

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНДОЦИТОЗА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ
НАНОЧАСТИЦ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ**

Петров Н.С. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – PhD, Дададжанов Д.Р.
(Университет ИТМО)

Введение. Фундаментальные исследования в области наноматериалов способствовали быстрому развитию технологии адресной доставки лекарственных средств. В свою очередь, наночастицы благородных металлов хорошо зарекомендовали себя в качестве биомаркеров или мишеней в фототермической терапии [1,2]. Прежде всего, это достигается благодаря их плазмонным свойствам, а именно благодаря локализованному поверхностному плазмонному резонансу (ЛППР), возникающему из-за резонансного колебания свободных носителей заряда в металле [3]. Плазмонные свойства зависят не только от характеристик самих наночастиц (размер или материал), но и от диэлектрической проницаемости окружающей среды [4]. Известно, что размер, форма, заряд и присутствие активных веществ на поверхности металлических наночастиц играет определяющую роль при их эндоцитозе в клеточные среды. Однако, на текущий момент, отсутствует всестороннее понимание о механизмах и кинетике эндоцитоза наночастиц. Между тем контраст в разнице диэлектрической проницаемости для внеклеточной среды ($n = 1.33$) и билипидного слоя клетки ($n = 1.4$) делает возможным измерение положения металлических наночастиц относительно границы раздела двух биологических сред с помощью измерения спектрального сдвига ЛППР методами абсорбционной спектроскопии в дальнем поле [4]. Таким образом, изучение кинетики эндоцитоза при поглощении металлических наночастиц представляет большой научный интерес не только с физической точки зрения, но и с точки зрения биомедицины. Целью данной работы является установление физических закономерностей эндоцитоза серебряных и золотых наночастиц в зависимости от их размера и формы.

Основная часть. Спектральные свойства наносфер и наностержней на основе серебра и золота были изучены численным методом конечных элементов при использовании программного обеспечения COMSOL Multiphysics®. Диэлектрическая проницаемость серебра и золота были взяты из экспериментальной работы Р. В. Johnson и R. W. Christy [5]. Для изучения эндоцитоза НЧ была смоделирована сфера радиусом 250 нм и показателем преломления $n=1.4$, имитирующая билипидный слой клеточной мембраны. Были изучены спектры сечения поглощения, рассеяния и экстинкции наносфер и наностержней при переходе из клеточной питательной среды ($n=1.33$) во внутриклеточную среду ($n=1.37$) через слой мембраны. Радиус наносфер варьировался от 5 нм до 50 нм. Длина наностержня варьировалась от 20 нм до 100 нм с фиксированным радиусом 5 нм.

Выводы. Были получены зависимости максимумов ЛППР от положения серебряных и золотых наночастиц в ходе моделирования эндоцитоза. Было показано, что при прохождении золотых и серебряных наночастиц через клеточную мембрану наблюдается спектральный сдвиг ЛППР в длинноволновую область около 8 нм. Также было установлено, что при приближении металлической наносферы наблюдается расщепление ЛППР, которое впоследствии снимается когда наночастица находится во внутриклеточной среде.

Список использованных источников:

1. Kim M., Lee J. H., Nam J. M. Plasmonic photothermal nanoparticles for biomedical applications //Advanced Science. – 2019. – Т. 6. – №. 17. – С. 1900471.
2. Manrique-Bedoya S. et al. Computational Modeling of Nanoparticle Heating for

Treatment Planning of Plasmonic Photothermal Therapy in Pancreatic Cancer. – 2019.

3. Stepanov A. L. et al. Optical properties of metal nanoparticles //ICONO 2010: International Conference on Coherent and Nonlinear Optics. – SPIE, 2011. – T. 7993. – C. 543-552.

4. Baryshnikova K. V., Petrov M. I., Vartanyan T. A. Plasmon nanoruler for monitoring of transient interactions //physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters. – 2015. – T. 9. – №. 12. – C. 711-715.

5. Johnson P. B., Christy R. W. Optical constants of the noble metals //Physical review B. – 1972. – T. 6. – №. 12. – C. 4370.