DOI: 10.18721/JPM.10408
УДК 539.2; 004.94

СУБПИКОСЕКУНДНАЯ ДИНАМИКА ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛИАЛАНИНОВ

Т.И. Зезина, О.Ю. Цыбин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

На субпикосекундной шкале времени вычислены мгновенные значения дипольного момента олигопептидов аланина в вакууме и в водном растворе с целью оценки влияния внешних воздействий: температуры, а также амплитуды и ориентации вектора напряженности внешнего электростатического поля. Компьютерное моделирование осуществляли методом молекулярной динамики. Динамические сценарии при воздействии внешнего электростатического поля свыше 100 МВ/м были получены для олигопептидов аланина различной длины (от 2 до 24 групп), находящихся в водной среде и вакууме, с временным шагом 1 фс и временем моделирования до 100 нс. Вычисленные сценарии можно использовать для дальнейшего анализа и обобщенного описания структурных свойств и конформационной динамики молекул. Освоенный программный компьютерный комплекс пригоден для вычисления представительных молекулярных сценариев, включая поведение различных по структуре пептидов и белков в вакууме, растворах, а также под воздействием электрического поля при различных температурах.

Ключевые слова: биомолекула; пептиды; компьютерное моделирование; молекулярная динамика; дипольный момент; биомолекулярная электроника

Ссылка при цитировании: Зезина Т.И., Цыбин О.Ю. Субпикосекундная динамика дипольного момента молекулярных полиаланинов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 100–110. DOI: 10.18721/JPM.10408

SUBPICOSECOND DYNAMICS OF THE MOLECULAR POLYALANINE DIPOLE MOMENT

T.I. Zezina, O.Yu. Tsybin

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

Instantaneous dipole moments of polyalanine peptides in vacuum and in the aqueous medium have been calculated on the picosecond time scale in order to evaluate the external influence of temperature, of the electrostatic field's amplitude and direction. Computer simulation was performed using the molecular dynamics method. The dynamic scenarios induced by the external electrostatic field above 100 MV/m were obtained for polyalanine molecules of different lengths (from 2 to 24 groups) placed in vacuum and in aqueous medium, the time step of 1 fs and the simulation time up to 100 ns being taken. The simulated scenarios can be used for a further analysis and a generalized description of structural properties and conformational

dynamics of molecules. The mastered software packages are appropriate for computing the representational scenarios of biomolecular behavior under various conditions.

Key words: biomolecule; peptide; computer simulation; molecular dynamics; dipole moment; biomolecular electronics

Citation: T.I. Zezina, O.Yu. Tsybin, Subpicosecond dynamics of the molecular polyalanine dipole moment, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (3) (2017) 100–110. DOI: 10.18721/JPM.10408

Введение

Пространственная структура и динамика белковых молекул обеспечивают множество биологических функций в живой природе, а также подобных сценариев в искусственных системах. Исследования изолированных белков и пептидов позволяют получать биологически значимые данные о первичной и вторичной структурах, межмолекулярных и внутримолекулярных взаимодействиях [1 – 9]. В водных растворах пептиды и белки существуют в различных вторичных структурных состояниях (β-листы, альфа-спирали, 3_{10}-спирали и другие), которые для пептидов в основном или частично сохраняются при переходе в газовую фазу [1 – 3]. Экспериментально показано, например, что в вакууме дикатионы полиаланинов и полиглицинов сохраняют тенденцию к формированию структуры альфа-спирали [1]. Благодаря сохранению нативной структуры в газовой фазе, а также биологической значимости и медицинским приложениям, полиаланины представляют собой актуальный объект всестороннего изучения. Большое значение имеют исследования воздействия электрических статических и переменных полей на структуру полиаланинов. Дальнодействие электрических сил способствует возникновению нетепловых эффектов перестройки структуры молекулы во внешнем поле, усиленных упорядоченной ориентацией интегральных по объему молекулы электрических дипольных моментов (ЭДМ) [4 – 9].

Пространственная структура полипептида определяет интегральный ЭДМ, который за счет этого приобретает свойства оценочного параметра структурной геометрии и динамики. В относительно слабом, по сравнению с типичными полями атомных подсистем, электростатическом поле ($E < 10^8$ В/м) эффекты поляризации близки к линейным, средний статический ЭДМ приблизительно соответствует уравнению Ланжевена – Дебая:

$$p = \mu_0^2 E \,/\, 3kT,$$

где p – значение поляризации, μ_0 – значение ЭДМ, kT – термодинамическая энергия, определяемая произведением постоянной Больцмана на значение абсолютной температуры [2, 4 – 8].

Пептиды, обладающие свойствами пьезоэлектриков, например дифенилаланин, образуют упорядоченные агрегации даже в слабых полях [9]. Наряду с экспериментальными методами радиоимпедансной спектроскопии [10 – 12], поиск упорядоченных структур в слабых полях осуществляется компьютерным моделированием. Такие исследования востребованы, например, для выяснения процессов молекулярной самоорганизации в растворах и пленках. В более сильном поле (E = 1 В/нм) выполнено компьютерное исследование дипептида аланина в воде [4]. Подобные сильные поля типичны для наносистем, а в микролокальных лабораторных экспериментах создаются вблизи микроскопических дефектов поверхности, например у вершины острий.

