensity_reversed.reverse()
32     for i in Int:
33         Intensity_Normed.append('% .4g' % (i))
34         # Intensity.append('% .4g' % (i))
35     Intensity_Normed = list(map(float, Intensity_Normed))
36     theta = []
37     for k in range(M):
38         theta.append((data[k][Index_phi]))
39     theta = list(map(int, theta))
40     theta_reversed = []
41     for k in theta:
42         theta_reversed.append(k)
43     angles = []
44     for i in theta:
45         angles.append((i) * np.pi / 180) # заполнение массива экспериментальных углов
46     angles_reversed = []
47     for i in theta_reversed:
48         angles_reversed.append((-i) * np.pi / 180) # заполнение массива отраженных ("мнимых") углов
49     plt.figure()
50     ax = plt.subplot(111, projection='polar')
51     AX_reversed = ax.scatter(angles_reversed, Intensity_Normed, color='y', label='Theory')
52     AX_reversed_line = ax.plot(angles_reversed, Intensity_Normed, ls='-', lw='0.4')
53     AX = ax.scatter(angles, Intensity_Normed, color='g', label='Experiment')
54     AX_line = ax.plot(angles, Intensity_Normed, ls='-', lw='0.4')
55     ax.legend()
56     ax.set_theta_zero_location("S")
57     ax.set_rmin(min(Intensity))
58     # ax.set_rmax(N+1) # опционально в зависимости от графика
59     plt.title('Intensity_Normed')
60     plt.show()
```

Результаты работы

- Индикатрисы части изучаемых веществ



Результаты и Выводы

- Оптимизирована работа на установке с помощью макросов.
- Получены данные о распределении интенсивности лазерного излучения от угла при рассеянии на ряде веществ.
- Написана программа обработки экспериментальных данных.
- Из формы индикатрисы можно сделать вывод, что мы имеем дело с рассеивающими частицами размер которых меньше длины волны. В некоторых случаях (РТ-6, УК-2, УК-3) наблюдается эффект Ми.
- Подтверждена устойчивость исследуемых веществ под действием внешних факторов — важно для последующих медицинских исследований

Спасибо за внимание!