Научная статья
УДК 53.093, 53.096, 57.031, 57.033, 57.038
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19204

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОЛИГОМЕРОВ РЯДА АМИНОКИСЛОТ (Gly, Ala, Trp, Val) В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ ИНФРАКРАСНОГО ДИАПАЗОНА

М. А. Баранов ✉, О. Ю. Цыбин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ baranovma1993@gmail.com

Аннотация. Суперкомпьютерное моделирование методом молекулярной динамики ряда олигомеров аминокислот позволило впервые выявить для таких частиц особенности комплекса характеристик как собственных внутримолекулярных локальных колебаний (нормальных мод), так и вынужденных колебаний в растворе при задании электромагнитного поля в дальнем и среднем ИК-диапазонах, а также различных алгоритмов структуры растворителя. Для олигомеров аминокислот Gly, Ala, Trp, Val и их групп получены амплитудно-временные зависимости энергии и электрического дипольного момента, Фурье-преобразованием которых выявлены спектры частот. Впервые обнаружены и вычислены смещения спектральных пиков, вызванные различиями алгоритмов задания структуры растворителя. Интерпретация полученных закономерностей позволила предложить непротиворечивую модель, удовлетворяющую фундаментальным физическим представлениям о внутримолекулярной и межмолекулярной динамике групп биомолекул. Эта модель допускает внутримолекулярные взаимодействия нормальных локальных колебаний, в том числе по типу Ферми-резонанса.

Ключевые слова: молекулярная динамика, компьютерное моделирование, аминокислота, биомолекулярная электроника

Для цитирования: Баранов М. А., Цыбин О. Ю. Суперкомпьютерное моделирование динамики олигомеров ряда аминокислот (Gly, Ala, Trp, Val) в электромагнитном поле инфракрасного диапазона // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 39–56. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19204

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19204

SUPERCOMPUTER SIMULATION OF THE DYNAMICS OF OLIGOMERS OF A NUMBER OF AMINO ACIDS (Gly, Ala, Trp, Val) IN AN INFRARED ELECTROMAGNETIC FIELD

M. A. Baranov ✉, O. Yu. Tsybin

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ baranovma1993@gmail.com

Abstract. Supercomputer simulation of several amino acid oligomers using the molecular dynamics method has made it possible for the first time to identify a complex of characteristics of both intrinsic intramolecular local vibrations, or normal modes, and forced vibrations when specifying an alternating electric field in the IR frequency range. Amplitude-time dependences of energy and electric dipole moment were obtained for oligomers of Gly, Ala, Trp, Val amino acids, the Fourier transform of which revealed their frequency spectra. The type of solvent

© Баранов М. А., Цыбин О. Ю., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

model was shown to significantly affect the position of spectral peaks because of variations in local interactions and system dynamics. The interpretation of the obtained patterns made it possible to propose a non-contradictory model that satisfied the fundamental physical concepts of the intramolecular and intermolecular dynamics of groups of biomolecules. The model allows for intramolecular interactions of normal local vibrations, including those of the Fermi resonance type.

Keywords: molecular dynamics, simulation, amino acid, biomolecular electronics

For citation: Baranov M. A., Tsybin O. Yu., Supercomputer simulation of the dynamics of oligomers of a number of amino acids (Gly, Ala, Trp, Val) in the infrared electromagnetic field, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 39–56. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19204

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Вынужденные биомолекулярные колебательные процессы, обусловленные воздействием внешнего электромагнитного поля, имеют важное значение для наук о жизни, медицине, микроэлектронике и нанотехнологиях, экспериментальной спектроскопии и др. [1 – 13]. Компьютерными вычислениями амплитудно-временных реализаций (АВР) суммарного, или интегрального по всем зарядам молекулы, электрического дипольного момента (ЭДМ) в отсутствие внешнего воздействия выявлена субпикосекундная динамика собственных биомолекулярных колебаний [14, 15]. Значения частот собственных колебаний соответствуют локальным нормальным модам и распределенным колебаниям в диапазоне от терагерцовых (ТГц) до инфракрасных (ИК) частот. Компьютерная молекулярная динамика с вычислением амплитудно-временных реализаций интегрального ЭДМ во внешнем электромагнитном поле позволила вычислить конформации молекул и ИК-спектры их вынужденных колебаний, получить значительные научные и прикладные результаты в современной био- и нанофизике [10, 16 – 25]. Реализована, например, молекулярная динамика мономеров, димеров и протофибрилл молекул Aβ42 в терагерцовом (ТГц)-диапазоне, обоснованы возможности использования этого метода в среднем и дальнем ИК-диапазонах [20]. Показано, что использование ньютоновской механики силовых полей допустимо в молекулярной динамике в среднем и дальнем ИК-диапазонах наряду с квантовомеханическими вычислениями [17, 20, 21, 23, 24, 26 – 28]. Сопоставление молекулярно-динамических исследований в этих диапазонах частот показало довольно близкое соответствие спектральных характеристик экспериментальным и теоретическим данным, относящимся к собственным и вынужденным колебаниям [6, 21 – 23].

Примерами служат отнесения наиболее интенсивных собственных колебаний на вычисленных частотах (волновые числа, $см^{-1}$):

1100, 1519, 1652, 3018, 3322, 3364, 3362 – в растворах аминокислот аланина (Ala);

927, 1060, 1542, 1643, 3210, 3322, 3364, 3479 – в растворах глицина (Gly);

1048, 1533, 1640, 3030, 3325, 3361, 3479, 3663 – в растворах валина (Val);

784, 1403, 1495, 1536, 1646, 2917, 3325, 3562, 3766 – в растворах триптофана (Trp).

Эти результаты соответствует имеющимся теоретическим и экспериментальным данным, однако точность такого соответствия не определена [26, 28].

Согласно известным представлениям, частотные составляющие типичных спектров, которые лежат выше приблизительно на 200 – 800 $см^{-1}$, относятся к локальным собственным внутримолекулярным колебаниям, а ниже – к распределенным коллективным. Установление соответствия (соотнесение) полос локальных осцилляторов с нормальными модами и частотами представлено во многих известных источниках, например, в статье [26].

Спектральный диапазон 2600 – 900 $см^{-1}$ представлен в статье [29]. Девять характерных колебательных полос (амиды A, B, I, II, ..., VII), где амиды I и II дают полосы между 1600 и 1700 $см^{-1}$, а также между 1500 и 1600 $см^{-1}$, соответственно, являются интенсивными в ИК-спектре. Невозмущенный резонанс C=O группы (Amide I) находится на 1688 $см^{-1}$; при этом полоса смещается при наличии воды или других растворителей, а также зависит

© Baranov M. A., Tsybin O. Yu., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

от конформации. Резонанс (N–H)-группы (Amide II) лежит в интервале волновых чисел 1530 – 1580 см$^{-1}$. Резонанс Ca–N (Amide III) соответствует области 1200 – 1340 см$^{-1}$. Значения резонансных колебаний поля (основной гармоники меандра 3335,66 и 1042,37 см$^{-1}$) совпадают с собственными локальными колебаниями определенных типов (асимметричных N–H (Amide A) и C–N, соответственно).

Благодаря развитию методов молекулярной динамики, в последние годы получены новые результаты суперкомпьютерного моделирования, представляющие динамику все более сложных белковых молекул в электрическом поле с разной поляризацией и модуляцией в ТГц- и ИК- диапазонах [30 – 33]. Нарастающее внимание уделяется олигомерам как основным функциональным компонентам, которые позволяют белкам инициировать аллостерию и кооперативность [14, 15, 34 – 37].

Впервые выполнено моделирование колебательной динамики олигомеров, инициированной электромагнитными полями различной поляризации и временной зависимости в разных диапазонах волновых чисел, особенно в дальнем и среднем инфракрасном диапазонах [25].

Актуальность суперкомпьютерного исследования молекулярной динамики олигомеров, изложенного в данной статье, обусловлена необходимостью уточнить результаты анализа вынужденных колебаний таких частиц и их групп в растворах для развития фундаментальных биологических и биофизических представлений, а также для ряда современных и перспективных приложений.

Методика исследования и методические результаты

Выбранный подход к проблеме основывался на том, что разработанная суперкомпьютерная методика молекулярной динамики показала свою достаточно высокую и надежную эффективность [25, 29, 38 – 41].

Методики, развитые ранее для единичных молекул, также использованы в данной работе при изучении олигомеров и их групп.

