

01.1;02.1;02.4

## Компьютерная резонансная динамика молекулы глицина в электрическом поле инфракрасного диапазона

© Э.К. Непомнящая, М.А. Баранов, О.Ю. Цыбин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: baranovma1993@gmail.comПоступило в Редакцию 22 ноября 2022 г.  
В окончательной редакции 12 января 2023 г.  
Принято к публикации 16 января 2023 г.

Суперкомпьютерный программно-вычислительный комплекс молекулярной динамики дополнен учетом внешнего переменного электрического поля в ИК-диапазоне частот. Наряду с нерезонансными исследован режим резонансных возбуждений нормальных мод локальных колебаний в молекулах аминокислоты глицина. Методика показывает возможности исследования структуры и динамики биомолекул, а также их комплексов в биомолекулярной электронике.

**Ключевые слова:** биомолекулы, динамическое моделирование, электрическое поле, локальные моды колебаний.

Внутримолекулярные колебания имеют фундаментальное значение для биологических функций белковых молекул, а также реализуются в научных исследованиях и приложениях, в том числе в спектроскопии, в разработках гибридных полупроводниковых микроэлектронных приборов со встроенными органическими компонентами и др. [1–3].

Компьютерная неравновесная динамика биомолекул, находящихся во внешнем электромагнитном поле, позволяет развивать теорию спектроскопии, выявлять динамику конформаций, определять диэлектрические свойства и многое другое [4,5]. Колебательные процессы, особенно в условиях дальнего и среднего ИК-электромагнитного воздействия на белковые молекулы, изучены недостаточно. В настоящей работе методом суперкомпьютерного моделирования рассмотрены резонансные и переходные эффекты при воздействии ИК-электрическим полем на молекулы аминокислоты глицина в растворе.

В работе [6] реализован суперкомпьютерный программно-вычислительный комплекс (ПВК) и выполнено исследование частотного спектра амплитудно-временных реализаций интегрального дипольного момента аминокислот глицина, дифенил-L-аланина и триптофана в условиях нулевого внешнего электромагнитного поля. В состав ПВК вошли пакеты прикладных программ Avogadro, Visual Molecular Dynamics и NAMD, а также дополнительные оригинальные программы, написанные на языке Python. Фурье-спектры собственных локальных колебаний аминокислот были верифицированы путем сопоставления с известными данными компьютерного моделирования и экспериментальной спектроскопии, что подтвердило достоверность реализованной программы вычислений.

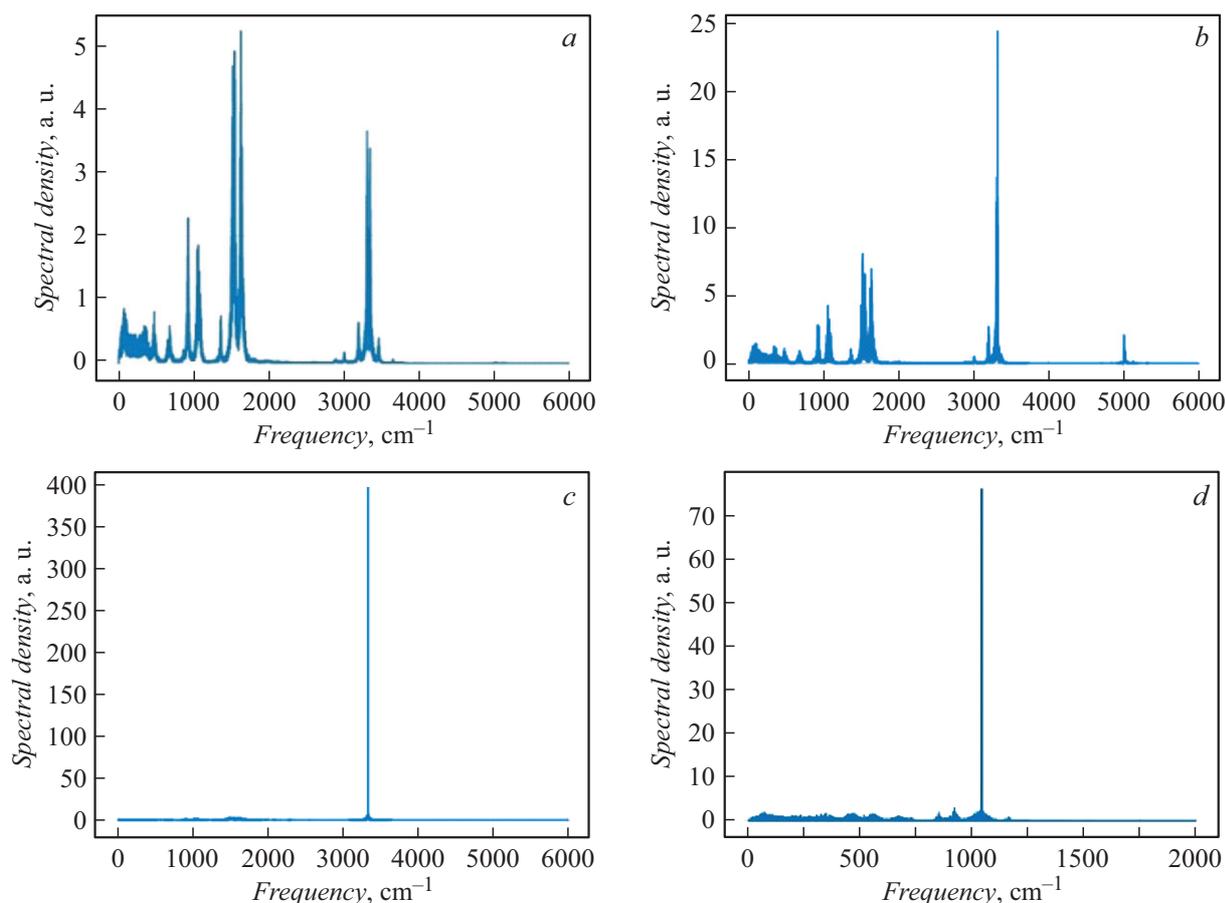
В настоящей работе указанный ПВК дополнен учетом внешнего переменного электрического поля с частотой

