

## КОНФОРМАЦИОННЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ NADH В ГИДРАТНОЙ ОБОЛОЧКЕ ПОД ВЛИЯНИЕМ СЛАБОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

© 2015 г. М.А. Заболотный, Ю.М. Барабаш, Н.П. Кулиш,  
О.П. Дмитренко, М.О. Кузьменко

*Физический факультет Киевского национального университета им. Т. Шевченко,  
03022, просп. Академика Глушкова, 4, Украина*

*E-mail: zabolotny@univ.kiev.ua*

Поступила в редакцию 26.02.14 г.

После доработки 15.05.14 г.

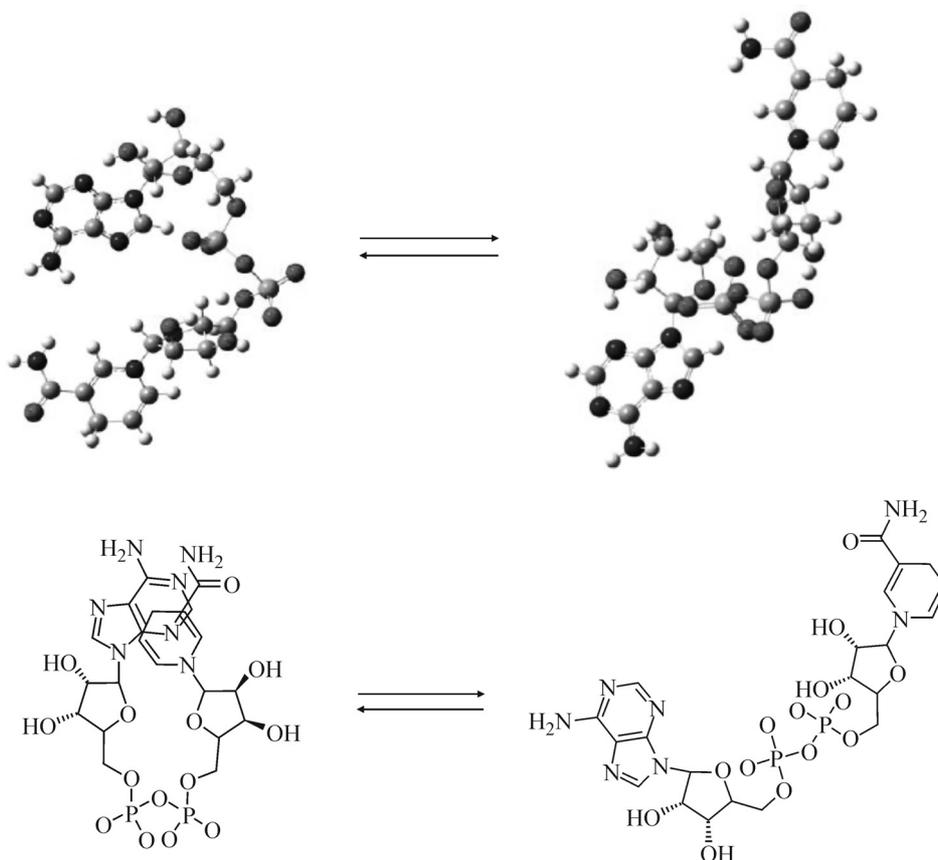
Исследованы спектры капиллярных волн бидистиллированной воды и водного раствора NADH, а также их динамика под воздействием электромагнитного излучения миллиметрового диапазона при разных значениях пространственной частоты поверхностной волны  $k$ .

*Ключевые слова: NADH, оптическое гетеродинамирование, капиллярные волны, вязкость, конформации полимеров.*

В настоящее время создание молекулярных и биологических тестов достаточно актуально. Востребованность технологий тестирования обусловлена разнообразными техногенными загрязнениями окружающей среды и обусловленной этим необходимостью оперативного контроля ее параметров, развитием новых фармацевтических, молекулярных нанотехнологий, которые повышают требования к химической чистоте и структурной однородности создаваемых изделий. Перспективными в этом направлении показали себя технологии с применением биологических молекул, избирательные свойства которых позволяют использовать их в качестве первичных рецепторов изменений контролируемых параметров.

К числу таких первичных биомолекулярных рецепторов можно отнести никотинамидадениндинуклеотид (NADH) – кофермент, присутствующий во всех живых клетках, входящий в состав ферментов группы дегидрогеназ, катализирующих окислительно-восстановительные реакции, и выполняющий функцию переносчика электронов и водорода, которые принимает от окисляемых веществ. Было доказано [1–4], что реакционные, люминесцентные и транспортные свойства молекул NADH зависят от их конформационного состояния, а также установлено [1,3] наличие как минимум двух конформационных состояний NADH в нейтральных водных растворах. Одна из конформаций молекулы является открытой (рис. 1), ее скелет (рибоза – дифосфатрибоза) вытянут, другая конформация – закрытой (скелет свернут, а два гетероцикла, адениновый и нико-