Методика динамического моделирования молекулярного комплекса реализована с использованием кластера «РСК-Торнадо» суперкомпьютерного центра «Политехнический» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и подробно рассмотрена в нашей статье [33]. Кластер с пиковой производительностью 10^{15} флопс содержит 668 двухпроцессорных узлов (Intel Xeon E5 2697 *v*3), из них 56 имеют два ускорителя вычислений NVIDIA K40. Это позволяет создавать за приемлемое компьютерное время эффективные базы данных амплитудно-временных реализаций интегрального электрического дипольного момента молекул с максимальной длительностью до 40 нс и с наименьшим шагом дискретизации до 1 фс, а также обеспечивать тем самым высокое разрешение Фурье-спектров в дальнем и среднем инфракрасных частотных диапазонах. В состав программно-вычислительного комплекса входили пакеты прикладных программ Avogadro, Visual Molecular Dynamics, и NAMD, а также дополнительные оригинальные программы, написанные на языке Python. Пакет Packmol позволил размещать олигомеры группами с количеством частиц $p = 1, 2, ..., 20$ в водном кубе со стороной 70 Å. С помощью пакета Avogadro были созданы исходные координатные файлы олигомеров аминокислот Gly, Ala, Trp и Val в водных растворах. Ниже представлены, в основном, результаты моделирования олигомеров polyAlaN (при их начальном задании в виде α-спиралей) с различным количеством аминокислотных остатков $N = 1, 2, ..., 18$. Программа VMD позволяла создавать структурные файлы на основе топологии молекулярных связей, добавлять «молекулы воды» и «ионы солей», визуализировать молекулярные системы, выполнять вычисления энергии и дипольных моментов конформационно-подвижных молекул. Для каждого атома системы решали уравнение динамики Ньютона, по временным шагам определяли координаты атомов, параметры силового поля, температуру системы, давление и т.п. В результате получали мгновенные значения координат и скорости заряженных частиц, через которые вычисляли зависимости от времени мгновенных значений интегрального электрического дипольного момента $\mu(t)$ путем суммирования векторов смещений каждого заряда, находящегося в системе в каждый момент времени.

Изменение вектора парциального электрического дипольного момента $\Delta\mu_{n,j}$ на j-м временном шаге длительностью Δt соответствует пространственному смещению заряда q_n на этом шаге на вектор $\Delta\mathbf{r}_{n,j}$:

$$\Delta\mu_{n,j} = q_n \Delta r_{n,j} = q_n \left[r_{n,j} - r_{n,j-1} \right].$$

Временную динамику мгновенных значений интегрального электрического дипольного момента $\mu(t)$ вычисляли путем суммирования по времени суммы парциальных моментов для каждого заряда в растворе олигомеров:

$$\mu(t) = \sum_j \sum_n^N q_n \Delta r_{n,j}, \quad (1)$$

где N – полное количество зарядов.

Динамические зависимости мгновенных значений электрического дипольного момента $\mu(t)$, или амплитудно-временные реализации интегрального ЭДМ, представляют собой суперпозицию локальных колебаний всех внутримолекулярных зарядов.

Спектр волновых чисел колебаний зарядов получали путем Фурье-преобразования функции амплитудно-временной реализации интегрального электрического дипольного момента как каждого олигомера, так и всего комплекса частиц в ячейке системы. При этом в алгоритме вычисления АВР использовалось свойство независимости флуктуаций интегрального электрического дипольного момента (1) от начала отсчета векторов $\Delta\mathbf{r}_{n,j}$. Достигалось высокое разрешение по характеристическим частотам в исследуемой части Фурье-спектра благодаря его численному равенству с отношением длительности амплитудно-временной реализации (АВР) к периоду колебания.

Достоинства применяемого Фурье-метода заключаются в воспроизведении всех спектральных компонент в заданном интервале волновых чисел, в том числе высших и комбинационных гармоник. Диапазон ограничен половиной частоты дискретизации, однако может быть расширен при использовании вычислительных ресурсов суперкомпьютера.

Приложение внешнего электромагнитного поля вызывает смещения зарядов на характеристических частотах ИК-диапазона и реакцию поляризации, изменяющую компоненты вектора и модуль электрического дипольного момента. Для обеспечения наиболее информативного исследования задавали три вида электромагнитного поля с плоской пространственной поляризацией по координатным осям (x, y, z), компонентами [E,0,0] с амплитудами от 0,01 до 0,50 В/нм:

гармоническое электромагнитное поле,

периодическая последовательность однополярных прямоугольных импульсов,

симметричный прямоугольный меандр.

Значение последнего было продиктовано тем, что меандр обладает свойствами периодических последовательностей импульсов и представляет практический интерес в микроэлектронике для задач управляемого переключения состояний молекул, а также для выявления ангармонической динамики молекул. Возможность и эффективность применения электромагнитного поля в виде меандра с основной гармоникой в ИК-диапазоне частот апробирована и подтверждена в ряде работ [14, 15, 23 – 25]. Подобное поле в виде меандра было реализовано в молекулярной динамике с воздействием на воду (в жидком состоянии) в интервале частот 20 – 500 ГГц [40].

Напряженность локального электрического поля, действующего на заряды в молекуле, варьировали в широком интервале значений: 0,004 – 0,400 В/нм. Как и в предыдущих наших работах, а также в работах других авторов, зависимость амплитуд колебаний от времени была линейной и не вызывала фрагментации молекулы. Действительно, такие поля существуют только в микроскопической области вблизи заряда и соответствуют типичным атомным внутримолекулярным. Такой подход не требует сопоставления с макроскопическим полем, имеющим иные энергетические характеристики [42 – 44].

Руководствуясь предварительно полученными данными о спектрах собственных колебаний олигомеров, мы задавали внешнее электрическое поле $E(t)$ резонансными выборками со следующими волновыми числами основной гармоники (см$^{-1}$):

5555, 4167, 3333, 1667, 1515, 1111, 1042, 980 и 200.

Этим выборкам сопоставлены их энергетические характеристики (рис. 1).

Сценарии изменения кинетической и потенциальной энергии частиц и системы в целом определяли одновременно с вычислением амплитудно-временной реализации величины электрического дипольного момента.

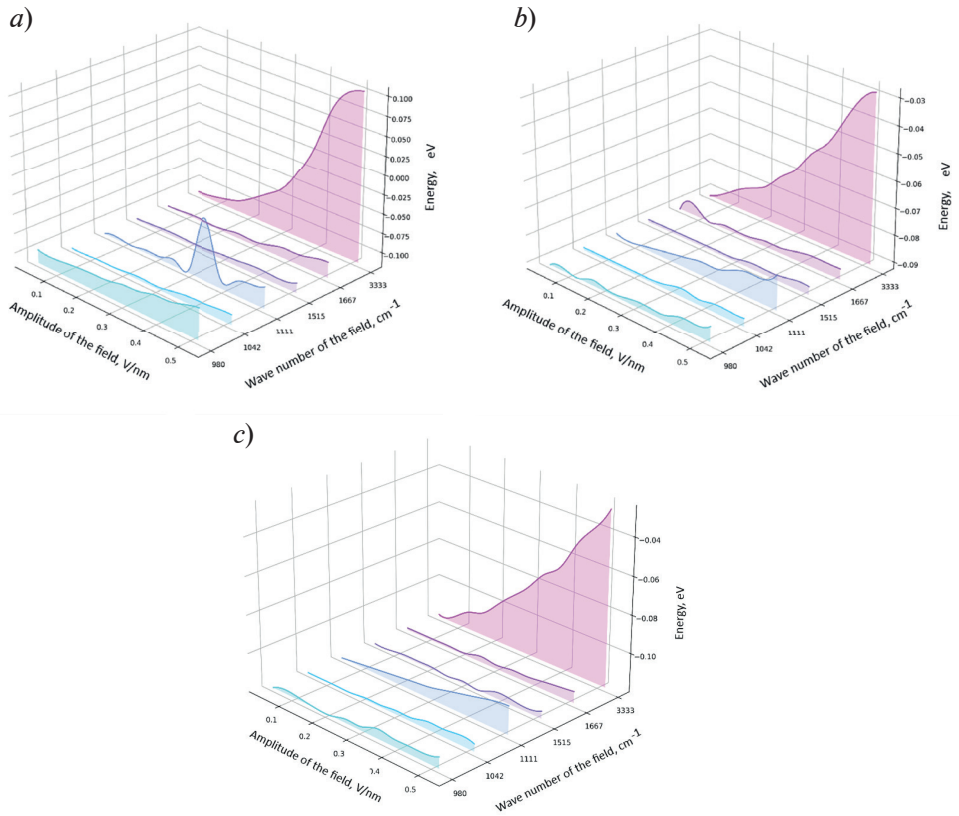


Рис. 1. Типичные характеристики потенциальной энергии молекул Ala (*a*), Gly (*b*), Trp (*c*) в водных растворах при задании растворителя алгоритмом явного растворителя. Показаны 3D-зависимости энергии от амплитуды меандра электромагнитного поля на ряде выбранных значений волновых чисел (WN). Температура была равна 298 K, шаг дискретизации по времени – 5 фс

Существенная, наиболее сильная, зависимость от амплитуды переменного электрического поля проявляется на значении волнового числа 3333 $см^{-1}$, соответствующем локализации колебаний асимметричных групп NH (Amide A) (см. рис. 1, *a*). Возможно, это связано также с преимущественной локализацией колебаний в цепях водородных связей. Энергия молекулы при резонансе зависела в большей степени от напряженности приложенного электромагнитного поля, и в меньшей степени (или почти не зависела) от длительности амплитудно-временной реализации. В области с амплитудой поля приблизительно от 0,01 до 0,50 В/нм сохранялись как практически постоянное значение потенциальной энергии во временном интервале от 0 до 510 пс для молекул Gly и Trp, так и более сложная зависимость, обусловленная, по-видимому, увеличенной боковой ветвью, – для Ala (см. рис. 1, *b*).

