



Баранов Максим Александрович

**КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ И ФОРМИРОВАНИЕ
МУЛЬТИФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР В БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ
ПЛЁНКАХ ДЛЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ЗАДАЧ ЭЛЕКТРОНИКИ**

1.3.4. Радиофизика

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2022

Работа выполнена в Высшей школе прикладной физики и космических технологий института электроники и телекоммуникаций федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Научный руководитель:

Величко Елена Николаевна

доктор физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург

Официальные оппоненты:

Галль Лидия Николаевна
академик РАН, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Института аналитического приборостроения Российской академии наук, г. Санкт-Петербург

Дудкин Валентин Иванович
доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры Фотоники и линии связи федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. Проф. М.А. Бонч-Бруевича», г. Санкт-Петербург

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, г. Санкт-Петербург

Защита состоится “15” ноября 2022 года в 18:00 часов на заседании диссертационного совета У 1.3.4.05 на базе Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (СПбПУ Петра Великого) по адресу: 195251, Санкт-Петербург, улица Политехническая, д. 29.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» и на сайте университета www.spbstu.ru.

Отзывы об автореферате в двух экземплярах, заверенные печатью, просим направлять по адресу: 195251, Санкт-Петербург, улица Политехническая, д. 29.

Автореферат разослан “__” октября 2022 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета У.1.3.4.05
Кандидат физико-математических наук

А. В. Петров

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность

Колебательные процессы играют важную роль в современной электронике. При разработке тех или иных электронных устройств, в частности интегральных микросхем или отдельных функциональных элементов плат, уделяют достаточно большое внимание различным колебаниям электрических полей. Исключением не стала и активно развивающаяся в настоящее время биомолекулярная электроника.

Перспективными материалами для такого типа электроники являются отдельные органические молекулы, такие как аминокислоты, пептиды и белки, а также созданные из них пленки. С точки зрения химии и биологии эти структуры являются полноценно изученным материалом. Что же касается радиофизики, волновых процессов и колебаний в них, вопрос исследования различных характеристик остается открытым.

Процесс образования биомолекулярных пленок начинается с распространения механических волн в жидкой фазе пленок, получаемых из растворов биомолекул. Механические волны в биомолекулярных пленках распространяются на относительно невысоких частотах: волновые процессы видны невооруженным глазом. Подобные низкочастотные колебания жидкой фазы пленок приводят к образованию мультифрактальных структур. Такие структуры определяют характеристики пленок, такие как проводимость или коэффициент преломления. Поэтому биомолекулярные пленки могут стать перспективным материалом для разработки прототипов биомолекулярной гибридной электроники. В то же время колебания отдельных молекул лежат в более высокой частотной области. Это дает возможность использования отдельных молекул в целях развития современной электроники и технологии передачи информации.

В данной работе исследуются колебательные процессы в биомолекулярных пленках, приводящие к образованию мультифрактальных структур, а также высокочастотные колебания в молекулах пептидов для разработки технологии передачи информации.

Цель работы

Выявление особенностей формирования мультифрактальных структур в самоорганизованных биомолекулярных пленках и колебаний отдельных биомолекул для разработки устройств биомолекулярной электроники.

Задачи работы

1. Разработать и применить алгоритм обработки изображений биомолекулярных пленок для анализа мультифрактальных структур и выявления особенностей их образования при различных параметрах создания пленок.
2. Определить зависимости фрактальной размерности структур от параметров создания биомолекулярных пленок.

3. Провести моделирование молекулярной динамики для анализа высокочастотных колебаний дипольных моментов компонентов молекулярных систем с помощью параллельных вычислений на суперкомпьютере.

4. Выполнить анализ частотных характеристик колебаний дипольных моментов компонентов молекулярных систем при различных параметрах молекулярных моделей в свободном и вынужденном режимах.

Научная новизна

Все результаты, включенные в диссертационную работу, являются новыми и получены впервые, в частности:

1. Разработан алгоритм расчета фрактальной размерности мультифрактальных дендритных структур с использованием методов цифровой обработки изображений. На основе данного алгоритма создана компьютерная программа и зарегистрирован РИД (программное свидетельство №2020667561, 24.12.2020).

2. Определена зависимость фрактальной размерности структур в биомолекулярных пленках от параметров дегидратации растворов биомолекул.

3. Определены оптимальные параметры физико-математических моделей молекулярных систем для проведения моделирования молекулярной динамики и последующего частотного анализа колебаний дипольных моментов в терагерцовом диапазоне.

4. Предложенная модификация метода моделирования молекулярной динамики позволяет проводить спектральный анализ биомолекул, рассматривать селективное возбуждение отдельных типов связей в молекулах при приложении внешнего переменного электрического поля среднего ИК диапазона.

Положения, выносимые на защиту

1. Применение биомолекулярных плёнок в качестве встраиваемых фрактальных антенн в биомолекулярной радиоаппаратуре обусловливается достижением стабилизации максимального количества мультифрактальных структур в плёнках при установленной концентрации белка в исходном водном растворе 5% и начальном объёме раствора 2 мл.

2. Размерность периодических мультифрактальных структур в биомолекулярных плёнках по-разному зависит от концентраций соли и белка в диапазоне температур 20-40°C: повышение концентрации соли NaCl от 2% до 10% приводит к росту фрактальной размерности (до 1,85), в то время как повышение концентрации белка в этом же диапазоне вызывает уменьшение фрактальной размерности (до 1,45).

3. Определены параметры физико-математических моделей колебательных молекулярных систем, а также параметры моделирования, позволяющие вычислять спектры колебаний дипольных моментов биомолекул в диапазоне от 0 до 250 ТГц за минимальное время при

минимальном объеме данных о позициях атомов компонентов молекулярных систем.

4. Исследование селективно возбужденных типов связей в биомолекулах, актуальных для детального исследования компонентов биомолекулярной электроники, может выполняться посредством численного моделирования колебаний дипольных моментов биомолекул при приложении внешнего электрического поля терагерцового диапазона.

Значимость работы

Теоретическая значимость диссертации состоит в том, что полученные в работе результаты могут быть применены для развития теории колебательных процессов в биологических системах. Результаты работы являются дополнением в теорию разработки и создания гибридных биомолекулярных электронных элементов.

Практическая значимость исследования заключается в том, что полученные результаты о структуризации биомолекулярных пленок могут быть применены для формирования биомолекулярных пленочных структур как перспективного материала для разработки устройств биомолекулярной гибридной электроники, в частности в качестве встраиваемых биомолекулярных фрактальных микроантен.

Личный вклад диссертанта

В данной работе представлены результаты научной деятельности соискателя в Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого, полученные автором лично в работе по исследованию колебательных процессов в биомолекулярных системах.