тинамидный, расположены параллельно и взаимодействуют друг с другом). Таким образом, в зависимости от конкретного типа процесса с участием молекул NADH его скорость существенно будет определяться распределением молекул NADH по конформационным состояниям. Так, при связывании в нуклеотидном ингибиторном центре гликогенфосфорилазы принимают участие молекулы NADH закрытой (свернутой) конформации [4]. Изменение распределений конформационных состояний молекул NADH в водной среде может быть достигнуто при воздействии на молекулы образца электромагнитным излучением в области его поглощения [8]. В случае реализации такой схемы открывается возможность использования NADH в качестве люминесцентных датчиков предраковых патологий [2]. Таким образом, исследование закономерностей фотостимулированных конформационных переходов молекул NADH представляет как теоретический [5,6], так и прикладной интерес. Отметим, что в ряде работ, использующих анализ реологических характеристик водных растворов NADH для определения закономерностей динамики конформационных характеристик NADH, использовалось условие малости толщины слоя жидкости или учет только главных членов разложения дисперсионных уравнений в приближении слабвязкой жидкости [8]. Эти ограничения приводили к погрешностям, сравнимым по величине с ожидаемыми эффектами влияния экспонирования электромагнитными волнами, осо-



**Рис. 1.** Переход из свернутой в развернутую конформацию молекулы NADH. Энергетически выгодный переход происходит между двумя хромофорами.

бенно в области малых длин (менее 0,03 см) капиллярных волн на поверхности образца, где влияние границы жидкости наиболее существенно. В настоящей работе проанализировано поведение капиллярных поверхностных волн, длина которых не превышает 0,02 см, что позволяет определить влияние облучения в приповерхностном слое такой же толщины.

Целью настоящей работы является исследование влияния слабого электромагнитного излучения миллиметрового диапазона на реологические характеристики приповерхностного слоя бидистиллированной воды, а также излучение спектральных и геометрических характеристик конформеров молекул NADH в гидратной оболочке, находящихся в водном растворе вблизи его границы с воздушной средой, и их зависимости от частоты внешнего слабого электромагнитного излучения.

Исследование конформационного состояния молекул NADH в работе основано на использовании зависимости реологических характеристик жидкой среды, содержащей растворенные в ней твердые наночастицы фиксированного объема от формы наночастиц [5–8]. Данные об особенностях динамики реологических парамет-

ров водных растворов NADH были получены с помощью исследования зависимости частоты колебаний от значения волнового вектора капиллярных волн на свободной поверхности образца. Такой метод дает возможность определять значения вязкости и поверхностного натяжения при различных толщинах эффективного объема (т.е. области локализации непрерывных линий тока частиц) деформируемой среды. Частоту колебаний капиллярных волн определяли с помощью метода оптического гетеродинамирования [7,8].

При формулировке модели учтено, что размеры пространственных неоднородностей, определяемые размерами молекул NADH, намного меньше длины поверхностной капиллярной волны. Это позволяет использовать для описания особенностей кинетики капиллярных волн эффективную вязкость, которая в случае реализации ньютоновского характера течения деформируемой жидкой суспензии существенно зависит от формы взвешенных частиц [10]. Так, в случае эллипсоидальной формы частицы для описания вязкости суспензии можно использовать следующую параметризацию [10]:

$$v = v_0(1 + \gamma\varphi), \quad (1)$$

где  $\varphi$  – объемная доля взвешенных частиц,  $\gamma$  – параметр, зависящий от формы (конформационного состояния) взвешенной частицы. (Отметим, что значение объемной доли взвешенных частиц зависит от толщины приповерхностного слоя растворителя – в данном случае воды). Из выражения (1) следует, что изменение вязкости жидкой суспензии под действием внешних воздействий может свидетельствовать как об изменении геометрической формы твердых частичек суспензии при допущении их эллипсоидальной формы, так и о возможном структурировании [11] растворителя или изменении характеристик распределенных в нем бабстонов [12].

## МЕТОДЫ

Динамика свободной поверхности жидкости определяется флуктуационно-диссипативными процессами [9,10], которые обуславливают возникновение тепловых гидродинамических флуктуаций формы свободной поверхности жидкости, характеристики которых существенно зависят от свойств среды. Возникающие флуктуационные деформации свободной поверхности образца можно рассматривать [10] как результат суперпозиции распространяющихся по ней поверхностных капиллярных волн. Динамика таких волн достаточно хорошо [9,13] описывается системой уравнений Навье–Стокса и непрерывности, которую в случае малых и пологих деформаций свободной поверхности слоя жидкости (амплитуда деформаций ( $h$ ) намного меньше пространственной длины волны ( $\lambda$ )) можно линеаризовать и при двумерном характере движения деформируемой среды представить в виде [13]:

$$\frac{\partial v_x(x,y,t)}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p(x,y,t)}{\partial x} + v\Delta v_x(x,y,t), \quad (2)$$

$$\frac{\partial v_y(x,y,t)}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p(x,y,t)}{\partial y} + v\Delta v_y(x,y,t), \quad (3)$$

$$\frac{\partial v_x(x,y,t)}{\partial x} + \frac{\partial v_y(x,y,t)}{\partial y} = 0. \quad (4)$$

Здесь использованы следующие обозначения:  $v_x(x,y,t)$ ,  $v_y(x,y,t)$  – компоненты вектора скорости частиц жидкости в точке с координатами  $x$ ,  $y$  в момент времени  $t$ ,  $p(x,y,t)$  – гидродинамическое давление,  $v$  – кинематическая вязкость жидкости,  $\rho$  – ее плотность. Ось  $OY$  направлена по нормали к свободной поверхности деформируемой среды, а ось  $OX$  – расположена на ее свободной поверхности.

