

## Физика молекул

Научная статья

УДК 53.093, 53.096, 57.031, 57.033, 57.038

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.14410>

### КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ РЕЛАКСАЦИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ МОЛЕКУЛ ГЛИЦИНА, ТРИПТОФАНА И АЛЬБУМИНА В ИОНИЗОВАННОМ ВОДНОМ РАСТВОРЕ

М. А. Баранов , О. Ю. Цыбин, **Е. Н. Величко**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 [baranovma1993@gmail.com](mailto:baranovma1993@gmail.com)

**Аннотация.** Методом компьютерного молекулярного моделирования осуществлен сравнительный анализ динамики свободной энергии аминокислот аланина, триптофана и белка альбумина в водных растворах хлорида натрия различной концентрации (степени ионизации). Получены зависимости динамических сценариев поведения указанной энергии от концентрации ионизирующего реагента (диссоциирующей соли) в растворах. Такие сведения можно использовать при разработке гибридных микро- и наноэлектронных устройств с встроенными биомолекулярными объектами, например биохимических сенсоров, приборов с микропотоками жидкостей, технологии приготовления молекулярных пленок и т. п.

**Ключевые слова:** белки, пептиды, гибридная биомолекулярная электроника, компьютерное моделирование

**Финансирование:** работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта «Суперкомпьютерное моделирование и технология биомолекулярных пленочных структур» № 21-72-20029.

**Для цитирования:** 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. С. 135–146. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.14410>

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.14410>

### FREE ENERGY RELAXATION OF GLYCINE, TRIPTOFAN AND ALBUMIN MOLECULES IN THE IONIZED AQUEOUS SOLUTION: COMPUTER ANALYSIS

М. А. Baranov , О. Yu. Tsybin, **E. N. Velichko**

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

 [baranovma1993@gmail.com](mailto:baranovma1993@gmail.com)

**Abstract:** A comparative analysis of the free energy of alanine, tryptophan and albumin protein amino acids in the aqueous solutions of sodium chloride with different concentrations (ionization degree) has been carried out using the molecular computer modeling method. Some dependences of dynamic scenarios of the behavior of the mentioned energy on the concentration of ionizing reagent (the dissociating salt) in the solutions were obtained. Such information can be applied when designing the hybrid micro and nanoelectronic devices with built-in biomolecular objects, e. g. biochemical sensors, devices with microflow of liquids, for the molecular film preparation technology, etc.

**Keywords:** proteins, peptides, hybrid biomolecular electronics, computer modeling

**Funding:** the work was done with financial support of The Russian Science Foundation within the framework of a science project “Supercomputer simulation and biomolecular film structure technology” (subject code 21-72-20029).

**For citation:** 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 (3) (2021) 135–146. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.14410>

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

### Введение

Характеристики гибридных микро- и нанoeлектронных устройств с встроенными биомолекулярными объектами определяются, подобно живым системам, специфическими реализациями структуры, динамики и функции молекул и их ансамблей. Ключевое значение имеют, в частности, биомолекулярные конформация, энергия, дипольный момент и их эволюция для частиц, например белков и пептидов, связанных с твердыми телами и растворами. Сведения о диссипации энергии молекул в ионизованных растворах требуются для разработки электронных приборов с микропотоками жидкостей, биохимических сенсоров, технологии приготовления молекулярных пленок и т. п. Компьютерное моделирование и вычисление значений свободной энергии молекул используются для многих актуальных исследований, в частности, прогнозе вероятности установления определенной конформации и ее динамики [1 – 3]. При конформационных вариациях происходят коррелированные изменения дипольного момента и полной энергии молекулы или молекулярного кластера [4 – 6].