Апробация работы

Основные результаты исследований апробировались на 19 международных и всероссийских конференциях: Российская молодежная конференция по физике и астрономии «Физика. СПб» (Санкт-Петербург, 2020 г.); Международная школа-конференция «Saint-Petersburg OPEN» по Оптоэлектронике, Фотонике и Нанобиотехнологиям (Санкт-Петербург, 2017 и 2018 гг.); Международная конференция «Laser Optics» (Санкт-Петербург, и 2020 гг.); Международная конференция по оптике и биофотонике «Saratov fall meeting» (Саратов, 2017 и 2018 гг.); Конгресс молодых ученых (Италия, 2018 г.); V Международная конференция и молодёжная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (Самара, 2020 г.); Международная конференция по применениям оптики и фотоники (Лиссабон, Португалия, 2019 г.); IV Симпозиум по эффекту Казимира (Санкт-Петербург, 2019); IEEE Международная конференция по электротехнике и фотонике (Санкт-Петербург, 2018–2021 гг.); Международная конференция по энергетике, материалам и нанотехнологиям (Санкт-Петербург, 2019 г.); Симпозиум по исследованиям в области электромагнетизма (Санкт-Петербург, 2017 г.); Международная конференция по проводным/беспроводным передовым сетям и системам нового поколения (Санкт-Петербург, 2018–2021 гг.).

Внедрение результатов работы

В работу вошли результаты научных исследований, в частности полученных в результате выполнения следующих научных проектов:

- Проект №21–72–20029 РФФ "Суперкомпьютерное моделирование и технология биомолекулярных пленочных структур" 2021–2024 (Основной исполнитель).
- Проект № 19–32–90130 РФФИ от 02.07.2019 «Исследование процессов самоорганизации в пленках биологических жидкостей» 1.10.2019–1.10.2021 (Исполнитель).
- Государственное задание на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2020-0024).

Публикации

Основные результаты работы отражены в 22 публикациях, в том числе в статьях в рецензируемых научных журналах из списка ВАК, журналов, входящих в базы данных Scopus и WoS, а также в сборниках, рецензируемых РИНЦ. Оформлено 2 свидетельства о регистрации РИД (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ).

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы (из 122 наименований, включая работы автора и РИДы) и изложена на 100 страницах, включая 30 рисунков, 2 таблицы и 1 приложение.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** сформулированы актуальность темы, цель работы и определены основные научно-технические задачи, решаемые в диссертации, а также научная новизна и положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена анализу проблемы изучения колебательных процессов в биологических молекулах, созданию тонких биомолекулярных пленок из растворов биомолекул и образованию в них фракталоподобных структур, а также применению этих биомолекулярных компонентов для разработки устройств гибридной биомолекулярной электроники. Показано, что на основе тонких биомолекулярных пленок возможно создание гибридных транзисторов, а также разработка биосенсоров с биологическим чувствительным элементом. Показано, что за характеристики тонких биомолекулярных пленок, интересных для создания электронных устройств, отвечают такие параметры структур в тонких пленках как их форма, размер и количество. Отмечается, что в настоящее время не существует количественного описания данных структур.

Рассматриваются колебательные процессы в отдельных молекулах аминокислот. Показано, что молекулы аминокислот способны передавать и запасать энергию. Они способны к передаче фотона, фонона, электрона, экситона. Молекулу аминокислоты можно представить в виде эквивалентной электрической схемы, в которой все связи в молекуле являются колебательными контурами, колеблющимися в диапазонах дальнего и среднего инфракрасного излучения.

Отмечается возможность создания молекулярных переключателей и ячеек памяти на основе изменения дипольного момента молекул под воздействием внешних электрических полей. Таким образом, можно заключить, что исследование молекул аминокислот и их радиочастотных характеристик является крайне актуальной задачей для развития гибридной биомолекулярной электроники.

Во **второй главе** описывается экспериментальное исследование тонких биомолекулярных пленок, полученных методом изотермической дегидратации растворов белка альбумина (Human albumin) фирмы Biotest Pharma GmHb (Драйайх, земля Гессен, Германия) с исходной концентрацией 20 % (200 г/л). Подробное описание препаратов, а также подготовки экспериментальных проб описано в Приложении 1.

Разрабатывается алгоритм цифровой обработки изображений для анализа биомолекулярных пленок. На рис. 1 представлена блок-схема разработанного алгоритма.

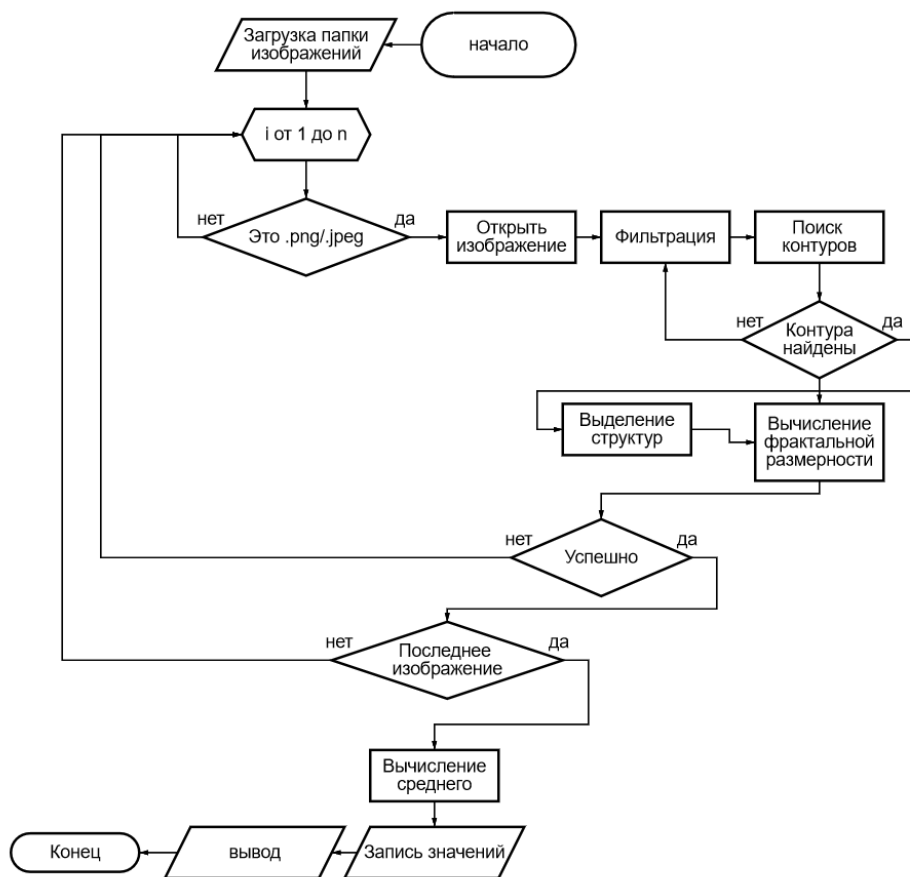


Рисунок 1. Блок-схема алгоритма цифровой обработки изображений дегидратированных биомолекулярных пленок

На рис. 2 представлен пример сегментации изображения и поиска фракталоподобных дендритных структур.