В качестве граничных условий используются:

$$\frac{\partial v_x(x,y,t)}{\partial y} \Big|_{y=h(x,t)} + \frac{\partial v_y(x,y,t)}{\partial x} \Big|_{y=h(x,t)} = 0, \quad (5)$$

$$P(x,y,t) \Big|_{y=h(x,t)} - 2\rho v \frac{\partial v_y(x,y,t)}{\partial y} \Big|_{y=h(x,t)} + T \frac{\partial^2 h(x,t)}{\partial x^2} = 0 \quad (6)$$

$$h(x,t) = \int v_y(x,y=0,t) dt, \quad (7)$$

где  $T$  – коэффициент поверхностного натяжения. Скорость частиц жидкости должна стремиться к нулю при удалении от свободной границы (при  $y \rightarrow -\infty$ ), что соответствует уменьшению влияния поверхности при удалении от нее. Решение уравнений (2)–(7) можно представить в следующем виде:

$$v_x(x,y,t) = kA \left[ -\exp(ky) + 2vk \frac{\sqrt{k^2 + \frac{\alpha}{v}}}{2k^2v + \alpha} \exp\left(y \sqrt{k^2 + \frac{\alpha}{v}}\right) \right] \exp(\alpha t) \sin(kx), \quad (8)$$

$$v_y(x,y,t) = kA \left[ -\exp(ky) - 2vk \frac{\sqrt{k^2 + \frac{\alpha}{v}}}{2k^2v + \alpha} \exp\left(y \sqrt{k^2 + \frac{\alpha}{v}}\right) \right] \exp(\alpha t) \cos(kx), \quad (9)$$

$$p(x,y,t) = -\rho\alpha A \exp(ky) \exp(\alpha t) \cos(kx). \quad (10)$$

Здесь  $A$  – параметр, который не может быть определен, что математически обуславливается однородным характером сформулированной задачи, а физически – некаузальным характером флуктуационных сил, являющихся причиной

возникновения волновых возмущений свободной поверхности жидкости. Использование уравнений (6), (9), (10) приводит к следующему дисперсионному уравнению, являющемуся мо-

дификацией соответствующего известного соотношения [13]:

$$1 + 2vk^2\alpha^{-1} \left( 1 + \frac{2vk^2\alpha^{-1}\sqrt{1 + \frac{\alpha}{k^2v}}}{1 + 2k^2v\alpha^{-1}} \right) + \frac{2Tk^3}{\alpha^2\rho} \left( 1 - \frac{2k^2v\alpha^{-1}}{1 + 2k^2v\alpha^{-1}} \right) = 0, \quad (11)$$

определяющего зависимость комплексной частоты  $\alpha$  от волнового вектора  $k$ . Уравнение (11) не имеет точного аналитического решения, и поэтому оно было модернизировано в приближении слабовязкой жидкости, при выполнении условия  $|\alpha^{-1}|vk^2 \ll 1$  с учетом четвертого порядка малости. (Необходимость обеспечения такой точности обуславливается малостью дли-

ной волны поверхностных капиллярных волн [13].)

$$1 + \frac{Tk^3}{\rho\alpha^2} + \frac{2}{\alpha}k^2 \left[ 1 - \frac{Tk^3}{\alpha^2\rho} \right]v + 4 \left( \frac{k^2v}{\alpha} \right)^{3/2} + 4 \frac{Tk^7v^2}{\alpha^4\rho} = 0. \quad (12)$$

Рассматривая два последних слагаемых в правой части уравнения (12) как малую добавку и учитывая только ее первый порядок, получаем три корня уравнения (12) – один действительный положительный корень и два комплексных. Первый корень соответствует неограниченному возрастанию амплитуды поверхностной деформации и не имеет физического смысла, два остальных допускают параметризацию:

$$\alpha_{2,3} = \left( \left( -\frac{1}{6} \right) \left( \frac{k \left( 36Tk^3v - 8k^2v^3\rho + (3)\frac{3}{2} \sqrt{\frac{Tk(T^2 + 44Tk^2v^2\rho - 16k^2v^4\rho^2)}{\rho}} \right)}{\rho} \right)^{\frac{1}{3}} - \frac{2}{3}kv \right) k + \frac{k^2(3T - 4kv^2\rho)}{6 \left( \frac{k \left( 36Tk^3v - 8k^2v^3\rho + (3)\frac{3}{2} \sqrt{\frac{Tk(T^2 + 44Tk^2v^2\rho - 16k^2v^4\rho^2)}{\rho}} \right)}{\rho} \right)^{\frac{1}{3}}} \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \left( \frac{k^2 \left( 36Tk^3v - 8k^2v^3\rho + (3)\frac{3}{2} \sqrt{\frac{Tk(T^2 + 44Tk^2v^2\rho - 16k^2v^4\rho^2)}{\rho}} \right)}{\rho} \right)^{\frac{1}{3}} + \frac{k^2(3T - 4kv^2\rho)}{6 \left( \frac{k \left( 36Tk^3v - 8k^2v^3\rho + (3)\frac{3}{2} \sqrt{\frac{Tk(T^2 + 44Tk^2v^2\rho - 16k^2v^4\rho^2)}{\rho}} \right)}{\rho} \right)^{\frac{1}{3}}}, \quad (13)$$

где  $I$  – мнимая единица. Из уравнения (13) видно, что комплексные корни уравнения (12)  $\alpha_2$  и  $\alpha_3$  обладают следующим свойством:

$$\Gamma \equiv \text{Re}(\alpha_2) = \text{Re}(\alpha_3), \quad \omega_k \equiv \text{Im}(\alpha_2) = -\text{Im}(\alpha_3). \quad (14)$$

