

PRIMENA METODA RASEJANJA SVETLOSTI U OCENI DIMENZIJA RASEJAVAČA OD INTERESA ZA BIOMEDICINU

S. Ostojčić¹⁾, J. Ilić²⁾, V. Mlinar³⁾, N. Bundaleski³⁾, J. Mirčevski⁴⁾, R. Sekulić⁴⁾, M. Živković⁵⁾

1) Tehnološko – metalurški fakultet – Beograd, 2) Mašinski fakultet – Beograd, 3) INN Vinča, Beograd, 4) AD Telefonija – Beograd, 5) Elektrotehnički fakultet, Beograd

Sadržaj – Razmatran je problem određivanja integralnog izraza za intenzitet rasejane laserske svetlosti o čestice sfernog i cilindričnog oblika. Definisana je integralni korekcionni faktor. Analiza uključuje dva izraza koji se primenjuju u zavisnosti od veličine i oblika čestice. U proračunu je uzeta u obzir raspodela čestica po dimenzijama, gde se kao raspodele koriste Gaussova raspodela, uniformna raspodela i raspodele dobijene na osnovu eksperimentalnih rezultata. Izvršena je komparacija dobijenih rezultata u zavisnosti od parametara raspodele, predstavljenih u zavisnosti od ugla rasejanja.

1. UVOD

U ovom radu razmatra se problem određivanja integralnog izraza za intenzitet rasejane svetlosti o čestice sfernog i cilindričnog oblika, pri čemu se polazi od poznatog izraza za rasejanje o jednu česticu. U proračun je uzeta u obzir raspodela čestica po dimenzijama, gde se kao raspodele koriste Gaussova raspodela, uniformna raspodela, kao i raspodele dobijene na osnovu eksperimentalnih rezultata. Izvršena je komparacija dobijenih rezultata koji su predstavljeni u zavisnosti od ugla rasejanja. Uporedni pregled omogućava izvodjenje zaključaka o ponašanju čestica u zavisnosti od njihove raspodele po dimenzijama (efekat polidisperznosti).

Na osnovu dobijenih rezultata u mogućnosti smo da pratimo položaj maksimuma raspodjele dijametara makromolekula. Iz dobijenih grafika, pri definisanom uglu rasejanja mogu se odrediti dimenzije čestica. Primenom navedenog algoritma postoji mogućnost praćenja ponašanja intenziteta svetlosti u zavisnosti od toga koji je model za rasejanje o jednu česticu korišćen, kao i izvodjenja zaključaka o validnosti pojedinog modela (bilo teorijskog, bilo eksperimentalnog) u zavisnosti od veličine čestice i njihovo odstupanje u slučaju primene u domenu čestica za koje nisu primenljivi.

Prethodno navedene smernice će biti predmet daljeg istraživanja.

Predstavljena analiza pruža mogućnosti za mnogo primena u medicini, gde se pojavljuje potreba za interpretacijom podataka sa aparatura za rasejanje svetlosti. Tu su i ispitivanje medicinskih sprejnih sistema za tretiranje astme, sušenje rana, generisanje aerosoli, prilikom detekcije, karakterizacije i kontrole formiranja makromolekula: proteina, antitela, DNK oligomera.

MODEL

U razvoju modela pošlo se od ideje da se ispita ponašanje angularne raspodele rasejane laserske svetlosti o makromolekule sfernog oblika sa dijametrima koje podležu različitim teoretski i eksperimentalno utvrđenim raspodelama. Naš motiv je bio da se teorijsko izračunavanje ovih raspodela koristi za uspostavljanje korelacija između angularne raspodele rasejane svetlosti i raspodele dijametara makromolekula i drugih centara rasejanja.

Jedan od značajnih parametara u izrazu za angularnu raspodelu rasejane svetlosti, za relativno velike centre rasejanja [1a] je “faktor korekcije” ugaone raspodele $P(\theta, D)$, odnosno korekcije centra rasejanja (bio, makromolekula, micela,...), gde je θ ugao rasejanja, a D – dijаметar. Ovaj faktor je poznat, po teoriji, za slučaj rasejanja na jednom makromolekulu [2a,b]. U ovom radu definišemo integralni korekcionni faktor na osnovu korekcionnog faktora za jedan makromolekul i gustine funkcije raspodele makromolekula po dijametru. Ova veličina je uvedena sa ciljem opisivanja rasejanja o čitav ansambl makromolekula.