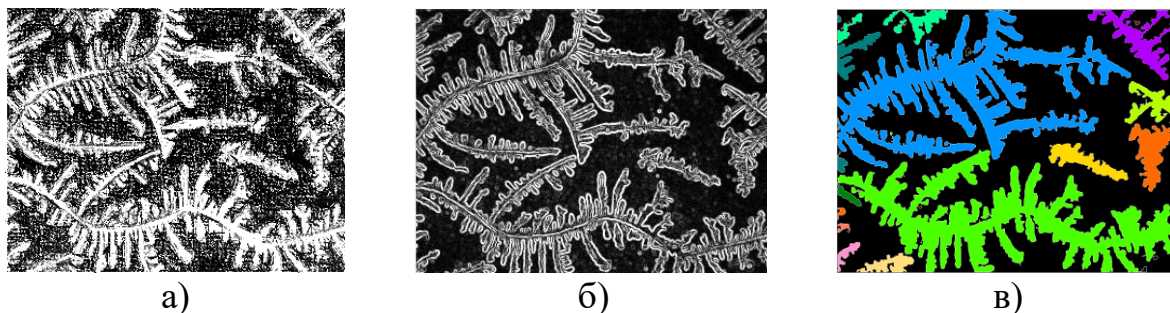


Рисунок 2. Пример обработки изображений дендритных структур в биомолекулярных пленках: а) – изображение дендритов; б) – выделение контуров дендритов с помощью градиентного анализа; в) – изображение дендритов после прохождения процедуры сегментации

Для разработки алгоритма используется метод цифровой обработки изображений. Он основан на фильтрации изображений, выделении необходимых структур, их подсчете и вычислении фрактальной размерности этих структур.

В работе используется классическое определение фрактальной размерности — размерность Минковского, которая определяется как

$$D = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln(N_\varepsilon)}{\ln(\varepsilon)} \quad (1)$$

где N_ε — минимальное число n -мерных шаров радиуса ε для покрытия множества. Однако, для разработки алгоритма использовался метод Box-counting. пусть D_{bc} — приближенное значение размерности Минковского. Следует преобразовать определение этой размерности, убрав предел, который будет имитироваться в итерациях, соответствующих изменениям размера ячеек

$$D_{bc} = \frac{\log N(\varepsilon)}{\log \frac{1}{\varepsilon}} \leftrightarrow D_{bc} \log \frac{1}{\varepsilon} = \log N(\varepsilon) \leftrightarrow D_{bc} \log \frac{1}{\varepsilon} - \log N(\varepsilon) = 0 \quad (2)$$

Если зафиксировать размеры ячеек ε и рассматривать D_{bc} как неизвестное, то приведенное выражение оказывается формулой линии. Можно запустить цикл по различным размерам ячеек ε и последовательно сохранять результаты. Если нанести результаты вычислений на график, то можно получить линию регрессии, описываемую уравнением $y = a + bx$, где b является наклоном данной прямой и размерностью изображения. С помощью разработанного алгоритма проводится поиск спиральных и дендритных структур.

Показана зависимость количества образующихся спиральных структур от температуры дегидратации, начального объема жидкого образца, концентрации белка. На рис. 3 приведена зависимость количества этих структур от температуры дегидратации и количества белка в исходном растворе.

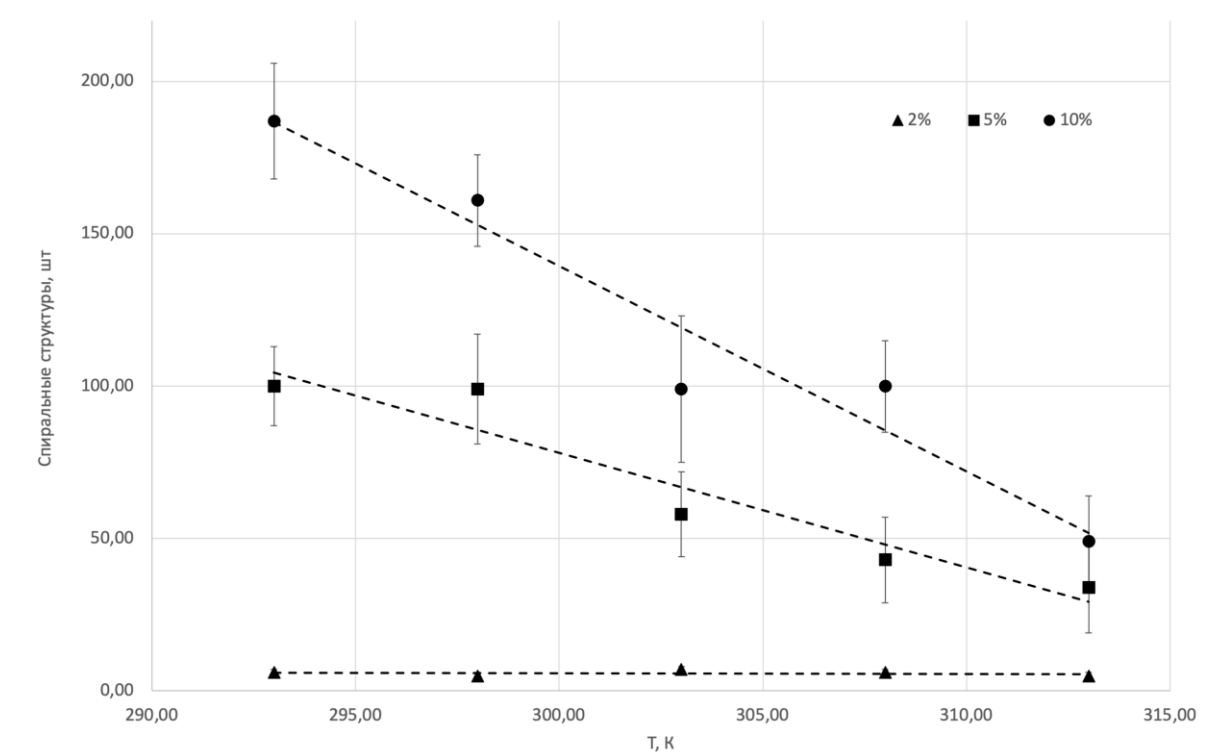


Рисунок 3 График зависимости количества спиральных структур от температуры дегидратации при концентрациях раствора альбумина 2, 5 и 10%

Описана зависимость фрактальной размерности спиральных структур от параметров дегидратации белковых растворов. На рис. 4 приведена зависимость фрактальной размерности спиральных структур от температуры дегидратации и концентрации белка в исходном растворе.

