

возбужденных синапсов в такой модели будет отвечать только один параметр σ_{AMPA} . Такое свойство предложенной модели может существенно упростить задачу построения нейросетей.

Следовательно, предложенная модель может быть использована как в экспериментальном исследовании СП при установлении ее скрытых параметров, так и при теоретических разработках нейросетей.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, грант Б14М-022.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Передача сигнала в синаптических контактах: детерминистическая модель и ее редукция / М. А. Глецевич [и др.] // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 1. С. 43–48.
2. Регуляция пероксидом водорода синаптической передачи в гиппокампе при изменении температуры и степени оксигенации / Т. Н. Питлик [и др.] // Докл. НАН Беларуси. 2010. Т. 54. С. 103–107.
3. *Robinson D. A.* The electrical properties of metal microelectrodes // Proc. of the IEEE. 1968. Vol. 56. P. 1065–1071.
4. Ionic mechanisms underlying spontaneous CA1 neuronal firing in Ca²⁺-free solution / J. Shuai [et al.] // Biophys. J. 2003. Vol. 84. P. 2099–2111.
5. *Powers R. K., Binder M. D.* Summation of effective synaptic currents and firing rate modulation in cat spinal motoneurons // J. Neurophysiol. 2000. Vol. 83. P. 483–500.
6. *Magee J. C.* Dendritic Ih normalizes temporal summation in hippocampal CA1 neurons // Nat. Neurosci. 1999. Vol. 2. P. 508–514.

Поступила в редакцию 19.12.2014.

Марина Александровна Глецевич – аспирант кафедры биофизики физического факультета БГУ. Научный руководитель – С. Н. Черенкевич.

Павел Михайлович Булай – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры биофизики физического факультета БГУ.

Тарас Николаевич Питлик – старший преподаватель кафедры биофизики физического факультета БГУ.

Андрей Анатольевич Денисов – кандидат биологических наук, заведующий лабораторией клеточной инженерии и нанобиотехнологий физического факультета БГУ.

Сергей Николаевич Черенкевич – академик НАН Беларуси, доктор биологических наук, заведующий кафедрой биофизики физического факультета БГУ.

УДК 535.37

Д. С. ТАРАСОВ, К. Н. КАПЛЕВСКИЙ, М. П. САМЦОВ, Е. С. ВОРОПАЙ

АНАЛИЗ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РАСТВОРОВ НОВОГО ИНДОТРИКАРБОЦИАНИНОВОГО КРАСИТЕЛЯ

Предложен метод селективного анализа многокомпонентных молекулярных растворов на основе регистрации истинных спектров возбуждения флуоресценции путем введения коэффициентов, корректирующих чувствительность фотоприемника. Коэффициенты коррекции определяются посредством сравнения аппаратного спектра возбуждения эталонного раствора со спектром его поглощения. В качестве эталона для определения коэффициентов коррекции использован раствор трикарбоцианинового красителя НТС в этаноле. Приведены результаты исследований с помощью модифицированного флуориметра спектрального проявления ассоциации молекул нового трикарбоцианинового красителя в водных растворах. Эффективность метода рассмотрена на примере исследования процессов ассоциации трикарбоцианинового красителя в воде.

Ключевые слова: индотрикарбоцианиновые красители; спектрально-люминесцентные свойства; ассоциация в водных растворах; спектры возбуждения флуоресценции.

A selective analysis method for multicomponent solutions has been proposed on the basis of recording true fluorescence-excitation spectra with the use of the factors correcting the sensitivity of a photodetector. The correction factors were determined by comparison between the instrumental excitation spectrum for the standard solution and its absorption spectrum. A solution of the tricarbocyanine НТС in ethanol was used as a standard for estimation of the correction factors. The experimental results have been obtained with the help of a modified fluorometer in studies of the spectral features associated with the molecular associations of a new tricarbocyanine dye in water solutions; efficiency of the method has been tested.

Key words: indotricarbocyanine dyes; spectral-luminescent properties; association in aqueous solutions; fluorescence excitation spectrum.

Люминесцентная спектроскопия – наиболее результативный метод биологических и биомедицинских исследований в промышленном и экологическом мониторинге. Люминесцентный анализ обладает высокой чувствительностью, низкими пределами обнаружения и используется преимущественно для нахождения и количественного определения следовых количеств веществ в природных, промышленных и биологических объектах. Особое значение люминесцентная спектроскопия имеет при исследовании многокомпонентных молекулярных растворов. В случаях, когда полосы поглощения различных компонентов раствора перекрываются, стационарная абсорбционная спектроскопия нередко недостаточно информативна. Возможность варьирования длины волны регистрации спектров возбуждения

флуоресценции (обеспечивает получение более точной информации о компонентном составе таких систем) позволяет более селективно осуществлять изучение таких систем. Из-за неоднородного спектрального состава источников света, зависимости пропускания монохроматоров и чувствительности фотоприемников от длины волны излучения регистрируемые спектры возбуждения и испускания люминесценции отличаются от истинных. Поэтому для получения надежных спектральных данных необходима предварительная градуировка аппаратуры.