Подобные задачи возникают в последние годы не только в биологии и медицине, биофизике и биохимии, но также в связи с актуальностью создания элементной базы биомолекулярной электроники: нового научно-технического и технологического гибридного комплекса твердотельной электроники, биомолекул и биомолекулярных метаматериалов [11 – 14]. В электродинамике и электронике биомолекулы предстают в большей степени не как носители биологических функций, а как распределенные в конфигурационном пространстве атомные кластеры, имеющие физические

свойства системы нелинейно связанных квантовых осцилляторов. Рассматриваются, например, конфигурации нано- или микроэлектронных цепей с включением в них белковой молекулы, при этом свойства цепей существенно зависят от ЭДМ молекулы [13 – 14].

В перспективных разработках элементной базы электроники ЭДМ может стать важным параметром, определяющим процессы ввода и сбора данных, полевые и температурные зависимости, распределение электрических потенциалов и энергии взаимодействия с поверхностью твердого тела и т. п. Для обеспечения такой перспективы требуется создать и проанализировать соответствующие базы данных значений ЭДМ различных молекул, динамических сценариев в условиях вакуума и растворов, взаимодействия с твердыми телами, изменения температуры и электрического поля. Интегральный молекулярный ЭДМ и его динамические сценарии потребуется вычислять при проектировании гибридных электронных элементов и устройств.

В данной работе выполнено компьютерное моделирование мгновенных (интегральных по объему атомного кластера) значений ЭДМ олигопептидов аланина на субпикосекундной шкале времени в вакууме и в водном растворе; эти значения необходимы для оценки влияния внешних воздействий: температуры, а также амплитуды и ориентации вектора напряженности внешнего электростатического поля на зависимость ЭДМ от времени.

Метод вычислений

Компьютерный метод молекулярной динамики (МД) был реализован путем совмещения ряда прикладных пакетов программ в единый исследовательский комплекс. Компьютерные модели, представляющие собой альфа-спирали олигопептидов аланина, создавали в пакете Avogadro [15], где получали пространственные распределения атомной подсистемы. Дальнейшая их модификация, включающая построение окружающей среды молекул воды, оптимизацию геометрии системы, моделирование пошаговой эволюции биомолекулярной системы методом МД с использованием силового поля CHARMM27 [16], оценка геометрических изменений в системе и расчет величины дипольного момента были реализованы при помощи программ NAMD [17] и VMD [18]. Для пептидов аланина различной длины в водной среде и вакууме были получены динамические сценарии с временным шагом 1 фс и временем моделирования до 100 нс под воздействием внешнего электростатического поля $E > 10^8$ В/м.

Мгновенные значения ЭДМ на каждом временном шаге вычисляли путем сложения индивидуальных моментов:

$$\boldsymbol{\mu} = \sum_{n=1}^{N} q_n \mathbf{r}_n.$$

Изменение поляризуемости и электронные переносы, вызванные пространственными структурными переходами и внешним полем $E > 10^8$ В/м, считали несущественными, чему есть подтверждающие обоснования в литературе [2, 7, 8]. Исследования методом МД проводились путем построения временных реализаций длительностью от 100 пс до 100 нс при различных условиях в вакууме и в водной среде.

Температуру T варьировали в пределах от 200 до 500 К. Амплитуду внешнего электростатического поля E в программе NAMD задавали в ккал/(моль · Å · e), где e – заряд электрона. Поле изменяли в пределах от 0 до 10 ккал/(моль · Å · e), где в единицах В/м наибольшее значение E соответствует $\approx 4{,}34 \cdot 10^9$ В/м, то есть полю 434 МВ/Å, относительно слабому, по сравнению с типичными межатомными полями.

Водная среда формировалась в виде заполненного трехточечными моделями молекул воды прямоугольного параллелепипеда со сторонами, отдаленными, как минимум, на 10 Å от биомолекулы для каждого олигопептида, состоящего из N звеньев аланина (N = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 16), и на 15 Å – для более крупных пептидов (Ala_{24} и Ala_{20}). Для ряда траекторий аланина в водной среде задавали периодические граничные условия с использованием термостата Ланжевена. Для всех сценариев дальнодействующие взаимодействия между атомами плавно спадали, начиная с расстояния в 10 Å, и обнулялись

к границе отсечения дальнодействующих взаимодействий, равной 12 Å. Компоненты ЭДМ в плоскости, поперечной первичной цепи, имели высокие значения: около 3,5 – 3,7 Д, но из-за периодической смены пространственного направления при суммировании вдоль первичной цепи они не вносили существенного вклада в интегральное значение. В результате вычисленный ЭДМ представлял собой интегральный вектор, направление которого выбрано от C-конца к N-концу.

Верификация вычисленных сценариев была основана на сопоставлении с имеющимися литературными данными, на многократных вычислениях реализаций с варьированием начальных условий, на аналитических проверках усредненных реализаций.