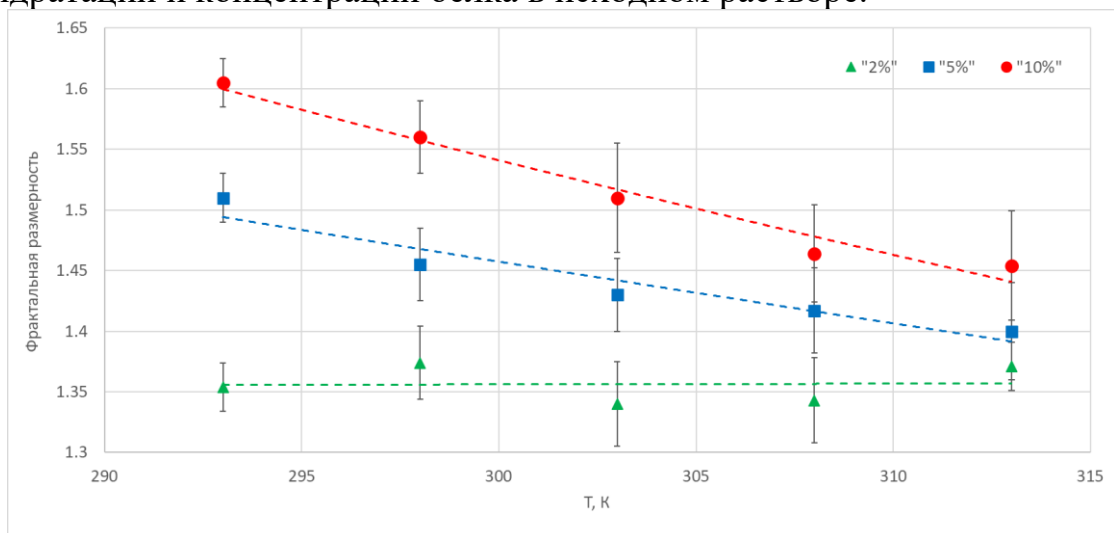


Рисунок 4. Зависимость фрактальной размерности спиральных структур в дегидратированных пленках белка альбумина от концентрации белка в исходных растворах представлена для температур дегидратации 298, 303, 308 и 313 К

В главе 2 описывается получение тонких белковых пленок с дендритными структурами. Установлена зависимость фрактальной размерности структур в дегидратированных биомолекулярных пленках от параметров дегидратации и параметров исходных растворов биомолекул. Показано, что в зависимости от концентрации соли, белка и температуры дегидратации можно совершать плавный переход от спиральных структур к

дендритным. На рис. 5 показана зависимость фрактальной размерности дендритов от параметров дегидратации и концентрации соли NaCl в исходном растворе белка.

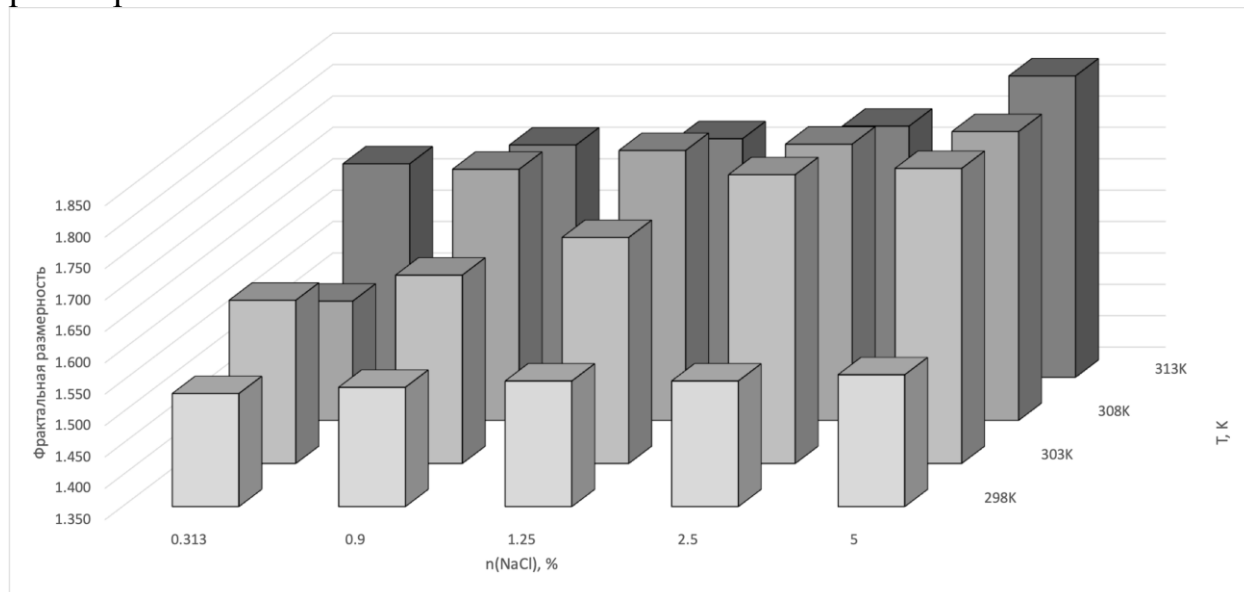


Рисунок 5. Зависимость фрактальной размерности дендритных структур от концентрации соли NaCl в исходном 2-процентном растворе белка альбумина

Изучен процесс дегидратации растворов белков на примере раствора белка альбумина человеческого. Рассмотрено влияние температуры, концентрации белка и солей в образце на дегидратацию растворов белка альбумина. В качестве характеристик процесса дегидратации использовали такие характеристики образующихся в пленках белка альбумина структур, как их количество и фрактальную размерность. Полученные данные показали схожие результаты с такими исследователями как Т.А. Яхно, В.Г. Яхно и Е. Рапис.

Результаты, полученные в главе, позволят формировать пленки с заданными параметрами стабильности и определенной фрактальной размерностью. Данные знания могут быть применимы для создания элементов биомолекулярной электроники, а также гибридной электроники с молекулярными включениями.

Третья глава посвящена колебательным процессам в молекулах аминокислот и белков. Описывается метод моделирования молекулярной динамики для вычисления значений энергий, координат и дипольных моментов компонентов молекулярных систем, а также оптимизация параллельных вычислений на суперкомпьютере. Предлагается алгоритм выполнения подготовки моделей молекулярных систем, описывается порядок проведения моделирования. На рис. 6 представлена блок-схема алгоритма подготовки молекулярных систем, выполнения моделирования молекулярной динамики, а также предварительной обработки данных.

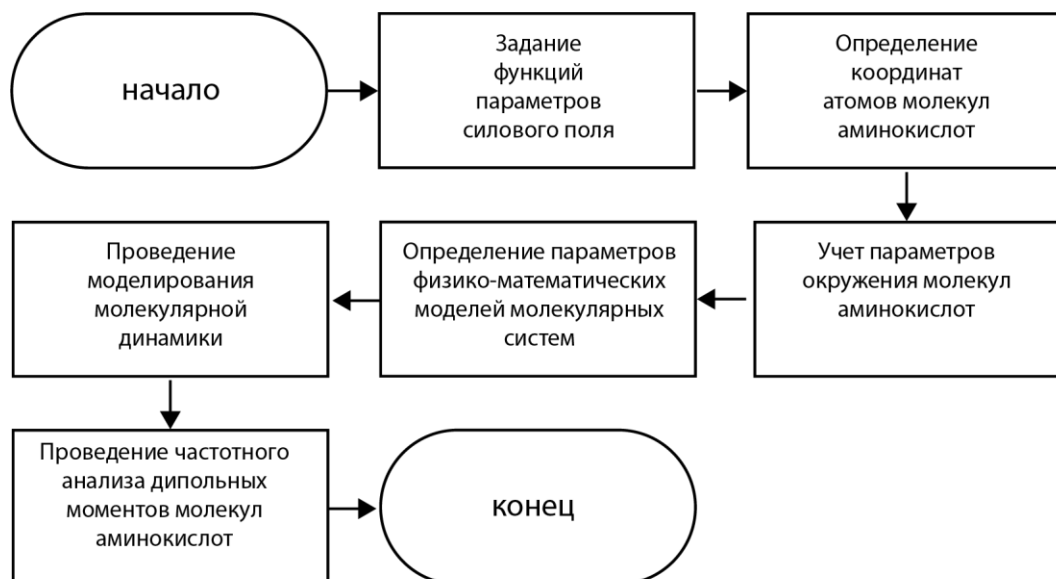


Рисунок 6. Блок-схема алгоритма подготовки молекулярных систем, выполнения моделирования молекулярной динамики, а также предварительной обработки данных