Амплитудно-временные зависимости значений свободной энергии биомолекул и биомолекулярных кластеров при их спонтанной релаксации в водном растворе требуются для параметризации состояний органических объектов, встроенных в гибридные электронные приборы [7]. Подобные данные были получены, например, для спонтанной колебательной субпикосекундной динамики дипольного момента некоторых полипептидов [6, 8, 9]. Однако не было найдено связи дипольных колебаний молекул с их полной свободной энергией, а такая связь имеет фундаментальное значение. Свободная энергия выступает наиболее важной термодинамической величиной, потому что ее изменение, связанное с молекулярным процессом, указывает на возможность (или ее отсутствие) спонтанного протекания процесса при заданных термодинамических граничных условиях. На практике значения свободной энергии позволяют сопоставлять результаты экспериментальных исследований с данными компьютерного моделирования [10 – 12]. Для получения наиболее полной информации о структуре и свойствах молекулярных ансамблей актуальным является изучение динамической релаксации свободной энергии биомолекул и их кластеров в водной среде [13, 14].

В данной работе выбор молекул и молекулярных кластеров пептидов глицина, триптофана и белка альбумина для исследований был основан на анализе подобных сведений, имеющих в литературе и подходящих для сравнительного анализа, а также на информации об известных перспективных практических применениях в гибридных электронных устройствах. Например, в статьях [15, 16] описываются исследования пептида глицина для различных приложений, в том числе биомедицинских. В работе



[17] представлены механизмы проводимости ионов в органических соединениях, в том числе альбумина. По мнению авторов указанной работы, альбумин представляет собой перспективный материал для разработки устройств биомолекулярной электроники. В работах [18, 19] показано, что допирование триптофаном заметно увеличивает электропроводимость молекулы аланина, что заставляет считать триптофан одним из перспективных материалов для биомолекулярной электроники.

В данной работе путем компьютерных численных расчетов получены и проанализированы амплитудно-временные зависимости значений свободной энергии молекул и молекулярных кластеров глицина, триптофана и альбумина в водных растворах с различной концентрацией ионизирующих диссоциирующих солей. Достигнутые при этом данные позволили развить соответствующие модельные представления.

Полученные результаты можно использовать при разработке гибридных микро- и наноэлектронных устройств с встроенными биомолекулярными объектами, например биохимических сенсоров, приборов с микропотоками жидкостей, технологии приготовления молекулярных пленок и т. п.

### Модели компьютерного исследования

Для создания молекулярных моделей была использована программа Visual Molecular Dynamics (VMD). Это компьютерная программа, предназначенная для молекулярного моделирования и визуализации молекулярных систем. Ее также применяют для компьютерного исследования свободной энергии крупных конформационно-подвижных молекул.

Модель молекулы или кластера для каждого пептида и белка из экспериментального набора состояла из одной или четырех молекул, помещенных в периодическую ячейку в виде водного куба. Размер такого куба варьировался от 50 до 120 Å (в зависимости от размеров молекул белков и их количества). Во всех расчетных системах 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. Однако использованная нами модель воды была реализована еще и в силовом поле CHARMM. Разница заключалась в применении параметров Леннарда – Джонса: в отличие от TIP3, версия модели CHARMM присваивает указанные параметры атомам водорода в дополнение к параметрам кислорода в молекуле воды [20, 21]. Такую модель воды используют авторы большинства подобных (известных нам) публикаций.

Расчет значения свободной энергии молекулы или кластера в водном растворе выполнялся по алгоритму Free Energy Perturbation (FEP) в программе Visual Molecular Dynamics (VMD). Алгоритм FEP основан на законах статистической механики, он применяется в вычислительной химии для определения свободной энергии по данным, полученным методом молекулярной динамики. Указанный алгоритм основан на определении разности энергий между двумя состояниями системы в каждый момент времени, что позволяет строить динамический сценарий развития процессов, протекающих в системе. Поскольку расчеты производились при условии постоянства давления, свободная энергия ассоциируется с энергией Гиббса.