Polazeći od izraza za intenzitet rasejane svetlosti o jednu česticu $I(D, \theta)$, koja je funkcija prečnika čestice i ugla rasejanja, i funkcije gustine raspodele čestica, dobijen je izraz za intenzitet rasejane svetlosti za celi opseg dimenzija čestica u funkciji ugla rasejanja [3]. Izraz je oblika:

$$I(\theta) = cAL \int_0^{\infty} i(\alpha, \theta) n(D) dD \quad (1)$$

gde je $n(D)dD$ broj čestica sa prečnikom u intervalu $(D, D+dD)$ u jedinici zapremine, A efektivna površina poprečnog preseka snopa, L optička dužina puta laserskog snopa od izvora do posmatrane tačke, α parametar veličine definisan sa $\alpha = \pi D / \lambda$, gde je λ talasna dužina snopa.

Polazeći od izraza (1) uz pretpostavku da su makromolekuli uniformno raspoređeni u prostoru, sledi:

$$\begin{aligned} I(\theta) &= \frac{cAL}{V} \int_0^{\infty} i(\alpha, \theta) p(D) dD = \\ &= K \int_0^{\infty} i(\alpha, \theta) p(D) dD \end{aligned} \quad (2)$$

gde je $p(D)$ funkcija gustine raspodele, a $K = \frac{cAL}{V}$, pri čemu je V jedinična zapremina.

Za dalju analizu izabrane su vrednosti parametara: $c=5 \cdot 10^{-4} \text{ g/cm}^3$, $A=0,5 \text{ mm}^2$, $\lambda=632,8 \text{ nm}$, $L=5 \text{ cm}$.

Za $p(D)$ je korištena Gaussova raspodela, za različite srednje vrednosti (Slika (1)) i uniformna raspodela (Slika (2)).

Korišten je izraz:

$$P(\alpha, \theta) = \left[\frac{3}{U^3} (\sin U - U \cos U) \right]^2 \quad (3)$$

gde je $U = 2\alpha \sin(\theta/2) = \frac{2\pi D}{\lambda} \sin(\theta/2)$. Ovaj izraz za korekcionni faktor jednog makromolekula se u literaturi [4] koristi za širok opseg ugla rasejanja. U ovom radu su izračunavanja izvršena za isti opseg ugla rasejanja ($\theta - 5 \text{ rad}$), a u opštem su predmet diskusije.

Za $\theta \rightarrow 0$, $P(\alpha, \theta)$ je oblika:

$$P(\alpha, \theta) = \frac{\Delta I_\theta}{\Delta I_{\theta=0^\circ}} \quad (4)$$

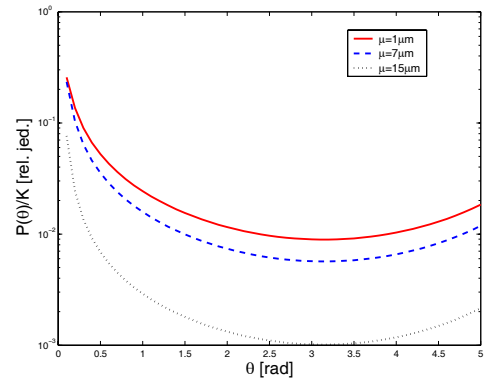
Pod pretpostavkom da je $P(\alpha, \theta) \sim i(\alpha, D)$ možemo definisati integralni korekcionni faktor $P_{\text{int}}(\theta)$:

$$\begin{aligned} P_{\text{int}}(\theta) &= \frac{cAL}{V} \int_0^\infty P(\alpha, \theta) p(D) dD \\ &= K \int_0^\infty P(\alpha, \theta) p(D) dD \end{aligned} \quad (5)$$

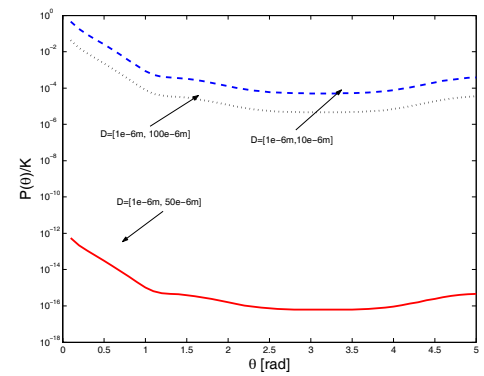
REZULTATI I DISKUSIJA

Na slikama 1 i 2 su prikazane angularne zavisnosti integralnog korekcionnog faktora za slučaj kada čestice podležu Gaussovoj raspodeli (Slika 1) i za slučaj uniformne raspodele (Slika 2). Promenljivi parametar je srednja vrednost dijametra čestica ($1 \mu\text{m}$, $7 \mu\text{m}$, $15 \mu\text{m}$) (Slika 1), dok je za Sliku 2 promenljivi parametar opseg dimenzija (intervali: $1 - 10 \mu\text{m}$, $1 - 50 \mu\text{m}$, $1 - 100 \mu\text{m}$).