Показано, что энергия молекул зависит от наличия растворителя. График на рис. 7 показывает зависимость потенциальной энергии молекулы белка альбумина от времени моделирования при наличии и отсутствии молекул воды в системе.

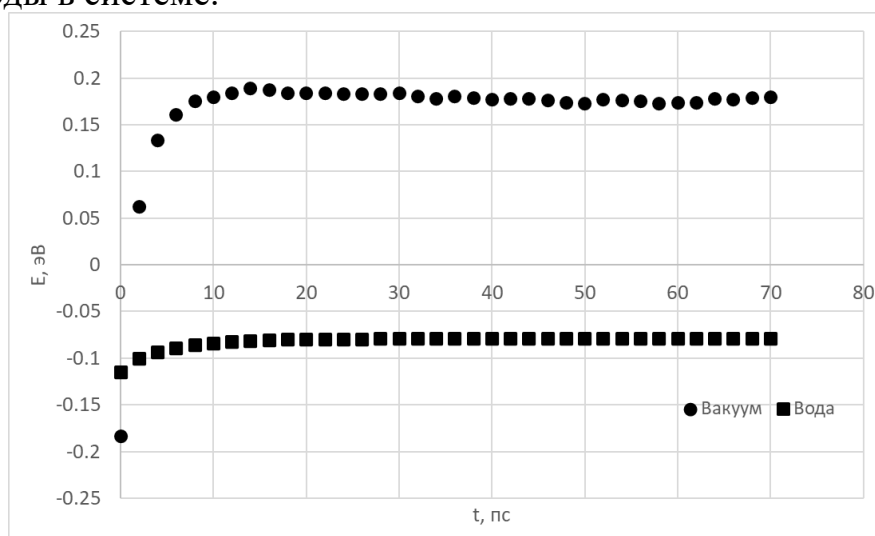


Рисунок 7. График зависимости потенциальной энергии молекулы белка альбумина от времени при моделировании молекулы в водном растворе и вакууме

Показано, что потенциальной энергии молекулярной системы выходит на стационарный уровень, причем в водном растворе она ниже, чем в вакууме. Это свидетельствует о большей стабильности молекулы в растворе, чем в вакууме.

На рис. 8 представлены графики зависимости потенциальной энергии молекулярных систем, содержащих молекулу белка альбумина, молекулы воды и ионы соли NaCl с концентрациями 0, 0,001, 0,9 и 5%, что соответствует 0, $1,7 \times 10^{-4}$, 0,15 и 0,86 моль/л. При концентрации ионов соли NaCl 5% и выше прекращаются видимые на графиках осцилляции потенциальной энергии.

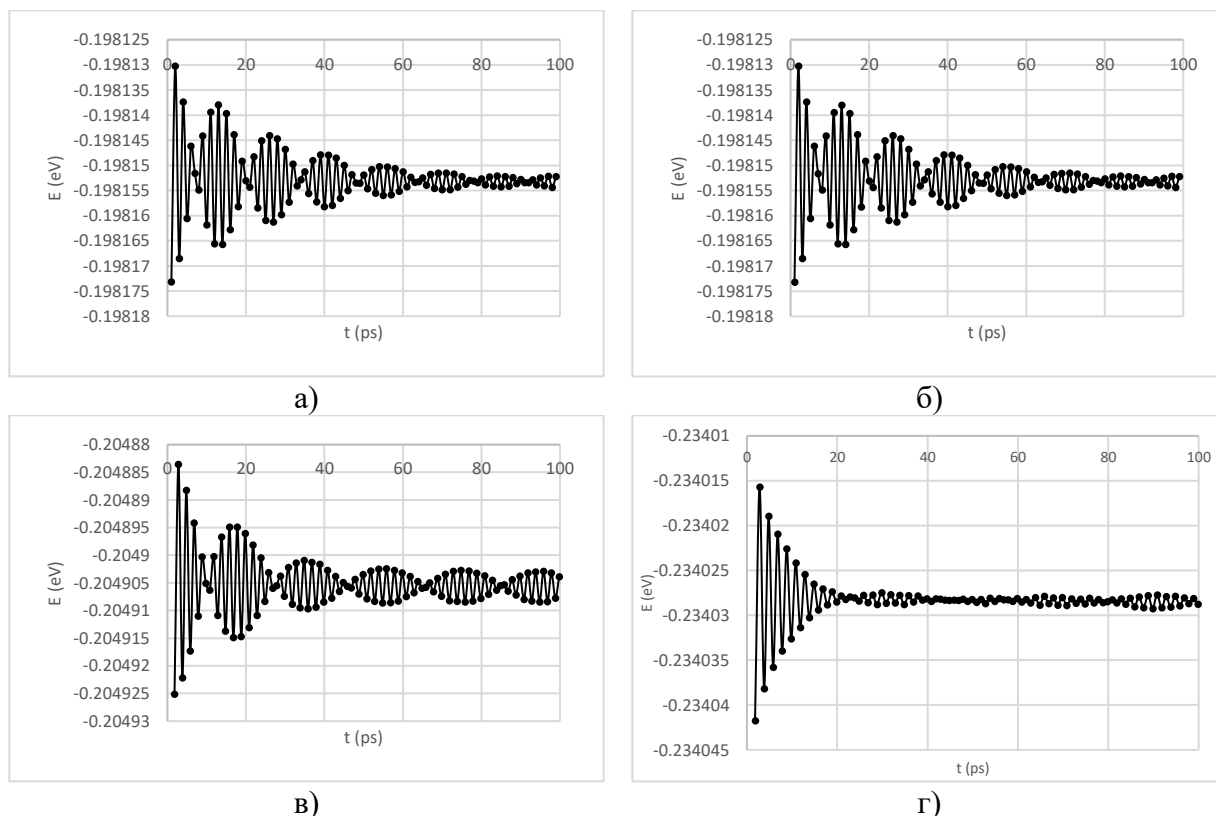


Рисунок 8. Зависимость потенциальной энергии молекулярных систем с различной концентрацией ионов соли NaCl от времени моделирования: а) $n(\text{NaCl}) = 0$ моль/л; б) $n(\text{NaCl}) = 1,7 \times 10^{-4}$ моль/л; в) $n(\text{NaCl}) = 0,15$ моль/л; г) $n(\text{NaCl}) = 0,86$ моль/л.