Для моделирования процедуры создания солевых растворов, в программе была использована функция добавления ионов, задающая их определенную концентрацию  $n$  (в моль/л) в водном кубе. Изменение концентрации  $n$  ионов в водных растворах достигалось компьютерным введением ионов соли NaCl с минимальной дистанцией между ионами – 5 Å. Подобные методы представлены в экспериментах, описанных в наших публикациях [8, 12]. При добавлении ионов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$  концентрацию водных растворов хлористого натрия изменяли в пределах от  $1,71 \cdot 10^{-4}$  до 1,71 моль/л, что соответствовало диапазону 0,001 – 10 % м.д. При этом максимальное количество ионов на одну молекулу в водном кубе составляло около 3200. Поскольку молекула белка альбумина гораздо крупнее молекул триптофана или глицина, на нее приходилось сравнительно большее количество ионов соли в водном кубе.

Молекулярное моделирование проводилось при условии наложения силового поля CHARMM27 с использованием пакета NAMD (Nanoscale Molecular Dynamics). Послед-

ний выполняет программу для молекулярной динамики, составленную с использованием модели параллельного программирования Charm++, обладающей высокой эффективностью распараллеливания и часто используемой для симуляции больших систем. Ставили периодические граничные условия, задавали значения радиуса отсечки (для несвязанных взаимодействий с функцией переключения), начиная с 9 Å и до 12 Å. Для моделирования момента установления равновесия в системе ставились условия минимизации энергии и стабилизации конформационного состояния молекул. В результате минимизации энергии получали стабильные конформационные состояния молекул, необходимые для дальнейшего исследования при их «помещении в раствор».

При минимизации энергии и вычислении релаксации молекулярных объектов использовали уравнение Ланжевена:

$$m_i \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = F_i \{x_i(t)\} - \gamma_i \frac{dx_i(t)}{dt} m_i + R_i(t), \quad (1)$$

где  $x_i$ , м, — координата объекта;  $t$ , с, — время;  $\gamma_i$  — коэффициент трения;  $m_i$ , г, — масса частицы;  $\gamma_i m_i$ , г, — коэффициент демпфирования системы;  $F_i$ , Н, — сила, которую испытывает частица, если она подвергается воздействию электрического поля (например, создаваемого ионами);  $R_i$ , Н, — случайные силы, которые действуют на частицу.

Метод Ланжевена позволил вычислять кинетическую энергию системы при одновременном контроле температуры молекулярного объекта и давления окружающей среды.

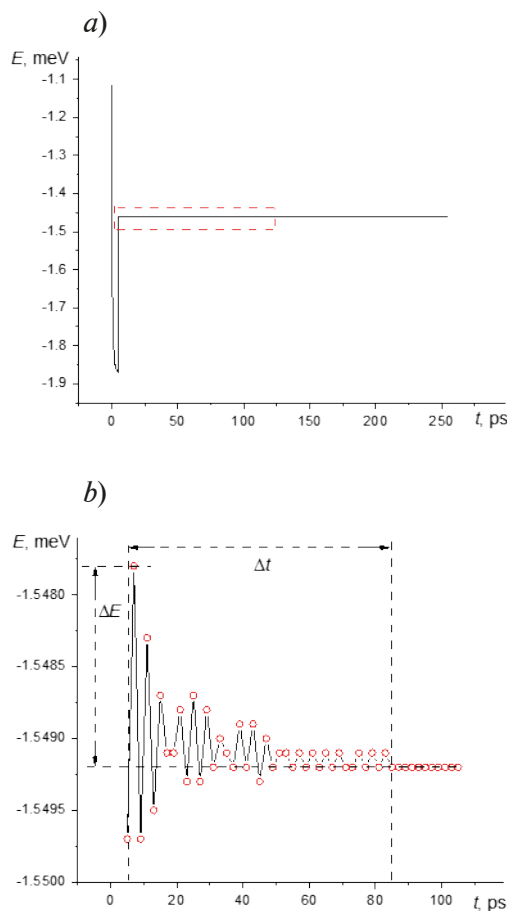


Рис. 1. Динамика полной энергии молекулы альбумина в водном растворе NaCl с концентрацией 0,15 моль/л на временных интервалах 300 пс (а) и 110 пс (б).

