

A New Method for Quality Assessment of Anti-UV Creams Using Optical Polarization: Modeling and Simulation

P. Ghassemi¹, M.H. MiranBaygi^{2*}

¹ Ph.D. Candidate, Biomedical Engineering Group, Electrical and Computer Engineering School, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, p_ghassemi@modares.ac.ir

² Assistant Professor, Biomedical Engineering Group, Electrical and Computer Engineering School, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

Abstract

In this research we present a new method to evaluate changes in size and refractive index of Titanium dioxide (TiO₂) nanoparticles which are the main component of anti-UV creams. The main objective of this research is assessing the impact of changing in size and refractive index of TiO₂ on the polarization state of backscattered light. The proposed technique is based on modeling the propagated polarized laser beam inside a phantom and evaluating the change in the polarization of backscattered light. The phantom is simulated by software to have the polarization properties of anti-UV creams. As scattering particles (TiO₂) in these creams configure polarization properties, then through modeling we have simulated the phantom with matrix of resin epoxy that has unit refractive index including Titanium dioxide nanoparticles. It will be shown that size parameter and relative refractive index of these particles influence cream's properties like purity, quality, coating power and degree of filtration and directly affect its polarization properties. The measurement technique which is presented here is based on scattering polarimetry. To assess the scattering phenomenon, the polarization state of incident and backscattered light is analyzed by simulating a laboratory polarimeter. Then polarization information of the simulated phantom is extracted as Mueller matrix and degree of polarization index. All modeling and simulations are performed in MATLAB 2006 and the results are presented towards the end part of the paper. The main outcome of this research is the ability of extracting and the recognition of those elements of the Mueller matrix which are very sensitive to changes in size parameter and relative refractive index of TiO₂. That will define the main markers for quality assessment of anti-UV creams.

Keywords: Modeling, Anti-UV, Titanium dioxide, State of polarization, Mueller matrix

* Corresponding author

Address: Mohammad Hosein MiranBaygi, Biomedical Engineering Group, Electrical and Computer Engineering School, Tarbiat Modares University, Jalal-e-AlAhmad Ave., Tehran, Iran.

Tel: +98 21 82883370

Fax: +98 21 82884325

E-mail: miranbmh@modares.ac.ir

استفاده از قطبش نور به عنوان روشی جدید در ارزیابی کیفی داروهای جلدی ضد اشعه ماوراءبنفش: مدل‌سازی و شبیه‌سازی

پژمان قاسمی^۱، محمدحسین میران‌بیگی^{۲*}

^۱ دانشجوی دکترا، گروه مهندسی پزشکی، دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه تربیت مدرس، تهران p_ghassemi@modares.ac.ir
^۲ استادیار، گروه مهندسی پزشکی، دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

چکیده

در این تحقیق به ارائه روشی نوین برای شناسایی تغییرات اندازه و ضریب شکست نانو ذرات دی‌اکسیدتیتانیوم به عنوان ماده اصلی تشکیل دهنده مواد دارویی جلدی ضد اشعه مضر ماوراءبنفش خورشید پرداخته شده است. هدف اصلی این مقاله بررسی تأثیر تغییرات اندازه و ضریب شکست ذرات دی‌اکسیدتیتانیوم موجود در فانتوم شبیه‌سازی شده مواد دارویی بر حالت قطبش نور بازپراکنده شده، است. اصول کار مبتنی بر مدل‌سازی پراکندگی نور لیزر تک‌رنگ قطبیده درون فانتوم شبیه‌سازی کننده ذرات دی‌اکسیدتیتانیوم است. مدل با هدف تحلیل پرتوهای بازپراکنده شده از فانتوم با دیدگاه قطبیدگی طراحی و پیاده‌سازی شده است. فانتوم به صورت نرم‌افزاری به منظور شبیه‌سازی خواص قطبیدگی مواد دارویی جلدی ضد اشعه ماوراءبنفش ایجاد شده است. از آنجاکه ذرات تفرق‌دهنده موجود در این گونه مواد به آن خواص قطبیدگی می‌بخشند، بنابراین در فرایند مدل‌سازی، از فانتومی با پایه نگهدارنده پلیمر اپوکسی رزین با ضریب شکست تقریبی برابر واحد و حاوی ذرات تفرق‌دهنده دی‌اکسیدتیتانیوم استفاده شده است. نشان خواهیم داد، پارامتر اندازه و ضریب شکست نانو ذرات تفرق‌دهنده دی‌اکسیدتیتانیوم موجود در مواد دارویی جلدی ضد اشعه ماوراءبنفش، تأثیر مستقیم بر میزان خلوص، کیفیت و همچنین قدرت پوشانندگی فیزیکی و درجه فیلتر کردن در چنین داروهایی دارد. از طرفی این پارامترها در شکل‌دهی خواص قطبشی ماده دارویی نقش اصلی را ایفا می‌کنند. روش اندازه‌گیری به کار رفته در این تحقیق مبتنی بر اصول قطبش‌سنجی تفرقی است. در این تحقیق به منظور بررسی پدیده پراکندگی به تحلیل حالت قطبش مجموعه نور تابشی و بازپراکنده شده در یک مجموعه آزمایشگاهی قطبش‌سنجی پرداخته شده است. بدین ترتیب اطلاعات قطبیدگی فانتوم شبیه‌سازی شده تحت آزمایش در قالب ماتریس مولر و درجه قطبیدگی استخراج شده است. دستاورد اصلی این تحقیق ایجاد توانایی در استخراج و شناسایی حساس‌ترین مؤلفه‌های ماتریس مولر به تغییرات اندازه و ضریب شکست ذرات دی‌اکسیدتیتانیوم و به عبارتی تعریف شاخص‌های ارزیابی کیفی برای داروهای جلدی ضد اشعه مضر ماوراءبنفش است.

واژه‌های کلیدی: مدل‌سازی، ضد اشعه ماوراء بنفش، دی‌اکسیدتیتانیوم، حالت قطبیدگی، ماتریس مولر

*عهده‌دار مکاتبات

نشانی: تهران، بزرگراه جلال آل احمد، دانشگاه تربیت مدرس

تلفن: ۸۲۸۸۳۳۷۰، دورنگار: ۸۲۸۸۴۳۲۵، پیام نگار: miranbmh@modares.ac.ir

۱- مقدمه

شکل و میزان زبری و نرمی سطحی وابسته است. بنابراین استفاده از روش‌های مبتنی بر خواص قطبیدگی نور علاوه بر تغییرات شدت، اطلاعات مفیدی از خواص قطبیدگی نور را در اختیار قرار می‌دهد. در پژوهش‌های گوناگون نشان داده شده است که روش‌های بر پایه تحلیل قطبیدگی می‌توانند خواص فیزیکی نور را در تقابل با ذرات تفرق‌دهنده، استخراج کنند [۴]. ارزیابی ریخت‌شناختی^۵ ساختار نانوذرات تفرق‌دهنده نور از طریق تحلیل قطبیدگی پرتوهای بازپراکنده شده از ماده مورد آزمایش، از کاربردهای این روش‌ها، است [۵-۱۰]. برخی تحقیقات انجام گرفته شامل روش جدیدی برای اندازه‌گیری اندازه نانوذرات ژرمانیوم^۶ [۵]، همچنین بررسی شکل و اندازه ذراتی چون پلی‌استایرن^۷ موجود در سیلیکون و نیمه هادی‌ها [۶-۱۰] هستند. به علاوه حوزه تحقیقات به سمت بررسی مواد بیولوژیکی نیز رفته است که نمونه بارز آن تحلیل الگوی شکلی ذرات میتوکندری بافت پوست بوده که در سال ۲۰۰۷ به وسیله فردوس^۸ و تاو^۹ انجام شده است [۱۱، ۱۲]. در پژوهش حاضر به بررسی خواص شکلی نانوذرات دی‌اکسیدتیتانیوم موجود در کرم‌های ضد اشعه ماوراءبنفش پرداخته شده است. همچنین به منظور ارائه مدل دقیق بازپراکنندگی نور لیزر قطبیده از ماده مورد آزمایش، ماده دارویی جلدی ضد اشعه ماوراءبنفش به وسیله فانتومی^{۱۰} از جنس پلیمر اپوکسی رزین^{۱۱} حاوی نانوذرات دی‌اکسید تیتانیوم به صورت نرم‌افزاری شبیه‌سازی شده است. بدین ترتیب به بررسی تغییرات بزرگی و درجه خلوص ذرات از روی رفتار پلاریزاسیونی نور قبل و بعد از پراکنندگی پرداخته شده است. این موضوع در مشخصه‌سازی مواد دارویی جلدی که شکل و اندازه ذرات و همچنین درجه خلوص آنها بسیار مهم است، اهمیت دارد. در مدل‌سازی از نور لیزر هلیوم‌نئون تک‌رنگ با طول موج ۶۳۲/۸nm استفاده شده است. نور لیزر در چند مرحله از طریق صفحه قطبیده کننده^{۱۲} و صفحه تأخیر دهنده^{۱۳} با حالت قطبیدگی مشخص به فانتوم تابانده شده و بخشی از آن که پس از انتشار درون فانتوم بازپراکنده^{۱۴} می‌شود، به وسیله مجموعه‌ای مشابه ورودی