Результаты вычислений и их обсуждение

Рассмотрим типичные вычисленные зависимости от времени интегрального ЭДМ олигопептидов аланина с $N = 2 - 24$ (N – число аминогрупп в пептидной цепи). На рис. 1 – 5 приведены основные характеристики ЭДМ в воде и в вакууме при различных значениях стационарной температуры окружения ($T = 200 - 500$ K) и молекулы, а также амплитуды напряженности внешнего электростатического поля $E = 0{,}1$; 1,0; 2,0; 5,0; 10,0 ккал/(моль · Å · e). Зависимости мгновенных значений интегрального по объему молекулы ЭДМ от времени получены с наибольшим разрешением в 1 фс «молекулярного» времени как в коротких, так и в обзорных реализациях длительностью до 100 нс. На реализациях наблюдаются как стабильные стационарные динамические сценарии в виде колебаний относительно среднего значения ЭДМ, так и быстрые глобальные конформационные бифуркации.

На рис. 1 приведены типичные временные реализации ЭДМ молекулы Ala_{12} при 300 K. На рис. 1, *a* показан график эволюции во времени ЭДМ на протяжении 100 пс для олигопептида аланина Ala_{12} в вакууме под действием внешнего электростатического поля, равного 1 ккал/(моль · Å · e) ≈ ≈ $4{,}34 \cdot 10^8$ В/м; на рис. 1, *b* – на протяжении 100 нс в водной среде. В водной среде на всем протяжении реализации амплитуда дипольного момента пептида остается в среднем практически постоянной и лишь колеблется вокруг среднего значения, причем имеются колебания как относительно низкой частоты, порядка 100 МГц – 1 ГГц, так и предельно высокой, неразличимой на данном графике. Для определения диапазона этих высоких частот требуются дополнительные исследования. На рис. 1, *a* показан пример быстрого, за время приблизительно 12 пс, конформационного перехода молекулы в вакууме во внешнем электростатическом поле 1 ккал/(моль · Å · e). Происходит, как видно, спонтанное изменение пространствен-

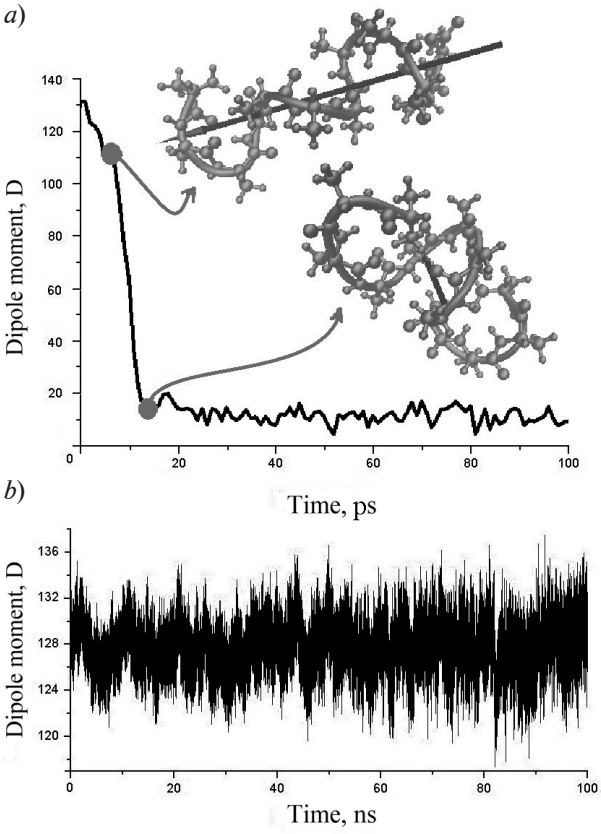

Рис. 1. Типичные временные реализации электрического дипольного момента (ЭДМ) молекулы Ala_{12} при 300 K: *a* – скачок ЭДМ в результате быстрого спонтанного пространственного перехода Ala_{12} в вакууме под действием внешнего электростатического поля в $4{,}34 \cdot 10^8$ В/м; *b* – динамика дипольного момента Ala_{12} в водной среде

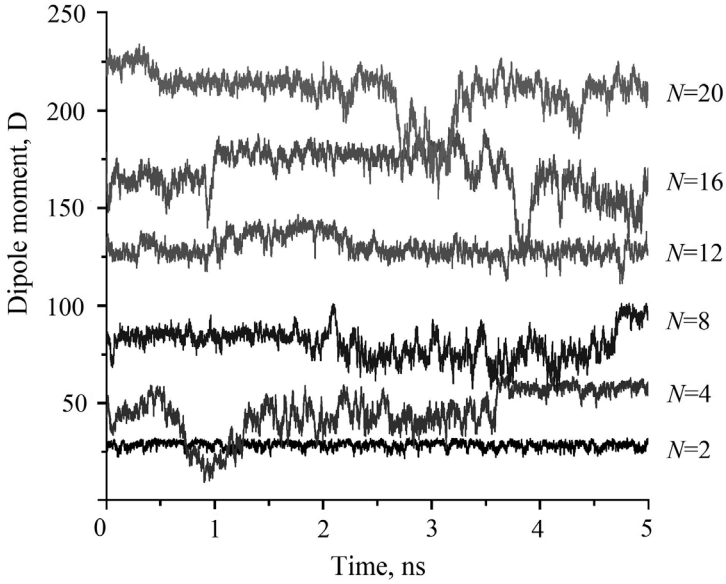

Рис. 2. Типичные временные зависимости ЭДМ олигопептидов аланина (число звеньев $N = 2 - 20$) в воде при 300 К

ной структуры в сжатое квазиспиральное состояние. Быстрому глобальному переходу пептида из одного пространственного состояния в другое соответствует значительное изменение величины его дипольного момента от начального (приблизительно 130 Д) к конечному (около 10 Д), сохраняющемуся затем на протяжении почти 100 пс. Стрелками на рисунке обозначены векторы ЭДМ, имеющие до и после перехода различные значения длины и углов ориентации. В период между пространственными бифуркациями флуктуации величины ЭДМ относительно среднего значения имели квазислучайный характер для всех молекул; вычисленная функция распределения была близка к Гауссовой.