Установлено, что частота релаксации потенциальной энергии остается без изменений в водно-солевых растворах разной концентрации, поскольку она зависит от массы частиц, а при изменении концентрации соли масса частиц не изменяется. Изменение концентрации ионов в растворе приводило к изменению времени релаксации.

На рис. 9 представлены зависимости установившихся значений потенциальной энергии молекул триптофана, глицина и альбумина от концентрации соли NaCl в растворе в момент времени 3 нс. Видно, что при увеличении концентрации соли потенциальная энергия молекулы снижается.

Наблюдаемый эффект соответствует снижению напряженности электрического поля над поверхностью каждой молекулы и соответствующего повышения электропроводности водно-солевого раствора.

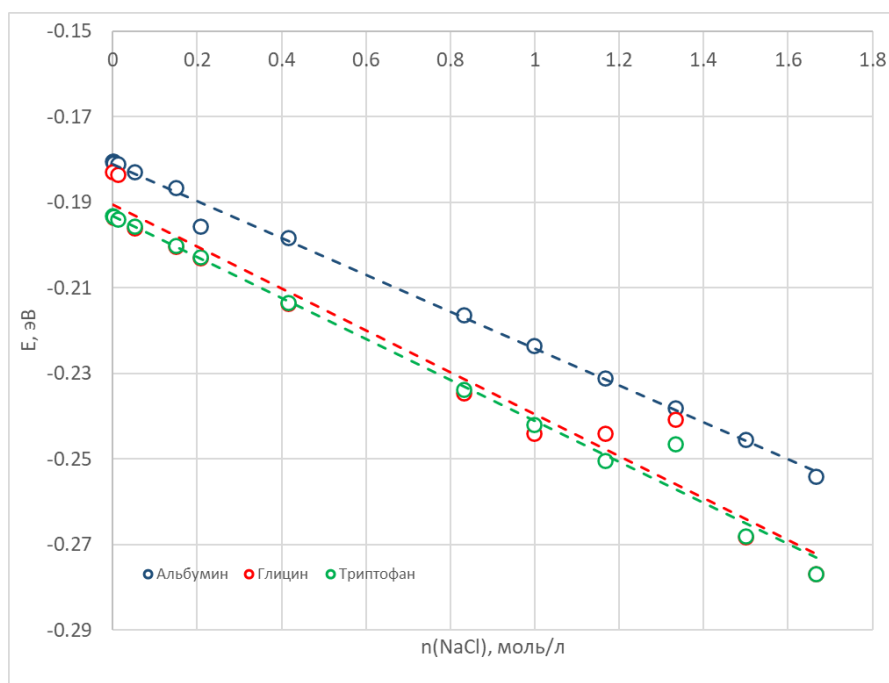


Рисунок 9. Зависимости значений потенциальной энергии молекул триптофана, глицина и альбумина (синяя, красная и черная линии соответственно) от концентрации водно-солевого раствора в момент времени $t_0 = 3$ нс

В данной работе для сравнения с известными данными вычислены дипольные моменты и их спектры для колебательных молекулярных систем. На рис. 10 и 11 представлены дипольные моменты молекул глицина и спектр колебаний дипольных моментов в отсутствие внешнего электрического поля.

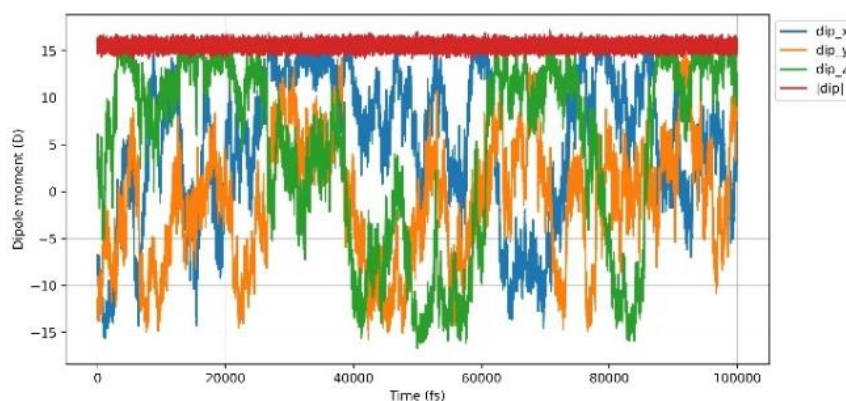


Рисунок 10. Дипольный момент молекулы глицина в водно-солевом растворе в отсутствие внешнего поля

Детектируемые спектральные пики соответствуют колебаниям отдельных связей в молекуле и коррелируют с данными ИК-спектроскопии, полученными в литературе. Таким образом предложенный метод компьютерного моделирования может стать более универсальной и гибкой заменой методу ИК-спектроскопии.

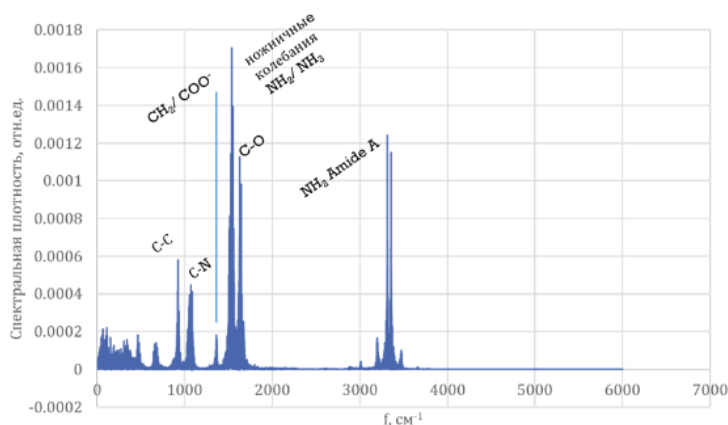


Рисунок 11. Спектр колебаний дипольного момента молекулы глицина в водно-солевом растворе в отсутствие внешнего поля

Для анализа влияния электрических полей на молекулярную колебательную систему был разработан оригинальный метод наложения внешнего переменного поля различных частот. Для исследований выбран средний ИК диапазон спектра, поскольку именно в нем лежат основные колебательные моды молекулы. На рис. 10 (а, б) представлены амплитудная и частотная характеристики накладываемого на колебательную молекулярную систему внешнего поля.