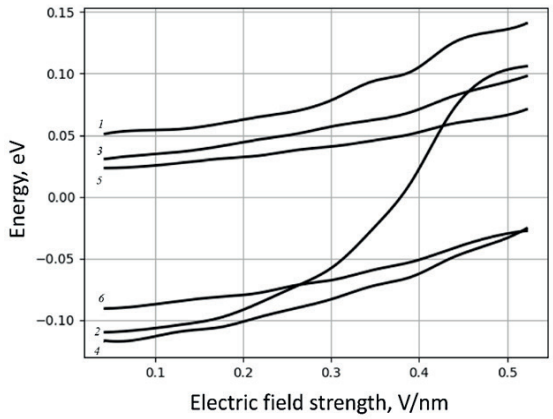


Рис. 2. Зависимости значений потенциальной и кинетической энергии молекул аминокислот дифенил-L-аланина (*1*, *2*), триптофана (*3*, *4*) и глицина (*5*, *6*) в водном растворе от амплитуды поля в момент времени $t = 500$ пс. Волновое число основной гармоники электромагнитного поля составляет 3333 $см^{-1}$

На рис. 2 представлены зависимости значений потенциальной и кинетической энергии молекул аминокислот дифенил-L-аланина, триптофана и глицина в водном растворе от амплитуды электромагнитного поля в фиксированный момент

времени t = 500 пс. Волновое число основной гармоники электромагнитного поля равно 3333 см$^{-1}$. Характерно, что имеется линейный участок нарастания энергии от предельно малых амплитуд электромагнитного поля на значении основной гармоники поля 3333 см$^{-1}$ до приблизительно 0,4 В/нм для глицина и триптофана, и 0,2 В/нм – для дифенил-L-аланина. На других характеристических частотах (например, 980 и 200 см$^{-1}$) оба вида энергии практически не зависят от амплитуды поля, что соответствует данным на рис. 1, *а*.

Выявлены смещения спектральных пиков по шкале волновых чисел при задании различий в алгоритмах локальных взаимодействий и динамики системы. В частности, виртуальные молекулярные системы различались по способу добавления воды (растворитель). Так, в систему можно было «добавлять» как неявный растворитель, так и явный (с добавлением молекул воды), т.е. использовать модель Coarse-Grained [45].

Во втором случае объем и сложность вычислений возрастают, поскольку необходимо задавать параметры и состояния молекул воды, размер водного куба и др. Для первого случая использовали метод GBIS (Generalized Born Implicit Solvent). Обобщенный неявный растворитель Борна (GBIS) – это быстрый, но приближенный метод расчета молекулярной электростатики в растворителе, описываемый уравнением Пуассона – Больцмана, которое моделирует воду как диэлектрический континуум:

$$\nabla \times \left[\varepsilon(r)\nabla\varphi(r)\right] = -\rho^{f}(r) - \sum_{i} c_i^{\infty} z_i e_0 \exp\left[\frac{-z_i e_0 \varphi(r)}{k_{\text{в}} T}\right], \qquad (2)$$

где $\varepsilon(\mathbf{r})$ – диэлектрическая проницаемость среды, φ – электрический потенциал, $\rho^{f}(\mathbf{r})$ – плотность электрического заряда в среде, c_i^{∞} – концентрация i-ого иона на бесконечности, z_i – валентность i-го иона, $k_{\text{в}}$ – постоянная Больцмана, T – температура.

Данный метод позволяет моделировать атомные структуры без включения явной воды, т.е. без добавления атомов водорода и кислорода (H и O), и не проводить для них вычисления координат. Использование неявного растворителя значительно ускоряет моделирование и значительно уменьшает размер выходных файлов (примерно 1 : 50 Гб), что выступает ключевым фактором в данном исследовании.

Молекулы аминокислот помещали в моделируемую периодическую систему с ячейкой в виде куба воды (длина его стороны составляла 70 Å и не зависела от размеров молекул аминокислот). Расстояние от крайней молекулы до границы куба составляло 15 Å. Для моделирования растворения молекул была использована модель воды TIP3W, соответствующая трем атомам молекулы воды в трех точках взаимодействия с молекулой. Подобные модели обеспечивают высокую вычислительную эффективность и применяются в многих приложениях молекулярной динамики. Кроме того, выбранная нами модель воды была также использована в силовом поле CHARMM. Разница заключалась в применении параметров Леннарда – Джонса: в отличие от модели TIP3, версия модели CHARMM присваивает указанные параметры атомам водорода в дополнение к параметрам кислорода в молекуле воды [46, 47]. Эту модель воды использовали авторы многих подобных исследований, однако смещения частоты собственных колебаний, связанные с различием алгоритмов, не были ими замечены [48, 49].

Результаты моделирования системы

На рис. 3 показаны спектральные характеристики воды в периодической системе кубических ячеек, вычисленные в данной работе при использовании алгоритма явного растворителя; для сравнения приведены известные из литературы диапазоны собственных колебаний молекул воды [50].

Спектр Фурье электрического дипольного момента молекул воды был вычислен при помощи плагина VMD IR Spectral Density Calculator, длительность амплитудно-временной реализации составляла 20 нс.

Анализ данных на рис. 3 позволяет заключить, что спектральные полосы колебаний молекул воды близки к позициям спектральных пиков собственных колебаний биомолекул [20, 30, 31, 33]. Спектральные резонансные эффекты вынужденных колебаний во внешнем электромагнитном поле, выявленные в интегральных электрических дипольных моментах ансамблей олигомеров, по энергетическим характеристикам подобны наблюдаемым в единичных молекулах аминокислот, приведенным в статьях [20, 33], а также в димерах, тримерах и других пептидах [51, 52].

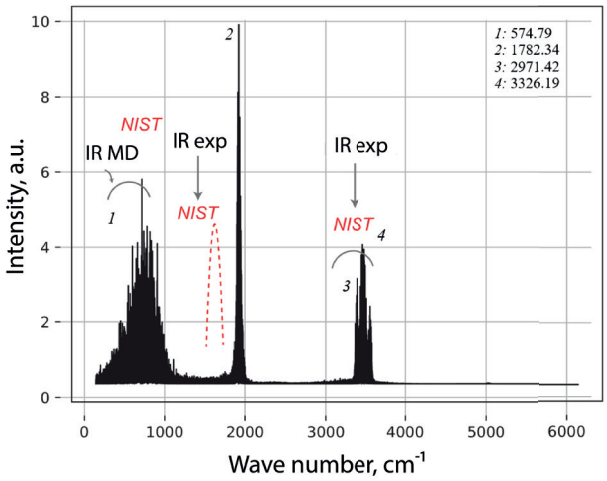


Рис. 3. Спектры Фурье амплитудно-временной реализации электрического дипольного момента молекул воды: IR MD – результат вычисления с помощью плагина VMD IR Spectral Density Calculator (t = 1 нс, f_D = 200 ТГц); IR exp NIST – экспериментальный результат по базе данных NIST (Национального института стандартов и технологий) [48].
Волновые числа (см$^{-1}$) спектральных колебательных полос *1 – 4* представлены в легенде

Фурье-спектры полос собственных внутримолекулярных колебаний олигомеров polyAlaN были качественно взаимно подобны при разных значениях N (N = 1, 2, ..., 18) и количества p (p = 1, 2, ..., 10) таких олигомеров в водном кубе, но при этом они содержали ряд количественных особенностей. Типичные обзорные и оконные (фрагментарные) спектры собственных колебаний интегрального электрического дипольного момента олигомеров polyAla12 при длительности амплитудно-временной реализации 2 нс, длительности времени реализации 510 пс и шаге дискретизации по времени 5 фс (температура равна 298 K), представлены на рис. 4.

Сравнение обзорных Фурье-спектров собственных колебаний единичных олигомеров polyAla12 (p = 1) и их группы при p = 10 (см. рис. 4) показывает, что состав спектральных компонент практически одинаков. Прослеживается смена спектральных составляющих при увеличении количества олигомеров: переход от структуры двух пиков в центре на волновых числах 3313,5 и 3358,1 см$^{-1}$ к структуре, состоящей из двух пиков на 3277 и 3394,4 см$^{-1}$. По-видимому, этот факт указывает на диполь-дипольное взаимодействие олигомеров в группе частиц. Аналогичная эволюция спектральных составляющих воспроизводилась и при других значениях параметров N и p. Анализ типичных фрагментов обзорного спектра частот, или оконных спектров собственных колебаний интегрального электрического дипольного момента ансамбля олигомеров polyAla12 (см. рис. 4), приводит к предположению, что наблюдаемые в них различия обусловлены эффектами взаимной фононной связи локальных колебаний, а также групповыми механизмами формирования спектральных компонент в ансамбле молекул.