دی‌اکسیدتیتانیوم^۱ به عنوان ماده اولیه اغلب داروهای آرایشی بهداشتی به شمار می‌رود و خاصیت اصلی آن ممانعت از نفوذ اشعه ماوراءبنفش نوع A و B^۲ به داخل پوست است [۱، ۲]. به عبارت دیگر پودر دی‌اکسیدتیتانیوم تفرق‌دهنده مناسبی در برابر اشعه مضر خورشید محسوب می‌شود، بنابراین استفاده از این نانوذره در محصولات جلدی، خواص ضدسرطانی و ضدپیری زودرس به آن می‌بخشد. ذرات دی‌اکسیدتیتانیوم رنگدانه‌های سفید معدنی، طبیعی و غیر شیمیایی هستند که ماده اصلی کرم‌های جلدی ضد اشعه مضر ماوراءبنفش را تشکیل می‌دهند. این ذرات غالباً کروی شکل‌اند و پوشش مناسبی بر روی سطح پوست ایجاد می‌کنند. مسلماً تغییر شکل و افزایش اندازه این ذرات موجب کاهش قدرت پوشاندگی آن می‌شود. همچنین درجه خلوص پودر دی‌اکسیدتیتانیوم به کار رفته در ساخت این گونه داروها نقش بسزایی در کیفیت جذب اشعه ماوراءبنفش داروی تولید شده خواهد داشت. بنابراین تحلیل ماده اولیه سازنده داروهای جلدی ضد اشعه ماوراءبنفش از نظر قدرت پوشاندگی (اندازه ذرات) و میزان خلوص با استفاده از یک روش کارآمد حائز اهمیت است.

پراکنندگی نور به وسیله ذرات تفرق‌دهنده پدیده‌ای است که با مطالعه رفتار آن از دیدگاه قطبشی^۳ می‌توان جامع‌ترین تحلیل نوری را ارائه کرد و به خواص ساختاری و فیزیکی آن ذرات دست یافت [۳]. پرتوی نور یک موج الکترومغناطیس متشکل از بردارهای متعام میدان الکتریکی و مغناطیسی است. از سوی دیگر بردار میدان الکتریکی نیز به دو مؤلفه برداری متعام افقی و عمودی قابل تجزیه است. تقدم و تأخر فاز این دو مؤلفه از بردار میدان الکتریکی نور، حالت قطبیدگی^۴ را تعیین می‌کند. هرگاه نور به وسیله شیئی با قابلیت تفرق‌دهندگی پراکنده می‌شود، علاوه بر شدت نور، حالت قطبش آن نیز تغییر می‌کند. شایان ذکر است میزان تغییر حالت قطبیدگی نور به نوع ذره، اجزاء تشکیل دهنده، خواص نوری و همچنین ویژگی‌های فیزیکی از قبیل اندازه،

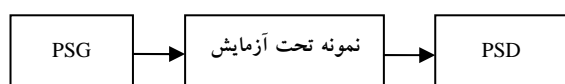
¹ Titanium dioxide (TiO₂)² UVA & UVB³ Polarization⁴ Polarization State⁵ Morphologic⁶ Germanium⁷ Polystyrene⁸ Firdus⁹ Tao¹⁰ Phantom¹¹ Epoxy resin¹² Polarizer¹³ Retarder¹⁴ Back-scattered

۲-۲- اندازه‌گیری حالت قطبیدگی

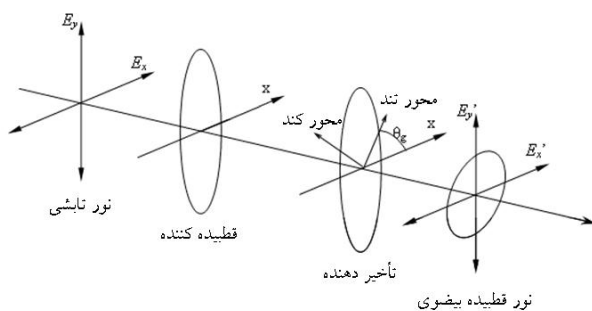
برای ایجاد مدل دقیق پراکندگی نور لیزر هلیوم‌نئون قطبیده در شناسایی تغییرات اندازه و جنس ذرات در فانتوم شبیه‌سازی شده مورد نظر، اطلاع از نحوه عملکرد یک مجموعه آزمایشگاهی قطبش‌سنجی ضرورت دارد. شکل ۱ نمودار بلوکی مربوط به یک قطبش‌سنج را نشان می‌دهد.

واحد تولیدکننده حالت قطبیدگی^{۱۷} (PSG) که مجموعه‌ای از منبع نور لیزر هلیوم‌نئون، صفحه قطبیده کننده و صفحه تأخیر دهنده است (شکل ۲)، وظیفه ایجاد حالات مختلف قطبیدگی و تابش به نمونه را بر عهده دارد.

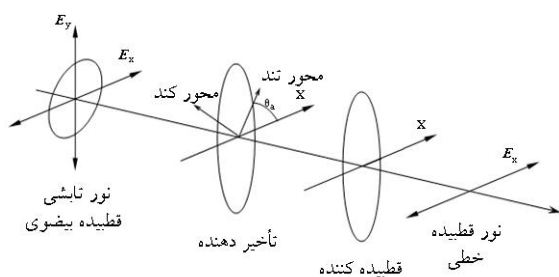
بخشی از نور پلاریزه شده پس از برخورد با فانتوم بازپراکنده شده و سپس توسط واحد گیرنده حالت قطبیدگی^{۱۸} (PSD) دریافت و با استفاده از مجموعه‌ای متشکل از صفحه قطبیده کننده، صفحه تأخیر دهنده و یک گیرنده نوری (شکل ۳) مورد مطالعه قرار می‌گیرد.



شکل ۱- نمودار بلوکی مجموعه آزمایشگاهی قطبش‌سنجی؛ PSG واحد تولیدکننده حالت قطبیدگی مطلوب و PSD واحد تحلیل کننده حالت قطبیدگی نور خارج شده از نمونه مورد آزمایش هستند.