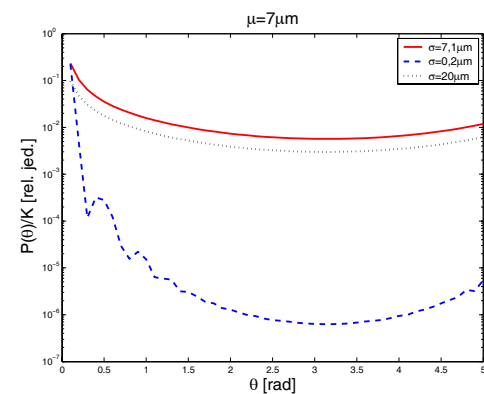
Sa porastom srednje vrednosti dijametra makromolekula dolazi do porasta integralnog korekcionnog faktora. Na osnovu intenziteta korekcionnog faktora, za definisan ugao rasejanja, može se utvrditi dimenzija čestica odnosno, položaj maksimuma raspodele dijametra makromolekula.



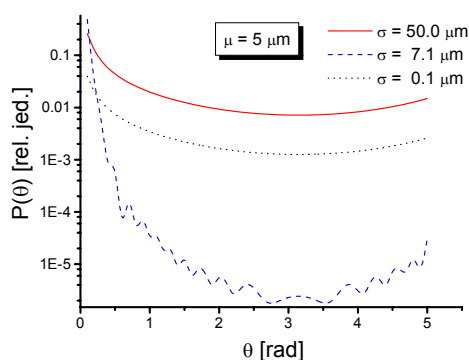
Sl.1- Zavisnost $P_{\text{int}}(\theta)/K$ od ugla rasejanja u slučaju da čestice podležu Gaussovoj raspodeli.



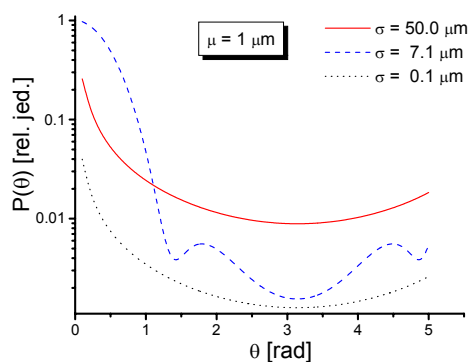
Sl.2- Zavisnost $P_{\text{int}}(\theta)/K$ od ugla rasejanja u slučaju da čestice podležu uniformnoj raspodeli.



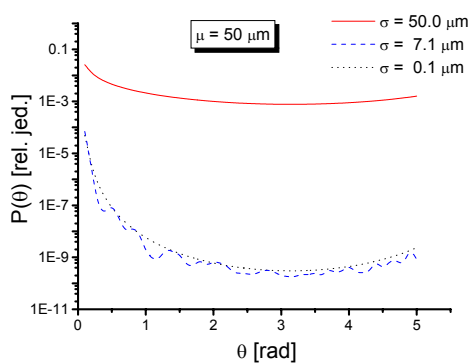
Sl.3- Ponašanje $P_{\text{int}}(\theta)$ za $\mu=7 \mu\text{m}$, gde parametar σ Gaussove raspodele, uzima vrednosti $50.0 \mu\text{m}$, $7.1 \mu\text{m}$ i $0.1 \mu\text{m}$ respektivno.



Sl.4- Ponašanje $P_{int}(\theta)$ za $\mu=5 \mu\text{m}$, gde parameter σ Gaussove raspodele, uzima vrednosti $50.0 \mu\text{m}$, $7.1 \mu\text{m}$ i $0.1 \mu\text{m}$ respektivno.



Sl.5- Ponašanje $P_{int}(\theta)$ za $\mu=1 \mu\text{m}$, gde parameter σ Gaussove raspodele, uzima vrednosti $50.0 \mu\text{m}$, $7.1 \mu\text{m}$ i $0.1 \mu\text{m}$ respektivno.



Sl.6- Ponašanje $P_{int}(\theta)$ za $\mu=50 \mu\text{m}$, gde parameter σ Gaussove raspodele, uzima vrednosti $50.0 \mu\text{m}$, $7.1 \mu\text{m}$ i $0.1 \mu\text{m}$ respektivno.

Na slikama 3-6 prikazane su zavisnosti integralnog korekcionog faktora od ugla rasejanja θ za različite vrednosti širine raspodele.