Нами были вычислены Фурье-спектры вынужденных колебаний интегрального ЭДМ олигомеров polyAla18 при p = 1 и длительности амплитудно-временной реализации, равной 2 нс при воздействии внешнего электромагнитного поля в виде симметричного прямоугольного меандра. Амплитуду меандра изменяли на два порядка в пределах от 0,004 до 0,400 В/нм, соответствующих локальным атомным полям в пределах молекулы. На разных частотах колебаний основные гармоники в спектре при изменении параметров воздействия показали практически одинаковые сценарии и закономерности. Типичные обзорные спектры вынужденных колебаний интегрального ЭДМ ансамбля олигомеров polyAla18 при p = 1, длительности амплитудно-временной реализации, равной 2 нс, при воздействии внешнего поля в виде симметричного прямоугольного меандра с амплитудой размаха 0,4 В/нм на разных волновых числах основной гармоники представлены на рис. 5.

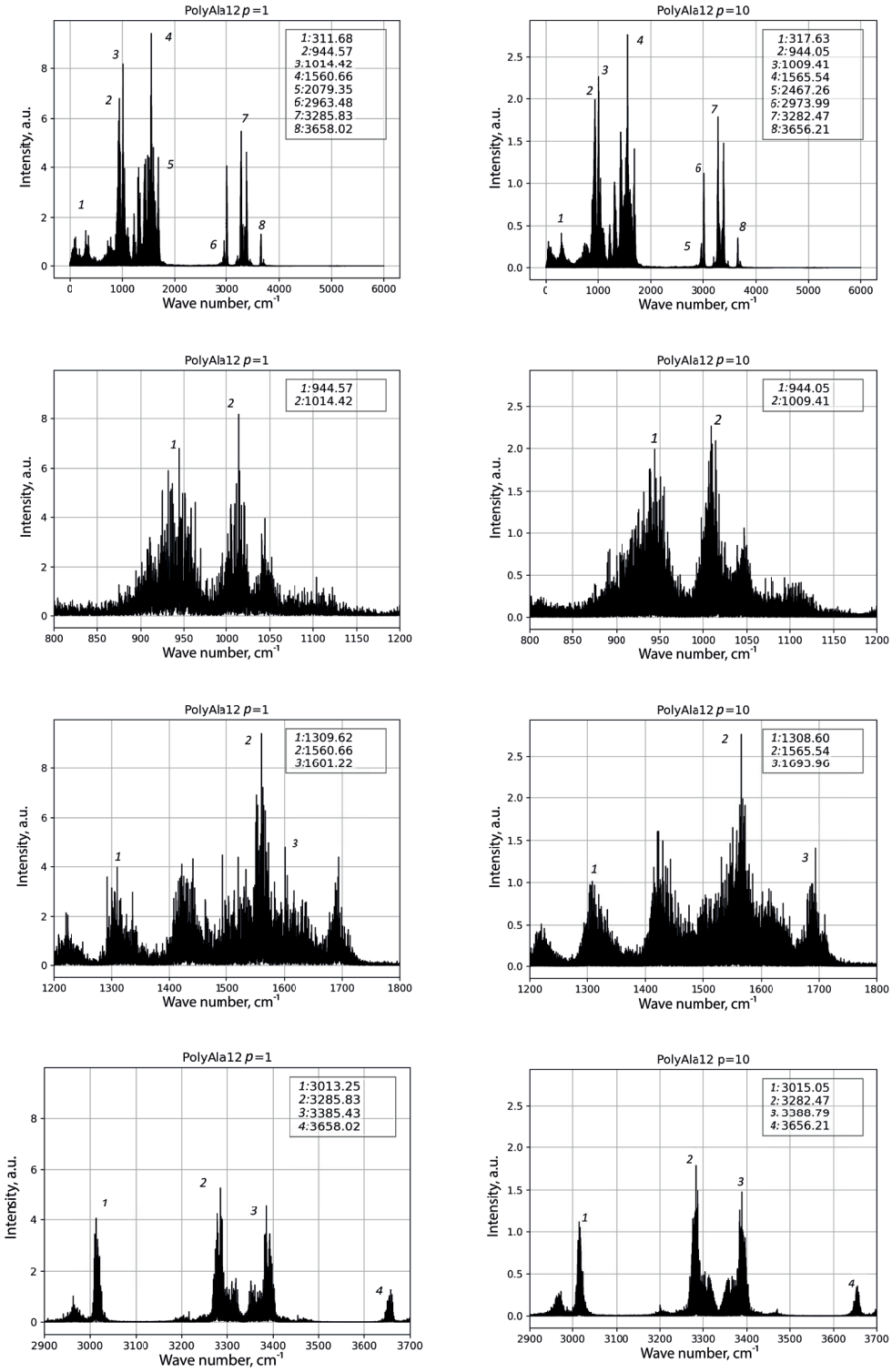
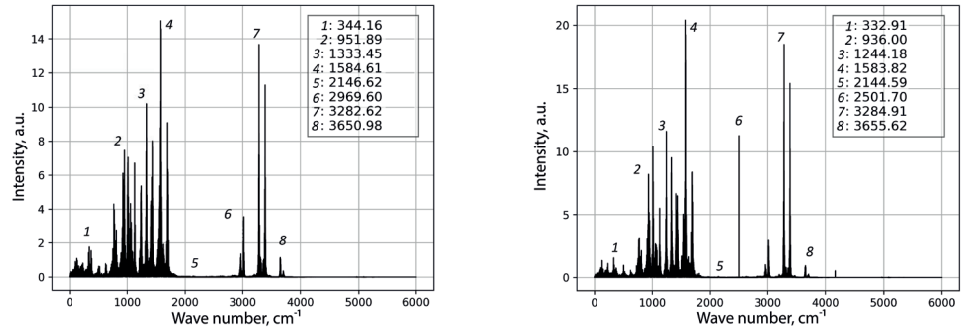


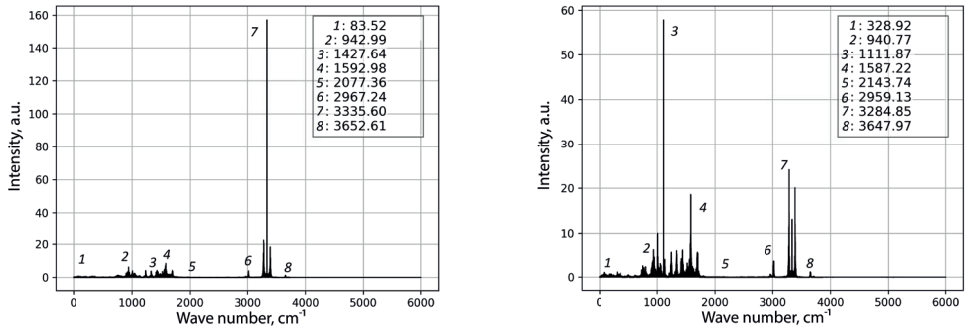
Рис. 4. Типичные фрагменты из обзорного спектра волновых чисел (оконные спектры) собственных внутримолекулярных колебаний интегрального электрического дипольного момента олигомеров polyAla12 при различных значениях количества олигомеров *p*.

Волновые числа ($см^{-1}$) спектральных колебательных полос представлены в легендах

a) WN = 5555 $см^{-1}$ *b*) WN = 4167 $см^{-1}$



c) WN = 3333 $см^{-1}$ *d*) WN = 1111 $см^{-1}$



e) WN = 1042$см^{-1}$ *f*) WN = 980$см^{-1}$

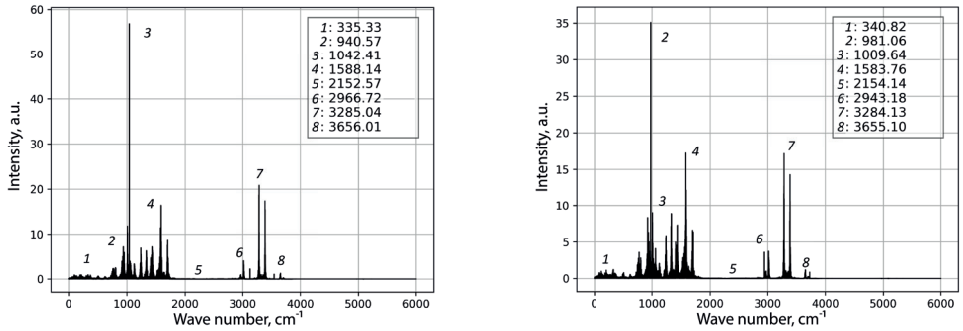


Рис. 5. Фурье-спектры вынужденных колебаний интегрального электрического дипольного момента олигомеров polyAla18 (p = 1, длительность амплитудно-временной реализации − 2 нс) при воздействии внешнего электромагнитного поля в виде симметричного прямоугольного меандра с амплитудой размаха 0,4 В/нм при разных значениях волнового числа (WN) основной гармоники

Аналогичные спектры с подобными характеристиками получены при меньших полях в интервале 0,01 − 0,400 В/нм для всех трех форм задания электромагнитного поля.

