



2-й Международный семинар по спектроскопии
и фотохимии макрогетероциклических
соединений 18–19 октября 2022 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Механизм дезактивации промежуточного нефлуоресцентного
TICT-состояния для тиофлавина T

В.И. Степура^a, С.А. Тихомиров^b, В.А. Поводайло^b

^aМеждународный государственный экологический институт
им. А.Д. Сахарова БГУ, ул. Долгобродская 23/1, Минск, Беларусь,
e-mail: stsiapura@gmail.com

^bИнститут физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости
68/2, Минск, Беларусь

Чувствительность флуоресцентных свойств молекулы тиофлавина T, широко используемой в качестве сенсора амилоидных фибрилл белков, к вязкости/жесткости микроокружения определяется протеканием в возбужденном электронном состоянии реакции внутримолекулярного переноса заряда с кручением фрагментов молекулы (twisted intramolecular charge transfer, TICT) [1]. В зависимости от вязкости скорость реакции переноса заряда, ведущей к образованию промежуточного нефлуоресцентного TICT-состояния, изменяется в значительном диапазоне вплоть до $\sim 10^{12}$ с⁻¹, что обеспечивает изменение квантового выхода флуоресценции на ~ 3 порядка величины [2]. Несмотря на многочисленные экспериментальные и теоретические исследования фотоиндуцированных процессов в данной молекуле, механизм дезактивации TICT-состояния ранее не рассматривался.

Методами нестационарной абсорбционной спектроскопии с фемтосекундным разрешением обнаружено, что динамика дезактивации короткоживущего нефлуоресцентного TICT-состояния зависит от вязкости среды и для маловязких растворителей лежит в пикосекундной области. На основании квантово-химических расчетов и экспериментальных исследований предложено, что дезактивация TICT-состояния протекает через энергетически доступное коническое пересечение поверхностей потенциальной энергии основного и возбужденного состояний, которому соответствует конформация молекулы со значительным изгибом длинной оси и внеплоскостными искажениями бензотиазолового цикла.

ЛИТЕРАТУРА

1. V.I. Stsiapura, A.A. Maskevich, V.N. Uversky, e.a. J. Phys. Chem. B, **112** (2008) 15893–15902.
2. V.I. Stsiapura, A.A. Maskevich, S. A. Tikhomirov, O.V. Baganov J. Phys. Chem. A, **114** (2010) 8345–8350.