в диапазоне 3–240 THz (с волновыми числами нормальных мод локальных внутримолекулярных колебаний около 100–8000  $\text{cm}^{-1}$  соответственно). Использован суперкомпьютерный центр Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, оснащенный кластером „РСК-Торнадо“ с пиковой производительностью  $10^{15}$  TFLOPS 668 двухпроцессорных узлов (Intel Xeon E5 2697 v3), из которых 56 имеют два ускорителя вычислений NVIDIA K40 [6]. Молекулярная система содержала молекулу аминокислоты глицина, молекулы воды (модель TIP3W) и соли NaCl. Молекулы воды и соли были добавлены в систему для проведения моделирования динамики аминокислот в среде, приближенной к естественной. 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 атомов, используя которые вычисляли зависимости от времени значений электрического дипольного момента (ЭДМ)  $\mu(t)$  путем суммирования парциальных моментов:

$$\mu(t) = \sum_{n=1}^N q_n [\mathbf{r}_n(t) - \mathbf{r}_n(0)]. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{r}_n(0)$  — радиус-вектор пространственного положения заряда  $q_n$  в момент времени  $t = 0$ ,  $\mathbf{r}_n(t)$  — текущее значение. Последовательность значений амплитудно-временной реализации интегрального ЭДМ  $\mu(t)$  (1) представляла собой суперпозицию локальных колебаний внутримолекулярных атомных осцилляторов. Наименьший шаг дискретизации составлял 1 fs, а максимальная длительность реализаций достигала 2 fs.

Фурье-анализ реализаций  $\mu(t)$  при помощи пакета VMD („IR Spectral Density Calculator“) представлял квазидискретный спектр частот со стабильной структурой пиков, что позволило интерпретировать вынуж-



**Рис. 1.** Фурье-спектр амплитудно-временных реализаций интегрального ЭДМ молекулы глицина в водном растворе при  $T = 300$  К и при  $E = 0$  (a), в нерезонансном  $f_E = 125$  THz ( $4167 \text{ cm}^{-1}$ ) (b) и резонансных  $f_E = 100$  THz ( $3333 \text{ cm}^{-1}$ ) (c) и  $f_E = 31$  THz ( $1042 \text{ cm}^{-1}$ ) (d) электрических полях.

