

Поглощение волн миллиметрового диапазона в водных растворах аминокислотМ. Г. Акатьева^{1,2*}¹Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана
(МГТУ им. Н. Э. Баумана), кафедра физики.

Россия, г. Москва, 2-я Бауманская д. 5

²Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова
Российской академии наук (ФИРЭ им. В. А. Котельникова РАН)

Россия, 141190, Московская область, г. Фрязино, пл. Введенского, д. 1.

В данной работе были исследованы зависимости поглощения излучения с длиной волны 2 мм в растворах аминокислот при разной концентрации и температуре. Вычислены коэффициенты поглощения растворов и проведены сравнения с чистой водой. Полученные зависимости представляют интерес для методов определения состава жидкости и изучения динамики молекул воды в растворах.

PACS: 42.68.Ay.

УДК: 537.874.72.

Ключевые слова: миллиметровые волны, спектроскопия, неразрушающие методы исследования, аминокислоты, водные растворы аминокислот.

1. ВВЕДЕНИЕ

В биологии и медицине широко используются водные растворы аминокислот. Одним из методов контроля состава и свойств раствора является исследование его взаимодействия с излучением гигагерцового и терагерцового диапазона. Для возможности разработок в области исследования водных растворов наибольший интерес представляет изучение их диэлектрических свойств, а также получение и систематизация данных о поглощении и отражении излучения в растворах. [1,2]

Растворы веществ в воде могут иметь различные свойства при взаимодействии с излучением, и для исследования их свойств необходимо знать свойства вещества при его взаимодействии с водой [3]. Кроме того, исследование водных растворов позволяет изучить динамику молекул воды при растворении полярных и неполярных молекул.

2. ВОДНЫЕ РАСТВОРЫ АМИНОКИСЛОТ

Молекулы воды обладают свойством образовывать водородные связи с соседними молекулами, в результате чего образуется сложная трёхмерная структура. Водородные связи менее прочны, чем химические связи в самих молекулах, поэтому они быстро распадаются и возникают вновь [4]. От количества этих связей зависит подвижность и число степеней свободы молекул воды, а от количества вращательных степеней свободы зависит их взаимодействие с излучением в СВЧ и ИК-диапазонах.

Все аминокислоты — амфотерные соединения, т. е. они могут проявлять как кислотные свойства, обусловленные наличием в их молекулах карбоксильной группы COOH, так и основные свойства, обусловленные аминогруппой NH₂. Растворы аминокислот в воде являются буферными растворами — pH этих растворов слабо меняется при добавлении кислоты или щёлочи, а также при изменении его концентрации. Однако разные аминокислоты различным образом взаимодействуют с водой. Полярные молекулы, такие, как аргинин или лизин, проявляют гидрофильные свойства, а неполярные, такие, как пролин или лейцин — гидрофобные. Эти свойства влияют на количество водородных связей и, следовательно, на подвижность и число степеней свободы молекул воды в растворе.

Молекулы воды поляризованы и способны образовывать водородные связи как между собой, так и с молекулами гидрофильных веществ. Гидрофобные молекулы не поляризованы и не способны образовывать водородные связи, поэтому вода отталкивает такие молекулы. Между радикалами гидрофобных аминокислот может появляться притяжение, обусловленное силами Ван-дер-Ваальса и называемое гидрофобным взаимодействием. Это притяжение по силе схоже с водородными связями и ослабевает в присутствии органических растворителей.

Растворы веществ в воде могут изменять динамику молекул воды, взаимодействуя с ними тремя разными способами:

- Иммобилизация молекул воды, при которой происходит потеря всех шести степеней свободы (трёх поступательных и трёх вращательных) за счёт образования прочных водородных связей с молекулами растворённого вещества — положительная гидрофильная гидратация,
- Образование гидрофобных участков, содержащих фрагменты молекул, с созданием дополнительных связей между молекулами воды на гра-

*E-mail: m-akt-ne@mail.ru

нице раздела между водой и растворённым гидрофобным веществом — положительная гидрофобная гидратация,

- Удерживание молекул воды в гидратной оболочке растворённого вещества с потерей пяти из шести степеней свободы (сохранение одной вращательной степени свободы) — отрицательная гидрофильная гидратация.

При положительной гидратации, так как молекулы воды теряют свою подвижность, коэффициент поглощения излучения возрастает с увеличением концентрации растворённого вещества. Если же гидратация отрицательная, то коэффициент поглощения в растворе должен уменьшаться по сравнению с чистой водой. Это объясняется сохранением одной вращательной степени свободы и увеличением вращательной подвижности у молекул воды в растворе [1].