На рис. 2 приведены типичные зависимости от времени для ЭДМ олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в воде, при 300 К. Эти зависимости были использованы для построения статистических распределений.

Гистограммы средних значений ЭДМ молекул олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в нулевом электростатическом поле ($E = 0$) при $T = 300$ К в водной среде представлены на рис. 3, *a*, в вакууме – на рис. 3, *b*. Среднеквадратичные отклонения (рис. 3, *a*) имеют значительно меньшую амплитуду, чем соответствующие средние значения ЭДМ. Средние значения ЭДМ в воде приблизительно пропорциональны количеству N аминокислотных групп молекулы. Этот факт указывает, по-видимому, на более вероятное и стабильное долговременное существование исходных спиральных пространственных, или конформационных состояний олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в воде, где стягивающие молекулу собственные электрические поля (водородные связи O· · ·H) ослаблены из-за увеличенной относительной диэлектрической проницаемости среды. Поэтому размер молекулы в спиральном состоянии определяется в большей степени количеством входящих групп, а не сжатием структуры. Такая гипотеза не противоречит имеющимся в литературе данным и может быть в дальнейшем уточнена путем анализа динамических реализаций ЭДМ для разных диапазонов частот колебаний.

Значения ЭДМ в вакууме (рис. 3, *b*), по сравнению с водной средой (рис. 3, *a*), приблизительно на порядок меньше, что можно связать с действием собственного электрического поля, усиленного в вакууме из-за снижения относительной диэлектрической проницаемости среды и стягиваю-

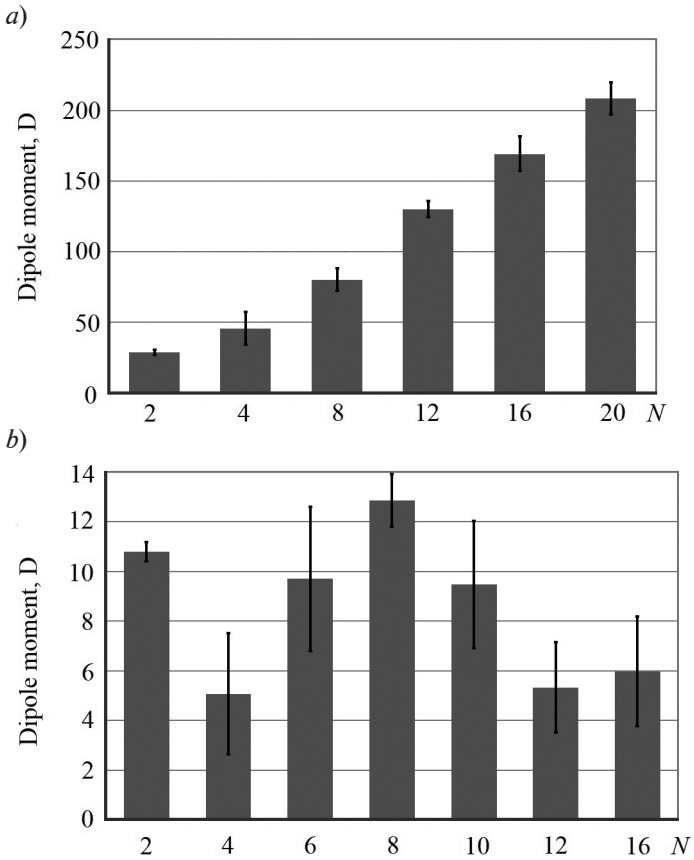

Рис. 3. Гистограммы средних значений ЭДМ с соответствующими среднеквадратичными отклонениями для молекул олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в нулевом электростатическом поле при $T = 300$ K в водной среде (*a*) и в вакууме (*b*)

щего молекулу в более плотную структуру.

Значения среднего ЭДМ сопоставимых молекул для водной среды и вакуума (см. рис. 3) не только сильно различаются между собой, но и имеют различные функциональные зависимости от параметра N. В вакууме наблюдается немонотонная зависимость от N, что указывает на более сложный характер формирования сжатой конформационной структуры, определяющей значение интегрального ЭДМ. Видно, например, что наименьшая молекула ряда – Ala_2 – имеет более высокое среднее значение ЭДМ, чем можно получить простой экстраполяцией графика, а наибольшее значение имеет пептид с промежуточным значением параметра $N = 8$. Такой сценарий согласуется с имеющимися данными литературы и дополняет их [3, 4, 6]. Ala_2 находится в альфа-подобной конформации, а остальные молекулы «сжимаются» сильнее. По графику данных для воды видно, что все олгопептиды аланина распределены по порядку нарастания ЭДМ и сохраняют стартовую структуру альфа-спирали.

