



**Ioffe
Physical-
Technical
Institute**



Пятая международная конференция • Школа молодых учёных

**ФИЗИКА —
НАУКАМ О ЖИЗНИ**

Санкт-Петербург • 16–19 октября • 2023



Исследование анизотропной релаксации NADH в водно-спиртовых растворах в пикосекундном диапазоне.

Д.А. Волков, И.А. Горбунова, М.Э. Сасин, Д.В. Яшков, О.С. Васютинский

ФТИ им А.Ф. Иоффе, Санкт Петербург, Россия

Объект исследования

- Никотинамид-аденин-динуклеотид (NADH)
- Важный кофермент участвующий в окислительно-восстановительных реакциях в клетках живых организмов

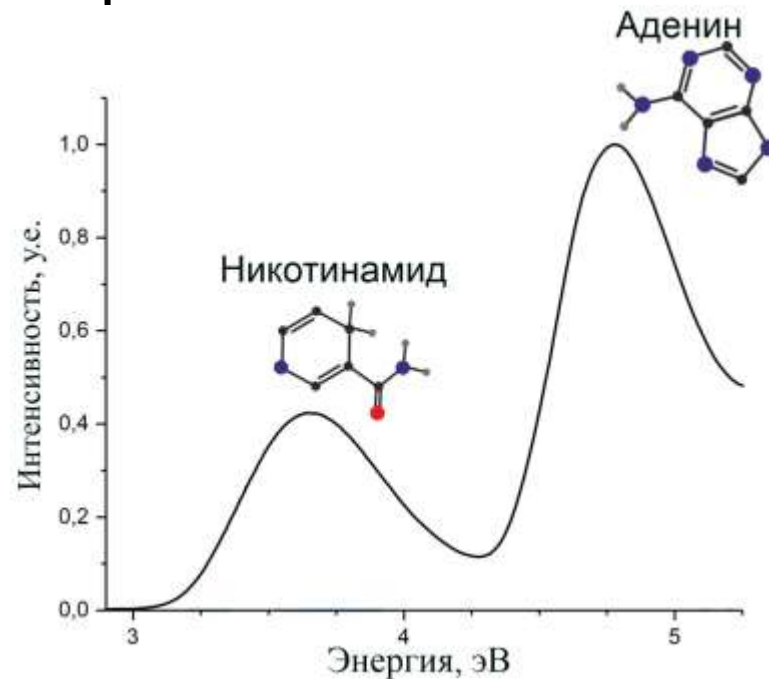


Рисунок 1. Спектр поглощения NADH

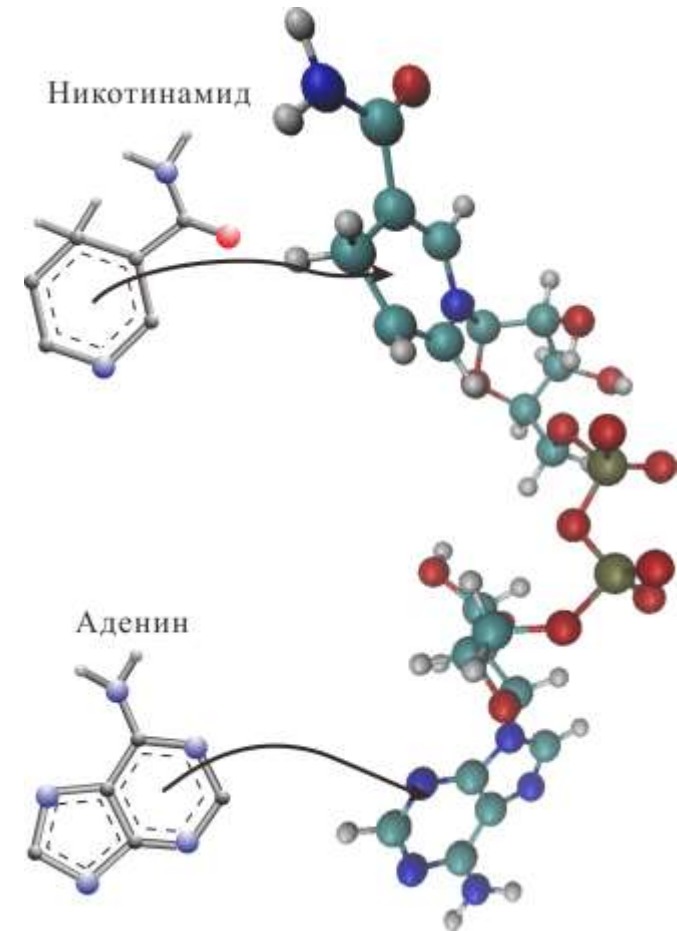


Рисунок 2. Структура NADH

Актуальность

- Развитие методов поляризационной спектроскопии накачка-зондирование для исследования сверхбыстрых процессов в биомолекулах
- Исследование не флуоресцентных молекул
- Разработка новых неинвазивных методов диагностики заболеваний.

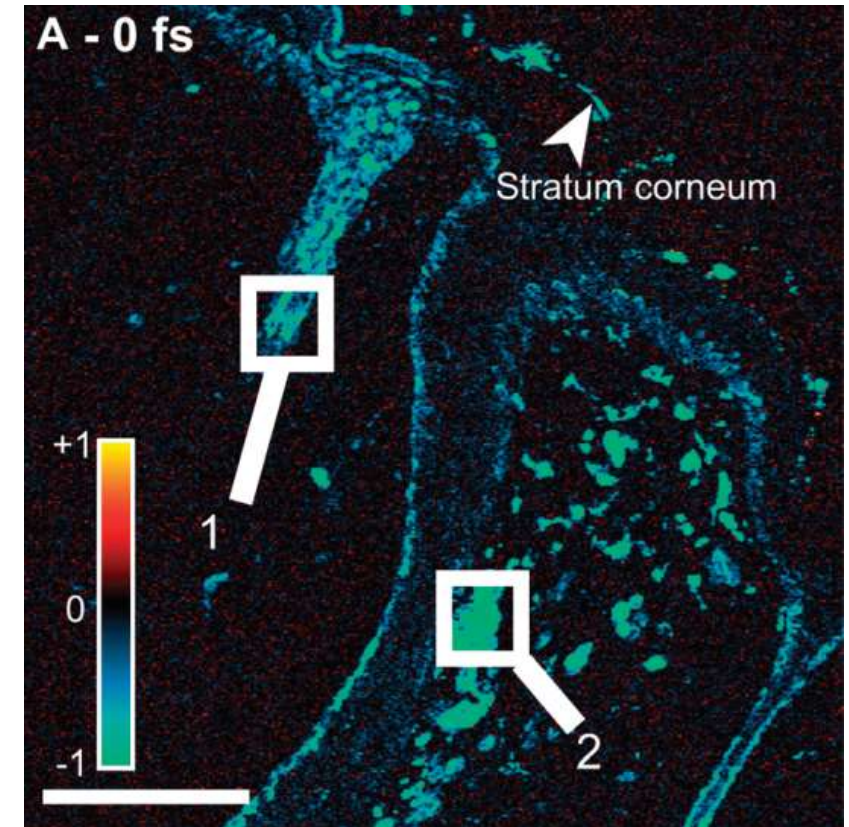


Рисунок 3. Пример сигнала получаемого методом накачка-зондирование в биологических тканях