شکل ۲- تولید کننده حالت قطبیدگی



شکل ۳- گیرنده حالت قطبیدگی

جمع‌آوری و به سمت گیرنده نوری هدایت می‌شود. این همان اتفاقی است که در عمل در مجموعه قطبش‌سنجی با آن مواجه خواهیم شد. نشان داده خواهد شد که می‌توان با بهره‌گیری از روش‌های قطبیدگی به اندازه‌گیری تغییرات خواص نور لیزر در تقابل با ذرات گوناگون پرداخت. در این مقاله، مدل پراکندگی نور از پلیمر اپوکسی رزین حاوی ذرات کروی دی‌اکسید تیتانیوم به‌عنوان فانتوم یک مجموعه قطبش‌سنجی ارائه خواهد شد که نتیجه آن ارائه جامع‌ترین نوع تعبیر قطبیدگی از نمونه یعنی استخراج ماتریس پراکندگی یا مولر^{۱۵} خواهد بود. سپس برای بررسی تأثیر تغییرات بزرگی و جنس (درجه خلوص) ذرات، نتایج برای موارد گوناگون تکرار و مورد بحث و بررسی قرار خواهد گرفت. نشان داده خواهد شد که روش ارائه شده در مشخصه‌سازی و ردگیری تغییرات اندازه و جنس ذرات داخل فانتوم بسیار کارآمد و مفید است.

۲- داده‌ها و روش حل

۲-۱- فانتوم شبیه‌سازی شده

به‌منظور مدل کردن مواد دارویی جلدی ضد اشعه ماوراء بنفش، فانتوم شبیه‌سازی شده پلیمری از جنس اپوکسی رزین حاوی ذرات کروی دی‌اکسید تیتانیوم مدل ۶۶۰ ساخت شرکت کمیرا^{۱۶} فنلاند به‌کار برده شده است. مشخصات آنالیز نانوذرات دی‌اکسید تیتانیوم در جدول ۱ آمده است [۱۳].

جدول ۱- مشخصات آنالیز دی‌اکسید تیتانیوم [۱۳]

ردیف	مشخصه	مقدار
۱	ضریب بازتابش	۲/۷
۲	میزان جذب روغن (g/100 g)	۲۱
۳	درصد دی‌اکسید تیتانیوم	۹۳
۴	جنس سطح	Al ₂ O ₃ -SiO ₂
۵	اسیدیته	۸/۶-۷/۶
۶	رطوبت در زمان بسته‌بندی %	۰/۴
۷	درصد باقیمانده غریبال	۰/۰۱
۸	میانگین اندازه کریستال (نانومتر)	۲۲۰
۹	وزن مخصوص g/cm ³	۴/۰
۱۰	چگالی kg/m ³	۸۰۰

¹⁵ Mueller (scattering) matrix

¹⁶ Kemira

¹⁷ Polarization State Generator

¹⁸ Polarization State Detector

که سری فوق پس از $n=n_c$ جمله خاتمه می‌یابد. n هرچه بزرگتر انتخاب شود، تقریب فوق دقیق‌تر خواهد بود. a_n و b_n ضرایب پراکندگی و π_n و τ_n توابع لژاندر^{۲۳} هستند.

$$\pi_n = \frac{P_n^1}{\sin \theta}, \quad \tau_n = \frac{dP_n^1}{d\theta} \quad (2)$$

$$\pi_n = \frac{2n-1}{n-1} \mu \pi_{n-1} - \frac{n}{n-1} \pi_{n-2}$$

$$\tau_n = n\mu\pi_n - (n+1) \pi_{n-1}$$

که $\mu = \cos \theta$ ، $\pi_0 = 0$ و $\tau_1 = 1$.

بنابراین رابطه دامنه میدان پراکندگی و تابش عبارتست از:

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel S} \\ E_{\perp S} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & 0 \\ 0 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel i} \\ E_{\perp i} \end{pmatrix} \quad (3)$$

که $E_{\parallel S}$ و $E_{\perp S}$ بردارهای میدان الکتریکی موج الکترومغناطیس نور، موازی و عمود بر صفحه پراکندگی پس از پراکندگی به وسیله شیء کروی هستند. بنابراین رابطه بین بردار استوکس^{۲۴} موج تابشی و تفرقیافته و به عبارت دیگر رابطه ماتریس پراکندگی برای ذرات کروی در محیط همگن را می‌توان به صورت رابطه ۴ نوشت [۱۴-۱۶].

$$\begin{pmatrix} I_S \\ Q_S \\ U_S \\ V_S \end{pmatrix} = \frac{1}{k^2 r^2} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} & S_{34} \\ 0 & 0 & -S_{34} & S_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_i \\ Q_i \\ U_i \\ V_i \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$S_{11} = \frac{1}{2}(|S_2|^2 + |S_1|^2), S_{12} = \frac{1}{2}(|S_2|^2 - |S_1|^2)$$

$$S_{33} = \frac{1}{2}(S_2^* S_1 + S_2 S_1^*), S_{34} = \frac{i}{2}(S_1 S_2^* - S_2 S_1^*)$$

اولین گام برای محاسبه رابطه ۱ به دست آوردن ضرایب

پراکندگی a_n و b_n است که از [۱۴] داریم:

$$a_n = \frac{m \psi_n(mx) \psi_n'(x) - \psi_n(x) \psi_n'(mx)}{m \psi_n(mx) \xi_n'(x) - \xi_n(x) \psi_n'(mx)} \quad (5)$$

$$b_n = \frac{\psi_n(mx) \psi_n'(x) - m \psi_n(x) \psi_n'(mx)}{m \psi_n(mx) \xi_n'(x) - \xi_n(x) \psi_n'(mx)}$$

که x و m به ترتیب پارامتر اندازه^{۲۵} و ضریب شکست نسبی^{۲۶} ذره به محیط پیرامون هستند [۱۷، ۱۸]:

$$x = ka = \frac{2\pi Na}{\lambda}, \quad m = \frac{k_1}{k} = \frac{N_1}{N} \quad (6)$$

N_1 و N به ترتیب ضرایب شکست ذره و محیط پیرامون ذره‌اند. همچنین توابع بسل^{۲۷} نوع اول ψ_n و نوع دوم ξ_n برای محاسبه ضرایب پراکندگی از روابط ۷ به دست می‌آیند [۱۴، ۱۶].

از مقایسه حالت قطبیدگی نور در بعد و قبل از بافت هدف می‌توان تمام خواص قطبیدگی نمونه مورد آزمایش و یا به عبارتی مؤلفه‌های ماتریس مولر آن را استخراج کرد. شایان ذکر است که هریک از مؤلفه‌های ماتریس مولر تابعی از زاویه پراکندگی هستند. بنابراین هریک از مؤلفه‌ها مقادیر متفاوتی در راستای زاویه پراکندگی، خواهند داشت. در این مقاله بررسی وابستگی و رفتار مؤلفه‌های ماتریس مولر و مشخصه‌های قطبیدگی ذرات دی‌اکسیدتیتانیوم موجود در رزین مورد بررسی نسبت به تغییر زاویه قرارگیری سنجنده^{۱۹} (واحد گیرنده حالت قطبیدگی) نیز انجام پذیرفته است.

۳-۲- ملاحظات نظری

از آنجاکه در این تحقیق از روش تفرقی می^{۲۰}، به منظور بررسی نحوه پراکندگی نور لیزر پلاریزه در برخورد با ذرات تفرق‌دهنده نور و استخراج ماتریس مولر استفاده شده است، بنابراین ابتدا به بررسی اصول نظری این روش پرداخته خواهد شد. به دلیل آن که اندازه ذرات موجود در رزین (میانگین قطر هر ذره ۲۲۰ nm) در مقایسه با طول موج لیزر نسبتاً بزرگ است، به عبارتی پارامتر اندازه ذرات بزرگتر از واحد است، بنابراین تمامی تحلیل‌ها در حوزه می انجام خواهد پذیرفت. در واقع زمانی که قطر ذره از یک‌دهم طول موج نور کوچک‌تر باشد وارد حوزه ریلی^{۲۱} می‌شویم. درحالی که نتایج شبیه‌سازی‌ها نیز نشان می‌دهند که حوزه تحلیل‌ها، همان حوزه می است [۱۴، ۱۵].