Полученные сценарии были подтверждены моделированием действия внешнего электростатического поля E, направленного вдоль вектора ЭДМ, то есть «растягивающего» молекулу вдоль первичной цепи и тем самым частично компенсирующего действие собственного электрического поля молекулы (рис. 4). Как и ожидалось, при увеличении внешнего поля E от нуля до максимума в 10 ккал/(моль · Å · e) ≈ ≈ $4{,}34 \cdot 10^9$ В/м, ослабленного в водной среде, происходило небольшое возрастание среднего значения интегрального

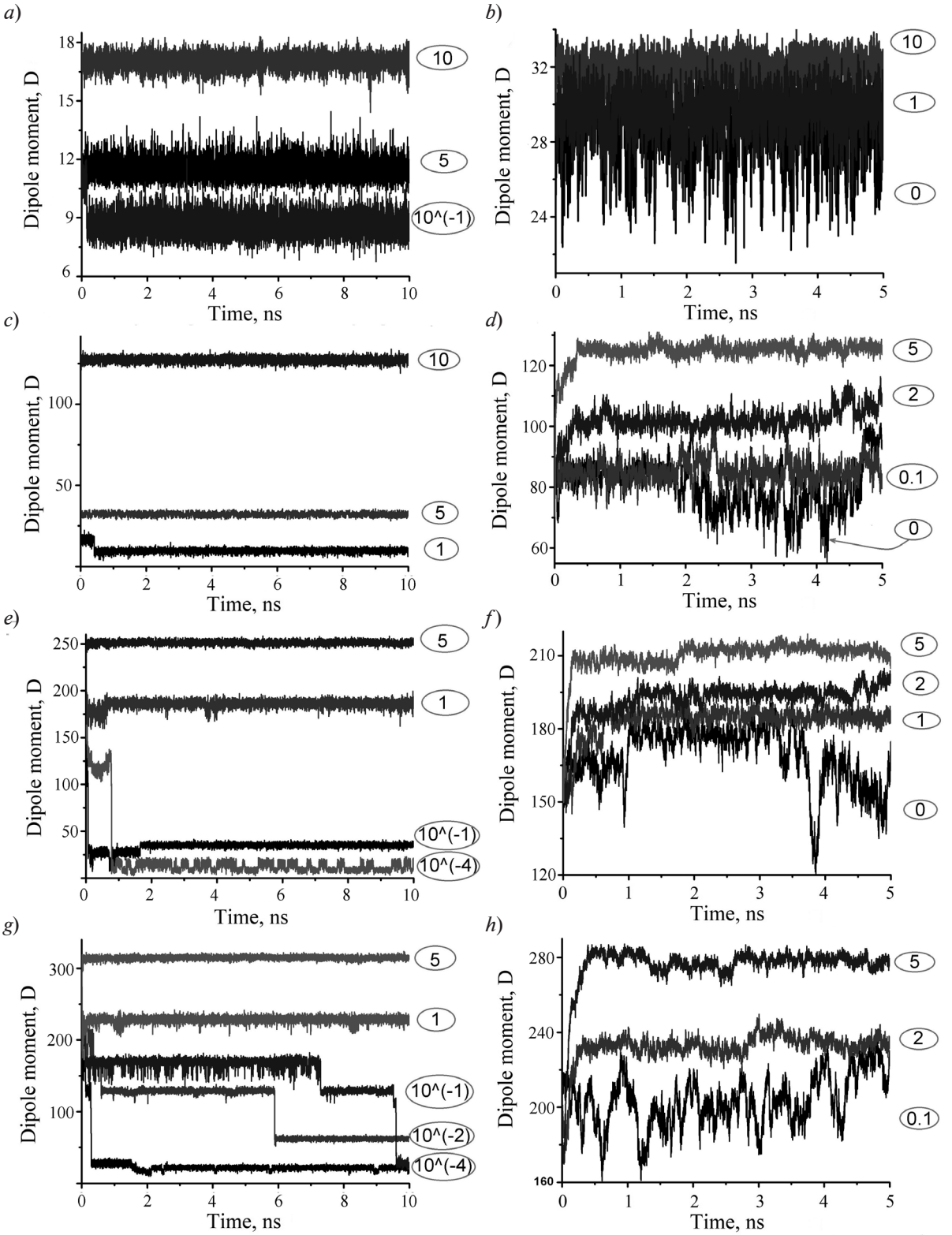

Рис. 4. Графики эволюции ЭДМ молекул Ala_2 (*a*, *b*), Ala_8 (*c*, *d*), Ala_{16} (*e*, *f*) и Ala_{20} (*g*, *h*) в вакууме (*a*, *c*, *e*, *g*) и воде (*b*, *d*, *f*, *h*) под действием внешнего электростатического поля *E* (значения *E* указаны справа от соответствующих графиков в единицах ккал/(моль · Å · e))

ЭДМ на величину 10 – 50 % от невозмущенного значения, а функциональная зависимость от параметра N оставалась монотонной. Наименьшее относительное возрастание среднего значения интегрального ЭДМ наблюдалось для $N = 2$. В вакууме при увеличении внешнего поля E от нуля до максимума в $4{,}2 \cdot 10^8$ В/м происходило драматическое возрастание мгновенных значений интегрального ЭДМ в 2 – 30 раз, а зависимость от N становилась более монотонной, поскольку возрастание превалировало для больших значений параметра N.