Методика эксперимента

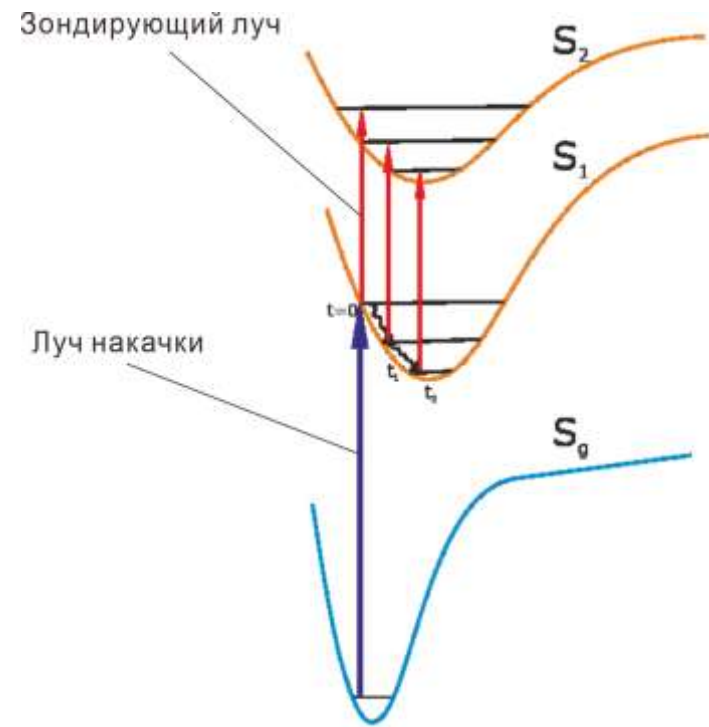


Рисунок 4. Схема энергетических уровней NADH

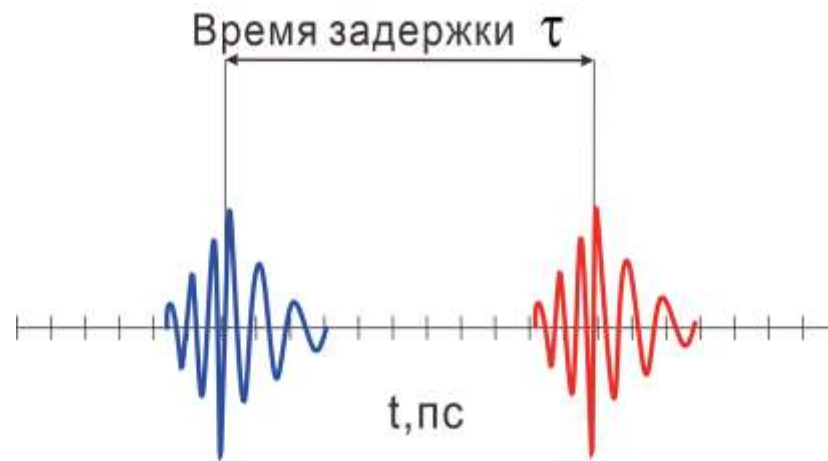


Рисунок 5. Схема задержки зондирующего импульса относительно импульса накачки

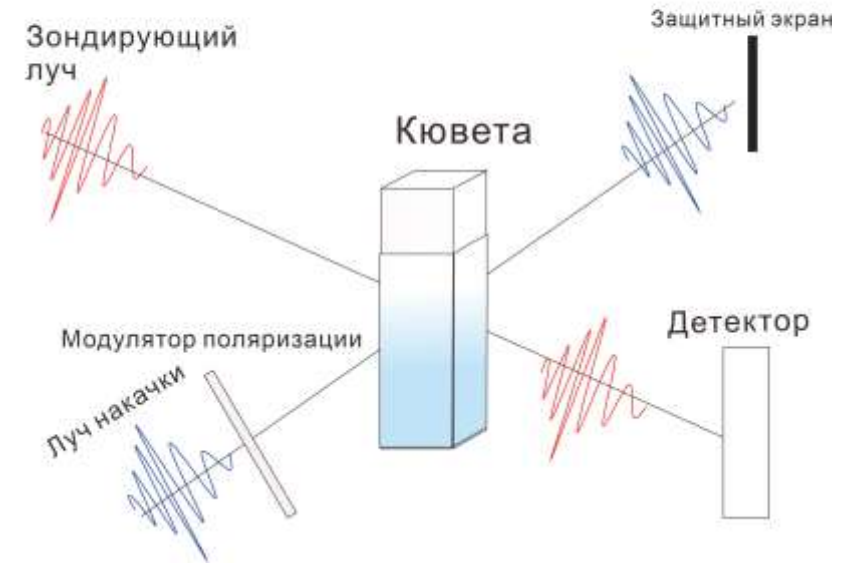


Рисунок 6. Схема метода накачка зондирование

Экспериментальная установка

- Источник излучения - фемтосекундный Ti:sapphire: длительность импульса 100фс; частота следования импульсов 80МГц
- Луч накачки модулировался с частотой 100кГц с помощью акустооптического модулятора
- Детектирование происходило с помощью призмы Глана, балансной схемы детектирования и последующего синхронного детектирования на частоте модуляции