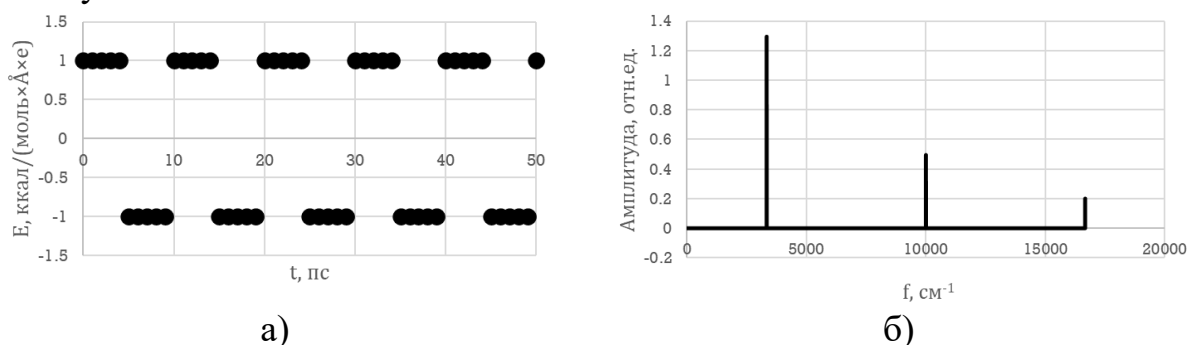


Рисунок 10 Амплитудная (слева) и частотная (справа) зависимости внешнего периодического поля

Показано, что приложение внешнего электрического поля с частотой колебаний, совпадающей с частотой колебаний определенного типа связи, способно возбуждать эту связь в молекуле, что приводит к существенному увеличению амплитуды колебаний на частоте приложенного поля. Также можно сделать вывод, что молекула аминокислоты способна запасать энергию. На рис. 11, 12 представлены спектры молекулы глицина в водном растворе в отсутствии и при приложении внешнего электрического поля величиной 1 ккал/(моль $\times$ Å $\times$ e) в течении 1 нс, соответственно.

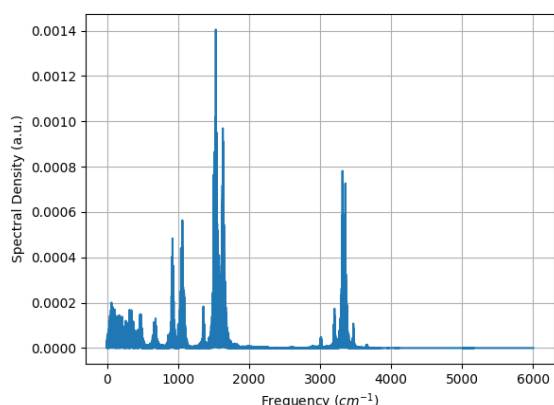


Рисунок 11. Спектр колебаний молекулы глицина в водном растворе

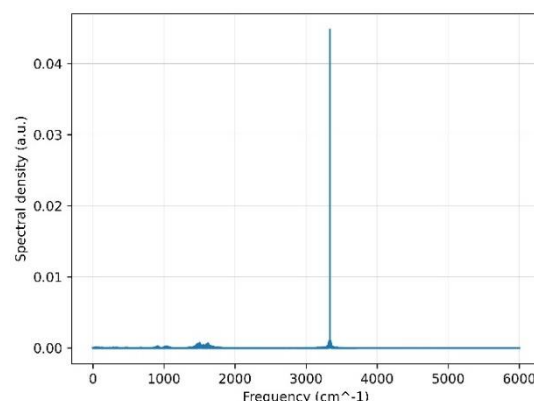
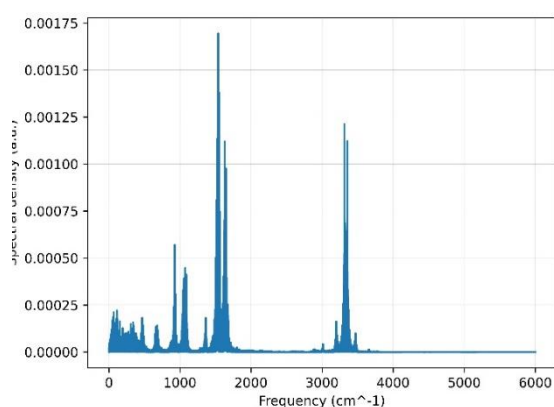


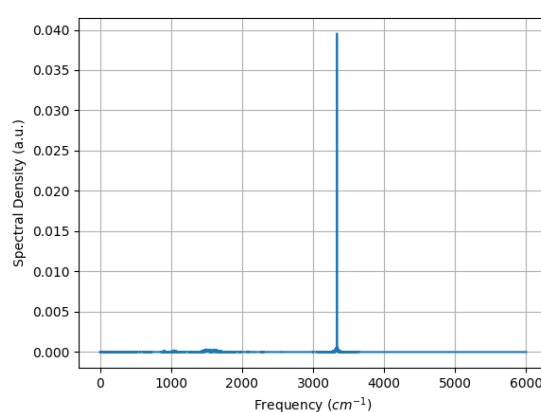
Рисунок 12. Спектр колебаний молекулы глицина в водном растворе при приложении внешнего электрического поля

Видно, что данное поле возбуждает колебания одного типа связи, в данном случае связи аминогруппы с углеродом в молекуле глицина. Можно сделать вывод, что предложенный метод моделирования молекулярной динамики позволяет исследовать селективное возбуждение колебаний отдельных типов связей в биологических молекулах.

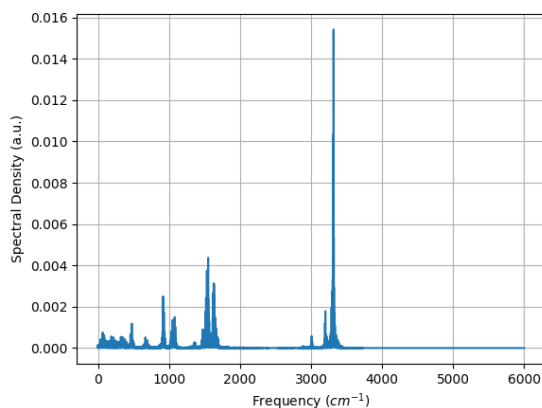
После прекращения действия электрического поля часть накапливаемой энергии в колебательной системе сохраняется. Данное утверждение подтверждается проведенными экспериментами. Были проанализированы амплитуды спектральных пиков во время приложения внешнего электрического поля и после его приложения. На рисунке 13 показаны спектрограммы колебаний дипольного момента молекулы глицина до, во время и после приложения внешнего электрического поля с резонансной частотой 3333 cm^{-1} .



а)



б)



в)

Рисунок 13. Спектрограммы колебаний интегральных дипольных моментов молекулы глицина до (а), во время (500 ps) (б) и после (в) приложения внешнего электрического поля величиной $1 \text{ ккал}/(\text{моль} \times \text{\AA} \times \text{e})$

Таким образом, в главе 3 показано, что метод моделирования молекулярной динамики подходит для исследования спектров колебаний различных типов связей в молекулах аминокислот путем вычисления дипольных моментов молекул. Показана, что полная энергия моделей молекулярных систем зависит от типа системы (вакуум, водный растворитель) и от степени ионизации системы. Установлено, что выход энергии на стабильный уровень проходит через процесс релаксации, продолжительность которого, а также значение энергии зависят от степени ионизации молекулярной системы. Установлены значения параметров моделирования для оптимальной обработки данных и вычисления спектров колебаний дипольных моментов молекул до 500 ТГц. Показано, что приложение внешнего электрического поля с частотой колебаний, совпадающей с частотой колебаний определенного типа связи, способно возбуждать эту связь в молекуле, что приводит к существенному увеличению амплитуды колебаний на частоте приложенного поля.