График *b* соответствует области, ограниченной на рис. *a* прямоугольником (процесс релаксации энергии);  $\Delta E$  — исходная избыточная энергия молекулы,  $\Delta t$  — временной интервал выхода энергии на стационарный уровень

На рис. 1 показана зависимость от времени полной энергии молекулы альбумина в водно-солевом растворе с концентрацией хлорида натрия 0,15 моль/л. Процесс минимизации энергии молекулы реализован на начальном участке длительностью около 5 пс (рис. 1, б). Видно, что процесс релаксации энергии начинается сразу после старта минимизации энергии. Предполагается, что на данном участке происходят осцилляции молекулярного кластера, когда энергия возбуждения молекул передается раствору.

Энергия выходит на стационарный (в среднем) уровень за время  $\Delta t$ ; при этом происходит релаксация начальной избыточной энергии молекулы на величину  $\Delta E$ , приблизительно равную разности двух значений энергии: конечного установившегося и начального.

Полная энергия молекулы представляет собой сумму кинетической и потенциальной энергии:

$$H(p, r) = K(p) + V(r), \quad (3)$$

где  $p$  — полный импульс,  $r$  — обобщенные координаты.

Кинетическая энергия следует выражению

$$K(p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i}, \quad (4)$$

где  $p_i$  — импульсы частиц,  $N$  — их количество.

Кинетическая энергия представлена преимущественно вращением пептидных групп, а потенциальная является суммой различных компонент.

Наибольший вклад в потенциальную энергию вносит электростатический потенциал

$$U_{elec} = \epsilon_{14} \frac{C q_i q_j}{\epsilon_0 r_{ij}}, \quad (6)$$

где  $r_{ij} = \|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|$ , м, — расстояние между парой атомов;  $q_i, q_j$ , Кл, — заряды на соответствующих атомах;  $\epsilon_{14}$  — безразмерный масштабный коэффициент,  $\epsilon_{14} = 1$  (за редким исключением, см. далее);  $C$  — кулоновская постоянная,  $C = 8,988 \cdot 10^9 \text{ Н} \cdot \text{м}^2 / \text{Кл}^2$ ;  $\epsilon_0$  — абсолютная диэлектрическая проницаемость,  $\epsilon_0 = 8,8542 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$ .

Величины  $C$  и  $\epsilon_0$  фиксированы для всех электростатических взаимодействий. Значение параметра  $\epsilon_{14}$  равно 1, за исключением модифицированного взаимодействия «1 — 4», где пара атомов разделена последовательностью из трех ковалентных связей (в итоге атомы также могут участвовать во взаимодействии с торсионным углом); в этом случае  $\epsilon_{14} = \epsilon_0$  для фиксированной величины относительной диэлектрической проницаемости в диапазоне  $0 \leq \epsilon \leq 1$  [24].

Концентрацию соли варьировали в пределах от 0,001 до 10 %, что соответствует диапазону значений  $1,71 \cdot 10^{-4} - 1,71$  моль/л.

Полученные амплитудно-временные зависимости энергии молекул и кластеров обрабатывали методом быстрого преобразования Фурье для получения спектров частот.

### Результаты и их обсуждение

В амплитудно-временных зависимостях наблюдались участки начальной релаксации от величины  $\Delta E$  (см. рис. 1, б) в виде колебаний спадающей амплитуды на протяжении временного промежутка до 250 пс (приблизительно) и квазигармонических колебаний малой амплитуды на временном интервале большей протяженности (до 10 нс и более). Амплитуда таких квазигармонических колебаний была много меньше значений полной энергии, что позволило рассматривать закономерности для установившихся равновесных (средних) значений.

Изменение концентрации ионов в растворе приводило к изменению времени релаксации. На рис. 2 представлены обзорные зависимости установившихся значений полной энергии молекул триптофана, глицина и альбумина от концентрации соли NaCl в



растворе в момент времени 3 нс. Видно, что при увеличении концентрации соли полная установившаяся энергия молекулы снижается (уточненные характеристики показаны ниже на рис. 3).