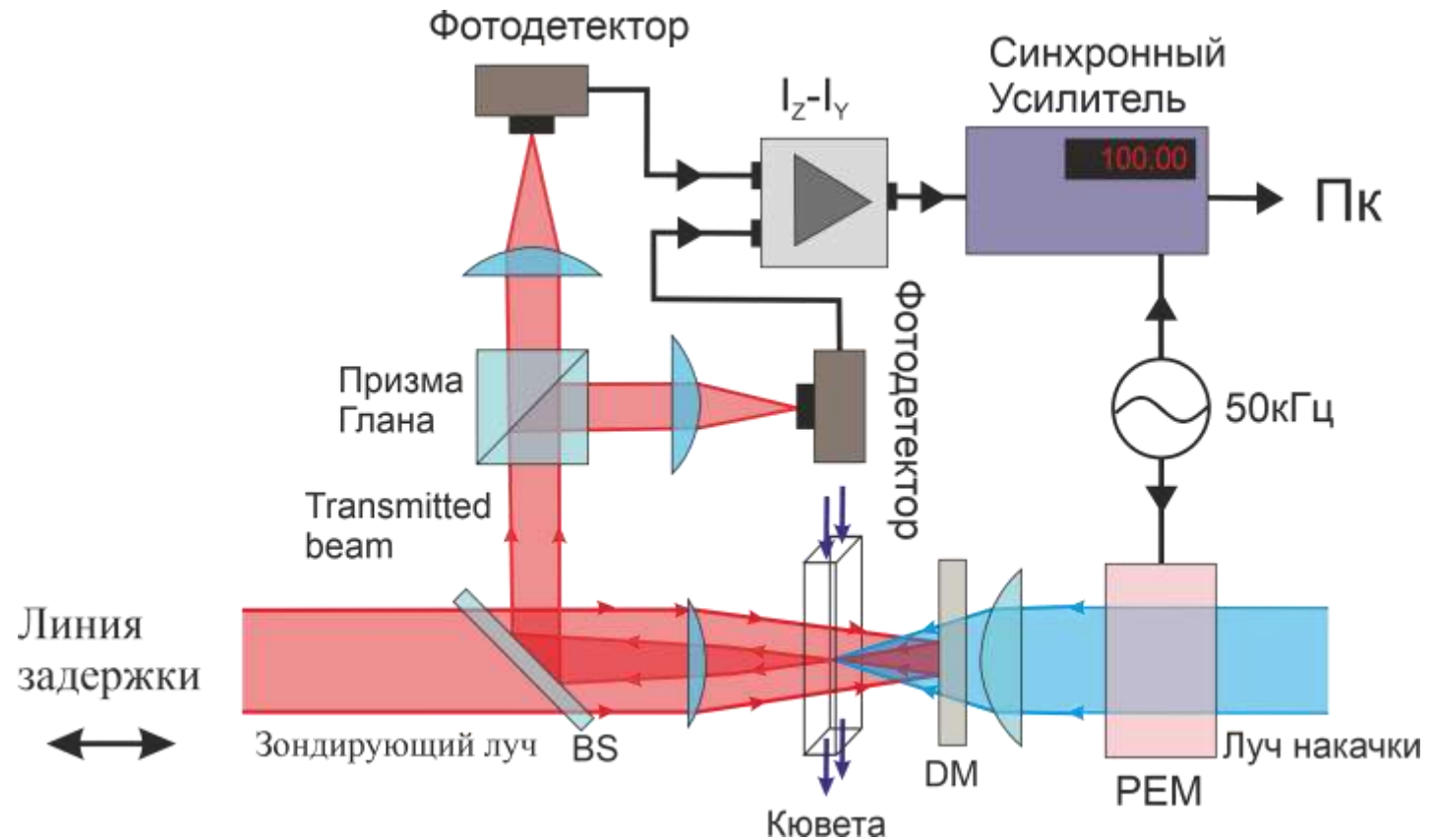


Рисунок 7. Схема экспериментальной установки

Сигнал линейного дихроизма

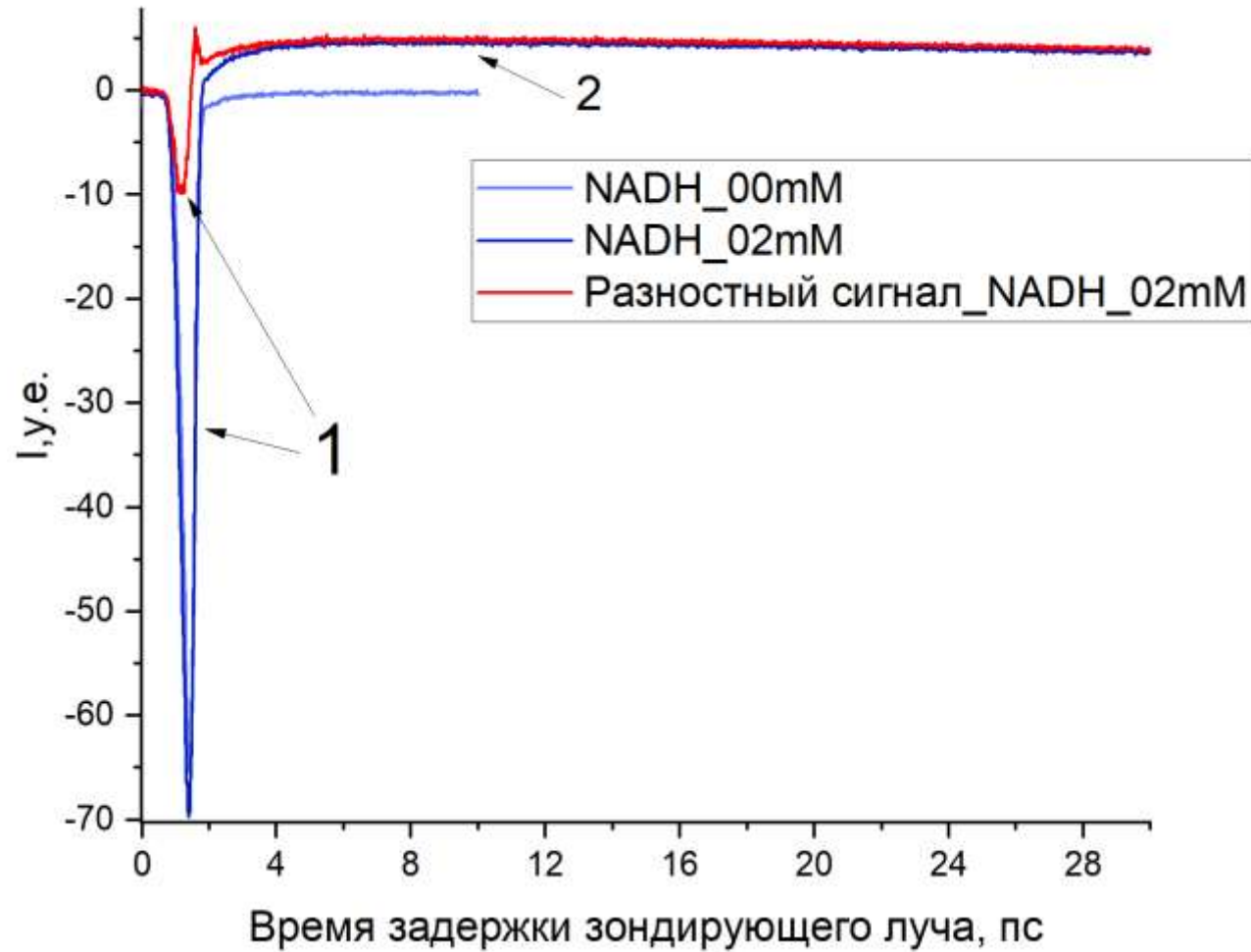


Рисунок 8. Экспериментальный сигнал NADH в воде

Модель для аппроксимации экспериментальных сигналов

$$\Delta I = IRF \otimes (C\delta(t) + D\delta(t + \square t) + [A_1 + (A_0 - A_1)e^{-t/\tau_v}]e^{-t/\tau_r} w(t))$$

IRF – функция отклика системы на единичный импульс;

\otimes - оператор свертки;

A_0, A_1 – описывают углы поворота дипольного момента перехода во время эволюции возбужденного состояния;

τ_v – время анизотропной колебательной релаксации;

τ_r – время вращательной диффузии;

$w(t) = a_1 e^{-t/\tau_1} + a_2 e^{-t/\tau_2}$ - временная зависимость населенности возбужденного состояния;

дельта функции учитывают сигнал при малых временах задержки.