برای بررسی تغییرات حالت قطبیدگی نور لیزر پراکنده شده از ذرات تفرق‌دهنده، باید به حل معادلات ماکسول^{۲۲} و استخراج ماتریس پراکندگی یا ماتریس مولر محیط تفرق‌دهنده پرداخت. از آنجاکه ذرات دی‌اکسیدتیتانیوم کروی شکل هستند، می‌توان نشان داد که ماتریس پراکندگی به صورت رابطه (۱) قابل محاسبه است [۱۴].

$$S_1 = \sum_n \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n)$$

$$S_2 = \sum_n \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n) \quad (1)$$

¹⁹ Detector

²³ Legendre

²⁷ Bessel Function

²⁰ Mie scattering theory

²⁴ Stokes

²¹ Rayleigh

²⁵ Size parameter

²² Maxwell

²⁶ Relative refractive index

موجود در رزین تحلیل می‌شوند. تحلیل طیف‌های قطبشی مدل ارائه شده بر مبنای الگوی آنها (مثلاً جابجایی مکانی قله-های طیف، افزایش یا کاهش قله‌ها و...) صورت خواهد پذیرفت. ارائه چنین تحلیلی در مشخصه‌سازی نمونه‌های واقعی از مواد دارویی جلدی مورد آزمایش می‌تواند بسیار مفید باشد. ابتدا نتایج را برای فانتوم حاوی تک ذره دی‌اکسید تیتانیوم ارائه داده و سپس نتایج را به مجموعه‌ای از ذرات تعمیم خواهیم داد. شایان ذکر است که در شبیه‌سازی‌ها ذرات کروی دی‌اکسید تیتانیوم همگون در نظر گرفته شده‌اند و نتایج برای مجموعه‌ای از ذرات معلق با فاصله کافی از هم و در شرایط پراکندگی تک‌گانه^{۳۱} است بررسی شده‌اند.

الف- محیط حاوی تک ذره کروی دی‌اکسید تیتانیوم و در هر مرحله با قطر ثابت بترتیب برابر ۲۰۰، ۲۱۰، ۲۲۰، ۲۳۰ و ۲۴۰ نانومتر و ضریب انکسار نسبی ذره به محیط ثابت و برابر با ۲/۷ در نظر گرفته شده است (با فرض ضریب انکسار واحد برای رزین). از آنجا که زاویه قرارگیری گیرنده نوری (زاویه پراکندگی) از نور تفرق یافته در حالت قطبیدگی ثبت شده مؤثر است، نتایج برای درجه قطبیدگی و نیز مؤلفه‌هایی از ماتریس مولر که بالاترین حساسیت را در مقابل تغییرات قطر ذره تفرق‌دهنده از خود نشان می‌دهند روی بازه صفر تا ۱۸۰ درجه ارائه شده است (شکل ۴). در شکل ۴ مشاهده می‌شود که در اکثر زوایای پراکندگی، تغییرات هریک از شاخص‌های نشان داده شده برای اندازه‌های مختلف دی‌اکسید تیتانیوم نسبت به هم کاملاً مشهود است. همچنین با افزایش قطر ذره تفرق‌دهنده موجود در فانتوم، در اغلب موارد قله‌های اصلی طیف این ۶ مؤلفه به سمت چپ انتقال می‌یابد که این خود یکی از نشانه‌های ارزیابی کیفی داروهای جلدی ضد اشعه ماوراءبنفش به‌شمار می‌رود. با بررسی طیف قطبیدگی در زوایای پراکندگی گوناگون می‌توان برای هریک از شاخص‌های قطبیدگی (مؤلفه‌های ماتریس مولر و نیز پارامترهایی نظیر درجه قطبیدگی)، زاویه پراکندگی مناسب با حداکثر درجه حساسیت به تغییرات عوامل گوناگون مانند اندازه، جنس و شکل ذرات را به دست آورد. همچنین ذکر این نکته ضروری است که از ۱۰ مؤلفه دیگر ماتریس مولر،

$$\begin{aligned} Z_n(\rho) &= \frac{2n+3}{\rho} Z_{n+1}(\rho) - Z_{n+2}(\rho) \\ \psi_0(\rho) &= \sin \rho, \quad \psi_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} - \cos \rho \\ \zeta_0(\rho) &= -\cos \rho, \quad \zeta_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho} - \sin \rho \\ Z_n(\rho) &= \frac{2n-1}{\rho} Z_{n-1}(\rho) - Z_{n-2}(\rho) \\ \xi_n(\rho) &= \psi_n(\rho) + i\zeta_n(\rho) \\ Z'_n(\rho) &= Z_{n-1}(\rho) - \frac{n+1}{\rho} Z_n(\rho) \end{aligned} \quad (7)$$

بنابراین با تکرار فرایند محاسبه ماتریس پراکندگی برای ۴ حالت پلاریزاسیون لیزر ورودی (عمودی، افقی، مورب ۴۵°+ و دایروی راستگرد)، ماتریس مولر مجموعه فانتوم شبیه‌سازی شده به دست می‌آید. بنابراین بردار استوکس نور حاصل از بازپراکندگی نور غیرقطبیده تابشی قابل محاسبه است:

$$\begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & M_{44} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} S_{i0} \\ S_{i1} \\ S_{i2} \\ S_{i3} \end{pmatrix} \quad (8)$$

که $S_k; k=1:4$ مؤلفه‌های بردار استوکس نور لیزر تابشی و $M_{ij}; i,j=1:4$ مؤلفه‌های ماتریس مولر هستند. از بردار استوکس حاصل می‌توان به ترتیب پارامترهای درجه قطبیدگی^{۲۸} (DOP)، درجه قطبیدگی خطی^{۲۹} (DOLP) و درجه قطبیدگی دایروی^{۳۰} (DOCP) را به دست آورد [۱۵].

$$\begin{aligned} DOP &= \frac{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}}{S_0} \\ DOLP &= \frac{\sqrt{S_1^2 + S_2^2}}{S_0} \\ DOCP &= \frac{S_3}{S_0} \end{aligned} \quad (9)$$

در این مقاله از پارامترهای تعریف شده در رابطه ۹ به همراه مؤلفه‌های غیرصفر ماتریس مولر، به عنوان شاخص‌های تشخیص تغییرات مورد نظر در فانتوم شبیه‌سازی شده استفاده شده است.