На рис. 3 показаны примеры амплитудно-временных зависимостей энергии молекул трех типов на временных интервалах  $0 - 0,1$  и  $3,00 - 3,01$  нс. Видно, что для начального процесса релаксации энергии характерны затухающие колебания, а для квазигармонических колебаний малой амплитуды – частотные биения.

С целью Фурье-анализа (использовали программу OriginPro) рассматриваемых амплитудно-временных зависимостей энергии были вычислены длительные сценарии их поведения на протяжении 100 нс с шагом дискретизации 1 пс. В качестве примера на рис. 4 показан Фурье-спектр такой амплитудно-временной реализации энергии молекулы глицина в водном растворе хлорида натрия с концентрацией 1,25 % на временном интервале от 5 до 65 нс. В представленном спектре обнаружен участок с повышенной спектральной плотностью вблизи частоты 0,44 ТГц (выделен красным прямоугольником), что примерно соответствует зависимости на рис. 3,с.

В других случаях, т. е. при меньших и больших концентрациях хлорида натрия, для глицина и других молекул частотные спектры имели более сложный вид. Выявленные особенности требуют дополнительного анализа, что выходит за рамки данной статьи.

На рис. 5, а,б показаны зависимости установившихся значений энергии от концентрации соли в системах, содержащих как одну молекулу, так и кластер из четырех таких молекул. Видно, что поведение представленных зависимостей практически одинаково, т. е. система не чувствительна к кластеризации молекул.

Зависимости времени релаксации энергии (рис. 5,с,д) можно аппроксимировать прямыми линиями, что позволяет констатировать экспоненциальный характер спада амплитуды. Показатели же экспонент, как видно, различны для разных типов молекул и их кластеров.

Как показали расчеты, величины начальной неравновесной свободной энергии единичной молекулы и молекулярного кластера снижаются колебательным образом в течение времени диссипации, т. е. за временной интервал, когда происходят основные потери энергии кластера через релаксацию в раствор; затем значения энергии выходят на квазистационарный уровень, т. е. устанавливается баланс потоков энергии из кластера в раствор и обратно.

Энергия колебаний молекул либо кластеров перекачивается в колебания ионов, образующихся при диссоциации соли. Полная энергия кластера значительно превосходит энергию релаксации, таким образом, речь идет о кинетической компоненте энергии.

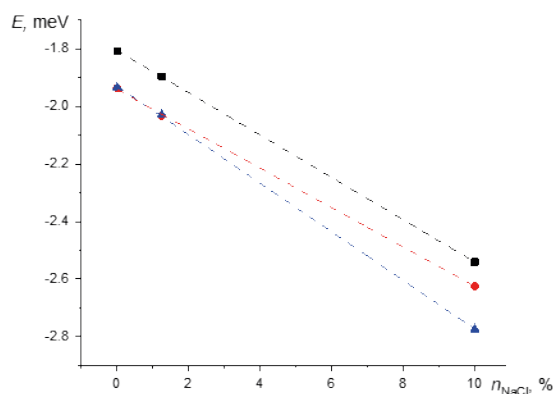


Рис. 2. Зависимости значений энергии молекул триптофана, глицина и альбумина (синяя, красная и черная линии соответственно) от концентрации водно-солевого раствора в момент времени  $t_0 = 3$  нс

