

Drżące ciało pomaga tworzyć mapy 3D ułożenia molekuł

15 sierpnia 2022

Polski zespół pokazał, jak mierząc drgania cząsteczek, można wyznaczać ich ułożenie w przestrzeni i przygotować niespotykanej dotąd dokładności mapę 3D niemal każdego dowolnego materiału. Może się to przydać w pracach nad nowymi materiałami, urządzeniami elektronicznymi, a nawet w terapii nowotworów.

Przełomowe badania pozwalające na stworzenie trójwymiarowych map orientacji wiązań w próbce zostały opublikowane przez zespół badawczy przy linii CIRI z krakowskiego SOLARIS w prestiżowym czasopiśmie JACS. „Struktura materiału, a więc orientacja jego cząsteczek w przestrzeni, wpływa choćby na właściwości mechaniczne (rozciąganie, pękanie), chemiczne, fizykochemię powierzchni, przewodnictwo czy dyfuzję (np. leku przez tkankę)” – tłumaczy kierownik badań dr hab. Tomasz Wróbel z SOLARIS.

Jego zespół pokazał, jak ułożenie poszczególnych molekuł w materiale można wyliczyć na podstawie ich drgań. Jeśli wiemy bowiem, jaka cząsteczka drga i mamy wiedzę o tym, wzdłuż której drga ona osi, to możemy z tego wywnioskować, jak jest ona ułożona w przestrzeni.

Drganie cząsteczek można obserwować wykorzystując znane już od dawna metody mikroskopii oscylacyjnej. Dopiero jednak zespół Polaków pokazał, jak za pomocą niestandardowych obliczeń matematycznych te informacje o drganiach można przełożyć na dane o ich orientacji. A dzięki tej wiedzy tworzyć mapy ułożenia cząsteczek w 3D dla prawie każdego materiału.

Kto może z tego skorzystać? Dr hab. Tomasz Wróbel tłumaczy w rozmowie z portalem PAP – Nauka w Polsce, że w niektórych obszarach nanotechnologii – np. w diodach OLED czy ogniwach

słonecznych – cząsteczki muszą być odpowiednio ułożone w przestrzeni, aby urządzenie optymalnie działało. Każde uchybienie – miejsce, w którym cząsteczki ustawione są w niekontrolowany sposób, sprawi, że urządzenie będzie działać gorzej.

Jeśli chodzi o nowe materiały, to można sobie wyobrazić materiał, w którym cząsteczki ułożone w poprzek blokować będą przepływ ciepła czy prądu elektrycznego z jednego końca próbki na drugi, a te same molekuly ułożone wzdłuż tej osi – zwiększyłyby jego przewodnictwo w danym kierunku.

Są też hipotezy, że poznanie orientacji komórek w przestrzeni może pomóc w doborze skuteczniejszej terapii nowotworów i ocenie rokowań pacjenta. Jeśli bowiem nowotwór ciasno opleciony jest siecią włókien, prawdopodobnie inaczej trzeba z nim walczyć, niż gdy włókna wokół niego nie mają takiej szczelnej struktury.

Do tej pory możliwe były badania orientacji wiązań w badanym materiale, ale tylko do pewnego stopnia, np. na dużych obszarach, w cienkich warstwach materiałów czy przy użyciu tomografii.

Dzięki najnowszemu odkryciu możliwe jest uzyskanie wysokorozdzielczego obrazu 3D bez niszczenia badanego materiału oraz bez użycia dodatkowych barwników czy znakowania. A to świetna wiadomość: jest nadzieja, że metodę tę będzie można wykorzystać do badania dowolnych próbek, również pochodzących z organizmów. A także do kontroli jakości materiałów, które przechodzić będą kolejne badania lub trafią do użytku.

W badaniach naukowcy wykorzystali spektroskopię w podczerwieni (IR), która pozwala na uzyskanie bogatych informacji na temat badanej próbki bez niszczenia jej czy wykorzystywania barwienia próbki. Technika ta od lat z powodzeniem stosowana jest w wielu dziedzinach nauki, a kluczowa jest w dziedzinach

badania nad nowymi materiałami.

Naukowcy po raz pierwszy zastosowali do analizy danych z IR tzw. Analizę równoczesną (4P-3D). Dzięki temu uzyskali informację o kątach orientacji makromolekuł w próbce sferulitu polikaprolaktonu. Okazało się to możliwe dzięki jednoczesnej analizie dwóch pasm o mniej więcej prostopadłych orientacjach momentu przejścia mierzonych przy 4 różnych polaryzacjach liniowych. „Ponadto pokazujemy, że metoda ta może być zastosowana do wysokorozdzielczego (ograniczonego limitem dyfrakcji) obrazowania FT-IR i ramanowskiego, a nawet do superrozdzielczego obrazowania O-PTIR” – podkreśla Paulina Kozioł (CIRI, SOLARIS) pierwszy autor publikacji.

Dr Wróbel zaprasza do współpracy naukowców, którzy chcieliby zbadać próbki swoich materiałów tą nowatorską metodą.

Badania były finansowane z grantu NCN Sonata.

Autorstwo: Ludwika Tomała

Źródło: NaukawPolsce.PAP.pl