Таким образом, исследуя взаимодействие растворов с излучением ММ диапазона, можно судить о типе гидратации вещества, что позволит исследовать взаимодействие молекул аминокислоты с водой при разных концентрациях. Кроме того, представляет интерес получение информации о зависимости свойств растворов с разным типом гидратации от их температуры.

3. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Для эксперимента были изготовлены растворы аминокислот различной концентрации. Известно, что максимальная концентрация вещества в воде прямо пропорциональна температуре раствора. Кроме того, не все аминокислоты хорошо растворимы в воде; к примеру, для цистеина растворимость при 25 °С составляет всего 0,01 г/100 мл. Точные значения для максимальной концентрации аминокислот имеются для температур 25 и 100 °С. В нашем эксперименте измерения проводились в диапазоне температур от 19 до 26 °С, поэтому концентрация растворов не превышала максимально возможное значение для 25 °С, чтобы избежать возможности появления осадка.

Экспериментальная установка показана на рис. 1. Кювета представляет собой устройство, содержащее два фторопластовых окна, расстояние между которыми заполняется исследуемой жидкостью и может меняться от 0 до 2,5 мм с точностью 5 мкм с помощью микрометрического винта. Таким образом, изменяя толщину слоя жидкости в кювете, можно исследовать поглощение излучения в веществе.

В процессе эксперимента проводились измерения коэффициента прохождения излучения с длиной волны 3 мм в растворе при различной ширине окна, т. е. толщине слоя раствора. Коэффициент прохождения составлял от -10 до -30 дБ. В данных условиях интерференция в слое раствора не наблюдается.

Измерения проводились для дистиллированной воды и растворов 13 различных аминокислот, 6 из кото-

рых являются гидрофильными, а 7 — гидрофобными. В таблице результатов показаны значения для 8 аминокислот, 4 из которых имеют гидрофильные свойства, 4 — гидрофобные. Диапазон температур исследуемых жидкостей составлял 19–26 °С.

4. ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ

На основе полученных результатов проводились расчёты, приведённые в таблице 1. Вначале по изменению модуля коэффициента прохождения с увеличением толщины слоя определялся коэффициент поглощения излучения α [дБ/мм] в чистой воде при заданной температуре, затем аналогичные значения при той же температуре рассчитывались для раствора:

$$\alpha = \log \frac{I}{I_0} . \quad (1)$$

Здесь I — мощность прошедшего излучения на единицу длины, I_0 — мощность падающего излучения.

В последнем столбце таблицы приведено относительное изменение коэффициента поглощения раствора по сравнению с коэффициентом поглощения чистой воды при данной температуре:

$$\Delta\alpha = \left(\frac{\alpha - \alpha_0}{\alpha_0} \right) \cdot 100\% . \quad (2)$$

На основе полученных данных были сделаны выводы, изложенные в заключении. Можно увидеть, что отличие свойств раствора от свойств чистой воды растёт с увеличением концентрации растворённого вещества, причём для разных аминокислот форма зависимости коэффициента поглощения от концентрации различна. Кроме того, отдельные вещества показывают сильную температурную зависимость, тогда как у других это различие не столь значительно. Были исследованы как гидрофильные, так и гидрофобные вещества, что в дальнейшем позволит сравнить поведение молекул воды в присутствии полярных и неполярных молекул. Кроме того, известна температурная зависимость коэффициента поглощения в чистой воде, что позволяет сравнивать экспериментальные значения и судить о наличии в воде примесей. При наличии информации о растворённых в воде аминокислотах, в дальнейшем планируется по типу гидратации определить состав растворённого вещества.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведены исследования влияния растворённых в воде аминокислот на динамику молекул воды и на поглощение излучения миллиметрового диапазона. Выявлены отличия в свойствах раство-

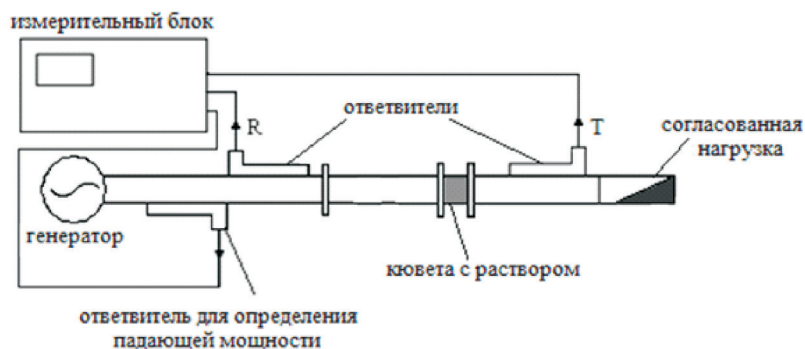


Рис. 1: Схема экспериментальной установки с кюветой для исследования водных растворов