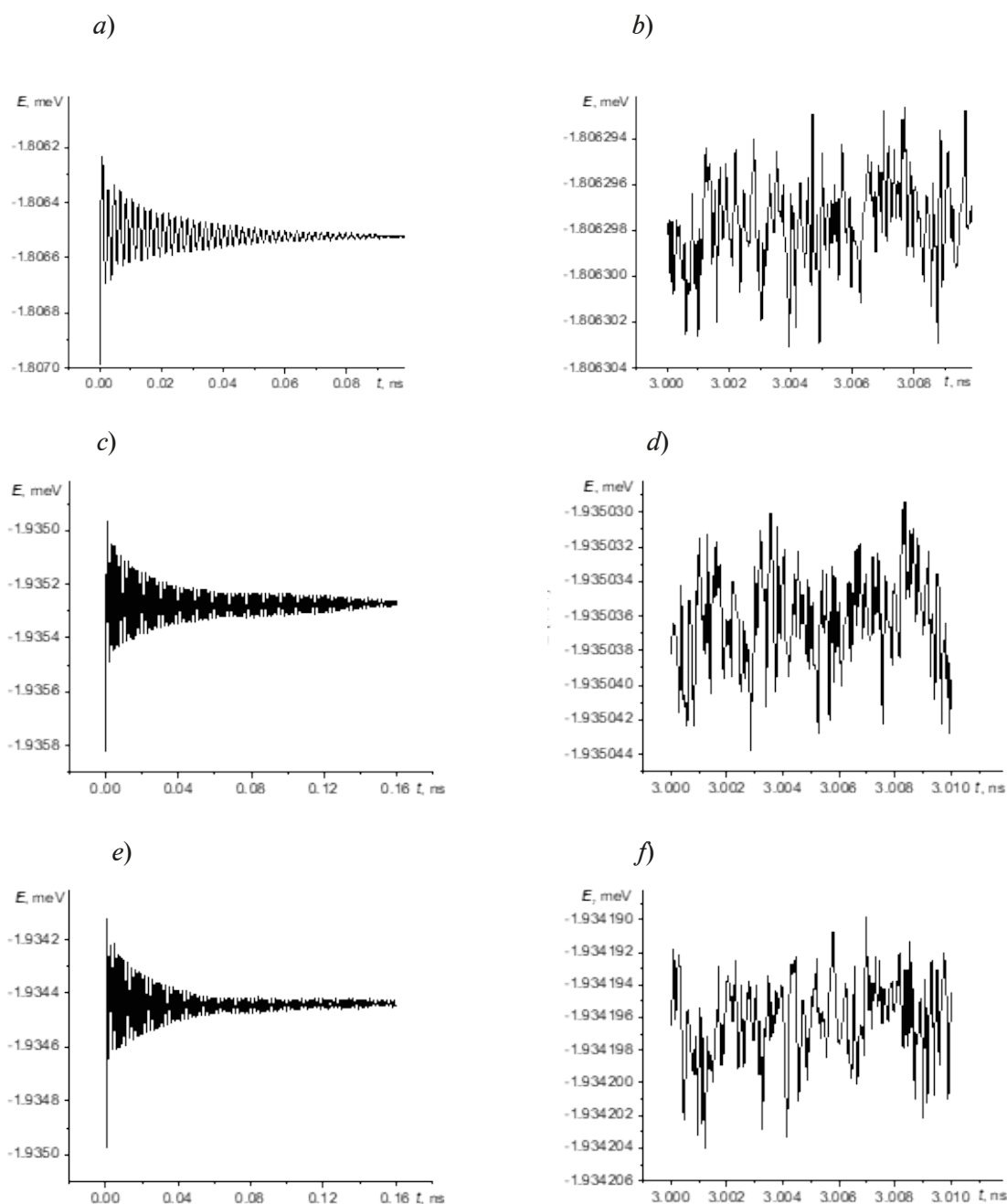


Рис. 3. Динамика энергии молекул альбумина (*a, b*), глицина (*c, d*) и триптофана (*e, f*) в водно-солевых растворах с концентрацией 0,001 % на двух временных интервалах

Время релаксации энергии до квазистационарного состояния зависит от концентрации водно-солевого раствора. По мере ее увеличения потери энергии молекулы происходили быстрее, чем при исходной низкой концентрации. Релаксация энергии, происходящая с медленными аperiодическими колебаниями, аналогична релаксации диссипативной динамической системы с низкой электропроводностью и повышенным «трением».

Наблюдаемый эффект соответствовал, по-видимому, снижению напряженности электрического поля над поверхностью каждой молекулы вследствие смещения водородного показателя pH в щелочную сторону и соответствующего повышения электропроводности водно-солевого раствора.