Коэффициенты и время анизотропной колебательной релаксации NADH

$$A_1 + (A_0 - A_1)e^{-t/\tau_v}$$

$$A_0 \approx P_2(\cos \theta_0); A_1 \approx P_2(\cos \theta_\infty)$$

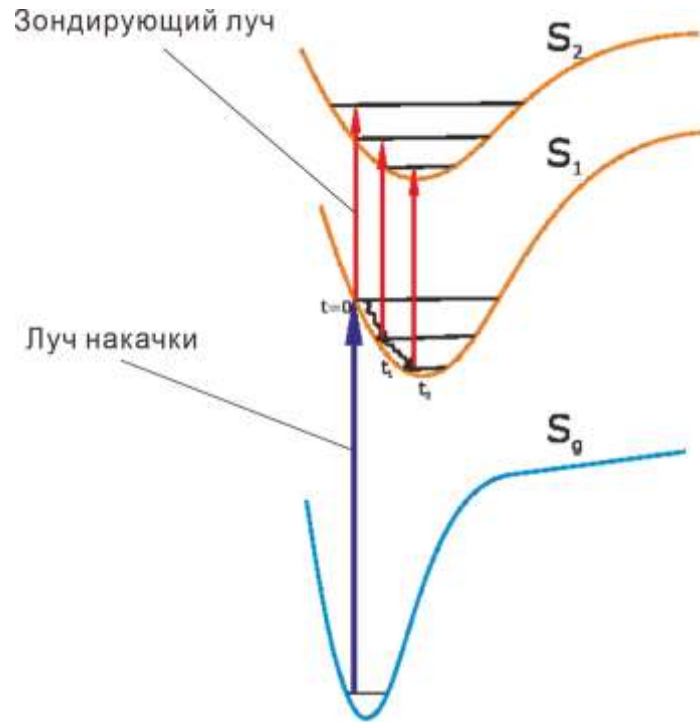


Рисунок 7. Схема энергетических уровней NADH

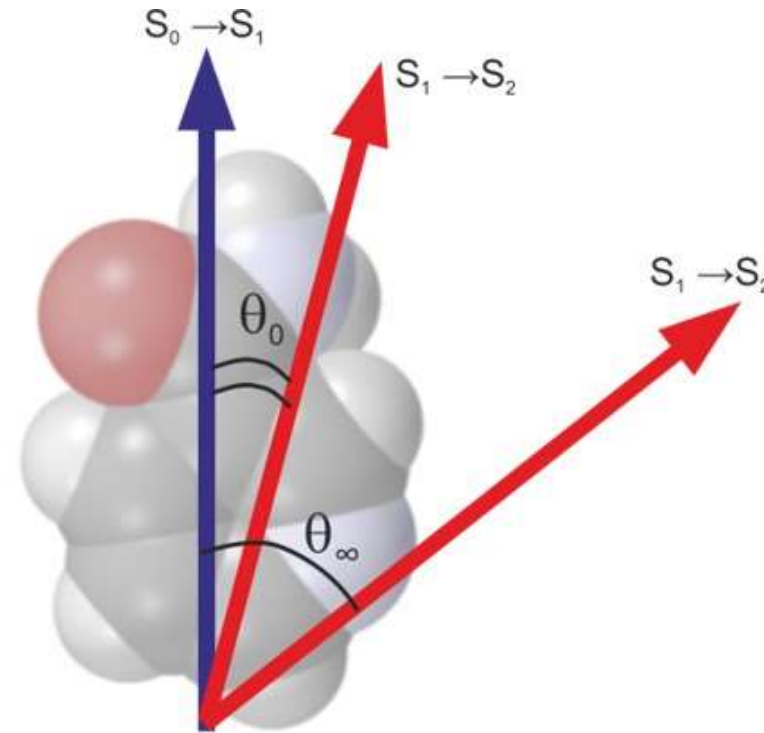


Рисунок 8. Схема дипольных моментов перехода

Сигналы линейного дихроизма NADH в различных растворах

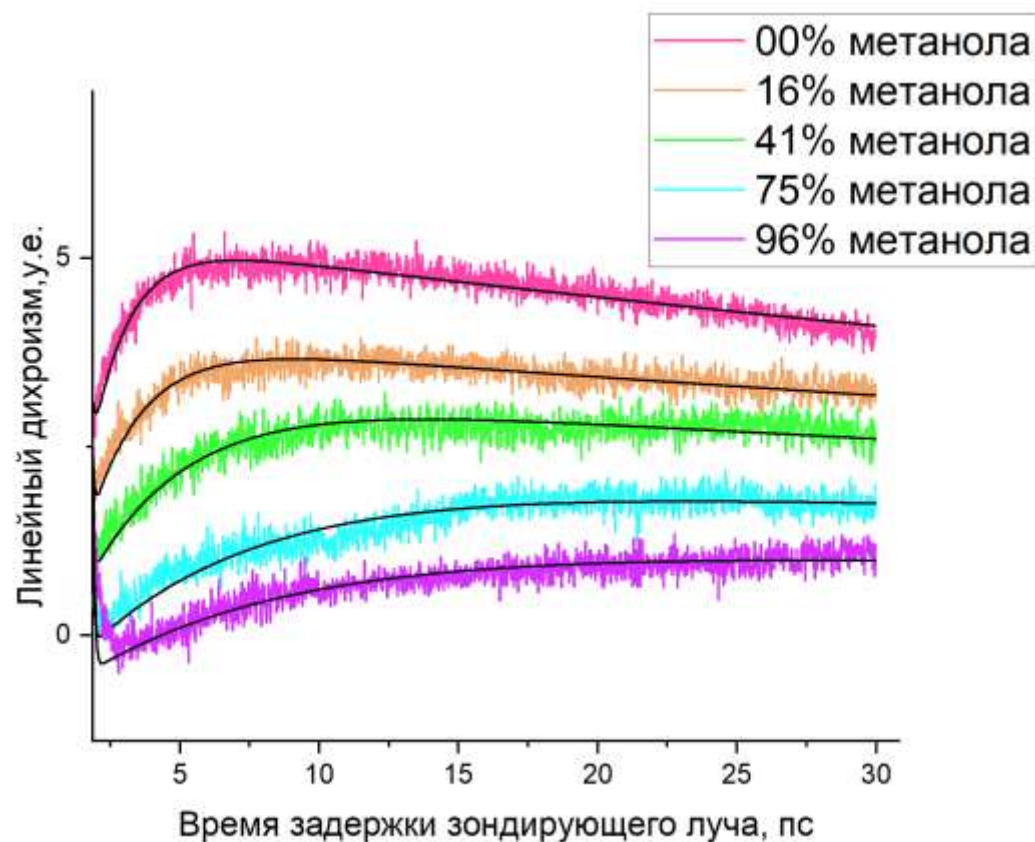


Рисунок 9. Экспериментальные сигналы линейного дихроизма NADH в растворах вода-метанол