Влияние изменения температуры при ее увеличении от 200 до 500 К на мгновенное и среднее значения интегрального ЭДМ было значительно слабее, чем действие электрического поля. В водной среде и вакууме возникали более частые быстрые глобальные пространственные перераспределения, или бифуркации, стимулированные, по-видимому, неустойчивостями структуры. Такие неустойчивости и переходы возможны из-за интенсификации колебаний атомной подсистемы для больших молекул при значениях N выше 12. Они показаны для $N = 8$ и 20 при $T = 200$ К и 500 К в воде (рис. 5, *a* и 5, *c*, соответственно) и для $N = 20$ при $T = 200$ К и 400 К (рис. 5, *d*), а также для $N = 8$ при $T = 200$ К и 450 К в вакууме (рис. 5, *b*).

Выводы

Реализован вычислительный комплекс в виде совокупности пакетов прикладных компьютерных программ, как известных, так и оригинальных. С помощью этого комплекса получены новые данные о состоянии олигопептидов аланина. Ком-

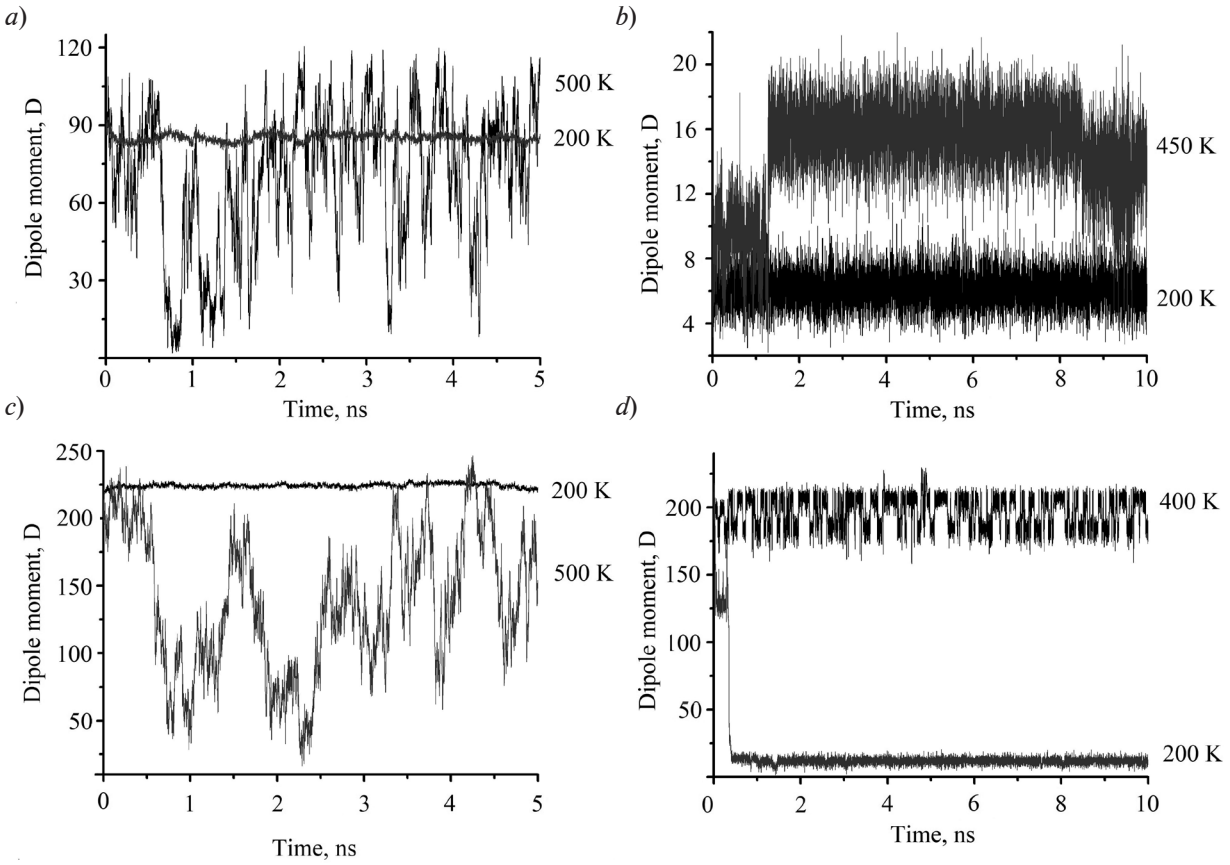

Рис. 5. Типичные временные зависимости ЭДМ молекул Ala_8 (*a*, *b*), и Ala_{20} (*c*, *d*) в водной среде (*a*, *c*) и в вакууме (*b*, *d*), при низком (200 К) и высоких (400 – 500 К) значениях температуры

пьютерное моделирование различных по размеру молекул олигопептидов аланина ($N = 2 - 20$) в водной среде и вакууме позволило получить комплекс сведений о наиболее вероятных пространственных структурах и соответствующих значениях интегрального по объему молекулы электрического дипольного момента при определенных варьируемых внешних условиях. Выявленные при моделировании закономерности изменения электрического дипольного момента в различных условиях образовали внутренне непротиворечивый комплекс, физически обоснованный, достоверность которого подтверждается сопоставимостью с известными литературными данными. Это позволило считать разработанный подход и комплекс примененных методик, алгоритмов и программ достаточно надежными и эвристичными. Они положены в основу дальнейших углубленных исследований. Вычисленные сценарии могут быть использованы для дальнейшего анализа и обобщений конформационной динамики; они позволяют перейти к частотному спектральному анализу динамики электрического дипольного момента. Освоенный программный комплекс пригоден для суперкомпьютерного вычисления более представительных молекулярных сценариев. Выбранные временные параметры моделирования позволят в дальнейшем вычислить частотный спектр, включающий резонансные внутримолекулярные колебания атомной подсистемы.