۳- تفسیر و تحلیل نتایج

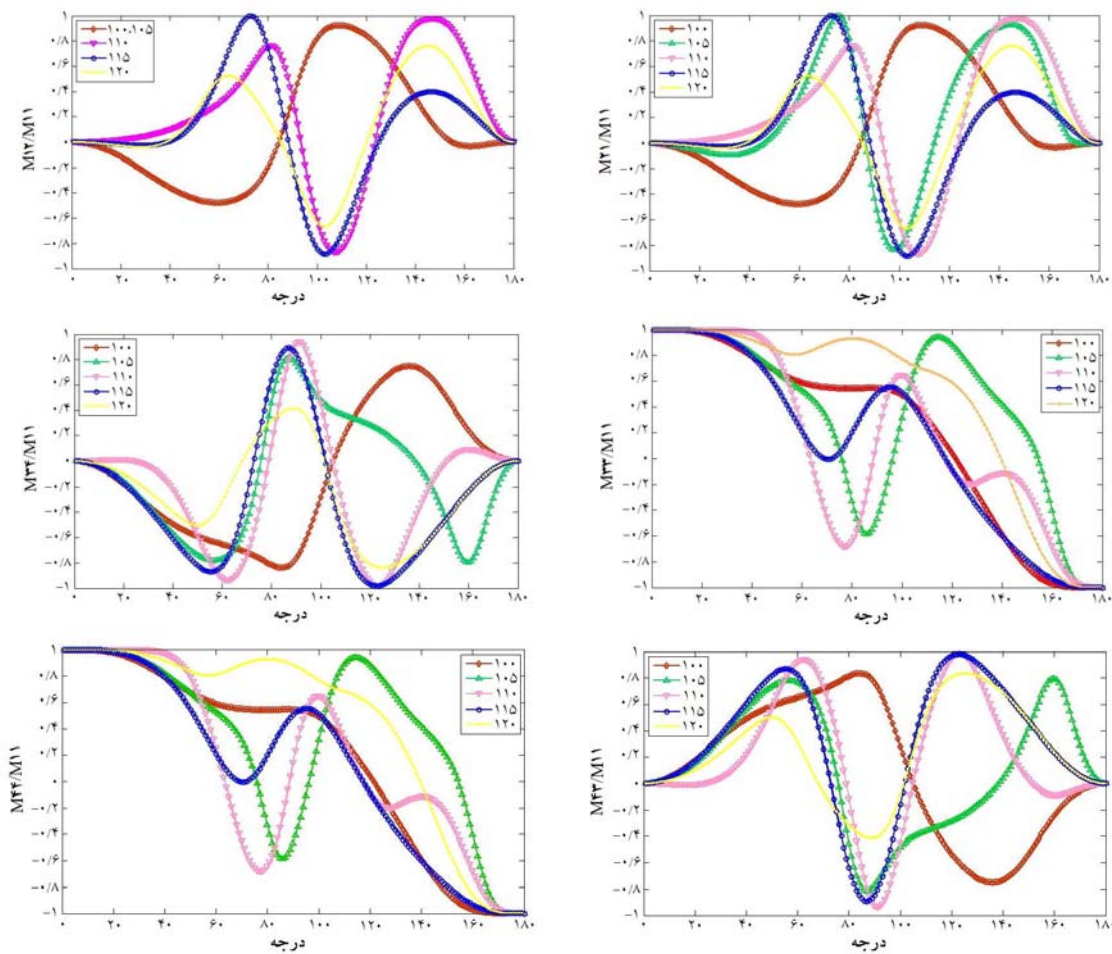
در این بخش، نتایج مدل‌سازی بازپراکندگی نور لیزر قطبیده از نمونه اپوکسی رزین حاوی ذرات تفرق‌دهنده دی‌اکسید تیتانیوم ارائه می‌شود و سپس نتایج و تعریف شاخص‌های مناسب براساس بیشینه حساسیت به تغییرات اندازه و جنس ذرات

²⁹ Euclidian norm

³⁰ Exponentially convergence

ضریب انکسار نسبی ذره به محیط کماکان ثابت و برابر با ۲/۷ فرض شده است. نتایج برای زاویه پراکندگی (زاویه قرارگیری آشکارساز نسبت به نمونه) در ۴ وضعیت ۲۰، ۴۵، ۹۰ و ۱۳۵ درجه بررسی شده است. نتایج مدل نشان می‌دهد به‌ازای زوایای پراکندگی انتخاب شده و با ثابت در نظر گرفتن ضریب شکست نسبی، حساس‌ترین مؤلفه به تغییرات اندازه ذره تفرق‌دهنده را می‌توان در هر مورد انتخاب کرد. در شکل ۵ طیف تغییرات مؤلفه‌های غیر صفر ماتریس مولر یعنی $M_{12}, M_{21}, M_{33}, M_{34}, M_{43}, M_{44}$ نسبت به اندازه آورده شده است.

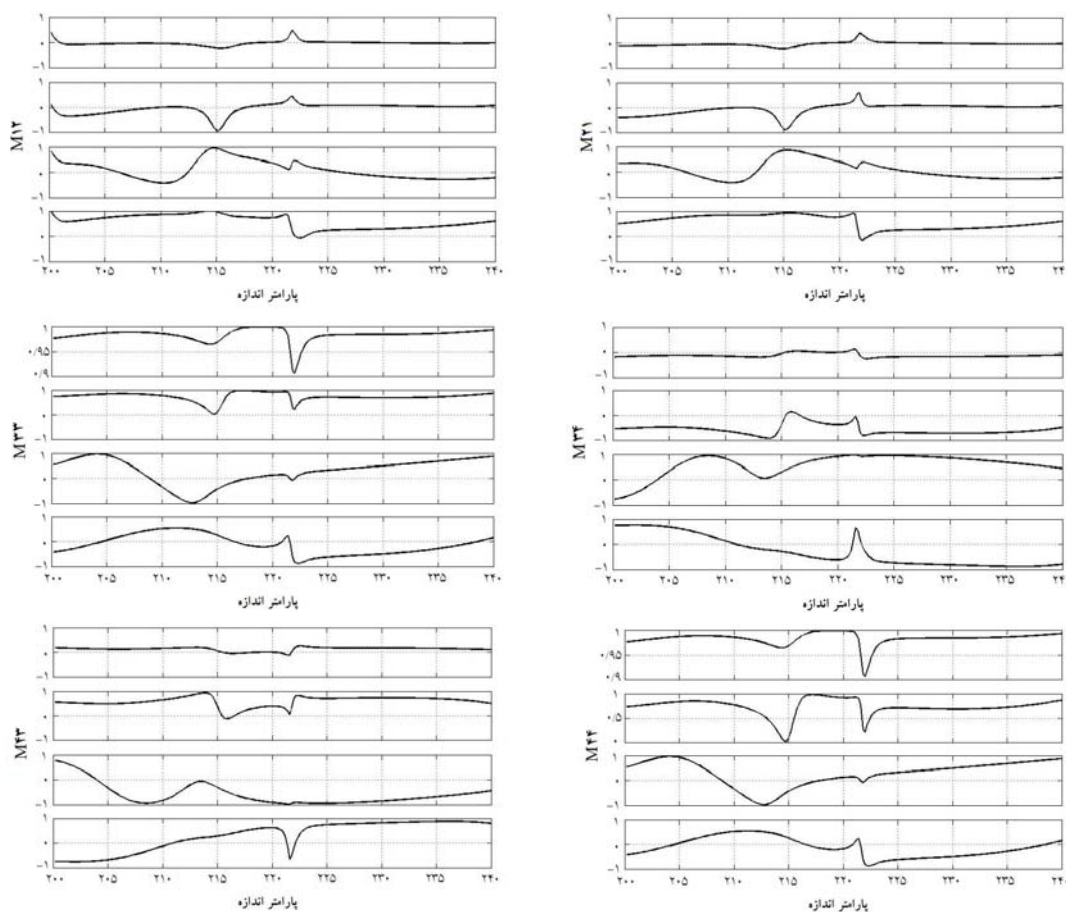
M_{23} و M_{24} در مقابل تغییر اندازه ذره تغییرات غیرقابل پیش‌بینی و نامنظم نشان می‌دهند و ۸ مؤلفه باقیمانده ($M_{11}, M_{13}, M_{14}, M_{22}, M_{31}, M_{32}, M_{41}, M_{42}$) و نیز پارامتر درجه قطبیدگی بدون تغییرات است. از آنجاکه برخی شاخص‌های قطبیدگی نور بازپراکنده شده از نمونه مورد آزمایش، حساسیت بالایی به تغییرات اندازه ذره از خود نشان می‌دهند، بنابراین در ادامه مدل بازپراکندگی از فانتوم شبیه‌سازی شده برحسب تغییرات پارامتر اندازه و برای چند زاویه پراکندگی نمونه اجرا شده است. هدف از این شبیه‌سازی محاسبه میزان حساسیت هریک از شاخص‌ها به تغییرات اندازه و جنس و در نهایت انتخاب بهترین معرف‌ها است. در اینجا اندازه ذرات بین ۲۰۰ تا ۲۴۰ نانومتر با گام ۰/۲ تغییر داده شده است.



