

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРИКЛЕТОЧНОГО ТРАНСПОРТА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ РАЗЛИЧНОЙ ФОРМЫ

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

**Введение.** Металлические наночастицы, по сравнению с объёмным материалом, обладают уникальными оптическими, электрическими и химическими свойствами [1,2]. В частности, возбуждение металлических наночастиц светом приводит к индуцированию коллективных колебаний электронов проводимости – плазмонов. Плазмонные свойства металлических наночастиц, как правило, определяются их размером, формой, составом и диэлектрической проницаемостью внешней среды. Последнее свойство легло в основу многих сенсорных приложений, где важна оценка показателя преломления аналита. Хотя многочисленные исследования сосредоточены на биомедицинском применении металлических наночастиц в качестве носителей для адресной доставки и локальных источников гипертермии опухолей, механизмы клеточного проникновения этих наночастиц остаются недостаточно изученными. Известно, что переход наночастицы из питательной среды в клетку через билипидный слой (мембрану) сопровождается изменением показателя преломления [3]. В этом случае появляется возможность детектирования внутриклеточного транспорта, изучение кинетики и механизмов захвата при оценке спектрального сдвига плазмонного резонанса с помощью абсорбционной спектроскопии. Ранее было показано, что эффективность эндоцитоза наночастиц во многом определяется размером, формой, зарядом и присутствием поверхностно-активных веществ [4]. Таким образом, в данной работе проводится изучение влияния формы и размера серебряных и золотых наночастиц на их плазмонные свойства в процессе внутриклеточного транспорта с помощью метода численного моделирования.

**Основная часть.** Оптические свойства золотых и серебряных наночастиц были изучены с помощью метода численных конечных элементов с использованием программного обеспечения COMSOL Multiphysics®. Диэлектрическая проницаемость серебра и золота были взяты из экспериментальной работы Р. В. Johnson и R. W. Christy [5]. Для изучения влияния геометрических особенностей на плазмонные свойства были рассмотрены наночастицы кубической и сферической формы с размерами от 10 нм до 40 нм. Было изучено влияние радиуса кривизны граней куба на положение плазмонного резонанса. Были изучены спектры сечения поглощения, рассеяния и экстинкции данной наночастицы в различных средах, с диэлектрическими проницаемостями от 1.33 до 1.4.

**Выводы.** По результатам моделирования были получены зависимости положения максимумов плазмонного резонанса в зависимости от радиуса кривизны граней кубических наночастиц. Было установлено, что при прохождении золотых и серебряных наночастиц через клеточную мембрану наблюдается спектральный сдвиг плазмонного резонанса в длинноволновую область порядка 10 нм.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 22-72-10057.

### Список использованных источников:

1. Maier S. A. Plasmonics: fundamentals and applications. – New York: Springer, 2007. –

245 p.

2. Pelaz B. Diverse applications of nanomedicine //ACS nano. – 2017. – T. 11 (№. 3). – C. 2313-2381.

3. 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.

4. Nambara K. et al. Reverse size dependences of the cellular uptake of triangular and spherical gold nanoparticles //Langmuir. – 2016. – T. 32. – №. 47. – C. 12559-12567.

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