В статье предложен метод селективного анализа многокомпонентных молекулярных растворов на основе регистрации истинных спектров возбуждения флуоресценции путем введения корректирующих коэффициентов, которые определялись посредством сравнения аппаратного спектра возбуждения эталонного раствора со спектром его поглощения. Эффективность метода рассмотрена на примере исследования процессов ассоциации трикарбоцианинового красителя с полиэтиленгликолями в воде.

Материалы и методы исследования

Объект исследования – известный индотрикарбоцианиновый краситель НТС, а также новый водорастворимый индотрикарбоцианиновый краситель с полиэтиленгликолями (ИТК-ПЭГ). Оба соединения синтезированы в лаборатории спектроскопии научно-исследовательского учреждения «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ». Чистота красителей подтверждена путем анализа спектров хроматомасс методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЖХ).

Применявшийся в качестве растворителя этанол предварительно очищался по стандартной методике [1].

Спектры поглощения исследуемых веществ регистрировались с помощью спектрофотометра PV 1251B (Solar). В качестве основного прибора для спектрально-люминесцентных измерений использовался модернизированный спектрофлуориметр Fluorolog.

В спектрофлуориметре для регистрации спектров возбуждения флуоресценции учет зависимости интенсивности возбуждающего света от длины волны предусмотрен с помощью счетчика квантов на основе высококонцентрированного раствора родамина В в пропиленгликоле, который поглощает практически весь падающий свет в области от 220 до 600 нм. Такой метод оказывается неприемлем для регистрации спектров возбуждения трикарбоцианиновых красителей, у которых основная полоса поглощения лежит в ближней ИК-области [2], т. е. за пределами рабочего диапазона квантового счетчика.

В настоящей работе для коррекции спектров возбуждения флуоресценции использован раствор трикарбоцианинового красителя НТС ($C_{кр} \sim 10^{-6} M$) в полярном этаноле, в котором молекулы находятся в мономерном состоянии и в форме свободных ионов [3]. Квантовый выход флуоресценции красителя в таком растворе не зависит от длины волны возбуждения, и исправленный спектр возбуждения флуоресценции должен совпадать со спектром поглощения. Следует иметь в виду, что оптическая плотность раствора должна быть порядка 0,01, так как в этом случае интенсивность флуоресценции прямо пропорциональна молярному коэффициенту поглощения [4]. Следовательно, путем сопоставления аппаратного спектра возбуждения со спектром поглощения красителя НТС в полярном этаноле можно определить коэффициенты коррекции (рис. 1):

$$K = I_{эт}^{ан} / D_{эт}; I_{обр}^{кор} = I_{обр}^{ан} / K,$$

где K – коэффициенты коррекции спектров возбуждения; $D_{эт}$ – оптическая плотность этанола; $I_{эт}^{ан}$ – аппаратный спектр возбуждения флуоресценции этанола; $I_{обр}^{ан}$, $I_{обр}^{кор}$ – аппаратный и скорректированный спектры возбуждения флуоресценции образца.

Результаты исследования и их обсуждение

Краситель ИТК-ПЭГ – одно из соединений, разработанных в рамках выполнения проекта по созданию фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии [5–7]. В водных растворах краситель ИТК-ПЭГ присутствует в виде равновесной смеси мономеров и ассоциатов. Спектры поглощения формируются за счет наложения поглощения отдельных компонентов, что приводит к зависимости формы основной полосы поглощения ИТК-ПЭГ от концентрации красителя (рис. 2). При разбавлении раствора уменьшается относительный вклад максимума на 645 нм, а относительная интенсивность максимума возрастает на 703 нм. При этом происходит смещение коротковолнового максимума с $\lambda = 645$ нм при $C_{кр} = 1,8 \cdot 10^{-5} M$ на $\lambda = 657$ нм при $C_{кр} = 3,2 \cdot 10^{-6} M$, а также уменьшение полуширины длинноволновой полосы от 141 до 111 нм. Отсутствует ярко выраженная изобестическая точка. Таким образом, можно заключить, что в растворе присутствует более двух компонентов.