Сопоставление спектров вынужденных (см. рис. 5) и собственных колебаний показало, что воздействие поля на значениях волновых чисел 5555 и 4167 $см^{-1}$, а также других в области, лежащей выше частот собственных локальных колебаний, не вызывают заметной перестройки спектральных составляющих олигомеров при разных значениях N (N = 1, 2, ..., 18). При совпадении частоты воздействия, например при значениях волновых чисел (в $см^{-1}$) 3333, 1111, 1042 и 980, и частоты собственного локального колебания выявляется сильная амплитудная перестройка по типу резонансной накачки вынужденных колебаний (см. рис. 4). Причинами такого результата, скорее всего,

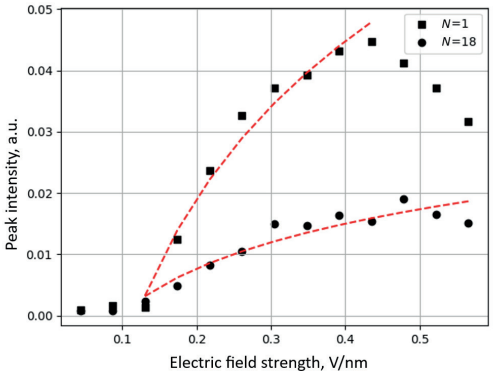


Рис. 6. Зависимости значений резонансных пиков молекул polyAlaN при $N = 1$ и $N = 18$, $p = 1$, от амплитуды напряженности электромагнитного поля при воздействии его меандра и значении волнового числа основной гармоники WN = 3333 см$^{-1}$

являются соответствующие изменения конформационной структуры и значений интегрального ЭДМ. Действительно, полученные частотные зависимости значений интегрального ЭДМ (усредненных за время амплитудно-временной реализации) олигомеров polyAla18 при различных значениях параметра p для электрического поля с амплитудой $E = 0{,}4$ В/нм не противоречили этому предположению.

На рис. 6 приведены зависимости максимальных значений резонансных спектральных полос молекул polyAlaN при $N = 1$, $N = 18$ и $p = 1$, от значений амплитуды напряженности электромагнитного поля при воздействии меандра на волновом числе основной гармоники 3333 см$^{-1}$. Выявлен участок почти линейной связи между

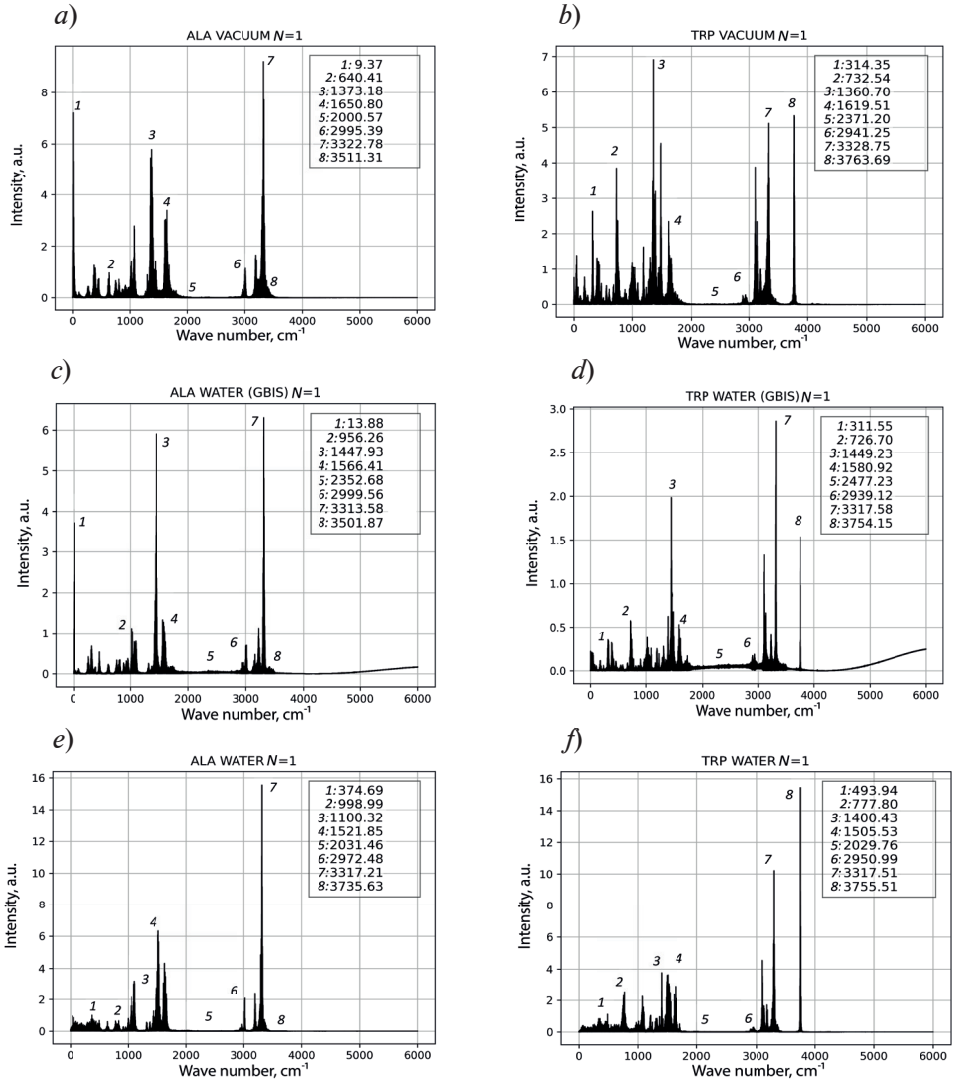


Рис. 7. Промоделированные спектральные характеристики амплитудно-временной реализации электрического дипольного момента молекул Ala и Trp (при $t = 1$ нс) в разных средах: Ala в вакууме (*a*); Trp в вакууме (*b*); Ala GBIS (*c*); Trp GBIS (*d*); Ala в явном водном растворителе (*e*); Trp в явном водном растворителе (*f*)

амплитудами резонансов и предельно малыми значениями амплитуды электромагнитного поля. Этот участок простирается вплоть до максимальных значений резонансных спектральных полос, когда величина поля составляет примерно 0,4 В/нм, что соответствует известным результатам других работ [53, 54].

Для разных частот воздействия поля, амплитуда спектральных линий либо почти не изменялась подобным образом, либо нарастала линейно при повышении поля в указанном интервале.

На рис. 7 представлены спектральные характеристики амплитудно-временной реализации электрических дипольных моментов молекул Ala и Trp при моделировании системы для условий вакуума и различных моделей воды-растворителя. Выявленные различия в спектральных характеристиках, обсуждаемые далее, позволили сформулировать и обосновать некоторые существенные дополнения к описанию колебательных свойств молекул.

Обсуждение полученных результатов

Представленные результаты позволяют проанализировать динамические свойства рассмотренного ряда олигомеров в ИК-диапазоне. Сравнение обзорных Фурье-спектров собственных колебаний единичных олигомеров и их групп показало, что состав спектральных компонент при различных значениях параметров N и p практически совпадает. Эффекты вынужденных колебаний во внешних электромагнитных полях различной формы, в том числе гармонических и импульсных периодических, выявленные в интегральных электрических дипольных моментах ансамблей олигомеров, по энергетическим и спектральным характеристикам оказались подобными наблюдаемым в единичных молекулах аминокислот.

При рассмотрении типичных фрагментов обзорного спектра частот (оконных спектров) собственных колебаний интегрального электрического дипольного момента ансамбля олигомеров выявляется эффект близости осцилляторов по частоте, а также осцилляторов электромагнитных полей по частоте. На этом основании можно предположить, что в них имеют место эффекты взаимосвязи локальных колебаний; такая связь, скорее всего, обусловлена фононными взаимодействиями, при этом происходит групповое формирование спектральных компонент. При увеличении размера олигомера совершалось перераспределение компонент частотного спектра: переход от структуры двух пиков в центре (при значениях волновых чисел 3313,5 и 3358,1 $см^{-1}$) к структуре, состоящей также из двух пиков – 3277 и 3394,4 $см^{-1}$. Аналогичная эволюция спектральных составляющих воспроизводилась и при других значениях размера N. На наш взгляд, такой эффект вызван Ферми-резонансом второй гармоники колебаний на 1565,7 и 1695,5 $см^{-1}$, имеющихся в спектре, с резонансным колебанием при 3333 $см^{-1}$, которое нам удалось выявить через воздействие внешнего электромагнитного поля.

Для единичной молекулы не наблюдалось существенных изменений интегрального ЭДМ при воздействии внешнего электромагнитного поля в режиме вынужденных локальных колебаний, что указывает, по всей вероятности, на устойчивость конформации единичного олигомера при возбуждении в нем локальных, а не коллективных колебаний. Однако существенные изменения появляются при бóльших значениях количества олигомеров в ансамбле частиц, когда параметр $p = 3$, 4 и 5. В этом случае возможны, по-видимому, эффекты воздействия внешнего электромагнитного поля на межмолекулярные колебания и силовые диполь-дипольные взаимодействия.

При моделировании впервые выявлено различие зависимостей резонансных пиков молекул polyAlaN при значениях $N = 1$ и $N = 18$, от напряженности электромагнитного поля при воздействии меандра при волновом числе основной гармоники 3333 $см^{-1}$ (см. рис. 5). Резонансное возрастание электрического дипольного момента происходит значительно интенсивнее для единичной молекулы (см. рис. 1), чем для олигомера, конформация и интегральная энергия которого оказываются стабильнее по отношению к возбуждению внутримолекулярных локальных осцилляторов.