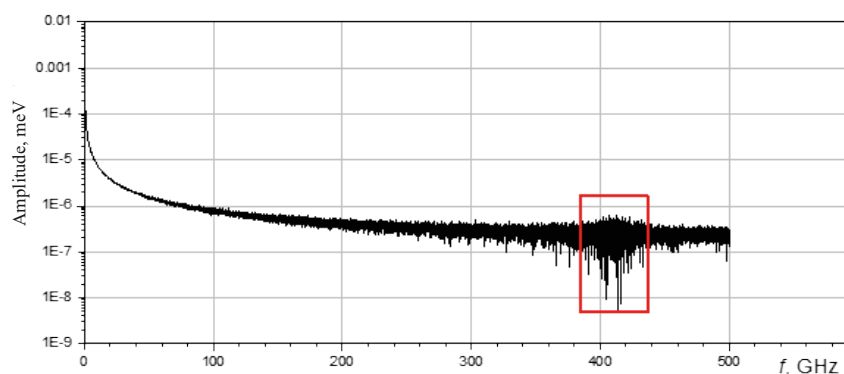


Рис. 4. Фурье-спектр частоты колебаний молекулы глицина в водно-солевом растворе с концентрацией 1,25 %. Выделен участок с повышенной спектральной плотностью вблизи частоты 440 ГГц

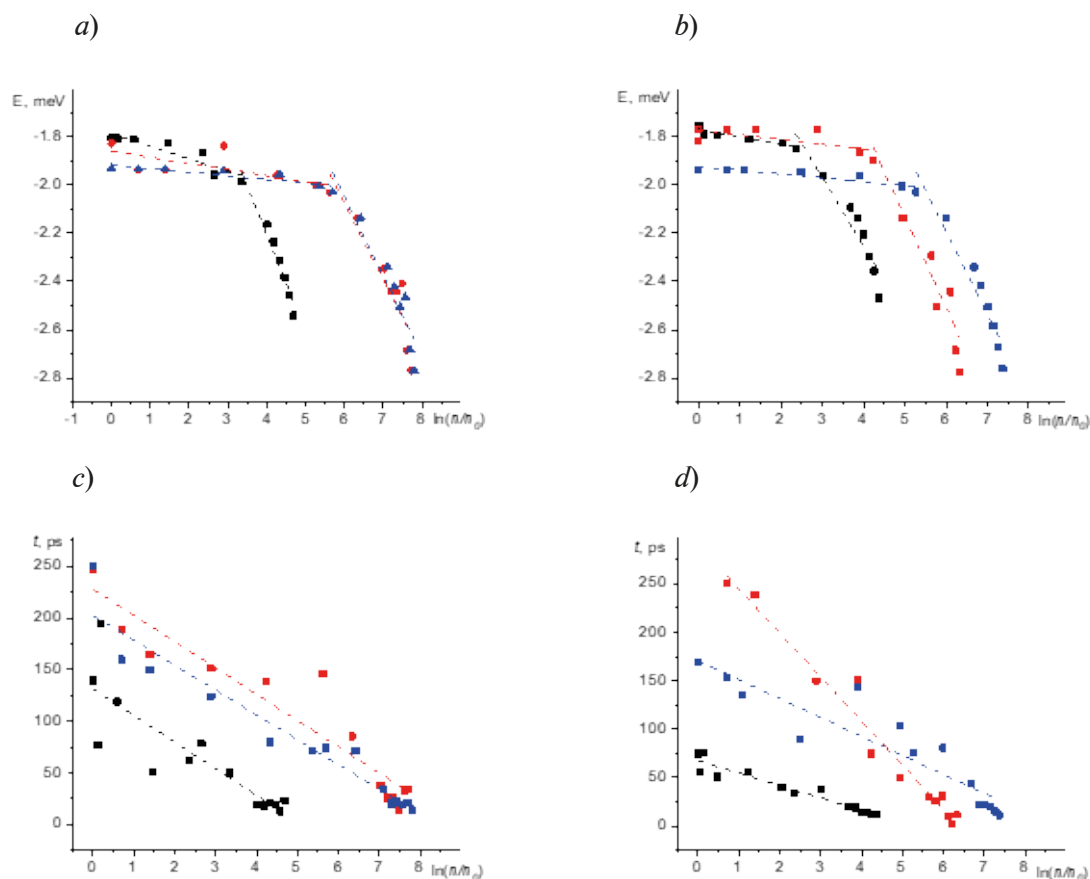


Рис. 5. Зависимости энергии (*a,b*) и времени релаксации (*c,d*) единичных молекул триптофана, альбумина и глицина (*a,c*), и кластеров из 4 молекул (*b,d*) от концентрации водно-солевого раствора NaCl.