Это соответствует тому, что колебательные процессы, которые они описывают, имеют одинаковый декремент затухания ( $\text{Re}(\alpha_2)$ ) и одинаковую частоту колебаний ( $\omega_k$ ), зависящую от коэффициента поверхностного натяжения, вязкости среды и волнового вектора  $k$ . Использовать выражение (14) непосредственно для определения вязкости среды затруднительно в связи с существенно нелинейным характером зависимости  $v = v(\omega)$ . Поэтому вместо выражения (14) было использовано его разложение в ряд

по безразмерной вязкости с учетом членов четвертого порядка малости:

$$\alpha_{2,3} = \left[ \frac{\sqrt{k^3T}}{\rho} + 2v^2\sqrt{\frac{k^5\rho}{T}} + 0(v^4) \right] \pm \left[ -2kv^2 + \frac{4k^3v^2}{T} + 0(v^5) \right]. \quad (15)$$

Отметим, что роль поправочных членов в значении  $\alpha_{2,3}$  возрастает при уменьшении  $T$ , что делает их учет необходимым. Соотношения (7), (9), (14), (15) определяют функциональный вид амплитуды рельефа, образующегося на свободной поверхности образца:

$$h(x,t) = h(k,t)\cos(kx), \quad (16)$$

где

$$h(k,t) = \left| kA(\Gamma + I\omega_k)^{-1} \left[ 1 - 2 \frac{vk^2}{(\Gamma + I\omega_k)} \frac{\sqrt{1 + \frac{(\Gamma + I\omega_k)}{vk^2}}}{(1 + 2k^2v(\Gamma + I\omega_k)^{-1})} \right] \right| \exp(-\Gamma t \pm I\omega_k t). \quad (17)$$

Для определения величины  $A$  (и тем самым количественного значения амплитуды волн) необходима [10,14] дополнительная информация о механизме возбуждения поверхностных волн. При отсутствии этой информации для определения реологических характеристик среды будет использован учет влияния колеблющихся капиллярных волн на значение частоты рассеянного на свободной поверхности жидкости света.

При экспериментальном исследовании динамики капиллярных волн на свободной поверхности жидкости учтено [9], что при освещении поверхности с флуктуирующим на ней рельефом с амплитудой  $h(k,t)$  интенсивность ( $J$ ) света, рассеянного в телесном угле  $\Omega$ , определяется величиной среднего среднеквадратичного смещения элемента колеблющейся поверхности жидкости:

$$\langle h(k,t)h^*(k,t + \tau) \rangle = \frac{k^2 A^2}{\alpha_{2,3}^2 \gamma} \left[ 1 - 2 \frac{vk^2}{\alpha_{2,3}} \frac{\sqrt{1 + \frac{\alpha_{2,3}}{vk^2}}}{(1 + 2k^2v\alpha_{2,3}^{-1})} \right]^2 (1 - \exp(-\gamma)) [\exp(-\Gamma\tau - I\omega_k\tau) + \exp(-\Gamma\tau + I\omega_k\tau)]. \quad (19)$$

Из уравнения (19) следует, что произвольное значение параметра  $\gamma$  не влияет на функциональный характер  $\langle h(k,t)h^*(k,t + \tau) \rangle$  и общность полученных выражений ввиду наличия неопределенного значения коэффициента пропорциональности  $A$ .

В соответствии с теоремой Винера–Хинчина [14] спектральная плотность мощности стационарного случайного процесса является преобразованием Фурье по  $\tau$  (сопряженная  $\tau$  переменная  $\omega$ , соответствующая частоте колебаний выбранной гармоники капиллярных волн) от соответствующей корреляционной функции. Следовательно, угловое распределение спектральной плотности мощности ( $P(\omega, \omega_k, \Gamma)$ ) капиллярных волн на поверхности несжимаемой ньютоновской жидкости будет пропорционально преобразованию Фурье-выражения (19):

$$P(\omega, \omega_k, \Gamma) \propto \left( \frac{1}{(\omega_k - \omega)^2 + \Gamma^2} + \frac{1}{(\omega_k + \omega)^2 + \Gamma^2} \right). \quad (20)$$

Из выражения (20) видно, что  $P(\omega, \omega_k, \Gamma)$  представима в виде суммы двух компонент лоренцовского вида. После определения величины

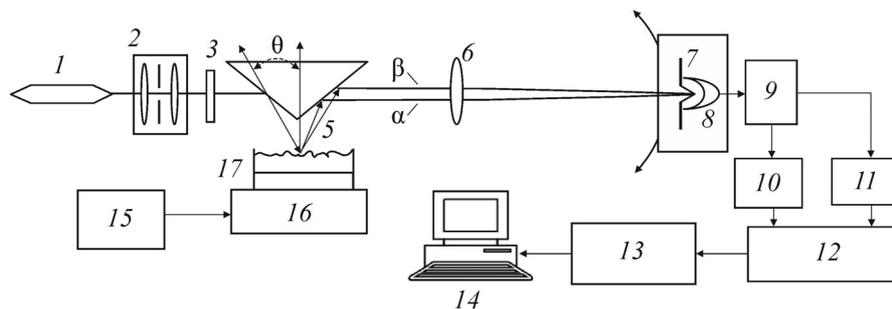
$$\frac{dJ}{d\Omega} = J_0 \frac{q^4}{(4\pi)^2} \langle h(k,t)h^*(k,t + \tau) \rangle_{\tau=0} \cos^3(\theta), \quad (18)$$