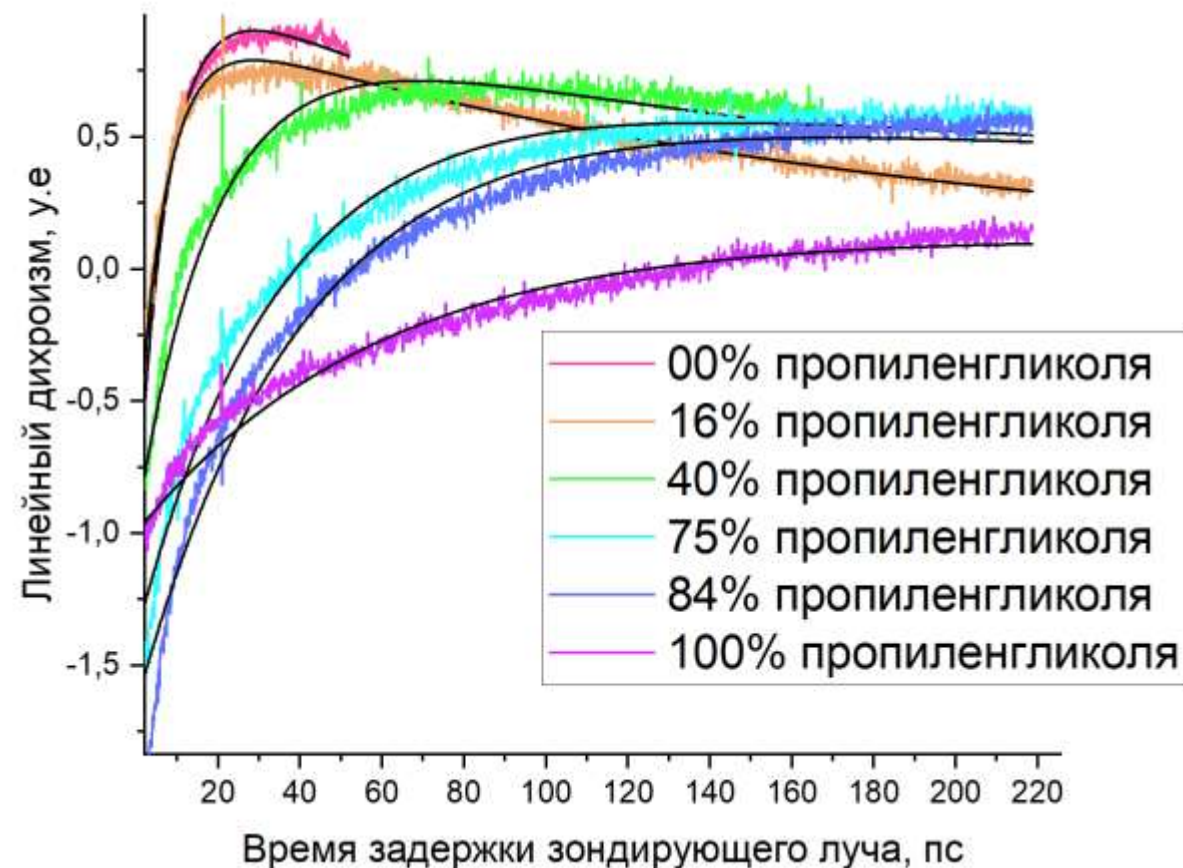


Рисунок 10. Экспериментальные сигналы линейного дихроизма NADH в растворах метанол-пропиленгликоль

Скорость анизотропной колебательной релаксации NADH в растворах вода-метанол

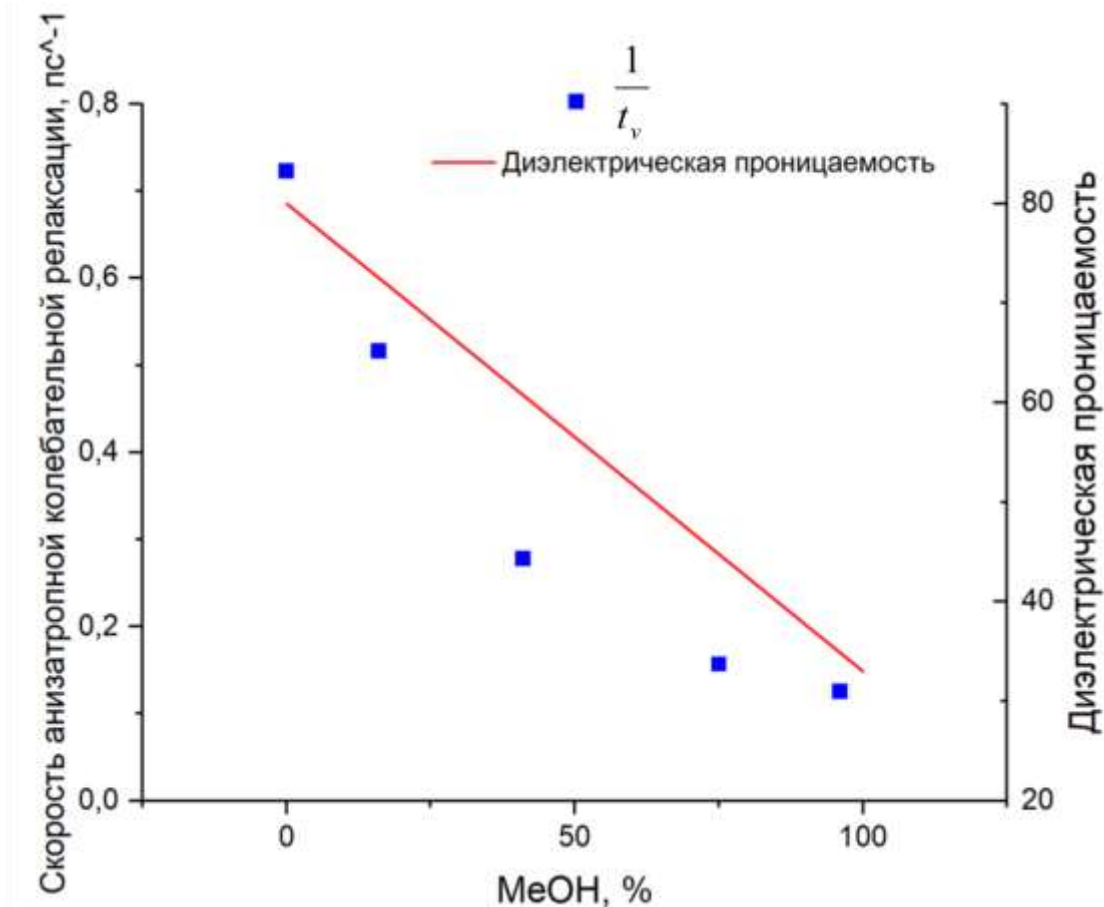


Рисунок 11. Скорость анизотропной колебательной релаксации NADH и диэлектрическая проницаемость в растворах вода-метанола