Заключение

В работе впервые осуществлено суперкомпьютерное молекулярно-динамическое моделирование олигомеров ряда аминокислот в электромагнитных полях ИК-диапазона. Реализованные суперкомпьютерные методы такого рода целесообразно использовать

в области нанобиотехнологий и микроэлектроники со встроенными биомолекулярными компонентами, среди которых важное место занимают олигомеры аминокислот. Применение методики доказало свою довольно высокую и надежную эффективность; оно обеспечило получение новых результатов, которые непротиворечиво дополняют известные теоретические и экспериментальные данные. Использование трех разных видов амплитудной модуляции воздействующего электромагнитного поля (гармоническая, периодическая последовательность однополярных прямоугольных импульсов, симметричный прямоугольный меандр) позволило сформировать основы дальнейшего практического рассмотрения, а также создать условия контроля ангармоничности в широкой полосе частот среднего и дальнего ИК-диапазонов.

Применяемая методика позволила сравнивать спектры частот собственных колебаний молекул как в воде, так и без водной среды, а также выявлять общие свойства и особенности. Добавление воды (виртуальное) приводило к положительным сдвигам частот в пределах нескольких процентов, т.е. смещению значений энергии колебаний в целом в сторону увеличения. Вероятно, природа такой трансформации обусловлена особенностями спектра собственных колебаний молекул воды, нелинейные связи которых возникали одновременно с локальными осцилляторами молекул.

Для олигомеров нами впервые выявлен комплекс характеристик как собственных внутримолекулярных локальных колебаний (нормальных мод), так и вынужденных колебаний в дальнем и среднем ИК-диапазонах. Интерпретация полученных закономерностей позволила предложить непротиворечивую модель физики молекул, включающую взаимные фононные связи локальных осцилляторов, удовлетворяющую фундаментальным физическим представлениям о внутримолекулярной и межмолекулярной динамике групп биомолекул.

Полученные результаты можно использовать для определения функциональных свойств дегидратированных биомолекулярных пленок, применяемых в биофизике, нанобиотехнологии и микроэлектронике, например при разработке и поиске прототипов биоэлектронных и гетерогенных гибридных микроэлектронных приборов с встроенными биомолекулярными компонентами [55].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ruan X., Ruan X., Huang H.** Application of terahertz spectroscopy in medical microbiological detection // Journal of Physics: Conference Series. 2022. Vol. 2425. No. 1. P. 012045.

2. **Turton D. A., Senn H. M., Harwood T., Lapthorn A. J., Ellis E. M., Wynne K.** Terahertz underdamped vibrational motion governs protein-ligand binding in solution // Nature Communications. 2014. Vol. 5. 03 June. P. 3999.

3. **Noble B. B., Todorova N., Yarovsky I.** Electromagnetic bioeffects: a multiscale molecular simulation perspective // Physical Chemistry Chemical Physics. 2022. Vol. 24. No. 11. Pp. 6327–6348.

4. **Woods K. N.** Solvent-induced backbone fluctuations and the collective librational dynamics of lysozyme studied by terahertz spectroscopy // Physical Review E. 2010. Vol. 81. No. 3. P. 031915.

5. **Niehues G., Heyden M., Schmidt D. A., Havenith M.** Exploring hydrophobicity by THz absorption spectroscopy of solvated amino acids // Faraday Discussions. 2011. Vol. 150. 23 May. Pp. 193–207.

6. **Jeong S.-Y., Cheon H., Lee D., Son J.-H.** Determining terahertz resonant peaks of biomolecules in aqueous environment // Optics Express. 2020. Vol. 28. No. 3. Pp. 3854–3863.

7. **Grechko M., Hasegawa T., D'Angelo F., Ito H., Turchinovich D., Nagata Y., Bonn M.** Coupling between intra- and intermolecular motions in liquid water revealed by two-dimensional terahertz-infrared-visible spectroscopy // Nature Communications. 2018. Vol. 9. No. 1. P. 885.

8. **Xu J., Galan J., Ramian G., Savvidis P., Scopatz A., Birge R. R., Allen S. J., Plaxco K.** Terahertz circular dichroism spectroscopy of biomolecules // Edited by Jensen J. O., Theriault J.-M. Proceedings SPIE. 2004. Vol. 5268. Chemical and Biological Standoff Detection. 27 February. Pp. 19–26.

9. **Beyer C., Christen P., Jelesarov I., Fröhlichet J.** Real-time assessment of possible electromagnetic-field-induced changesin protein conformationand thermal stability // Bioelectromagnetics. 2014. Vol. 35. No. 7. Pp. 470–478.

10. **Calabrò E., Magazù S.** Resonant interaction between electromagnetic fields and proteins: A possible starting point for the treatment of cancer // Electromagnetic Biology and Medicine. 2018. Vol. 37. No. 3. Pp. 155–168.

11. **Harvey A.** The interaction between electromagnetic fields at megahertz, gigahertz and terahertz frequencies with cells, tissues and organisms: Risks and potential // Journal of the Royal Society, Interface. 2017. Vol. 14. P. 0585

12. **Wu H., Ghaani M. R., Futera Z., English N. J.** Effects of externally applied electric fields on the manipulation of solvated-chignolin folding: Static- versus alternating-field dichotomy at play // The Journal of Physical Chemistry B. 2022. Vol. 126. No. 2. Pp. 376–386.

13. **Vaden T. D., de Boer T. S. J. A., Simons J. P., Snoek L. C., Suhai S., Paizs B.** Vibrational spectroscopy and conformational structure of protonated polyalanine peptides isolated in the gas phase // The Journal of Physical Chemistry A. 2008. Vol. 112. No. 20. Pp. 4608–4616.

14. **Matsunaga Y., Koike R., Ota M., Tame J. R. H., Kidera A.** Influence of structural symmetry on protein dynamics // PLoS One. 2012. Vol. 7. No. 11. P. e50011.

15. **Wako H., Endo S.** Dynamic properties of oligomers that characterize low-frequency normal modes // Biophysics and Physicobiology. 2019. Vol. 16. November 29. Pp. 220–231.

16. **Husseini F. S., Robinson D., Hunt N. T., Parker A. W., Hirst J. D.** Computing infrared spectra of proteins using the exciton model // Journal of Computational Chemistry. 2017. Vol. 38. No. 16. Pp. 1362–1375.

17. **Schultheis V., Reichold R., Schropp B., Tavan P.** A polarizable force field for computing the infrared spectra of the polypeptide backbone // The Journal of Physical Chemistry B. 2008. Vol. 112. No. 39. Pp. 12217–12230.

18. **Narayan B., Herbert C., Rodriguez B. J., Brooks B. R., Buchete N.-V.** Replica exchange molecular dynamics of diphenylalanine amyloid peptides in electric fields // The Journal of Physical Chemistry B. 2021. Vol. 125. No. 20. Pp. 5233–5242.

19. **Bradshaw R. T., Dziedzic J., Skylaris Ch.-K., Essex J. W.** The role of electrostatics in enzymes: Do biomolecular force fields reflect protein electric fields? // Journal of Chemical Information and Modeling. 2020. Vol. 60. No. 6. Pp. 3131–3144.

20. **Баранов М. А., Карсеева Э. К., Цыбин О. Ю.** Суперкомпьютерное моделирование внутримолекулярных колебаний глицина, дифенилаланина и триптофана в электрическом поле терагерцового и инфракрасного диапазонов // Биофизика. 2024. Т. 69. № 2. С. 213–229.

21. **Wolpert M., Hellwig P.** Infrared spectra and molar absorption coefficients of the 20 alpha amino acids in aqueous solutions in the spectral range from 1800 to 500 cm^{-1} // Spectrochimica Acta A.: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2006. Vol. 64. No. 4. Pp. 987–1001.

22. **Barth A.** Infrared spectroscopy of proteins // Biochimica et Biophysica Acta – Bioenergetics. 2007. Vol. 1767. No. 9. Pp. 1073–1101.

23. **Zhang F., Tominaga K., Hayashi M., Wang H.-W.** Low-frequency vibration study of amino acids using terahertz spectroscopy and solid-state density functional theory // Zhang C., Zhang Xi-Ch., Nani M. (Eds.) Proceedings of SPI. Vol. 9275. Infrared, Millimeter-Wave, and Terahertz Technologies III. Conference: SPIE/COS Photonics Asia 2014. 11 November, Beijing, P. 92750D.

24. **Moon J. H., Oh J. Y., Kim M. S.** A systematic and efficient method to estimate the vibrational frequencies of linear peptide and protein ions with any amino acid sequence for the calculation of Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus rate constant // Journal of the American Society for Mass Spectrometry. 2006. Vol. 17. No. 12. Pp. 1749–1757.

25. **Baranov M. A., Shariaty F., Tsybin O. Y.** Dynamics of glycine, diphenylalanine, and tryptophan oligomers: Computer simulation in an IR electric field with different forms and polarization // Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. 2026. Vol. 44. No. 5. Pp. 2651–2658.

26. **Barth A.** The infrared absorption of amino acid side chains // Progress in Biophysics and Molecular Biology. 2000. Vol. 74. No. 3–5. Pp. 141–173.