где  $J_0$  – интенсивность отраженного излучения, определяемая для плоской поверхности с помощью формул Френеля,  $\theta$  – угол падения света,  $q$  – волновое число падающего света, знак  $\langle \rangle$  обозначает проведение операции усреднения по поверхности образца. При вычислении автокорреляционной функции  $\langle h(k,t)h^*(k,t + \tau) \rangle$  был использован экспоненциальный спад  $h(k,t)$  как функции  $t$ , что позволило считать  $h(k,t)$  сосредоточенной на отрезке  $t \in \left[ 0, \frac{\gamma}{\Gamma} \right]$ , где  $\gamma$  – произвольное число больше единицы. Используя это приближение и уравнение (17), получаем следующее выражение для  $\langle h(k,t)h^*(k,t + \tau) \rangle$ :

резонансной частоты  $\omega_k$  и полуширины пика  $\Gamma$ , значения вязкости среды и коэффициента поверхностного натяжения определяются с помощью формул (13), (14).

Измерения параметров проводили с помощью метода оптического гетеродинамирования. Блок-схема установки представлена на рис. 2.

Исходный лазерный пучок под малым углом  $\theta$  падает на поверхность исследуемого раствора, сохраняя гауссов профиль. Поляризатор 3 устанавливает электрический вектор электромагнитного излучения параллельно поверхности раствора. Падающий свет зеркально отражается поверхностью раствора (опорный пучок  $\alpha$ ), рассеиваясь на Фурье-компонентах поверхностных волн (измерительный пучок  $\beta$ ). Интенсивность света, рассеянного поверхностью раствора (пучок 5) достаточна лишь в пределах узкого диапазона углов ( $\partial\theta = 10$  мрад) около направления опорного пучка  $\alpha$ , что позволяет измерять капиллярные волны с пространственной длиной волны в диапазоне  $10 \div 100$  лин/мм. Выбор капиллярной волны с заданной пространственной частотой осуществляется путем перемещения фотоприемника 8 в плоскости, перпендику-



**Рис. 2.** Блок-схема установки по исследованию спектров капиллярных волн: 1 – лазер ЛГ-79, 2 – коллиматор, 3 – поляризатор, 4 – отражающая призма, 5 – лучи лазера ( $\alpha$   $\beta$ ), отраженные от поверхности раствора, 6 – фурие-линза, 7 – диафрагма, 8 – фотоприемник с двумя детекторами, 9 – предварительный усилитель, 10 – активный заграждающий фильтр высоких частот (пропускание  $0 \div 200$  Гц), 11 – активный полосовой фильтр (полоса пропускания  $300 \div 10000$  Гц), 12 – электронный делитель, 13 – аналогоцифровой преобразователь (10 бит,  $\pm 5$  В,  $\tau = 40$  мкс), 14 – персональный компьютер, 15 – блок питания терморегулятора, 16 – устройство термостатирования кюветы раствора, 17 – кювета с раствором.

лярной к направлению опорного пучка. Опорный пучок  $\alpha$  попадает на фотоприемник 8 без изменения своей частоты, смешивается в дальней волновой зоне с измерительным пучком  $\beta$ , частота которого изменяется в соответствии с эффектом Доплера. На поверхности фотоприемника с квадратичной характеристикой эти пучки смешиваются, образуя динамическую интерференционную картину. Фотоприемником 8 измерялась интенсивность опорного пучка, амплитуда биений частот пучков ( $\alpha$   $\beta$ ) света, значение частоты биений и их зависимость от угла рассеяния.

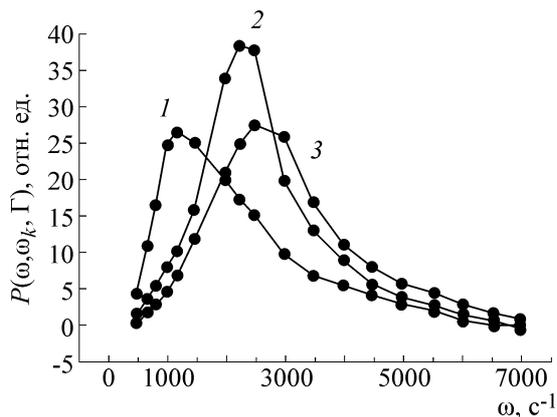
В качестве исследуемых образцов использовали бидистиллированную воду и приготовленный на ней раствор NADH. Концентрация NADH не превышала пяти весовых процентов – это приводило к независимости характеристик спектров капиллярных волн от концентрации NADH. Образцы предварительно выдерживали в темноте на установке в течение двух часов. Оптическая схема установки была собрана на голографическом столе с виброзащитным основанием. Мощность лазера составляла 7,5 мВт на длине волны 630 нм, диаметр луча на поверхности жидкости составлял  $3 \cdot 10^{-3}$  м (на уровне 0,7 максимальной интенсивности). Фокусирующая линза имела фокусное расстояние 1 м, диаметр луча в области перетяжки составлял  $0,5 \cdot 10^{-3}$  м. Область перетяжки находилась на расстоянии 1,5 м от поверхности жидкости. Фотоприемное устройство было собрано на базе двух фотодиодов ФД-256, с микросхемами КР544УД1А и апертурой  $0,5 \cdot 10^{-3}$  м. Измерительная кювета представляла собой медный цилиндр высотой  $15 \cdot 10^{-3}$  м, с внешним диаметром  $35 \cdot 10^{-3}$  м. Устройство термостатирования кюветы было собрано на элементе Пельтье и обес-