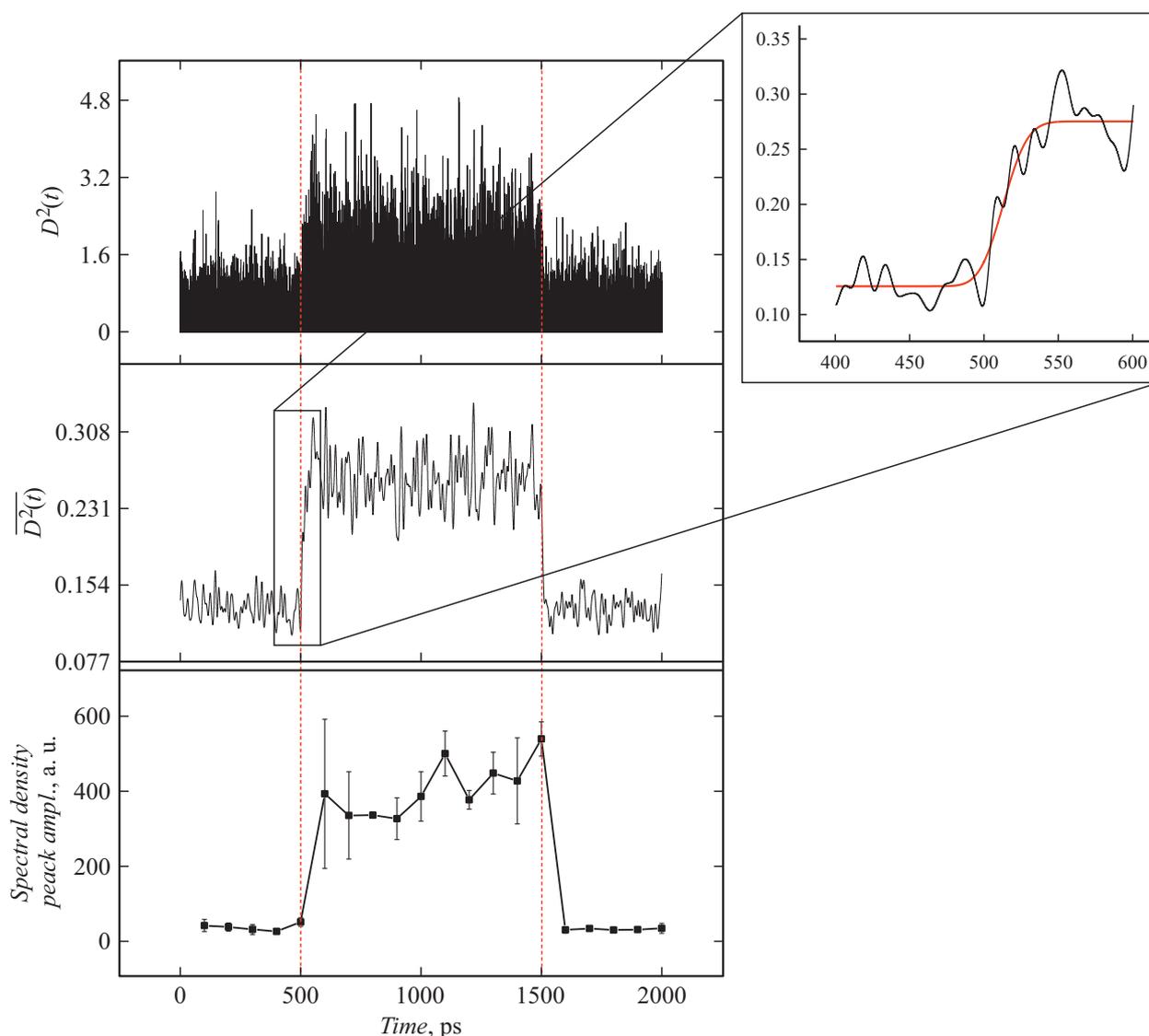
денные локальные внутримолекулярные колебания в атомной подсистеме во внешнем электрическом поле. Атомно слабое поле задавали в виде симметричного меандра с различной длительностью пакета, плоской пространственной поляризацией по координатным осям  $x$ ,  $y$ ,  $z$  с компонентами  $[A00]$  и амплитудой  $A$  от 0 до  $\pm 0.5 \text{ V} \cdot \text{nm}^{-1}$ . Частоту поля изменяли в широких пределах, варьируя количество точек дискретизации в периоде меандра и значения частоты дискретизации. Выбор глицина позволил сопоставить результаты с известными данными, обеспечить наиболее надежные методики вычислений и интерпретацию результатов.

На рис. 1 представлены спектры частот внутримолекулярных колебаний, полученные посредством спектрального фурье-разложения амплитудно-временных реализаций интегрального ЭДМ глицина без воздействия поля при  $E = 0$  (a), при наложении нерезонансного (b) и резонансных (c, d) полей. Внешнее поле нерезонансной частоты приводило к возрастанию в несколько раз амплитуд ближайших по частоте пиков (рис. 1, b). При резонансах, когда частота основной гармоники поля совпадала с частотой локального колебания, наблюдалось существенное (на порядок и более) возрастание

амплитуды выбранного типа колебания. Вид спектра показал, что энергия всех регистрируемых колебаний была сосредоточена практически полностью в резонансном пике.