ZAKLJUČAK

U radu je pokazano da se zavisnosti $P_{int}(\theta)$, za slučaj Gaussove raspodele, približno paraboličnog karaktera. Uočava se da intenzitet $P_{int}(\theta)$ generalno raste sa porastom širine raspodele σ . Međutim, postoji anomalija u odnosu na ovo pravilo u slučaju $\sigma = 0.7 \mu\text{m}$ nezavisno od vrednosti parametra μ . Primećeno oscilovanje $P(\theta)$ se ne može objasniti kao posledica greške numeričkog postupka. Karakter ovih oscilacija zavisi od vrednosti parametra μ . Uzrok ovog fenomena se može odgonetnuti nakon detaljnijeg razmatranja problema, primenom preciznijih modela. Navedeni proračuni se mogu koristiti za određivanje opsega važnosti postavljenih modela u zavisnosti od dimenzije čestica i predvideti njihovo ponašanje u graničnim oblastima.

LITERATURA

- [1] a) C. Bohren, D. Huffman, Absorption and Scattering of Light by Small Particles, Mir, Moskva, 1986.
b) Physical and Chemical Characterisation of Individual Airborne Particles, edited by K. R. Spurny, 1986.
- [2] Laser Application in Chemistry and Biology, Plenum Press, New York, 1980.
- [3] a) V. Mlinar, Diplomski rad, Elektrotehnički fakultet, Beograd, 2002.
b) H. Sin. Chen, Sydney Yip ed., Spectroscopy in Biology and Chemistry, Academic Press, New York, 1974.
c) Photon Correlation and Light beating Spectroscopy, edited by H. Z. Cummins, Mir, Moskva, 1978.
d) Micellization, Solubilization and Microemulsions, edited by K. L. Mittal, Mir, Moskva, 1980.
- [4] a) S. Guinand, J. Tonelat, Journal Chim. Phys., Vol. 49. str. 481-499, 1952
b) Cabannes J., La Diffusion moleculaire da la lumiere, Press Univers, Paris, 1929.
c) Kaj B. Osterlund, "Investigations of biological structures using diffraction and scattering methods", Commentations Physico-mathematicae et Chemico medicae, 130/1991.
- [5] J. Buinskas, V. Shugurov, "Electromagnetic wave diffraction by a finite set of spheres", Lietuvos fizikos rinkinys, Nr.4 Vol.28, pp.432-438, 1988.
- [6] A. D. Suprun, "Dvosolitonnoe vozbusdenie v beskonacnoj molekularnoj cepi", Teoreti-ceskaja i matematiceskaja fizika, pp.282-290.
- [7] Risto Lapatto, "Studes of the three dimen-sional structure of some proteins of medical importance", Commentations Physico-mathema-ticae et Chemico medicae, 123/1991.
- [8] Ed. K. R. Spurny, "Physical and Chemical Characterisation of individual Airborne Parti-cles", Ellis Hoorwwd, J. Wiley, Choichester, New York.
- [9] V. Straus, S. D. Meinyring, "Kon6rol zagrzajenija vozdušnogo basseina", Moskva , Stroizdat, 1989.

- [10] Ed. D. P. Antic, J. Lj. Vujic, "Environ-mental Recovery of Yugoslavia", Beograd, 2002.
- [11] V. Kalesinscas, L. Suslov, V. Shugurov, "Diffraction of plane electromagnetic wave by finite set of cylinders", Lietuvos Fizikos Rynkinys Nr.6, pp.696-703, 1987.
- [12] V. P. Ticinskij, V. L. Pankov, A. G. Dauel-Dauge, A. V. Karpunjin, "Registracija subher-covih fluktuacija anizotropii pri maloiglovih rassejanii sveta", Pisma v @ETF, To, 44, Vip. 4, pp.197-200, 1986.
- [13] H. A. Ragheb, L. Shafai, "Scattering from a dielectric coated elliptic cylinder", Canadian Journal of Physics, Vol.66 Bo.12, pp.115-117, Dec. 1988.

Abstract – The probability determination of integral expression for light scattering intensity on particles of spherical and

cylindrical shapes are presented. The integral correction factor was defined. Analysis include two equations which are applied with respect to the dependence of size and shape of the particle. Calculations include particle size distributions. Used distributions are Gaussians, uniform and distributions which are obtained by experimental results. Comparison of the results due to distribution parameters in dependence of angle of light scattering are presented.

**USE OF LIGHT SCATTERING METHODS FOR
DETERMINING DIMENSIONS OF PARTICLES IN
BIOMEDICAL APLICATION**

S. Ostojić, J. Ilić, V. Mlinar, N. Bundaleski, J. Mirčevski, R. Sekulić, M. Živković