печивало измерение абсолютного значения температуры с точностью  $\pm 0,25^\circ\text{C}$  в диапазоне от 4 до  $38^\circ\text{C}$ . С фотоприемника 8 через фильтры 10, 11 сигнал поступал на делитель. На вход числителя цифрового делителя поступал сигнал, пропорциональный интенсивности интерференционной картины. На вход знаменателя цифрового делителя поступал сигнал, пропорциональный интенсивности света в опорном пучке. Таким образом, выполнялась нормировка сигнала для разных фурие-компонент поверхностных волн раствора. Аналого-цифровой преобразователь 13 служил для оцифровки сигнала и ввода его в персональный компьютер 14. Алгоритм обработки сигнала заключался в стандартном автокорреляционном анализе сигнала, использовании быстрого фурие-преобразования и получении спектра плотности мощности для разных фурие-компонент поверхностных волн раствора. В качестве источника электромагнитного излучения использовали генератор Г-142 с гибким диэлектрическим волноводом и He-Ne-лазер (ЛГ-79) с мощностью излучения 15 мВт. Мощность электромагнитного излучения на выходе волновода составляла 1 мВт на частоте 60 ГГц.

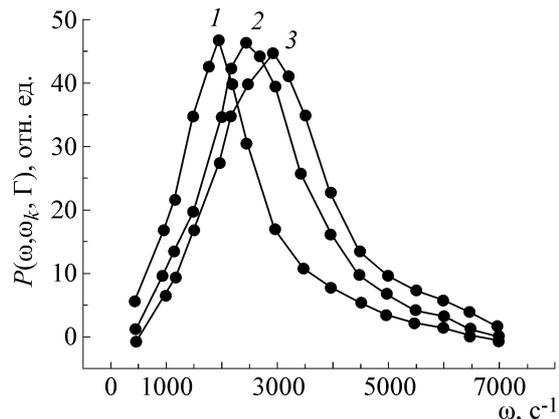
## РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Исследовали спектры капиллярных волн бидистиллированной воды и водного раствора NADH, а также их динамику под воздействием электромагнитного излучения миллиметрового диапазона при разных значениях пространственной частоты поверхностной волны  $k$ .

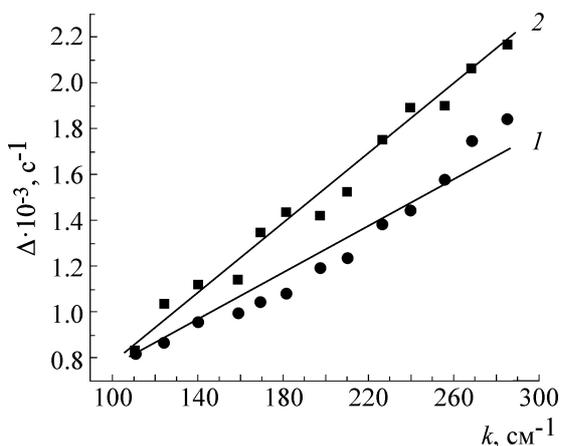
Результаты исследований иллюстрируют графики, представленные на рис. 3–8. На рис. 3, 4 представлены спектры капиллярных волн об-



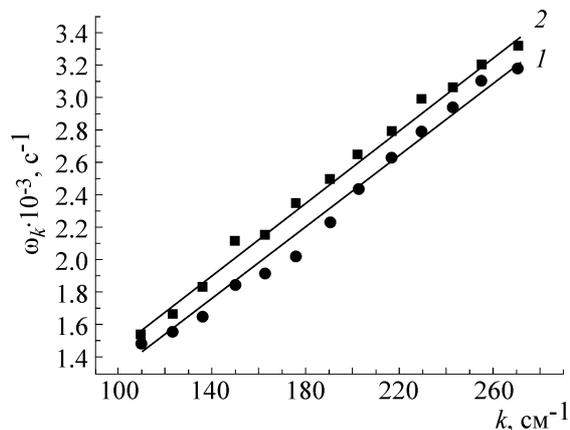
**Рис. 3.** Зависимости спектральной мощности капиллярных волн на поверхности необлученной бидистиллированной воды от частоты колебаний гармоники для пространственных частот капиллярных волн  $k$ , равных  $125 \text{ см}^{-1}$  (1),  $190 \text{ см}^{-1}$  (2),  $220 \text{ см}^{-1}$  (3) при температуре  $20^\circ\text{C}$ .



**Рис. 4.** Зависимости спектральной мощности капиллярных волн на поверхности необлученного 5% водного раствора NADH от частоты колебаний гармоники для  $k = 190 \text{ см}^{-1}$  (1),  $220 \text{ см}^{-1}$  (2),  $251 \text{ см}^{-1}$  (3) при температуре  $20^\circ\text{C}$ .



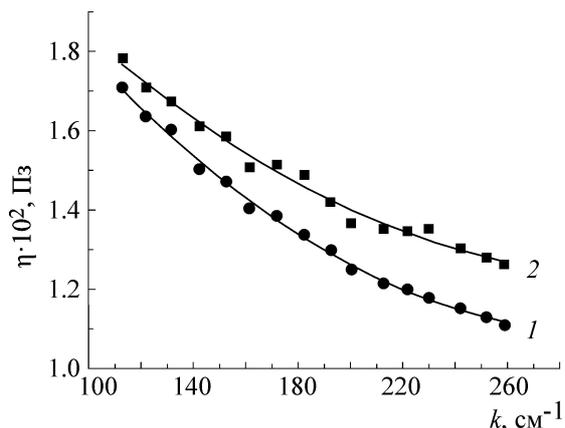
**Рис. 5.** Зависимости полуширин максимумов спектральной мощности капиллярных волн от  $k$  до (1) и после (2) экспонирования электромагнитным излучением.