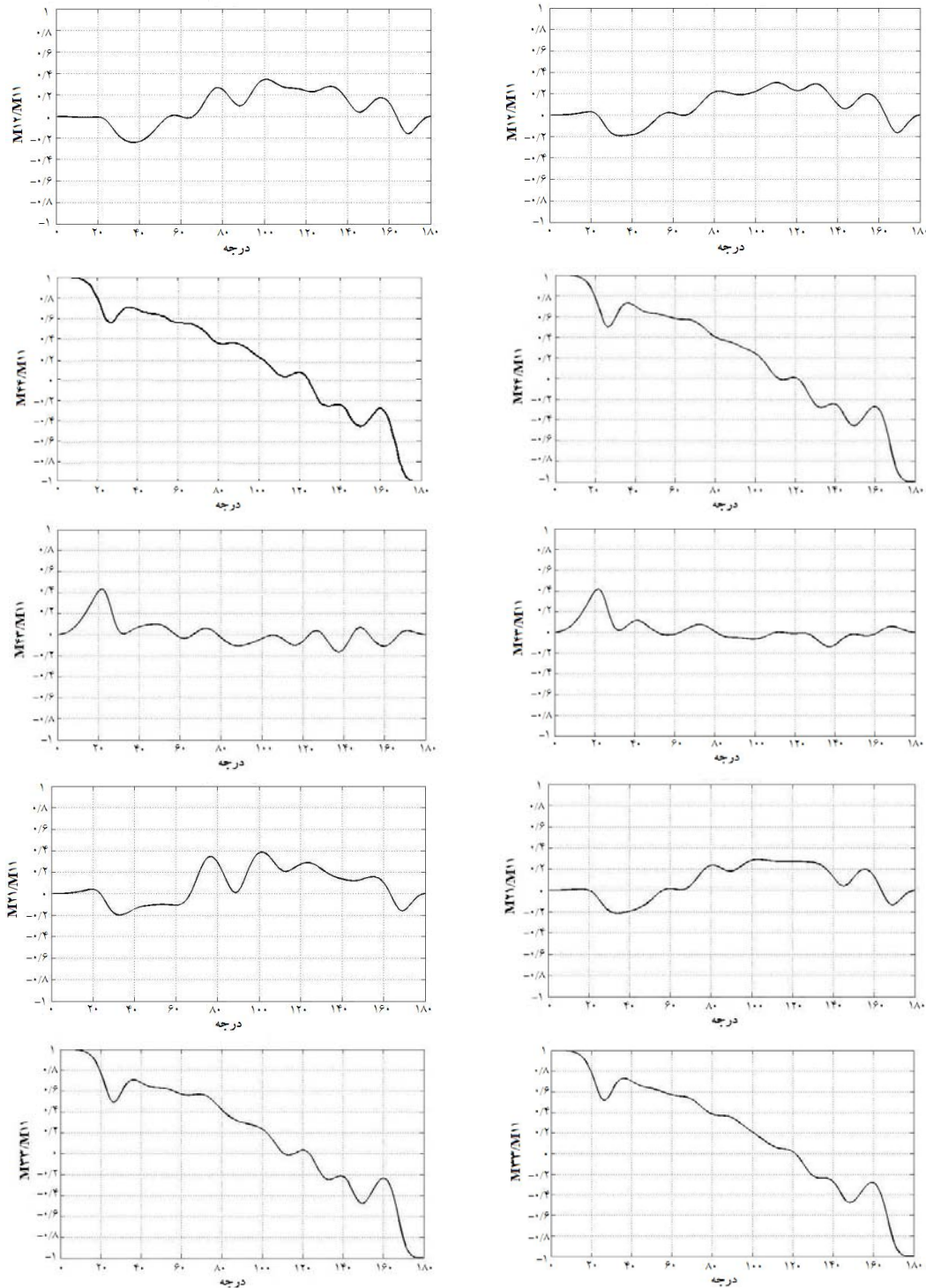
شکل ۴- طیف $M_{21}/M_{11}, M_{33}/M_{11}$ و M_{43}/M_{11} (تصاویر سمت راست از بالا به پائین)؛ $M_{12}/M_{11}, M_{34}/M_{11}$ و M_{44}/M_{11} (تصاویر سمت چپ از بالا به پائین) برحسب زاویه پراکندگی برای رزین اپوکسی حاوی تک‌ذره کروی دی‌اکسیدتیتانیوم به قطرهای ۲۰۰، ۲۱۰، ۲۲۰، ۲۳۰ و ۲۴۰ نانومتر و ضریب شکست نسبی ثابت ۲/۷

ج- پس از ارائه و بررسی نتایج مدلسازی برای رزین اپوکسی حاوی تک‌ذره دی‌اکسید تیتانیوم، نتایج برای شرایطی که به واقعیت نزدیک‌تر است یعنی رزین اپوکسی حاوی مجموعه‌ای از ذرات دی‌اکسید تیتانیوم بررسی شده است. در این مرحله طیف شاخص‌های قطبیدگی برای مجموعه‌هایی از ۱۰۰ و ۱۰۰۰ ذره با پارامتر اندازه تصادفی با توزیع یکنواخت بین ۱ تا ۵ (قطر تقریبی ذرات بین ۷۰ تا ۳۸۰ نانومتر)، مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرند. شایان ذکر است که ذرات همگون با جنس مشابه (ضریب انکسار نسبی برابر با ۲/۷ برای کل محیط) در نظر گرفته می‌شوند و فرض می‌شود فاصله ذرات به اندازه کافی از هم زیاد است به طوری که می‌توان از تأثیر نور تفرقیافته از هر ذره بر ذره مجاور و در نتیجه پدیده پراکندگی چندگانه صرف نظر کرد. همانطور که پیش‌بینی می‌شود شکل کلی شاخص‌های قطبیدگی محلول حاوی تک ذره حفظ شده است (شکل‌های ۶ و ۷).

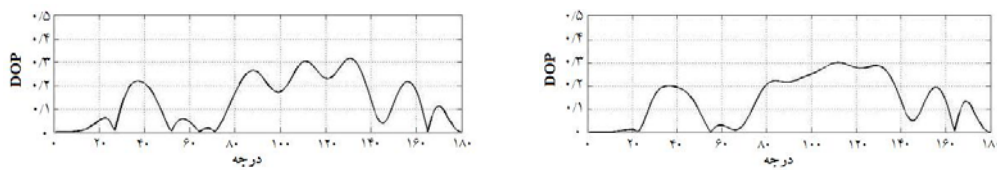
از نتایج مدل در شکل ۵ می‌توان دریافت که دو مؤلفه M_{33} و M_{44} در زاویه 20° حساسیت بسیار ناچیزی در مقابل تغییرات اندازه نشان می‌دهند که این تغییرات برای ذرات با قطر ۲۲۰ تا ۲۲۵ مشهود است. این حساسیت برای باقیمانده مؤلفه‌های ماتریس مولر نیز چشمگیر نیست و انتخاب زاویه قرارگیری آشکارساز در 20° به منظور ردگیری تغییرات اندازه مناسب نیست. در زاویه پراکندگی 45° با توجه به شکل ۵ می‌بینیم که تغییرات محسوس تنها برای بخشی از بازه ۲۱۰ تا ۲۲۵ نانومتر دیده می‌شود. در زاویه ثبت 90° ، طیف شاخص‌های M_{12} ، M_{21} ، M_{33} و M_{44} به‌ازای غالب مقادیر اندازه ذرات، دارای حساسیت چشمگیر بوده و از طرفی می‌توان معادله طیف را به صورت مقطعی با روابط خطی تخمین زد. این امر در زاویه 135° به‌ویژه برای ۲ مؤلفه M_{33} و M_{44} کاملاً مشهود است. به‌عنوان جمع‌بندی نهایی می‌توان اشاره کرد که با قرارگیری آشکارساز نوری در ۲ زاویه ۹۰ و 135° درجه می‌توان از هریک از ۶ مؤلفه غیر صفر ماتریس مولر به‌عنوان شاخص ارزیابی تغییرات اندازه بهره گرفت.



