**Методика приписки низкочастотных колебательных линий в КР спектрах кератинов человеческого волоса**

**Травкина Е.И.1**

1студент

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,физический факультет, Москва, РоссияE–mail: travkina.ei19*@physics.msu.ru*

Работа посвящена выявлению конформационно чувствительных полос в низкочастотном диапазоне КР спектров кератинов человеческого волоса.

Недостаток информации об отнесении КР линий в низкочастотном спектральном диапазоне (50-480 см-1) порождает ряд вопросов, связанных с анализом и интерпретацией получаемых данных. Обычно низкочастотные колебания относят к коллективным молекулярным колебаниям, таким как колебания белковой цепи в целом или межмолекулярные колебания белковых макромолекул. В настоящее время существует множество исследований, в которых проводится сравнение низкочастотных полос колебательных спектров различных белков, при этом наблюдаются линии, характерные как для вторичной [1], так и для третичной структуры [2]. Однако однозначная интерпретация этих линий отсутствует.

Человеческий волос состоит в основном из фибриллярных белков – кератинов. В нём можно выделить три основных компоненты: оболочку – кутикулу, основную часть – кортекс и сердцевину – медулу. Причём кортекс состоит преимущественно из α-спиралей, а в кутикуле преобладает концентрация β-структур. Таким образом, человеческий волос является удобной модельной системой для изучения конформационных изменений в структуре фибриллярных белков.

Предлагаемая методика анализа низкочастотных линий в КР спектрах кератинов основана на сравнении спектров волос, измеренных при различном расположении образца относительно возбуждающего излучения: при фокусировке излучения на торец волоса и на его боковую поверхность.

КР спектры измерялись с помощью КР микроспектрометра DXR Raman при возбуждении на длине волны 780 нм.

Показано, что на ряду с отличиями в диапазоне отпечатков пальцев, которые связаны с поляризационной чувствительностью α-спиральных структур [3], наблюдается изменение интенсивности в низкочастотном диапазоне, а именно в полосе частот 110-190 см-1. Проведено сравнение КР спектров кутикулы и кортекса. Результаты сравнения подтверждают, что полоса в интервале 110-190 см-1 характеризует колебания α-спиралей, а в интервале 235-353 см-1 проявляются колебания -структур.

В работе обсуждаются низкочастотные изменения в КР спектрах волос, возникающие при облучении образцов УФ излучением и при их нагревании.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 24-12-00412 и Фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

**Литература**

1. Balakhnina I. A., Brandt N. N., Chikishev A. Y., Mankova A. A., ShpachenkoI. G. Low-frequency vibrational spectroscopy of proteins with different secondary structures // Journal of Biomedical Optics. 2017. V. 22 (9). P. 091509.
2. Balakhnina I. A., Brandt N. N., Mankova A. A., Chikishev A. Y. The problem of manifestation of tertiary structure in the vibrational spectra of proteins // Vibrational Spectroscopy. 2021. V. 114. P. 103250.
3. Брандт Н.Н., Травкина Е.И., Михальчик Е.В., Чикишев А.Ю. Влияние конфигурации измерений на результаты КР-микроспектроскопии человеческого волоса // Квантовая электроника. 2022. V. 52 (1). P. 36-41.