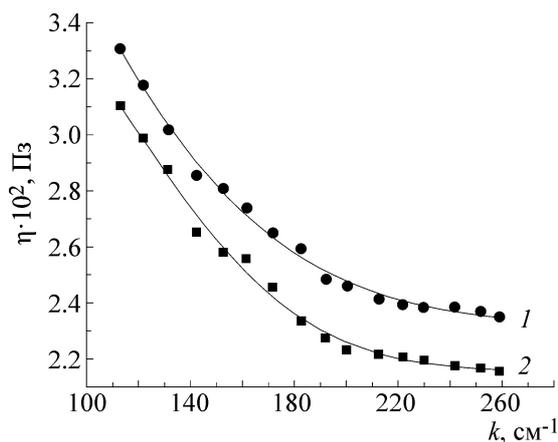
**Рис. 6.** Зависимости  $\omega_k$  спектральной мощности капиллярных волн от  $k$  до (1) и после (2) экспонирования электромагнитным излучением.

разцов бидистиллированной воды и водного раствора NADH до их облучения. Видно, что при фиксированной длине капиллярной волны на поверхности жидкости возможны колебания с различными частотами, что может свидетельствовать о нелинейном характере взаимодействий колеблющихся частиц жидкости и, соответственно, о необходимости характеризовать приповерхностный слой жидкости не значением ее вязкости (поверхностного натяжения), а набором значений вязкостей (поверхностных натяжений) вместе со своими весовыми множителями. Из рис. 3, 4 можно сделать вывод, что спектральная мощность капиллярных волн на поверхности как воды, так и водного раствора NADH существенно зависит от длины волны.

Это положение может быть объяснено при учете того, что толщина слоя жидкости, принимающей участие в формировании волны, связана с длиной волны и что характеристики жидкости в приграничном слое зависят от удаления от границы жидкости [5]. Аналогичные данные были получены и при исследовании образцов после их экспонирования в электромагнитном поле. При обработке полученных экспериментальных данных определялись полуширины ( $\Delta$ , рис. 5) и точки максимума ( $\omega_k$ , рис. 6) графиков частотных зависимостей спектральной мощности капиллярных волн с длиной волны миллиметрового диапазона, что позволило при использовании соотношений (13) и (14) определить коэффициенты вязкости и поверхностного натяжения образцов. Рассчитанные по этим формулам значения вязкости бидистиллирован-



**Рис. 7.** Зависимости динамической вязкости дистиллята воды от  $k$  до (1) и после (2) экспонирования образца электромагнитным излучением миллиметрового диапазона при температуре 20°C.



**Рис. 8.** Зависимости динамической вязкости раствора NADH в дистилляте воды от  $k$  до (1) и после (2) экспонирования образца электромагнитным излучением миллиметрового диапазона при температуре 20°C.

ной воды представлены на рис. 7. Из приведенных данных видно, что под действием электромагнитного облучения вязкость приповерхностного слоя бидистиллированной воды возрастает. Такой эффект исключает тепловое действие электромагнитных волн. Из представленных на рис. 7 графиков видно, что действие электромагнитного излучения на капиллярные волны усиливается при уменьшении их длины волны, т.е. при уменьшении толщины приповерхностного слоя жидкости, участвующего в формировании волн. Проведенный анализ показал, что в этой же области  $k$  становится заметным и влияние электромагнитного излучения на коэффициент поверхностного натяжения бидистиллированной воды.

Аналогичные исследования были проведены при использовании образцов на основе раствора NADH в бидистиллированной воде. Из данных, представленных на рис. 8, следует, что под действием электромагнитного излучения (мощность 10<sup>-3</sup> Вт/см<sup>2</sup>, частота 60 ГГц, в течение 20 мин) происходит уменьшение значения коэффициента вязкости раствора NADH в бидистиллированной воде. Проведенный анализ влияния электромагнитного излучения миллиметрового диапазона на коэффициент поверхностного натяжения образцов (рассчитанных при использовании данных рис. 7, 8 и формул (13), (14)) показывает, что их изменение для воды и раствора NADH происходит согласованно с изменением вязкости. Такое поведение реологических параметров образцов исключает возможность объяснения электромагнитного излучения, индуцированным изменением температуры образцов.

Использование представленных на рис. 7, 8 результатов и выражения (1) позволяет рас-

считать изменение конформационного параметра  $\gamma$  под действием электромагнитного излучения. Обозначая  $\gamma^{(1)}$  значение конформационного параметра до экспонирования, а  $\gamma^{(2)}$  – после, можем получить:

$$\frac{\gamma^{(2)}}{\gamma^{(1)}} = \frac{\frac{v_{\text{NADH}}^{(2)}(k)}{v_{\text{water}}^{(2)}(k)} - 1}{\frac{v_{\text{NADH}}^{(1)}(k)}{v_{\text{water}}^{(1)}(k)} - 1} \quad (21)$$