شکل ۵- طیف تغییرات ۶ مؤلفه غیر صفر ماتریس مولر (M_{12} ، M_{21} ، M_{33} ، M_{44} ، M_{13} و M_{31}) نسبت به اندازه در ۴ زاویه پراکندگی مشخص ۲۰، ۴۵، ۹۰ و 135° درجه (بترتیب از بالا به پائین) برای رزین اپوکسی حاوی تک‌ذره کروی دی‌اکسید تیتانیوم با ضریب شکست نسبی ثابت ۲/۷

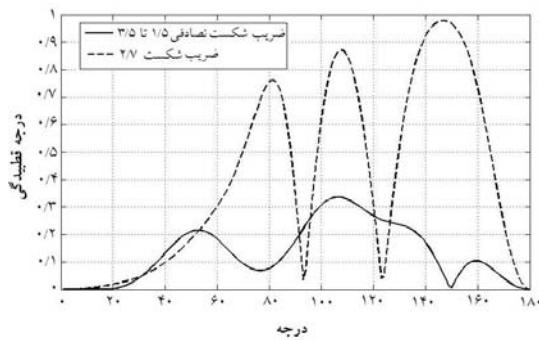


شکل ۶- طیف M_{12}/M_{11} , M_{13}/M_{11} , M_{21}/M_{11} , M_{22}/M_{11} , M_{23}/M_{11} برحسب زاویه پراکندگی از بالا به پائین برای فانتوم حاوی ۱۰۰ (چپ) و ۱۰۰۰ (راست) ذره دی اکسید تیتانیوم با پارامتر اندازه تصادفی بین ۱ تا ۵ و ضریب شکست نسبی ثابت ۲/۷



شکل ۷- طیف درجه قطبیدگی برحسب زاویه پراکندگی برای فانتوم حاوی ۱۰۰ (چپ) و ۱۰۰۰ (راست) ذره دی اکسید تیتانیوم با پارامتر اندازه تصادفی بین ۱ تا ۵ و ضریب شکست نسبی ثابت ۲/۷

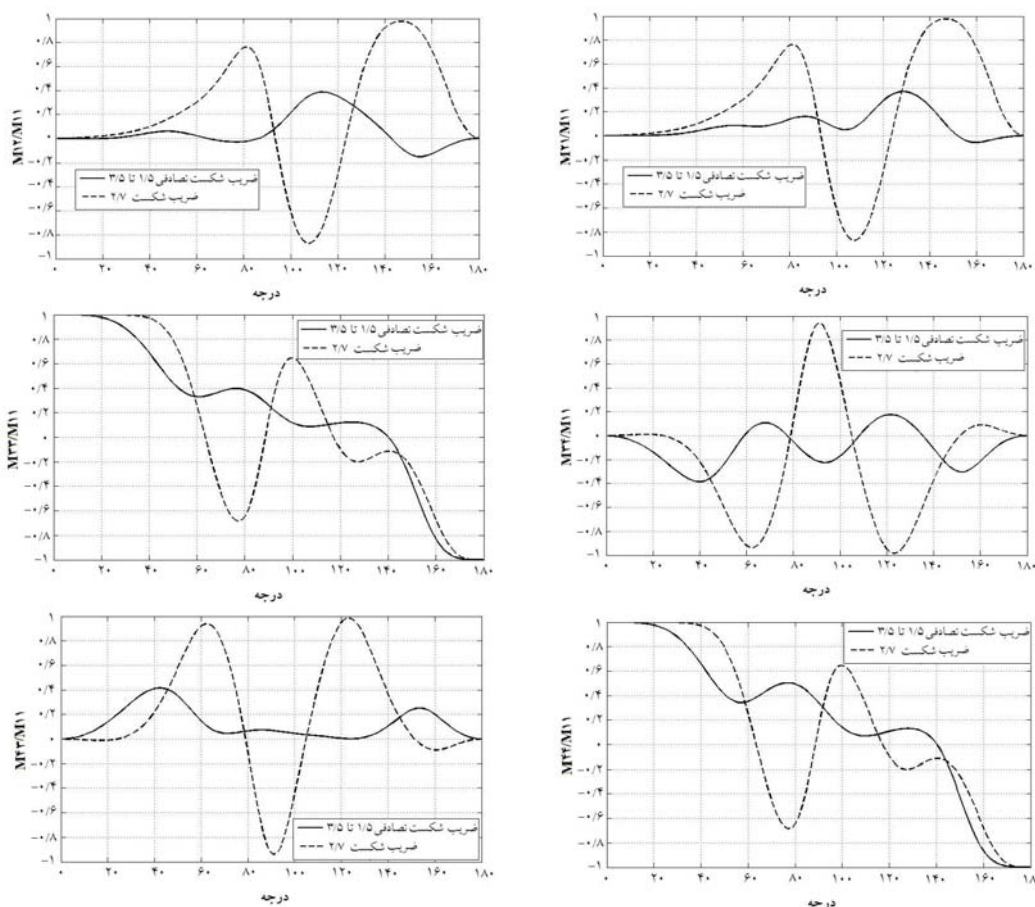
حاوی ۱۰۰ ذره با قطر برابر (۲۲۰nm) و ضریب شکست نسبی تصادفی بین ۱/۵ تا ۳/۵ در نظر گرفته شده و شاخص‌های قطبیدگی برای زاویه پراکندگی صفر تا ۱۸۰ درجه ارائه شده است (شکل‌های ۸ و ۹).



شکل ۸- طیف درجه قطبیدگی برحسب زاویه پراکندگی برای فانتوم حاوی ۱۰۰ ذره دی‌اکسیدتیتانیوم با قطر یکسان (۲۲۰nm) و ضریب شکست نسبی تصادفی با توزیع یکنواخت بین ۱/۵ تا ۳/۵

درحالی‌که با توجه به شرایط مسئله یعنی نحوه توزیع ذرات تفرق‌دهنده با رعایت فاصله کافی از یکدیگر، سیگنال نوری ثبت شده به‌وسیله بلوک گیرنده حالت قطبیدگی مجموعه قطبش‌سنجی در هر زاویه پراکندگی از صفر تا ۱۸۰ درجه، برابر جمع آثار سیگنال‌های تفرق یافته از تک‌تک ذرات است. با توجه به این‌که طیف خروجی از قانون جمع آثار تبعیت می‌کند، با افزایش تعداد ذرات تفرق‌دهنده در فانتوم شبیه‌سازی شده، منحنی یکنواخت‌تر شد و از شدت تیزی قله‌ها کاسته شد. بنابراین می‌توان با بهره‌گیری از نتایج مدل به ارزیابی مواد دارویی مورد نظر در شرایطی پرداخت که علاوه بر تغییر در اندازه ذرات دی‌اکسیدتیتانیوم، دارای تنوع اندازه و غیریکنواختی در اندازه نیز هستند.

د- پس از بررسی‌های انجام شده درباره اندازه تفرق‌دهنده‌ها به بررسی تأثیر تغییرات جنس یا ضریب شکست نسبی ذرات دی‌اکسید تیتانیوم بر روی الگوهای قطبشی پرداخته‌ایم. محیطی



شکل ۹- طیف M_{22}/M_{11} و M_{33}/M_{11} (راست بالا به پائین) و M_{21}/M_{11} ، M_{33}/M_{11} و M_{22}/M_{11} (چپ بالا به پائین) برحسب زاویه پراکندگی برای فانتوم حاوی ۱۰۰ ذره دی‌اکسیدتیتانیوم با قطر یکسان (۲۲۰nm) و ضریب شکست نسبی تصادفی با توزیع یکنواخت بین ۱/۵ تا ۳/۵

حساس‌ترین اجزای ماتریس مولر به تغییرات شکل ذرات یخ از حالت کروی به غیرکروی بوده است. همچنین در مطالعه دیگری که مدل تفرق نور در محیط‌های با قدرت تفرق‌دهندگی بالا پیاده‌سازی شده است، نشان داده شده است که M_{12} بیشترین حساسیت را نسبت به وجود ذرات تفرق‌دهنده با اندازه‌های مختلف دارد [۱۹]. نتایج مشابهی در تحقیقی روی محیط حاوی گلوکز ارائه شده است که در آن حساسیت جزء M_{12} به تغییر غلظت گلوکز مشاهده می‌شود [۲۰].