Данная работа была поддержана средствами программы 5-100-2020 для участия аспирантки Т.И. Зезиной в Школе по методам компьютерного моделирования молекул (2015 год, г. Оденсе, Дания).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Albrieux F., Calvo F., Chirot F., Vorobyev A., Tsybin Yu.O., Lepère V., Antoine R., Lemoine J., Dugourd Ph.** Conformation of polyalanine and polyglycine dications in the gas phase: Insight from ion mobility spectrometry and replica-exchange molecular dynamics // J. Phys. Chem. A. 2010. Vol. 114. No. 25. Pp. 6888–6896.

2. **Leitgeb B., Kerényi Á., Bogár F., Paragi G., Penke B., Rákhely G.** Studying the structural properties of polyalanine and polyglutamine peptides // J. Mol. Model. 2007. Vol. 13. No. 11. Pp. 1141–1150.

3. **Antoine R., Compagnon I., Rayane D., Broyer M., Dugourd Ph., Breaux G., Hagemeister F.C., Pippen D., Hudgins R.R., Jarrold M.F.** Electric dipole moments and conformations of isolated peptides // Europ. Phys. J. D. 2002. Vol. 20. No. 3. Pp. 583–587.

4. **Wang H., Schütte Ch., Ciccotti G., Delle Site L.** Exploring the conformational dynamics of alanine dipeptide in solution subjected to an external electric field: A nonequilibrium molecular dynamics simulation //J. Chem. Theory and Comp. 2014. Vol. 10. No. 4. Pp. 1376–1386.

5. **Poulain P., Antoine R., Broyer M., Dugourd P.** Monte Carlo simulations of flexible molecules in a static electric field: electric dipole and conformation //Chem. Phys. Lett. 2005. Vol. 401. No. 1–3. Pp. 1–6.

6. **Calvo F., Dugourd P.** Folding of gas-phase polyalanines in a static electric field: alignment, deformations, and polarization effects // Biophys. J. 2008. Vol. 95. No. 1. Pp. 18–32.

7. **Bulthuis J., Becker J.A., Moro R., Kresin V.V.** Orientation of dipole molecule and clusters upon adiabatic entry into an external electric field // J. Chem. Phys. 2008. Vol. 129. No. 2. P. 024101.

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

9. **Kellya C.M., Northeya T., Ryana K., Brooksd B.R. Kholkine A.L., Rodrigueza B.J., Buchete N.V.** Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field // Biophys. Chem. 2015. Vol. 196. Pp. 16–24.

10. **Величко Е.Н., Черемискина А.В., Зезина Т.И., Цыбин О.Ю.** Импедансная радиоспектроскопия и компьютерное моделирование биомолекулярных пленок // Матер. XXI Междунар. науч.-метод. конф. «Высокие интеллектуальные технологии и инновации в национальных исследовательских университетах». СПб., 5–7 июня 2014. Т. 3. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. С. 50–53.

11. **Velichko E., Zezina T., Cheremiskina A., Tsybin O.** Nanocommunication device with embedded molecular films: Effect of electromagnetic field and dipole moment dynamics // Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems; ruSMART-2015. Lecture Notes in Computer Science. Springer International Publishing, 2015. No. 9247. Pp. 765–771.

12. **Зезина Т.И., Цыбин О.Ю.** Компьютерное моделирование эволюции дипольного момента пептидов аланина // Научный форум с междунар. участием «Неделя науки СПбПУ». Матер. науч.-практ. конф. Институт физики, нанотехнологий и телекоммуникаций СПбПУ. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2015. С. 199–201.

13. **Величко Е.Н., Цыбин О.Ю.** Биомолекулярная электроника. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2011. 256 с.

14. **Rakos B.** Modeling of dipole-dipole coupled, electric field-driven, protein-based computing architectures // International Journal of Circuit Theory and Applications. 2015. Vol. 43. No. 1. Pp. 60–72.

15. **Hanwell M.D., Curtis D.E., Lonie D.C., Vandermeersch T., Zurek E., Hutchison G.R.** Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform // Journal of Cheminformatics. 2012. Vol. 4. No. 1. Pp. 1–17.

16. **MacKerell A.D., Feig M., Brooks C.L.** Extending the treatment of backbone energetics in protein force fields: Limitations of gas-phase quantum mechanics in reproducing protein conformational distributions in molecular dynamics simulations //J. Comp. Chem. 2004. Vol. 25. No. 11. Pp. 1400–1415.

17. **Phillips J.C., Braun R., Wang W., Gumbart J., Tajkhorshid E., Villa E., Chipot Ch., Skeel R.D., Kalé L., Schulten K.** Scalable molecular dynamics with NAMD // J. Comp. Chem. 2005. Vol. 26. No. 16. Pp. 1781–1802.

