

после травматического повреждения и гемостаза, особенно в группе с применением препарата «Фибринолат».

Литература

1. Эволюция подходов в лечении закрытой травмы печени и селезёнки / А. А. Агеева, Р. Ю. Маер, Д. Н. Греков [и др.] // Проблемы социальной гигиены, здравоохранения и истории медицины. – 2022. – Т. 30, № 5. – С. 937–942.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МОЛЕКУЛЯРНОГО РОТОРА Th-C7 ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ВЯЗКОСТИ ОКРУЖЕНИЯ

Куколович Е.В.

Научный руководитель: Чумаченко Д.М.
Гродненский государственный медицинский университет

Актуальность. В современной науке остро стоит задача разработки и изучения люминесцентных маркеров для широкого спектра применений. К этим маркерам предъявляются высокие требования, включая селективность, чувствительность и стабильность. В частности, для использования в биологических и молекулярных исследованиях, они должны обладать способностью проникать и специфически связываться с целевыми участками. Активный интерес к этой области, подтверждаемый ростом числа публикаций, подчеркивает актуальность подобных исследований.

Цель. Исследование влияния вязкости растворителя на спектры флуоресценции красителя Th-C7, обладающего признаками молекулярного ротора. Определение зависимости квантового выхода красителя от вязкости растворителя.

Материалы и методы. Математическая обработка результатов проводилась с использованием пакета Origin 6.0 Для исследования флуоресценции использовали спектрофлуориметр CM2203 (СОЛАР, РБ). В исследовании использовалась молекула красителя N-(3-карбоксипропил)-бензиндольного монокарбостирила, приведенная на рисунке 1.

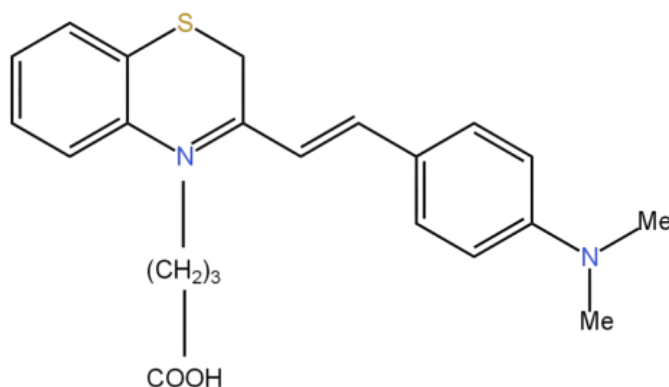


Рисунок 1. – Структурная формула соединения Th-C7

Результаты и их обсуждение. Квантовый выход молекулярных роторов является весьма удобным индикатором свойств микроокружения. Поскольку молекула Th-C7 проявляет свойства молекулярного ротора, ожидается, что ее квантовый выход должен изменяться в зависимости от вязкости растворителя, в котором он находится. На рисунке 2 приведена зависимость интенсивности флуоресценции от температуры растворителя.

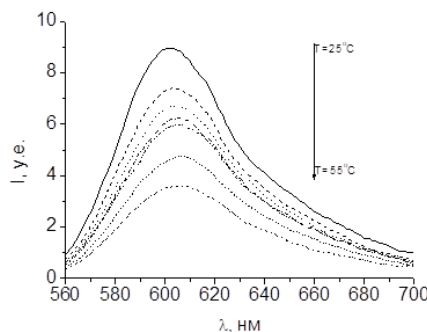


Рисунок 2. – Спектры флуоресценции Th-C7 в глицерине в зависимости от температуры глицерина

Видно, что интенсивность флуоресценции имеет чёткую зависимость, что согласуется с механизмом действия молекулярных роторов. После поглощения кванта энергии молекула переходит в неравновесное, возбужденное Франка-Кондона состояние, после которого почти мгновенно релаксирует в равновесное возбужденное состояние. В случае вязкого полярного растворителя, такого как глицерин, релаксация возбужденного и осинового уровней энергии происходит как за счет торсионного (вращательного) движения, так и за счет сольватации, причем скорости этих процессов сравнимы со скоростью излучательного перехода.

Согласно уравнению Фёрстера-Хоффмана квантовый выход для молекулярных роторов описывается уравнением:

$$\Phi_f = z\eta^\alpha$$

где: Φ_f – квантовый выход,

η – вязкость,

α и z – константы.

Как можно увидеть из уравнения есть связь между величиной квантового выхода и вязкостью. Так же можно рассмотреть квантовый выход как соотношение между константами скоростей излучательного и не излучательного переходов.

$$q_f = \frac{k_r}{k_{nr} + k_r} = k_r \tau_f$$

где: q_f – квантовый выход флуоресценции,

τ_f – время затухания флуоресценции,

k_r – константа скорости излучательного перехода,

k_{nr} – константа скорости безызлучательного перехода.

В данном случае скорость безызлучательного перехода будет определяться скоростью торсионной релаксации, которая зависит от вязкости и жесткости среды, в которой находится исследуемое вещество. Объединяя эти два выражения, можно получить модифицированное уравнение Фёрстера-Хоффмана, из которого получим зависимость времени затухания флуоресценции в зависимости от температуры.

$$\tau_f = \frac{z\eta^\alpha}{k_r}$$

Из таблицы 1 видно, что с ростом температуры квантовый выход снижается, что соответствует ранее приведенному уравнению.