Время анизотропной колебательной релаксации NADH

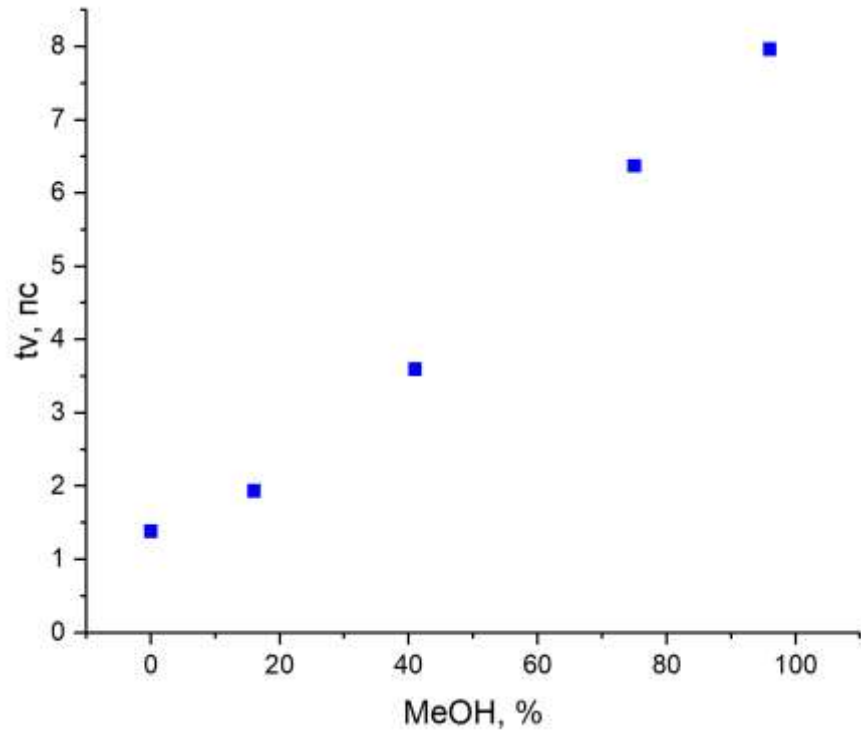


Рисунок 12. Время анизотропной колебательной релаксации NADH в растворах вода-метанол

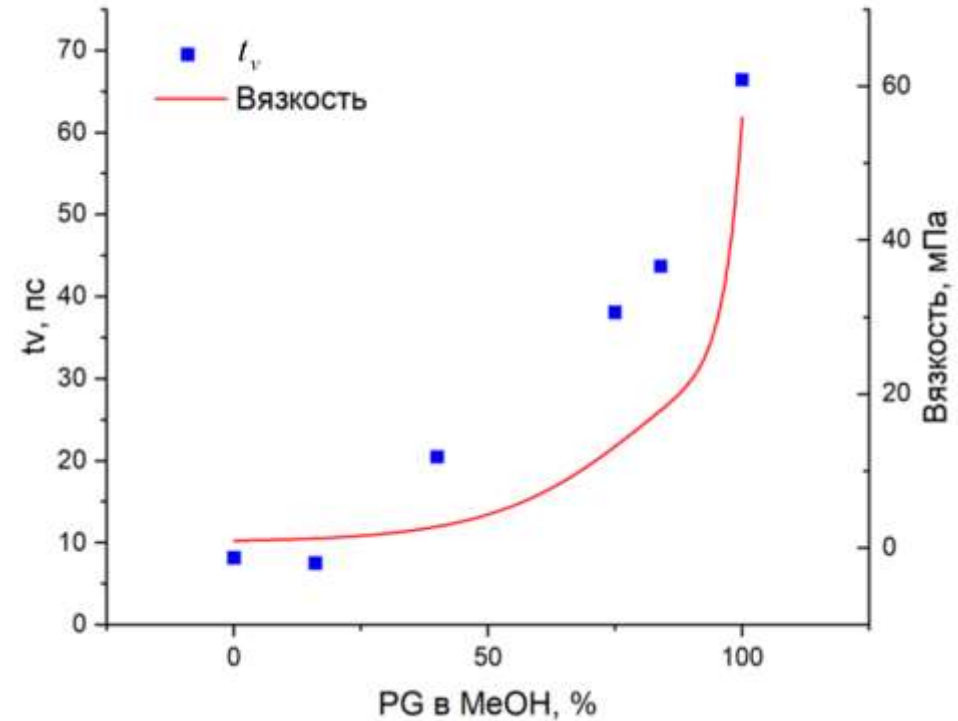


Рисунок 13. Время анизотропной колебательной релаксации NADH в растворах метанол-пропиленгликоль