18. **Humphrey W., Dalke A., Schulten K.** VMD – Visual Molecular Dynamics // J. Mol. Graph. 1996. Vol. 14. No. 1. Pp. 33–38.

Статья поступила в редакцию 28.03.2016, принята к публикации 05.07.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗЕЗИНА Татьяна Игоревна – *аспирантка кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zezinat@yandex.ru

ЦЫБИН Олег Юрьевич – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
otsybin@rphf.spbstu.ru

REFERENCES

[1] **F. Albrieux, F. Calvo, F. Chirot, et al.,** Conformation of polyalanine and polyglycine dications in the gas phase: Insight from ion mobility spectrometry and replica-exchange molecular dynamics, J. Phys. Chem. A. 114 (25) (2010) 6888–6896.

[2] **B. Leitgeb, Á. Kerényi, F. Bogár, et al.,** Studying the structural properties of polyalanine and polyglutamine peptides, J. Mol. Model. 13(11) (2007) 1141–1150.

[3] **R. Antoine, I. Compagnon, D. Rayane, et al.,** Electric dipole moments and conformations of isolated peptides, Europ. Phys. J. D. 20(3) (2002) 583–587.

[4] **H. Wang, Ch. Schütte, G. Ciccotti, L. Delle Site,** Exploring the conformational dynamics of alanine dipeptide in solution subjected to an external electric field: A nonequilibrium molecular dynamics simulation, J. Chem. Theory and Comp. 10(4) (2014) 1376–1386.

[5] **P. Poulain, R. Antoine, M. Broyer, P. Dugourd,** Monte Carlo simulations of flexible molecules in a static electric field: electric dipole and conformation, Chem. Phys. Lett. 401(1–3) (2005) 1–6.

[6] **F. Calvo, P. Dugourd,** Folding of gas-phase polyalanines in a static electric field: Alignment, deformations, and polarization effects, Biophys. J. 95(1) (2008) 18–32.

[7] **J. Bulthuis, J.A. Becker, R. Moro, V.V. Kresin,** Orientation of dipole molecule and clusters upon adiabatic entry into an external electric field, J. Chem. Phys. 129(2) (2008) 024101.

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

[9] **C.M. Kellya, T. Northeya, K. Ryana, et al.,** Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field, Biophys. Chem. 196 (2015) 16–24.

[10] **E.N. Velichko, A.V. Cheremiskina, T.I. Zezina, O.Yu. Tsybin,** Impedansnaya

radiospektroskopiya i kompyuternoye modelirovaniye biomolekulyarnykh plenok [Impedance spectroscopy and simulation of biomolecular films], Materialy XXI Mezhdunarodnoy nauchno-metodicheskoy konferentsii «Vysokiye intellektualnyye tekhnologii i innovatsii v natsionalnykh issledovatelskikh universitetakh» [Proceedings of the 21-th Intern. Conf. "Smart High Tech. and Innovations at National Research Universities"], Vol. 3, 2014, June 5–7, St. Petersburg, Politekhn. Univ. Publ. House, 2014. Pp. 50–53.

[11] **E. Velichko, T. Zezina, A. Cheremiskina, O. Tsybin,** Nanocommunication device with embedded molecular films: Effect of electromagnetic field and dipole moment dynamics, Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems, ruSMART-2015. Lecture Notes in Computer Science, Springer International Publishing. 9247 (2015) 765–771.

[12] **T.I. Zezina, O.Yu. Tsybin,** Kompyuternoye modelirovaniye evolyutsii dipolnogo momenta peptidov alanina [Simulation of evolution of a dipole moment of polyalanine peptides], Proceedings of the Intern. Conf. "The Week of Science at St. Petersburg Polytechnical University" ("Nedelya nauki SPbPU"), St. Petersburg, Petersburg, Politekhn. Univ. Publ. House, 2015. Pp. 199–201.

[13] **E.N. Velichko, O.Yu. Tsybin,** Biomolekulyarnaya elektronika. Vvedeniye [Biomolecular electronics. Introduction], St. Petersburg Politechnic university, St. Petersburg, 2011.

[14] **B. Rakos,** Modeling of dipole-dipole coupled, electric field-driven, protein-based computing architectures, International Journal of Circuit Theory and Applications. 43(1) (2015) 60–72.

[15] **M.D. Hanwell, D.E Curtis, D.C. Lonie, et al.,** Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform, Journal of Cheminformatics. 4(1) (2012) 1–17.

[16] **A.D. MacKerell, M. Feig, C.L. Brooks,** Extending the treatment of backbone energetics in protein force fields: Limitations of gas-phase quantum mechanics in reproducing protein conformational distributions in molecular dynamics simulations, J. Comp. Chem. 25(11) (2004) 1400–1415.

[17] **J.C. Phillips, R. Braun, W. Wang, et al.,** Scalable molecular dynamics with NAMD, J. Comp. Chem. 26(16) (2005) 1781–1802.

[18] **W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten,** VMD – Visual Molecular Dynamics, J. Mol. Graph. 14(1) (1996) 33–38.

Received 28.03.2016, accepted 05.07.2017.

THE AUTHORS

ZEZINA Tatiana I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
zezinat@yandex.ru

TSYBIN Oleg Yu.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
otsybin@rphf.spbstu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2017