همان‌طور که در بخش بررسی نتایج مدل اشاره شد، در هر مورد می‌توان به معرفی شاخص‌های برتر برای ارزیابی کیفی مواد مورد نظر پرداخت. به عنوان مثال در ارزیابی اندازه ذرات تفرق‌دهنده دی‌اکسید تیتانیوم، نشان داده شد که از بین ۱۶ مؤلفه ماتریس مولر و نیز درجه قطبیدگی، تنها ۶ مؤلفه از ماتریس مولر حساسیت مطلوبی در برابر تغییرات دارند. همچنین با تحلیل زاویه پراکندگی بر روی مدل پیشنهادی، زوایای بهینه برای ثبت اطلاعات به دست آمدند. بنابراین با اطلاعات کسب شده درباره پارامترهای مورد نیاز و زاویه سنجنده (زاویه پراکندگی) حتی می‌توان به ساده‌سازی مجموعه اندازه‌گیری که یک قطبش‌سنج ساده خواهد بود پرداخت.

سپاسگزاری

نویسندگان مقاله لازم می‌دانند از زحمات جناب آقای دکتر علیرضا مینویی و مشاوره‌های ایشان در پیشبرد تحقیق و شبیه‌سازی نمونه‌های آزمایشگاهی داروهای جلدی، صمیمانه سپاسگزاری کنند.

مراجع

- [1] Gamer A.O., Leibold E., van Ravenzwaay B., The in vitro absorption of microfine zinc oxide and titanium dioxide through porcine skin; *Toxicology in Vitro* 2006; 20:301-307.
- [2] Umbreit T.H., Weaver J.L., Miller T.J., Zhang J., Shah R., Khan M.A., Stratmeyer M.E., Tomazic-Jezic V.; *Toxicology of titanium dioxide nanomaterials: characterization and tissue distribution in subcutaneously and intravenously injected mice*, The *Toxicologist* 2007; Abstract No 1391, Charlotte, NC.

نتایج نشان دهنده تغییرات طیف قطبیدگی پارامترهای موردنظر به دلیل ناهمگونی در جنس ذرات تفرق‌دهنده است. عموماً این تغییرات با کاهش دامنه جهش و انتقال طیف به سمت چپ همراه است. بازهم دو مؤلفه M_{23} و M_{24} دارای تغییرات شدید و نامنظم بوده و ۸ مؤلفه دیگر ماتریس مولر بدون تغییرات هستند. از نتایج به دست آمده از مدل ارائه شده درباره اندازه و جنس نانو ذرات دی‌اکسید تیتانیوم می‌توان به این نکته اشاره کرد که برای هر فانتوم پوست حاوی ذرات تفرق‌دهنده با بزرگی و درجه خلوص مشخص با خواص منحصر به فرد، استخراج طیف مشخصه قطبیدگی آن امکان‌پذیر است.

۴- نتیجه‌گیری

دست‌آورد اصلی این مطالعه دستیابی به امکان استخراج طیف‌های مشخصات قطبشی معرف اندازه و ضریب شکست نانو ذرات دی‌اکسید تیتانیوم در مواد دارویی جلدی، با استفاده از روش پیشنهادی قطبش‌سنجی و مدل ارائه شده است. در فرایند تولید چنین موادی، برای رسیدن به کیفیت مطلوب می‌توان از مقایسه طیف ماده موجود با مرجع استاندارد، به وجود ناخالصی یا ناهمگونی در اندازه ذرات پی برد. بنابراین می‌توان از روش پیشنهادی برای تعیین کیفیت مواد دارویی موجود و مقایسه آنها با یکدیگر استفاده کرد. همچنین همان‌طور که در بخش قبل و به‌ویژه شکل‌های ۴ و ۹ نشان داده شد این روش قادر است کوچکترین تغییرات در اندازه و نیز ضریب شکست را به تصویر بکشد. نتایج به دست آمده در این تحقیق با نتایج گزارش شده از تحقیقات مشابه روی خواص قطبیدگی مواد گوناگون، همخوانی خوبی دارند [۸-۱۱]. از آنجاکه استفاده از قطبیدگی نور در ارزیابی خواص داروهای جلدی ضد اشعه ماوراءبنفش در این تحقیق برای نخستین بار ارائه شده است، بنابراین نتایج حاصل در چند مورد با نتایج تحقیق‌های مشابه در سایر حوزه‌های صنعتی مقایسه شده است. به‌عنوان مثال در مرجع [۸] نتایج آزمایش‌های قطبش‌سنجی بر روی ذرات کروی شکل یخ گزارش شده است. در این مقاله هدف محقق شناسایی

- [12] Tao Su X., Capjack C., Rozmus W., and Backhouse C., 2D light scattering patterns of mitochondria in single cells, *Opt. Express* 2007; 15(17): 10562-575.
- [13] <http://www.kemira.com/en/solutions/products/mining/mining/titaniumdioxide/pages/default.aspx>, 2009.
- [14] Bohren C. and Huffman D.R., Absorption and scattering of light by small particles; Wiley Science Paperback Series 1998; 780-825.
- [15] Azzam R.M.A., and Bashara N.M., Ellipsometry and polarized light; North Holland, Amsterdam, 1988.
- [16] M. J. Rakovic, G. W. Kattawar, M. Mehrubeoglu, B. D. Cameron, L.-H. Wang, and S. Rastegar, G. L. Cote, Light backscattering polarization patterns from turbid media: theory and experiment; *Appl. Opt.* 1999; 38: 3399-3408.
- [17] Petrov D., Synelnyk E., Shkuratov Yu., and Videen G., The T-matrix technique for calculation of scattering properties of ensembles of randomly oriented particles with different size; *JQSRT* 2006; 102:85-110.
- [18] Rother T., Schmidt K., Wauer J., Shcher-bakov V., and Gayet J.F., Light scattering on Chebyshev particles of higher order; *Appl. Opt.* 2006; 45: 6030-6037.
- [19] Bartel S., and Hielscher A.H., Monte Carlo simulation of the diffuse backscattering Mueller matrix for highly scattering media; *Appl. Opt.* 2000; 39(10): 1580-1588.
- [20] Wang X., Yao G., and Wang L.V., Monte Carlo model and single-scattering approximation of the propagation of polarized light in turbid media containing glucose; *Appl. Opt.* 2002; 41(4): 792-801.
- [3] Kattawar G.W. and Rakovic M.J., Virtus of Mueller matrix imaging for underwater target detection; *Appl. Opt.* 1999; 38: 6431-6438.
- [4] Yang P., Wei H., Kattawar G.W., Hu Y.X., Winker D.M., Hostetler C. A., and Baum B. A., Sensitivity of the backscattering Mueller matrix to particle shape and thermodynamic phase; *Appl. Opt.* 2003; 42:4389-4395.
- [5] Kim H.S., and Jeoung S.C., Polarization-induced size control and ablation dynamics of Ge nanostructures formed by a femtosecond laser; *Opt. Express* 2006; 14(8): 3694-3699.
- [6] Sung L., Mulholland G.W., and Germer T.A., Polarization of light scattered by particles on silicon wafers, *SPIE* 1999; 3619:80-89.
- [7] Efros A. L. and Rosen M., The electronic structure of semiconductor nanocrystals, *Annu. Rev. Mater. Sci.* 2003; 30: 475-521.
- [8] Ping Y., Heli W., George W.K., Young X.H., David M.W., Chris A.H., and Bryan A.B., Sensitivity of the backscattering Mueller matrix to particle shape and thermodynamic phase; *Appl. Opt.* 2003; 42(21): 4389-95.
- [9] Viktin I.A., Laszlo R.D., and Whyman C.L., Effects of molecular asymmetry of optically active molecules on the polarization properties of multiply scattered light; *Opt. Express* 2002; 10(4): 222-229.
- [10] Ishimaru A., Jaruwatanadilok S., and Kuga Y., Polarized pulse waves in random discrete scatterers; *Appl. Opt.* 2001; 40(30): 5495-5502.
- [11] Firdus S., and Ikram M., Polarized laser beam scattering through turbid medium for application in tissue imaging; *ScienceAsia* 2005; 32:167-172.