Значения резонансных частот можно отнести к валентным локальным колебаниям типа асимметричных колебаний  $\text{NH}_2$  (Амид A) и колебаний  $\text{C}-\text{N}$  с волновыми числами около  $3335.6$  и  $1042.37 \text{ cm}^{-1}$  соответственно. Амплитуда резонансного пика возрастала линейно при увеличении амплитуды меандра от 0 до  $\pm 0.4 \text{ V} \cdot \text{nm}^{-1}$ , а при большей напряженности поля устанавливался нелинейный режим. Подобные результаты были получены также для молекул дифенил-L-аланина и триптофана. Для вынужденного резонанса в режиме линейного квазигармонического осциллятора можно ввести параметры постоянной времени релаксации, т.е. нарастания и затухания энергии локальных колебаний  $\tau$ , полосы частот  $\Delta f = 1/\tau$ , а также добротности  $Q \approx f/\Delta f$ . При задании импульсной прямоугольной огибающей пакета меандра значения постоянной времени релаксации  $\tau$  определяли по виду фронтов импульса интегрального ЭДМ (рис. 2).

Аппроксимация импульсов  $D^2(t)$  соответствовала экспоненциальным зависимостям изменения энергии во



**Рис. 2.** Зависимость квадрата амплитуды  $D(t)$  высокочастотной составляющей ЭДМ от времени (вверху), усреднение этой зависимости с периодом 5 ps (в центре), гистограмма резонансного пика (внизу). На вставке показана аппроксимация фронта импульса  $D^2(t)$ . Обозначены моменты времени включения (500 ps) и выключения (1500 ps) пакета меандра на частоте 100 THz ( $3333 \text{ cm}^{-1}$ ).

время нарастания и затухания колебаний. Параметрам графиков, приведенных на рис. 2, и другим подобным резонансным режимам соответствовали значения  $\tau \approx 10^{-10} \text{ s}$ , полосы частот  $\Delta f \approx 10 \text{ GHz}$  и добротности локального осциллятора нормальной моды асимметричных колебаний  $\text{NH}_2$   $Q \approx 10^4$ .

Реализация методики моделирования динамических параметров аминокислот согласуется с линейным характером суперпозиции локальных нормальных мод колебаний и неравномерным распределением энергии связанных квазигармонических осцилляторов по широкому спектру частот. В электрическом поле на частотах дальнего и среднего ИК-диапазонов выявлены режимы резонансного возбуждения вынужденных колебаний молекулах аминокислот глицин, дифенил-L-аланин

и триптофан, определены линейный участок и порог перехода в нелинейный режим. Вычислены типичные параметры переходных динамических процессов, в том числе постоянные времени релаксации, полоса частот и значения добротности молекулярных осцилляторов. Предложенный метод и полученные результаты расширяют возможности суперкомпьютерного исследования структуры и динамики биомолекул в электрическом поле, а также их функций в гетерогенных гибридных микро- и наноэлектронных устройствах.

#### Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 21-72-20029) с использованием

вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого ([www.scc.spbstu.ru](http://www.scc.spbstu.ru)).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] N. Amdursky, E.D. Głowacki, P. Meredith, *Adv. Mater.*, **31** (3), 1802221 (2019). DOI: 10.1002/adma.201802221
- [2] M.C. Petty, T. Nagase, H. Suzuki, H. Naito, in *Springer handbook of electronic and photonic materials*, ed by S. Kasap, P. Capper (Springer, Cham, 2017). DOI: 10.1007/978-319-48933-9\_51
- [3] Е.Н. Величко, О.Ю. Цыбин, *Гибридная биомолекулярная электроника* (Политех-Пресс, СПб., 2021).
- [4] W. Yi, J. Yu, Y. Xu, F. Wang, Q. Yu, H. Sun, L. Xu, Y. Liu, L. Jiang, *Instrum. Sci. Technol.*, **45** (4), 423 (2017). DOI: 10.1080/10739149.2016.1270961
- [5] N.J. English, C.J. Waldron, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17** (19), 12407 (2015). DOI: 10.1039/C5CP00629E
- [6] М.А. Баранов, Э.К. Непомнящая, О.Ю. Цыбин, *Науч.-техн. ведомости СПбГПУ. Физ.-мат. науки*, **15** (4), 55 (2022). DOI: 10.18721/JPM.15404