Таблица 1. – Квантовый выход флуоресценции Th-C7 в глицерине, в зависимости от температуры

t, °C	qфл.
25	0,231
30	0,194
35	0,169
40	0,155
45	0,161
50	0,126
55	0,090

Также при увеличении температуры вязкость глицерина постепенно уменьшается, что важно для молекулярного ротора, поскольку способствует ускорению перехода из нескрученного в скрученное не флуоресцирующее состояния. Чем быстрее происходит этот переход, тем меньше молекул успевают излучить до перехода в не флуоресцирующее TICT-состояние, в котором молекула не излучает, а происходит перераспределение электронной плотности вследствие изменений в основном состоянии [1].

Зависимость вязкости растворителя от температуры также можно описать следующим уравнением:

$$\frac{1}{\eta} = \frac{1}{\eta_0} \exp\left(\frac{E_a}{k_B T}\right)$$

где E_a – энергия активации вязкого течения.

При этом можно записать следующее выражение:

$$\ln\left(\frac{\frac{1}{q} - 1}{T}\right) \sim \frac{E_a}{k_B T}$$

Энергия активации, рассчитанная по углу наклона, составляет $E_a =$

1588 см⁻¹, причем энергия активации глицерина равна примерно 4700. Различие, вероятно, вызвано тем, что использовался глицерин 97%, а не 99% [2]. Как видно из рисунка 3 зависимость является линейной.

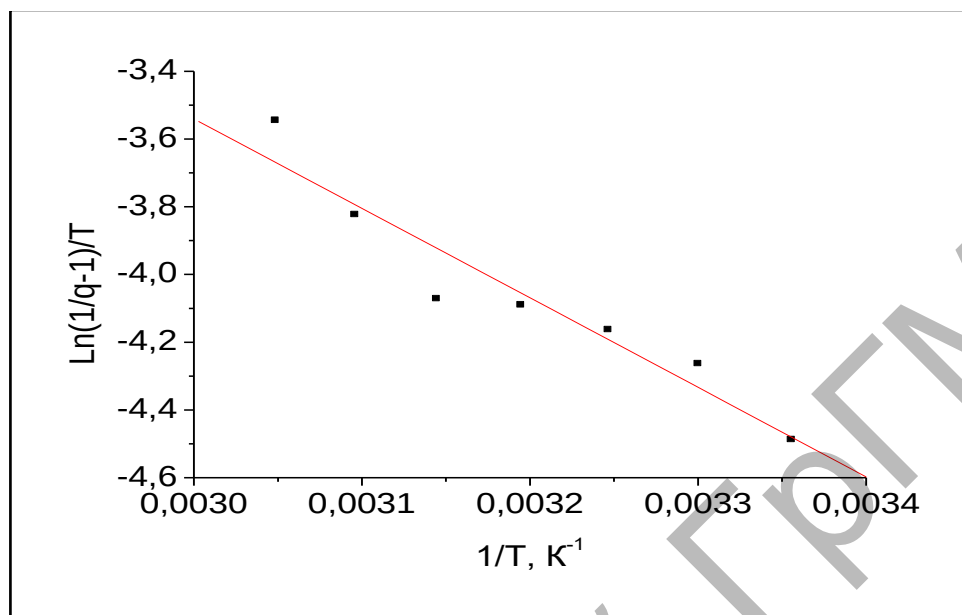


Рисунок 3. – Зависимость $\ln \left(\frac{1-q}{T} \right)$ от $\frac{1}{T}$ для Th-C7 в глицерине

Вывод. Проведенное исследование показало, что краситель на основе тиюфлавина Т Th-C7, обладает ярко выраженными свойствами молекулярного ротора. Проявляется сильная зависимость как интенсивности флуоресценции от вязкости, так и времени затухания с квантовым выходом. Данная зависимость определена и приведена в работе. Отраженная зависимость соответствует выбранной модели на основе уравнения Фёрстера-Хоффмана. В ходе работы так же рассчитан квантовый выход соединения относительным способом. Полученные данные о спектральных характеристиках соединения являются обнадеживающими для применения в медицинских целях и послужат дальнейшему исследованию данного красителя.

Литература

1. Спектральные проявления процессов агрегации и встраивания в амилоидные фибриллы анионного производного тиюфлавина / А. А. Маскевич, Е. И. Плигин, А. А. Луговский [и др.] // Молекулярные, мембранные и клеточные основы функционирования биосистем. К 100-летию белорусской академической науки : тез. докл. Междунар. науч. конф., Пятнадцатого съезда Белорус. общ. об-ния фотобиологов и биофизиков, Минск, 15–17 июня 2022 года / редкол.: И. Д. Волотовский (гл. ред.) [и др.]. – Минск, 2022. – С. 64.
2. Чумаченко, Д. М. Флуоресцентные свойства новой производной тиюфлавина Т Th-C7 в растворителях различной полярности / Д. М. Чумаченко ; науч. рук. А. А. Маскевич // Физика конденсированного состояния : материалы XXXIII Междунар. науч.-практ. конф. аспирантов, магистрантов и студентов, Гродно, 3–4 апр. 2025 г. / Гродн. гос. ун-т им. Я. Купалы, физ.-техн. фак. ; гл. ред. Г. А. Гачко ; редкол.: Г. А. Гачко [и др.]. – Гродно, 2025. – С. 108–110.