Полученные в результате выполнения работ теоретические и экспериментальные результаты могут быть использованы для разработки устройств и функциональных элементов биомолекулярной электроники, в том числе основанных на использовании тонких биомолекулярных пленок и отдельных молекулах аминокислот. С помощью полученных знаний представляется возможным создание прототипов элементов устройств биомолекулярной электроники.

В **заключении** приведены основные результаты работы. Все поставленные задачи исследования выполнены в полном объеме. Цель исследования достигнута.

Решение поставленных задач позволило получить следующие научные результаты:

1. Разработан алгоритм поиска структур в дегидратированных биомолекулярных пленках и вычисления их фрактальной размерности.

2. Структуризация биомолекулярных пленок, а также фрактальная размерность периодических структур в тонких биомолекулярных пленках зависит от параметров исходных растворов, а также от параметров дегидратации: при повышении температуры дегидратации и концентрации соли в исходном растворе фрактальная размерность немонотонно увеличивается от 1.45 до 1.85, при повышении концентрации белка в исходном растворе уменьшается.

3. Определены параметры моделей молекулярных систем для оптимизированного вычисления дипольных моментов молекул аминокислот на суперкомпьютере и анализа спектров их колебаний.

4. Показано, что энергия колебаний дипольных моментов молекул зависит от типа системы (вакуум или растворитель), наличия внешнего электрического поля, его частоты и амплитуды. Показано, что возбуждение колебаний отдельных связей в молекулах возможно с помощью внешнего электрического поля.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

А.1. Баранов М. А., Розов С. В. Структурные свойства пленок белковых растворов // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. – 2019. – Т. 12. – №. 4. (БАК)

А.2. Baranov M. A., Velichko E. N., Andryakov A. A. Image processing for analysis of bio-liquid films // Optical Memory and Neural Networks. – 2020. – Т. 29. – С. 1-6. (БАК, Scopus)

А.3. Baranov M., Velichko E., Shariaty F. Determination of Geometrical Parameters in Blood Serum Films Using an Image Segmentation Algorithm // Optical Memory and Neural Networks. – 2020. – Т. 29. – №. 4. – С. 330–335. (БАК, Scopus)

А.4. Баранов М. А., Цыбин О. Ю., Величко Е. Н. Структурированные биомолекулярные пленки для микроэлектроники // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Сер.: Физико-математические науки. – 2021. – Т. 14. – №. 1. (БАК)

А.5. 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 СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 4. (БАК)

А.6. Баранов М. А., Непомнящая Э.К., Цыбин О. Ю. Фурье-спектр интегрального дипольного момента суперкомпьютерных моделей аминокислот глицина, дифенил-1-аланина и триптофана // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 4. (БАК)

А.7. Velichko E.N., Baranov M.A., Nepomnyashchaya E.K., Cheremiskina A.V., Aksenov E.T. Studies of biomolecular nanomaterials for application in

electronics and communications //Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems. – Springer, Cham, 2015. – C. 786-792. (Scopus, WoS)

A.8. Baranov M. A., Velichko E. N., Aksenov E. T. Methods of non-destructive testing in studies of self-organization processes in protein films //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2017. – T. 917. – №. 6. – C. 062059. (Scopus, WoS)

A.9. Baranov M.A., Nepomnyashchaya E.K. The study of self-organization of molecular complexes by means of an acoustic field //International Research Conference on Science, Education, Technology and Management. – 2017. (Scopus, WoS)

A.10. Baranov M. A., Alekseenko A. P., Velichko E. N. Study of electric properties of self-assembled films of albumin during their dehydration //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2018. – T. 1124. – №. 3. – C. 031013. (Scopus, WoS)

A.11. Baranov M., Rodion S., Alekseenko A. Optical and electrical properties of protein Films //2018 IEEE International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). – IEEE, 2018. – C. 186-188. (Scopus, WoS)

A.12. Baranov M. A., Dudina A. I., Nepomnyaschaya E. K. Optical analysis of protein–metal interactions //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2019. – T. 1226. – №. 1. – C. 012005. (Scopus, WoS)

A.13. Baranov M. Study of dielectric parameters of protein solution //Saratov Fall Meeting 2018: Optical and Nanotechnologies for Biology and Medicine. – International Society for Optics and Photonics, 2019. – T. 11065. – C. 110651S. (Scopus, WoS)

A.14. Baranov M. A., Rozov S. V. Study of the dielectric parameters of biological liquids //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2019. – T. 1326. – №. 1. – C. 012006. (Scopus, WoS)

A.15. Baranov M. A. Image processing of biological liquids films for medical diagnostics //Journal of Electronic Science and Technology. – 2020. – T. 18. – №. 1. – C. 100027. (Scopus, WoS)

A.16. Baranov M., Velichko E., Tsybin O. Self-assembled Biomolecular Films as a New Material for Nano-Telecommunication Devices //Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems. – Springer, Cham, 2020. – C. 384-393. (Scopus, WoS)

A.17. Maksim B., Tristan M. Determination of the Structure Contour Parameters in Biological Films for the Development of the Cuneiform Dehydration Method //International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies. – Springer, Cham, 2021. – C. 593-601. (Scopus, WoS)

A.18. Baranov M., Velichko E., Rozov S. Study of Self-Organized Protein Films for the Purposes of Biomolecular Electronics //2020 IEEE International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). – IEEE, 2020. – C. 185-187. (Scopus, WoS)

A.19. Baranov M., Velichko E., Greshnevikov K. Analysis of Fractal Structures in Dehydrated Films of Protein Solutions //Symmetry. – 2021. – Т. 13. – №. 1. – С. 123. (Scopus, WoS)

A.20. Velichko E. et al. Dynamics of polypeptide cluster dipole moment for nano communication applications //Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems. – Springer, Cham, 2018. – С. 675-682. (Scopus, WoS)

A.21. Velichko E., Nepomnyashchaya E., Baranov M. Study of Self-assembled Molecular Films as a Method of Search for Promising Materials in Nanoelectronics and Nanocommunications //Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems. – Springer, Cham, 2018. – С. 691-701. (Scopus, WoS)

A.22. Баранов М. А., Маллевиц Т. Определение параметров контуров структур в биологических пленках для развития метода клиновидной дегидратации //Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2020). – 2020. – С. 343–348. (РИНЦ)

Зарегистрированные результаты интеллектуальной деятельности

A.22. Программа обработки изображений для определения геометрических параметров структур в пленках биологических жидкостей: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020617699. 10.07.2020 / Баранов М. А., Величко Е. Н.; заявитель и патентообладатель ФГАОУ ВО "СПбПУ" – 2020616720; заявл. 30.06.2020

A.23. Программа для расчета фрактальной размерности структур в белковых пленках: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020667561. 24.12.2020 / Баранов М. А.; заявитель и патентообладатель ФГАОУ ВО "СПбПУ" – 2020667038; заявл. 14.12.2020.