Здесь  $v_{\text{NADH}}^{(1)}(k)$ ,  $v_{\text{NADH}}^{(2)}(k)$  – зависящее от  $k$  значение вязкости водного раствора NADH до и после экспонирования его электромагнитным излучением. Величины  $v_{\text{water}}^{(1)}(k)$ ,  $v_{\text{water}}^{(2)}(k)$  характеризуют величины вязкости воды. Используя в уравнении (21) усредненные по  $k$  величины с учетом данных, представленных на рис. 7, 8, получаем, что  $\frac{\gamma^{(2)}}{\gamma^{(1)}} = 0,65 - 0,70$ . Такое поведение

конформационного параметра говорит о том, что под действием электромагнитного излучения миллиметрового диапазона отношение наименьшего размера наноструктуры «молекула NADH + приповерхностный слой воды» к его наибольшему значению увеличивается. В качестве возможного объяснения этого факта можно предположить, что низкоэнергетическое миллиметровое излучение вызывает свертывание молекул NADH вместе с их гидратной оболочкой (форма молекулы становится ближе к сферической). Дополнительными исследованиями показано, что реологические характеристики при-

поверхностного слоя воды и водного раствора NADH возвращаются к исходному состоянию за время 30–60 мин (время зависит от длины используемой капиллярной волны, т.е. от удаления исследуемого слоя от границы с воздухом).

### ВЫВОДЫ

1. Проведен анализ взаимосвязи между временной и пространственной частотой капиллярных волн на поверхности слабвязкой (по Левичу) жидкости с учетом членов 4-го порядка малости. Получены уравнения, описывающие их поведение при длинах волн не менее 0,028 см, что позволило использовать неразрушающий метод оптического гетеродинамирования для определения реологических характеристик приповерхностных слоев толщиной до 0,028 см.

2. Воздействие электромагнитного излучения (мощность  $10^{-4}$  Вт/см<sup>2</sup>, частота 60 ГГц, в течение 20–25 мин) на бидистиллированную воду приводит к увеличению значений вязкости приповерхностного слоя воды и поверхностного натяжения на (8–12)%, что говорит о возможной кластеризации воды или изменении характеристик содержащихся в нем бабстонов, что согласуется со сделанными предположениями.

3. Воздействие электромагнитного излучения (мощность  $10^{-4}$  Вт/см<sup>2</sup>, частота 60 ГГц, в течение 20–25 мин) на водный раствор NADH приводит к уменьшению значений его вязкости и поверхностного натяжения. Изменения значений вязкости и поверхностного натяжения растворов зависит от пространственной частоты капиллярных волн. Это возможно при одновременном структурировании приповерхностного слоя воды и изменении конформации наноструктуры – молекула NADH + гидратная оболочка, находящихся в водном растворе под воздействием электромагнитного излучения слабой интенсивности. В случае 5% концентра-

ции NADH изменение вязкости приповерхностного слоя раствора достигало (7–10)%.

4. Под действием электромагнитного излучения миллиметрового диапазона а (мощность  $10^{-4}$  Вт/см<sup>2</sup>, частота 60 ГГц, в течение 20–25 мин) происходит увеличение отношения наименьшего размера наноструктуры «молекула NADH + приповерхностный слой воды» к его наибольшему значению.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. X. A. Arshakyan, S. V. Pushkarov, E. S. Polovnikov and Yu. P. Meshalkin, *Бюл. СО РАМН*, № 1 (123), 30 (2007).
2. R. A. Lipson, E. J. Baldes, and A. M. Olsen, *J. Nat. Cancer Inst.* **26**, 1 (1961).
3. А. П. Демченко, *Люминесценция и динамика структуры белков*, под ред. А.П. Демченко (Наук. думка, 1988).
4. V. S. Martynyuk, Yu. V. Tseyslyer, and N. A. Temuryants, *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics* **48** (8), 832 (2012).
5. М. А. Заболотный, Ю. М. Барабаш, О. П. Дмитриченко и др., *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies* **8** (3), 713 (2010).
6. Л. А. Булавин, О. М. Алексеев, Л. М. Гаркуша и др., *Укр. фіз. журн.* **56** (5), 450 (2011).
7. M. Giustini, M. Autullo, M. Mennuni, et al., *Sensors and Actuators B: Chemical* **163**, 69 (2012).
8. А. Л. Дмитриев, *Оптические системы передачи информации* (СПб., 2007).
9. L. B. Shih, *Rev. Sci. Instr.* **55** (5), 716 (1984).
10. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика* (1986).
11. Г. Н. Саркисов, *Успехи физ. наук* **176** (8), 833 (2006).
12. N. F. Bunkin, N. V. Suyazov, A. V. Shkirin, et al., *J. Chem. Phys.* **130**, 134 308 1 (2009).
13. В. Г. Левич, *Физико-химическая гидродинамика* (Изд-во АН СССР, М., 1952).
14. В. Кляцкин и Д. Гурарий, *Успехи физ. наук* **169** (2), 171 (1999).
15. С. М. Рытов, *Введение в статистическую радиофизику*. Ч. 1. *Случайные процессы* (Наука, М., 1976).

## Conformational States of NADH Molecules in Hydrated Shell under Weak Electromagnetic Irradiation

M.A. Zabolotny, Yu.M. Barabash, N.P. Kulish, O.P. Dmitrenko, and M.O. Kuzmenko

*Department of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, pr. Akad. Glushkova 4, Kyiv, 03022 Ukraine*

The work deals with spectra of capillary waves of water distillate and water solution of NADH and dynamics of NADH under electromagnetic irradiation in the range of millimeters at different space frequencies of surface wave  $k$ .

*Key words: NADH, optical heterodyning, capillary waves, viscosity, polymer conformations*