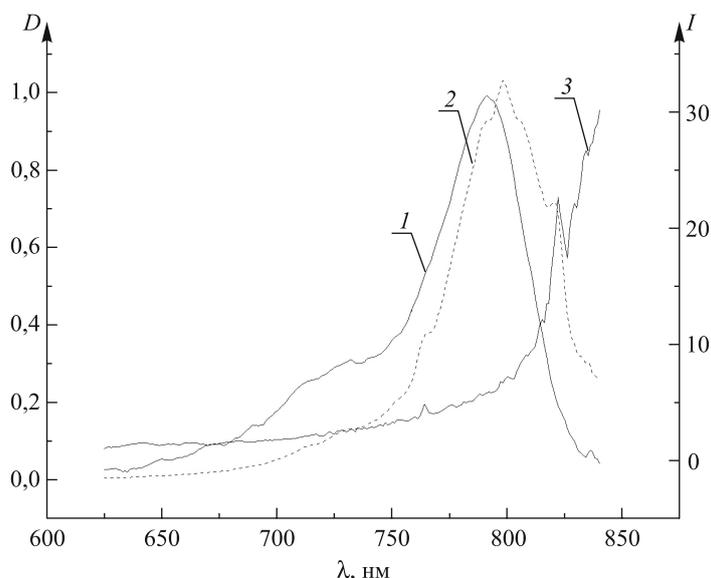


Рис. 1. Спектр поглощения (1) и аппаратный спектр возбуждения флуоресценции (2) трикарбоцианинового красителя в этаноле; рассчитанные коэффициенты коррекции спектров возбуждения флуоресценции (3)

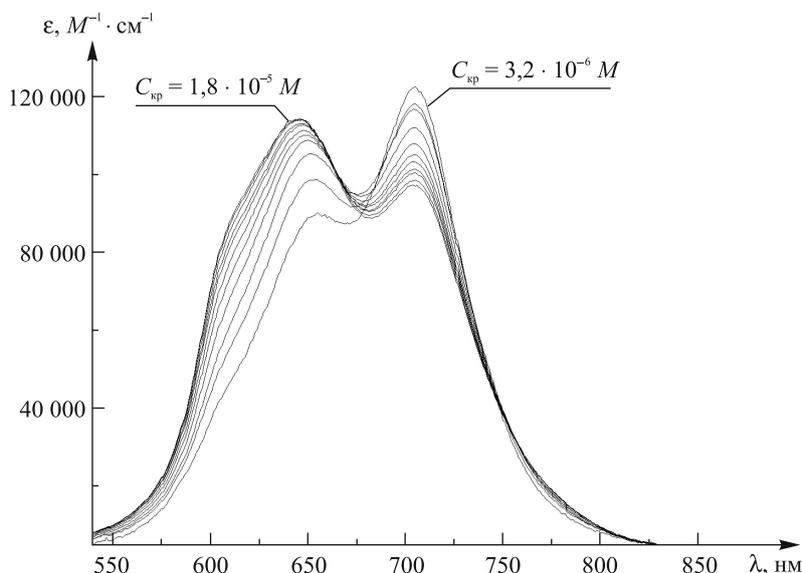


Рис. 2. Спектры поглощения ИТК-ПЭГ в воде при различных концентрациях

Анализ спектров флуоресценции растворов в данной ситуации является инструментом селективного анализа отдельных компонентов. Согласно данным работы [8] полиметиновые красители в водных растворах склонны к образованию *H*-агрегатов, у которых отсутствует люминесценция. При этом в спектре поглощения происходит гипсохромное смещение максимума и уширение полосы, а способный к флуоресценции компонент является мономерной формой красителя. В связи с этим регистрация спектров возбуждения флуоресценции водного раствора ИТК-ПЭГ позволяет определить спектр поглощения мономеров. При изменении длины волны возбуждения в пределах длинноволновой полосы поглощения, в диапазоне от 620 ÷ 700 нм, в спектре флуоресценции красителя ИТК-ПЭГ в воде проявляется один компонент (рис. 3), максимум которого расположен на длине волны 737 нм (полуширина – 58 нм). При этом форма спектра возбуждения флуоресценции не зависит от длины волны регистрации (см. рис. 3), максимум спектра расположен на $\lambda = 712$ нм (полуширина – 60 нм). Спектр возбуждения флуоресценции ИТК-ПЭГ в воде можно отождествлять со спектром поглощения длинноволнового компонента. На основании известного спектра поглощения мономеров из суммарного спектра рассчитывается спектр поглощения ассоциатов (рис. 4). Из рассчитанного спектра