Коэффициенты анизотропной колебательной релаксации NADH

$$A_0 \approx P_2(\cos \theta_0); A_1 \approx P_2(\cos \theta_\infty)$$

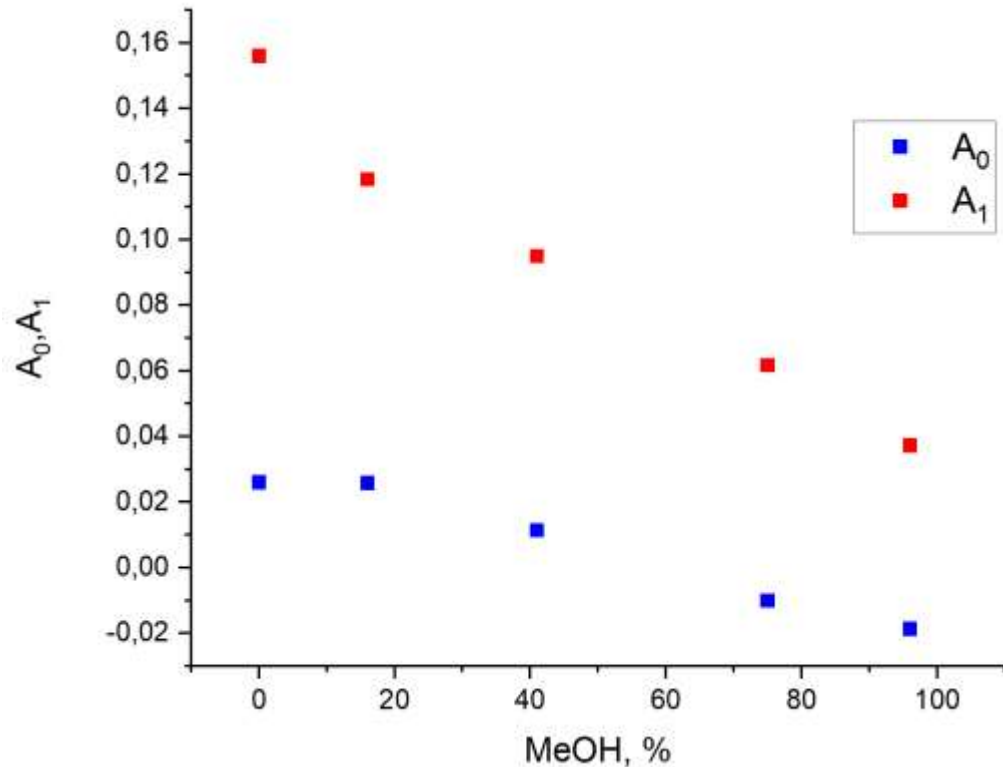


Рисунок 14. Коэффициенты анизотропной колебательной релаксации NADH в растворах вода-метанол

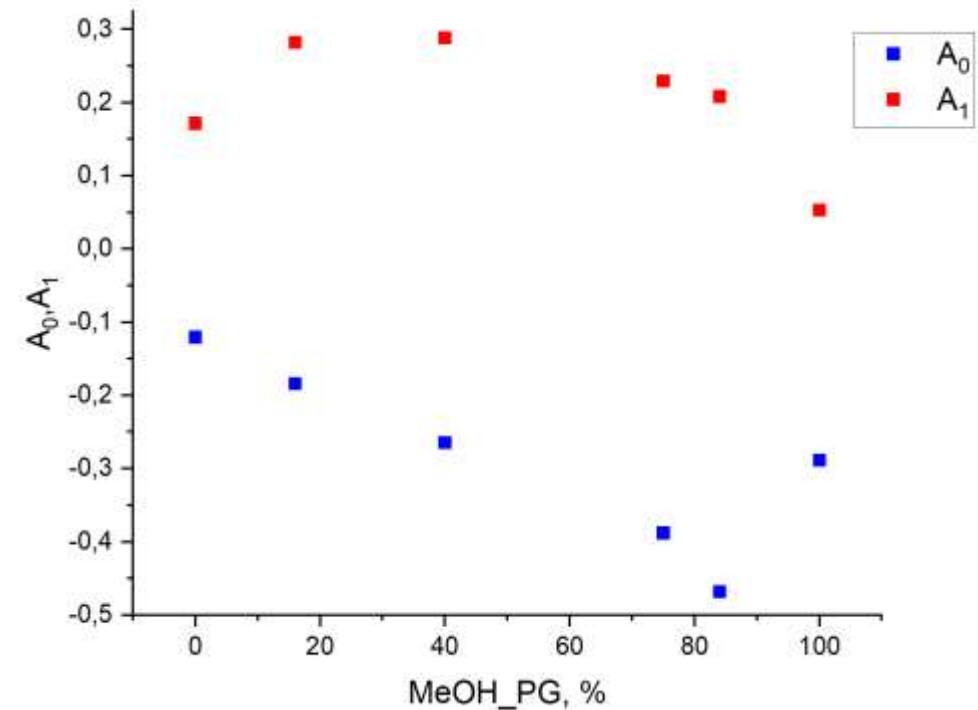


Рисунок 15. Коэффициенты анизотропной колебательной релаксации NADH в растворах метанол-пропиленгликоль

Выводы

- Разработана модель для аппроксимации экспериментальных сигналов линейного дихроизма.
- Впервые экспериментально были определены зависимости времени и коэффициентов анизотропной колебательной релаксации от состава растворов вода-метанол, метанол-пропиленгликоль.
- Установлено, что скорость анизотропной колебательной релаксации ведет себя также как диэлектрическая проницаемость раствора.
- Установлена зависимость времени анизотропной колебательной релаксации от вязкости раствора.

Спасибо за внимание!

Модель для выделения поглощения и аппроксимация экспериментальных кривых в спиртах

$$\Delta I = IRF \otimes (C\delta(t) + D\delta(t + t_0) + I_0[A_1 + (A_0 - A_1)e^{-t/\tau_v}]e^{-t/\tau_r} w(t))$$