27. **Barth A., Zscherp C.** What vibrations tell us about proteins // Quarterly Reviews of Biophysics. 2002. Vol. 35. No. 4. Pp. 369–430.

28. **Бутырская Е. В., Нечаева Л. С., Шапошник В. А., Дроздова В. И.** Отнесение полос в ИК спектрах водных растворов глицина на основе квантовохимического расчета // Сорбционные и хроматографические процессы. 2012. Т. 12. № 4. С. 501–512.

29. **Редьков А. В., Осипов А. В. Кукушкин С. А.** Моделирование процесса индентирования наномасштабных пленок на подложках методом молекулярной динамики // Письма в Журнал технической физики. 2016. Т. 42. № 12. С. 64–72.

30. **Непомнящая Э. К., Баранов М. А., Цыбин О. Ю.** Компьютерная резонансная динамика молекулы глицина в электрическом поле инфракрасного диапазона // Письма в Журнал технической физики. 2023. Т. 49. № 7. С. 8–11.

31. **Баранов М. А., Непомнящая Э. К., Цыбин О. Ю.** Фурье-спектр интегрального дипольного момента суперкомпьютерных моделей ряда аминокислот // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 4. С. 55–68.

32. **Баранов М. А., Цыбин О. Ю., Величко Е. Н.** Компьютерный анализ релаксации свободной энергии молекул глицина, триптофана и альбумина в ионизованном водном растворе // Научно-технические ведомости СПбПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 4. С. 135–146.

33. **Баранов М. А., Карсеева Э. К., Цыбин О. Ю.** Суперкомпьютерные динамические модели глицина, триптофана и дифенилаланина в электрических полях терагерцового и инфракрасного спектральных диапазонов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 59–72.

34. **Goodsell D. S., Olson A. J.** Structural symmetry and protein function // Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure. 2000. Vol. 29. No. 1. Pp. 105–153.

35. **Bahar I., Lezon T. R., Bakan A., Shrivastava I. H.** Normal mode analysis of biomolecular structures: Functional mechanisms of membrane proteins // Chemical Review. 2010. Vol. 110. No. 3. Pp. 1463–1497.

36. **Faridoddin S., Baranov M. A., Tsybin O. Yu.** Structure of biomolecular films through advanced imaging and statistical analysis // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2024. Vol. 702. Part 1. 5 December. P. 134920.

37. **Компан М. Е., Баранов М. А., Малышкин В. Г., Цыбин О. Ю.** Спектры комбинационного рассеяния в диапазоне 75 – 1200 $см^{-1}$ аминокислот L-триптофана, дифенил-L-аланина и глицина в водном растворе и в гидратированных пленках // Физика твердого тела. 2024. Т. 66. № 8. С. 1445–1449.

38. **Löffler G., Schreiber H., Steinhauser O.** Calculation of the dielectric properties of a protein and its solvent: Theory and a case study // Journal of Molecular Biology. 1997. Vol. 270. No. 3. Pp. 520–534.

39. **Baranov M., Tsybin O.** Supercomputer simulation of amino acid molecules high-frequency polarizability in THz electric field // Proceedings of the 2023 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), 19–20 October 2023. St. Petersburg, Russian Federation. IEEE, 2023. Pp. 261–264.

40. **Karplus M.** Molecular dynamics simulations of biomolecules // Accounts of Chemical Research. 2002. Vol. 35. No. 6. Pp. 321–323.

41. **Ruiz M. P., Aragonès A. C., Camarero N., Vilhena J. G., Ortega M., Zotti L. A., Pérez R., Cuevas J. C., Gorostiza P., Díez-Pérez I.** Bioengineering a single-protein junction // Journal of the American Chemical Society. 2017. Vol. 139. No. 43. Pp. 15337–15346.

42. **Reimann K., Woerner M., Elsaesser T.** Two-dimensional terahertz spectroscopy of condensed-phase molecular systems // The Journal of Chemical Physics. 2021. Vol. 154. No. 12. P. 120901.

43. **Solomentsev G. Y., English N. J., Mooney D. A.** Effects of external electromagnetic fields on the conformational sampling of a short alanine peptide // Journal of Computational Chemistry. 2012. Vol. 33. No. 9. Pp. 917–923.

44. **Kelly C. M., Northey T., Ryan K., Brooks B. R., Kholkin A. L., Rodriguez B. J., Buchete N.-V.** Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field // Biophysical Chemistry. 2015. Vol. 196. January. Pp. 16–24.

45. **Hadley K. R., McCabe C.** Coarse-grained molecular models of water: A review // Molecular Simulation. 2012. Vol. 38. No. 8–9. Pp. 671–681.

46. **Mao Y., Zhang Y.** Thermal conductivity, shear viscosity and specific heat of rigid water models // Chemical Physics Letters. 2012. Vol. 542. 23 July. Pp. 37–41.

47. **MacKerell, Ir., A. D., Bashford D., Bellott M., et al.** All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins // The Journal of Physical Chemistry B. 1998. Vol. 102. No. 18. Pp. 3586–3616.

48. **Linstrom P. J., Mallard W. G.** NIST standard reference database number 69 // NIST (National Institute of Standards and Technologies) Chemistry WebBook. 2005. Vol. 1227. No. 69. P. 20899.

49. **Feng J.-Y., Lee Y.-P., Zhu Ch.-Y., Hsu P.-J., Kuo J.-L., Ebata T.** IR–VUV spectroscopy of pyridine dimers, trimers and pyridine – ammonia complexes in a supersonic jet // Physical Chemistry Chemical Physics. 2020. Vol. 22. No. 37. Pp. 21520–21534.

50. **Zhang B., Yu Y., Zhang Zh., et al.** Infrared spectroscopy of neutral water dimer based on a tunable vacuum ultraviolet free electron laser // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2020. Vol. 11. No. 3. Pp. 851–855.

51. **Баранов М. А., Карсеева Е. К., Цыбин О. Ю.** Прототипы приборов гетерогенной гибридной полупроводниковой электроники с встроенным биомолекулярным доменом // Микроэлектроника. 2023. Т. 52. № 6. Р. 497–507.

REFERENCES

1. **Ruan X., Ruan X., Huang H.,** Application of terahertz spectroscopy in medical microbiological detection, J. Phys. Conf. Ser. 2425 (1) 012045.

2. **Turton D. A., Senn H. M., Harwood T., et al.,** Terahertz underdamped vibrational motion governs protein-ligand binding in solution, Nat. Commun. 5 (03 Jun) (2014) 3999.

3. **Noble B. B., Todorova N., Yarovsky I.,** Electromagnetic bioeffects: A multiscale molecular simulation perspective, Phys. Chem. Chem. Phys. 24 (11) (2022) 6327–6348.

4. **Woods K. N.,** Solvent-induced backbone fluctuations and the collective librational dynamics of lysozyme studied by terahertz spectroscopy, Phys. Rev. E. 81 (3) (2010) 031915.

5. **Niehues G., Heyden M., Schmidt D. A., Havenith M.,** Exploring hydrophobicity by THz absorption spectroscopy of solvated amino acids, Faraday Discuss. 150 (23 May) (2011) 193–207.

6. **Jeong S.-Y., Cheon H., Lee D., Son J.-H.,** Determining terahertz resonant peaks of biomolecules in aqueous environment, Opt. Express. 28 (3) (2020) 3854–3863.

7. **Grechko M., Hasegawa T., D'Angelo F., et al.,** Coupling between intra- and intermolecular motions in liquid water revealed by two-dimensional terahertz-infrared-visible spectroscopy, Nat. Commun. 9 (1) (2018) 885.

8. **Xu J., Galan J., Ramian G., et al.,** Terahertz circular dichroism spectroscopy of biomolecules, In book: Jensen J. O., Theriault J.-M. (Eds.) Proc. SPIE. Vol. 5268: Chemical and Biological Standoff Detection. (27 Febr) (2004) 19–26.

9. **Beyer C., Christen P., Jelesarov I., Fröhlichet J.,** Real-time assessment of possible electromagnetic-field-induced changesin protein conformation and thermal stability, Bioelectromagnetics. 35 (7) (2014) 470–478.

10. **Calabrò E., Magazù S.,** Resonant interaction between electromagnetic fields and proteins: A possible starting point for the treatment of cancer, Electromagn. Biol. Med. 37 (3) (2018) 155–168.

11. **Harvey A.,** The interaction between electromagnetic fields at megahertz, gigahertz and terahertz frequencies with cells, tissues and organisms: Risks and potential, J. R. Soc. Interface. 14 (2017) 0585.

12. **Wu H., Ghaani M. R., Futera Z., English N. J.,** Effects of externally applied electric fields on the manipulation of solvated-chignolin folding: Static- versus alternating-field dichotomy at play, J. Phys. Chem. B. 126 (2) (2022) 376–386.

13. **Vaden T. D., de Boer T. S. J. A., Simons J. P., et al.,** Vibrational spectroscopy and conformational structure of protonated polyalanine peptides isolated in the gas phase, J. Phys. Chem. A. 112 (20) (2008) 4608–4616.

14. **Matsunaga Y., Koike R., Ota M., et al.,** Influence of structural symmetry on protein dynamics, PLoS One. 7 (11) (2012) e50011.