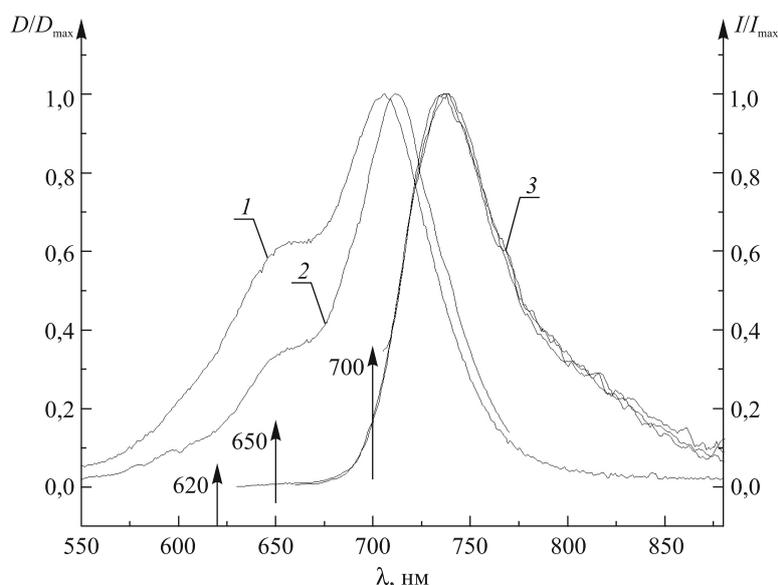


Рис. 3. Спектр поглощения ИТК-ПЭГ-красителя в воде (1); спектр возбуждения флуоресценции (2), длина волны регистрации 780 нм; спектры флуоресценции (3), длины волн возбуждения 620, 650 и 700 нм соответственно

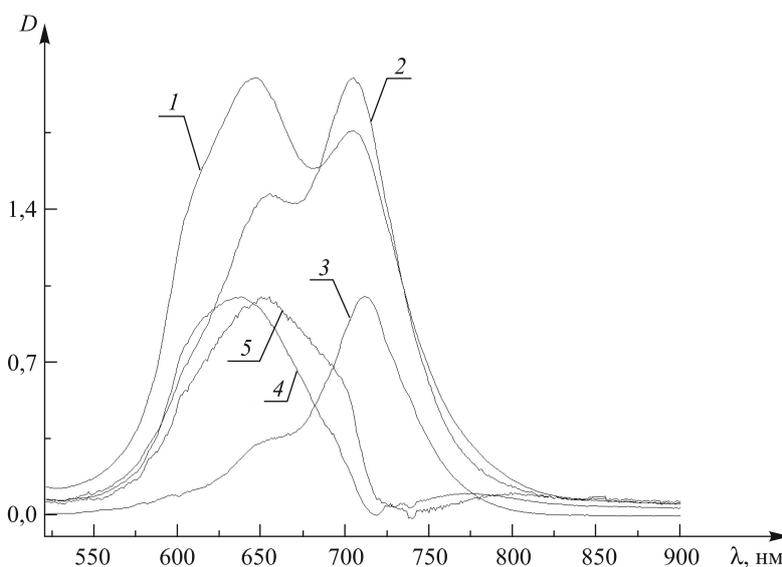


Рис. 4. Спектры поглощения красителя ИТК-ПЭГ в воде при концентрациях $1,7 \cdot 10^{-5} M$ (1) и $3,2 \cdot 10^{-6} M$ (2); спектр поглощения мономеров (3); рассчитанные спектры поглощения ассоциатов при концентрациях $1,7 \cdot 10^{-5} M$ (4) и $3,2 \cdot 10^{-6} M$ (5)

видно, что при изменении концентрации исследованного красителя форма спектра поглощения его ассоциатов изменяется. При более высокой концентрации красителя в растворе максимум поглощения ассоциатов смещается в коротковолновую область. Путем использования разбиения спектра поглощения на компоненты для разных концентраций раствора осуществлена оценка агрегационного числа согласно методике, приведенной в работе [9]. Агрегационное число для красителя ИТК-ПЭГ составило $n = 2,3$, что указывает на присутствие в растворе как димеров молекул, так и ассоциатов более высоких порядков.

Таким образом, представленная в работе методика позволила расширить спектральную область регистрации спектров возбуждения флуоресценции спектрофлуориметра Fluorolog. В качестве эталона для определения коэффициентов коррекции использован раствор трикарбоцианинового красителя ИТС в этаноле. Приведены результаты исследований спектрального проявления ассоциации молекул нового трикарбоцианинового красителя в водных растворах с помощью модифицированного флуориметра.

1. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. М., 1976.
2. Спектральные проявления образования ионных пар индотрикарбодиазиринных красителей / Е. С. Воропай [и др.] // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2003. № 1. С. 9–15.
3. Концентрационное усиление генерации синглетного кислорода индотрикарбодиазиринным красителем / М. П. Самцов [и др.] // ЖПС. 2014. Т. 81, № 2. С. 219–227.
4. Паркер С. Фотолюминесценция растворов. М., 1972.
5. Uptake and phototoxicity of tricarbo-cyanine indolenine dye covalently bound with glucose (TICS) under acidification of tumor cells environment / Y. P. Istomin [et al.] // Experimental Oncology. 2004. Vol. 26, № 3. P. 226–231.
6. The effect of hypoxia on photocytotoxicity of TICS tricarbo-cyanine dye In vitro / Y. P. Istomin [et al.] // Experimental Oncology. 2006. Vol. 28, № 1. P. 80–82.
7. Influence of photon energy on the efficiency of photochemotherapy / M. P. Samtsov [et al.] // J. of Applied Spectroscopy. 2009. Vol. 76, № 4. P. 547–553.
8. Химическое строение и ассоциация катионных полиметиновых красителей в малополярных растворителях / А. А. Ищенко [и др.] // Докл. АН УССР. Сер. Б. 1988. Т. 44, № 2. С. 46–49.
9. Чибисов А. К. Фотоника димеров цианиновых красителей // Химия высоких энергий. 2007. Т. 41. С. 239–248.

Поступила в редакцию 27.12.2014.

Дмитрий Сергеевич Тарасов – младший научный сотрудник научно-исследовательского учреждения «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ».

Кирилл Николаевич Каплевский – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ.

Михаил Петрович Самцов – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией спектроскопии научно-исследовательского учреждения «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ».

Евгений Семенович Воропай – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ.

УДК 53.01

ЛЫ ЗУНГ ВАН (ВЬЕТНАМ), И. Д. ФЕРАНЧУК

О ВЫБОРЕ НУЛЕВОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦЫ С КВАНТОВЫМ ПОЛЕМ

Исследуется модель взаимодействия частицы со скалярным квантовым полем. В рамках этой модели стандартная теория возмущений приводит к расходящимся выражениям при расчете энергии основного состояния системы. Показано, что эта расходимость обусловлена выбором начального приближения в форме асимптотически свободных состояний частицы поля в предположении адиабатического выключения взаимодействия. Однако в рамках этой же модели системы можно выбрать начальное приближение в виде волнового пакета, описывающего локализованное состояние частицы в поле. Параметры локализованного состояния определяются из минимума энергии системы. При этом как энергия основного состояния, так и физическая масса частицы остаются конечными во всем диапазоне изменения константы связи.

Ключевые слова: полярон; нулевое приближение; квантовое поле; адиабатическое приближение; теория возмущений.

Model for the interaction between particle and scalar quantum field is investigated in the present paper. In the framework of this model the conventional perturbation theory leads to the divergent expression when calculating the ground state energy of the system. It is shown in the paper that this divergence is conditioned by the choice of the initial approximation in the form of asymptotically free states for the particle and field. It is possible if the adiabatic switch-off interaction is considered. However, in the case of the same model it is natural to choose the initial approximation in the form of the wave packet that describes the localized state of the particle in the field. Parameters of this localized state are defined by the condition of the energy minimum. In this case both the ground state energy and the physical mass of the particle are finite in the entire range of the coupling constant. The obtained results could be important for analysis of the renormalization procedure in quantum field theories.

Key words: polaron; zeroth approximation; quantum field; adiabatic approximation; perturbation theory.

Задачи о взаимодействии частицы с квантовым полем возникают при описании электрон-фононного взаимодействия в твердом теле [1], рассмотрении движения частиц в поле лазерной волны [2], в нерелятивистской модели квантовой электродинамики [3] и в других случаях. При использовании стандартной схемы теории возмущений (ТВ) в таких задачах важную роль играет предположение об «адиабатическом выключении взаимодействия» [4], которое позволяет выбирать асимптотические состояния, соответствующие свободной частице и полю, в качестве нулевого приближения ТВ. При этом в большинстве моделей, используемых в квантовой теории, диаграммы стандартной ТВ приводят к бесконечным величинам из-за расходимости интегралов. В то же время существует уникальная физическая модель – «проблема полярона», в которой сходятся интегралы, соответствующие всем диаграммам ТВ, и не возникает необходимости вводить импульсы обрезания и выполнять перенормировку массы с использованием бесконечных величин [5]. Поэтому принципиальный интерес представляет исследование вопроса о том, являются ли расходимости, возникающие в других моделях, реальными