Где I_0 - коэффициент, отвечающий за поглощение пробного луча

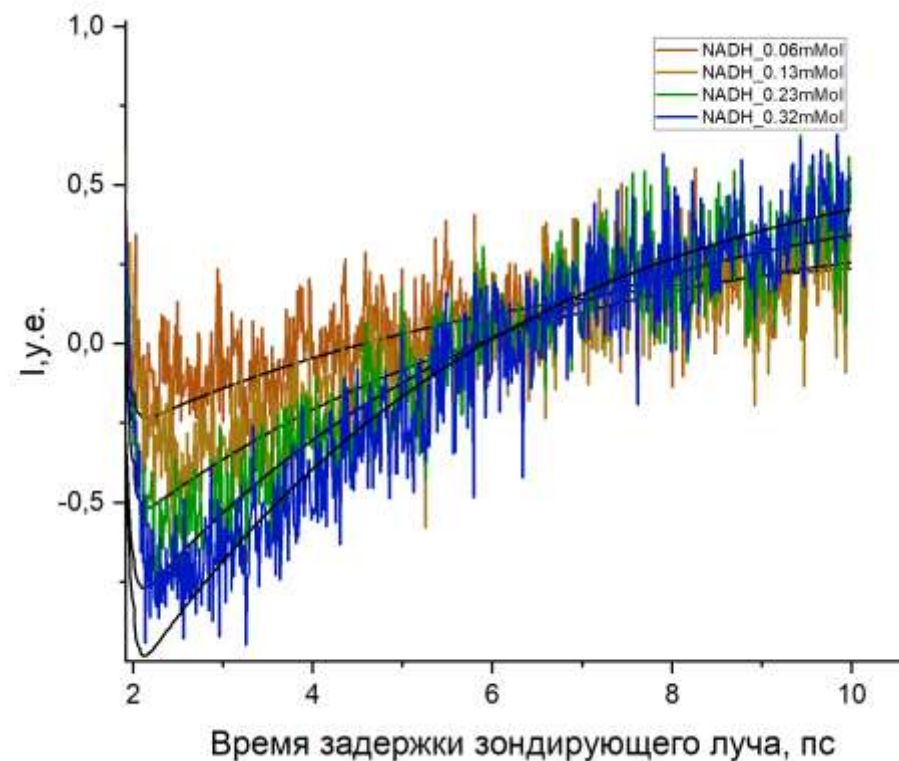


Рисунок 19. Сигналы NADH разной концентрации в метаноле

Зависимость поглощения от концентрации NADH

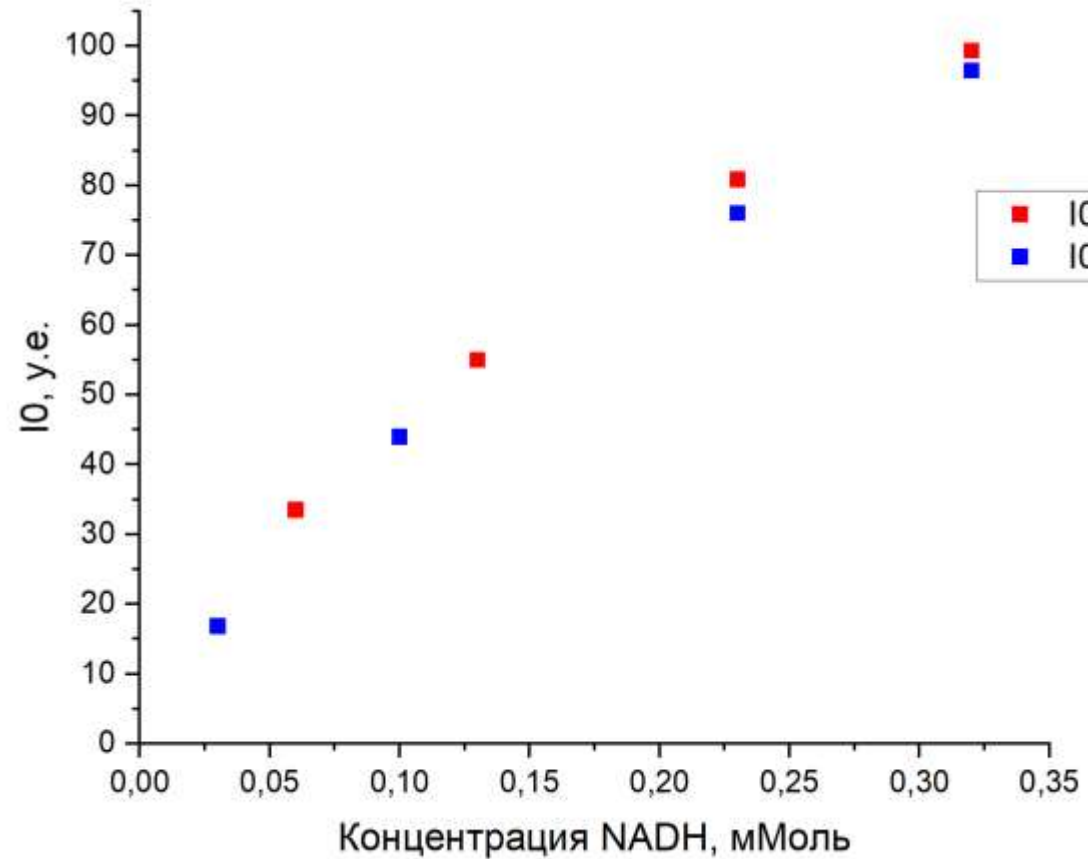
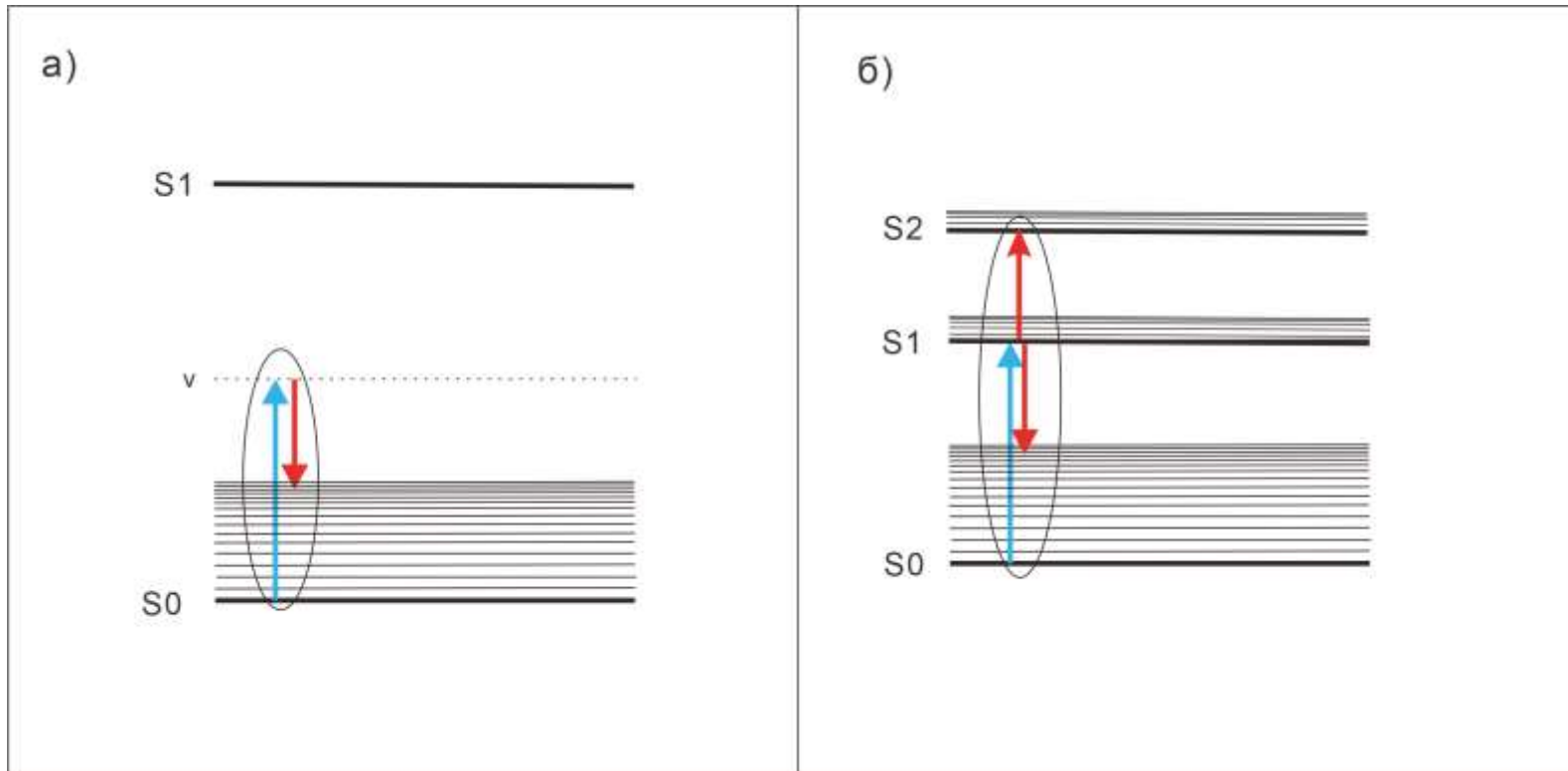


Рисунок 20. Поглощение от концентрации NADH

Пик сигнала



Стимулированное Рамоновское рассеяние