15. **Wako H., Endo S.,** Dynamic properties of oligomers that characterize low-frequency normal modes, Biophys. Physicobiol. 16 (Nov 29) (2019) 220–231.

16. **Husseini F. S., Robinson D., Hunt N. T., et al.,** Computing infrared spectra of proteins using the exciton model, J. Comput. Chem. 38 (16) (2017) 1362–1375.

17. **Schultheis V., Reichold R., Schropp B., Tavan P.,** A polarizable force field for computing the infrared spectra of the polypeptide backbone, J. Phys. Chem. B. 112 (39) (2008) 12217–12230.

18. **Narayan B., Herbert C., Rodriguez B. J., et al.,** Replica exchange molecular dynamics of diphenylalanine amyloid peptides in electric fields, J. Phys. Chem. B. 125 (20) (2021) 5233–5242.

19. **Bradshaw R. T., Dziedzic J., Skylaris Ch.-K., Essex J. W.,** The role of electrostatics in enzymes: Do biomolecular force fields reflect protein electric fields? J. Chem. Inf. Model. 60 (6) (2020) 3131–3144.

20. **Baranov M. A., Karseeva E. K., Tsybin O. Yu.,** Supercomputer simulation of intramolecular oscillations of glycine, diphenylalanine, and tryptophan in an electric field of the terahertz and infrared ranges, Biophysics. 69 (2) (2024) 179–194.

21. **Wolpert M., Hellwig P.,** Infrared spectra and molar absorption coefficients of the 20 alpha amino acids in aqueous solutions in the spectral range from 1800 to 500 cm^{-1}, Spectrochim. Acta A.: Mol. Biomol. Spectrosc. 64 (4) (2006) 987–1001.

22. **Barth A.,** Infrared spectroscopy of proteins, Biochim. Biophys. Acta Bioenerg. 1767 (9) (2007) 1073–1101.

23. **Zhang F., Tominaga K., Hayashi M., Wang H.-W.,** Low-frequency vibration study of amino acids using terahertz spectroscopy and solid-state density functional theory, In book: Zhang C., Zhang Xi-Ch., Nani M. (Eds.) Proc. SPI. Vol. 9275, Infrared, Millimeter-Wave, and Terahertz Technologies III; Conf.: SPIE/COS Photonics Asia 2014, 11 Nov., Beijing, P. 92750D.

24. **Moon J. H., Oh J. Y., Kim M. S.,** A systematic and efficient method to estimate the vibrational frequencies of linear peptide and protein ions with any amino acid sequence for the calculation of Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus rate constant, J. Am. Soc. Mass Spectrom. 17 (12) (2006) 1749–1757.

25. **Baranov M. A., Shariaty F., Tsybin O. Y.,** Dynamics of glycine, diphenylalanine, and tryptophan oligomers: Computer simulation in an IR electric field with different forms and polarization, J. Biomol. Struct. Dyn. 44 (5) (2026) 2651–2658.

26. **Barth A.,** The infrared absorption of amino acid side chains, Progr. Biophys. Mol. Biol. 74 (3–5) (2000) 141–173.

27. **Barth A., Zscherp C.,** What vibrations tell us about proteins, Q. Rev. Biophys. 35 (4) (2002) 369–430.

28. **Butyrskaya E. V., Nechaeva L. S., Shaposhnik V. A., Drozdova E. I.,** The assignment of the bands in IR spectra of aqueous solutions of glycine on the basis of quantum-chemical calculations, Sorbtsionnyye i Khromatograficheskiye Protsessy [Sorption & Chromatographic Processes]. 12 (4) (2012) 501–512 (in Russian).

29. **Redkov A. V., Osipov A. V., Kukushkin S. A.,** Molecular dynamics simulation of the indentation of nanoscale films on a substrate, Tech. Phys. Lett. 42 (6) (2016) 639–643.

30. **Nepomnyashchaya E. K., Baranov M. A., Tsybin O. Yu.,** Computer resonance dynamics of a glycine molecule in an infrared electric field, Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki. 49 (7) (2023) 8–11 (in Russian).

31. **Baranov M. A., Nepomnyashchaya E. K., Tsybin O. Yu.,** Fourier spectrum of the integral dipole moment of a number of amino acids supercomputer models, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (4) (2022) 55–68 (in Russian).

32. **Baranov M. A., Tsybin O. Yu., Velichko E. N.,** Free energy relaxation of glycine, tryptophan and albumin molecules in the ionized aqueous solution: Computer analysis, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (4) (2021) 135–146 (in Russian).

33. **Baranov M. A., Karseyeva E. K., Tsybin O. Yu.,** Supercomputer dynamical models of glycine, tryptophan and diphenyl-L-alanine in the electrical fields of terahertz and infrared spectral ranges, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 59–72 (in Russian).

34. **Goodsell D. S., Olson A. J.,** Structural symmetry and protein function, Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct. 29 (1) (2000) 105–153.

35. **Bahar I., Lezon T. R., Bakan A., Shrivastava I. H.,** Normal mode analysis of biomolecular structures: Functional mechanisms of membrane proteins, Chem. Rev. 110 (3) (2010) 1463–1497.

36. **Faridoddin S., Baranov M. A., Tsybin O. Yu.,** Structure of biomolecular films through advanced imaging and statistical analysis, Colloids Surf. A. Physicoch. Eng. Asp. 702 (P. 1– 5 Dec) (2024) 134920.

37. **Kompan M. E., Baranov M. A., Malyshkin V. G., Tsybin O. Yu.,** Raman spectra in range 75 – 1200 cm^{-1} of amino acids L-tryptophan, diphenyl-L-alanine and glycine in aqueous solution and in dehydrated films, Phys. Solid State. 66 (8) (2024) 1445–1449 (in Russian).

38. **Löffler G., Schreiber H., Steinhauser O.,** Calculation of the dielectric properties of a protein and its solvent: Theory and a case study, J. Mol. Biol. 270 (3) (1997) 520–534.

39. **Baranov M., Tsybin O.,** Supercomputer simulation of amino acid molecules high-frequency polarizability in THz electric field, Proc. 2023 Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), 19–20 Oct., 2023, St. Petersburg, Russian Federation, IEEE (2023) 261–264.

40. **Karplus M.,** Molecular dynamics simulations of biomolecules, Acc. Chem. Res. 35 (6) (2002) 321–323.

41. **Ruiz M. P., Aragonès A. C., Camarero N., et al.,** Bioengineering a single-protein junction, J. Am. Chem. Soc. 139 (43) (2017) 15337–15346.

42. **Reimann K., Woerner M., Elsaesser T.,** Two-dimensional terahertz spectroscopy of condensed-phase molecular systems, J. Chem. Phys. 154 (12) (2021) 120901.

43. **Solomentsev G. Y., English N. J., Mooney D. A.,** Effects of external electromagnetic fields on the conformational sampling of a short alanine peptide, J. Comput. Chem. 33 (9) (2012) 917–923.

44. **Kelly C. M., Northey T., Ryan K., et al.,** Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field, Biophys. Chem. 196 (Jan) (2015) 16–24.

45. **Hadley K. R., McCabe C.,** Coarse-grained molecular models of water: A review, Mol. Simul. 38 (8–9) (2012) 671–681.

46. **Mao Y., Zhang Y.,** Thermal conductivity, shear viscosity and specific heat of rigid water models, Chem. Phys. Lett. 542 (23 Jul) (2012) 37–41.

47. **MacKerell, Ir., A. D., Bashford D., Bellott M., et al.,** All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins, J. Phys. Chem. B. 102 (18) (1998) 3586–3616.

48. **Linstrom P. J., Mallard W. G.,** NIST standard reference database number 69, NIST (National Institute of Standards and Technologies) Chemistry WebBook. Vol. 1227. No. 69 (2005.) 20899.

49. **Feng J.-Y., Lee Y.-P., Zhu Ch.-Y., et al.,** IR–VUV spectroscopy of pyridine dimers, trimers and pyridine – ammonia complexes in a supersonic jet, Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (37) (2020) 21520–21534.

50. **Zhang B., Yu Y., Zhang Zh., et al.,** Infrared spectroscopy of neutral water dimer based on a tunable vacuum ultraviolet free electron laser, J. Phys. Chem. Lett. 11 (3) (2020) 851–855.

51. **Baranov M. A., Karseeva E. K., Tsybin O. Yu.,** Prototypes of devices for heterogeneous hybrid semiconductor electronics with an embedded biomolecular domain, Russian Microelectronics. 52 (6) (2023) 517–526.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАРАНОВ Максим Александрович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

baranovma1993@gmail.com

ORCID: 0000-0003-4555-0009

ЦЫБИН Олег Юрьевич – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

oleg.tsybin@gmail.com

ORCID: 0000-0002-8308-059X

THE AUTHORS

BARANOV Maksim A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
baranovma1993@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4555-0009

TSYBIN Oleg Yu.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
oleg.tsybin@gmail.com
ORCID: 0000-0002-8308-059X

Статья поступила в редакцию 24.04.2025. Одобрена после рецензирования 27.02.2026. Принята 27.02.2026.
Received 24.04.2025. Approved after reviewing 27.02.2026. Accepted 27.02.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026