Таблица I: Результаты расчётов на основе выполненных экспериментов. Растворы отсортированы по возрастанию относительного изменения коэффициента поглощения $\Delta\alpha$

№	Название аминокислоты	Гидрофильность	T (°C)	Концентрация (г/100 мл)	% от макс. концентрации при 25 °C	$\Delta\alpha$ (%)
1	Фенилаланин	Гидрофоб.	19	1,48	50	1
2	Метионин	Гидрофоб.	20	0,9	24	1,5
3	Глицин	Гидрофиль.	23,5	0,9	25	3
4	Аспарагин	Гидрофиль.	19,5	1	33	6,5
5	Валин	Гидрофиль.	23	2,21	25	6,6
6	Глутаминовая кислота	Гидрофиль.	23	0,6	70	7,2
7	Глутамин	Гидрофиль.	19	0,86	50	10
8	Фенилаланин (более высокая температура)	Гидрофоб.	26	1,48	50	12
9	Пролин	Гидрофоб.	21	8	50	14

ров различной концентрации и различной температуры. Относительное изменение коэффициента поглощения по сравнению с чистой водой может составлять до 14%. Растворы неполярных аминокислот при исследовании либо практически не влияли на поглощение излучения, либо влияли сильнее, чем растворы полярных молекул, в зависимости от типа аминокислоты. Очевидно, это связано с химическими свойствами молекул и типом гидратации. В продолжении работы планируется выяснить причины данного явления. К тому же, для гидрофобных аминокислот замечена сильная

температурная зависимость. Растворы полярных (гидрофильных) молекул изменяли коэффициент поглощения на величину от 3 до 10%. Данные исследования дополняют имеющиеся данные о спектрах поглощения аминокислот и их растворов в различных диапазонах частот, и открывают возможность для исследования состава и концентрации раствора. Кроме того, представляет научный интерес исследование упомянутой выше температурной зависимости поглощения в растворах.

- [1] Мериакри В. В., Пархоменко М. П., Чигряй Е. Е., Денисюк Р. Н., Федосеев Н. А. Электромагнитные волны и электронные системы. **10**, №4. С. 31. (2005).
 [2] Chaudhari H. C., Chaudhari A., Mehrotra S. C. Journal of the Chinese Chemical Society. **52**. P. 5. (2005).
 [3] Кудряшова В. А., Завизон В. А., Хургин Ю. И. Материалы 10 Российского симпозиума с международным участием «Миллиметровые волны в медицине и биологии».

- (Москва, 1995).
 [4] Валитов Р. А., Дюбко С. Ф., Макаренко Б. И. Измерения на миллиметровых и субмиллиметровых волнах: Методы и техника. (М.: «Радио и связь», 1984).
 [5] Ахадов Я. Ю. Диэлектрические параметры чистых жидкостей. (М.: Издательство МАИ, 1999).
 [6] Волькенштейн М. В. Биофизика. (М.: «Наука», 1981).

Millimeter waves absorption in amino acids water solutions**М. Г. Akatyeva^{1,2}**¹*Department of Physics, Faculty of Fundamental Sciences, Bauman Moscow State Technical University,
Moscow, 105005, Russia*²*Fryazino Department, Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics
Fryazino, Moscow region, 141190, Russia**E-mail: m-akt-ne@mail.ru*

In our experiments, we investigate a millimeter waves absorption by wavelength 2 mm in amino acids solutions by different concentration and temperature. We determine absorption coefficients in solutions of different amino acids and compare it for pure water. These results can be used for determination of liquid composition and for investigation of water molecules dynamics in solutions.

PACS: 42.68.Ay.

Keywords: millimeter waves, spectroscopy, non-destructive methods, amino acids, amino acids water solutions.

Сведения об авторах

Акатьева Милана Георгиевна — старший инженер ФИРЭ им. В. А. Котельникова РАН; ассистент кафедры физики МГТУ им. Н. Э. Баумана; тел. (496) 564-14-52, (916) 777-14-23, e-mail: m-akt-ne@mail.ru.