Цвета линий соответствуют таковым на рис. 2

Выявленная релаксация свободной энергии молекулярного кластера указывает на то, что электродинамические факторы играют значительную роль в рассматриваемых биомолекулярных процессах.

### Заключение

Методом компьютерного молекулярного моделирования, использующего программные расчеты и вычисления, осуществлен сравнительный анализ динамики свободной энергии





аминокислот аланина, триптофана и белка альбумина в водно-солевых растворах с различной концентрацией (степенью ионизации). Получены данные о зависимости динамических сценариев поведения свободной энергии и времени ее релаксации от концентрации ионизирующих агентов диссоциирующих солей в растворе. Показано, что энергетическими и спектральными характеристиками молекул, находящихся в водно-солевых растворах, можно управлять путем изменения степени ионизации растворов. Такие сведения можно использовать при разработке гибридных микро- и наноэлектронных устройств с встроенными биомолекулярными объектами, например биохимических сенсоров, приборов с микропотоками жидкостей, технологии приготовления молекулярных пленок и т. п.

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого ([www.scc.spbstu.ru](http://www.scc.spbstu.ru)).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang Y., Harrison C. B., Schulten K., McCammon J. A. Implementation of accelerated molecular dynamics in NAMD // *Computational Science & Discovery*. 2011. Vol. 4. No. 1. P. 015002.
2. Mohan A., Rajendran S. R. C. K., He Q. S., Bazinet L., Udenigwe C. C. Encapsulation of food protein hydrolysates and peptides: a review // *RSC Advances*. 2015. Vol. 5. No. 97. Pp. 79270–79278.
3. Pirsä S., Sharifi K. A. A review of the applications of bioproteins in the preparation of biodegradable films and polymers // *Journal of Chemistry Letters*. 2020. Vol. 1. No. 2. Pp. 47–58.
4. Xiao B.-L., Ning Y.-N., Niu N.-N., Li D., Moosavi-Movahedi A. A., Hong J. Steered molecular dynamic simulations of conformational lock of Cu, Zn-superoxide dismutase // *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9. No. 1. P. 4353.
5. Баранов М. А., Величко Е. Н., Розов С. В. Структурные свойства дегидратированных пленок белковых растворов // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2019. Т. 12. № 4. С. 25–37.
6. Rakos B. Modeling of dipole–dipole-coupled, electric field-driven, protein-based computing architectures // *International Journal of Circuit Theory and Applications*. 2013. Vol. 43. No. 1. Pp. 60–72.
7. Wang N., Yang A., Fu Y., Li Y., Yan F. Functionalized organic thin film transistors for biosensing // *Accounts of Chemical Research*. 2019. Vol. 52. No. 2. Pp. 277–287.
8. Velichko E., Zezina T., Baranov M., Nepomnyashchaya E., Tsybin O. Dynamics of polypeptide cluster dipole moment for nano communication applications // “Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems”, Proceedings of the 18-th International Conference, NEW2AN, and 11-th Conference, ruSMART 2018, St. Petersburg, Russia, August 27–29, 2018. Edited by O. Galinina, S. Andreev, S. Balandin, E. Koucheryavy. Switzerland: Springer, Cham, 2018. Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). Springer Verlag, 2018. Vol. 11118 LNCS. Pp. 675–682.
9. Silaghi S. D., Zahn D. R. T. Monitoring the ordering in biomolecular films on vicinal silicon surfaces by reflectance difference/anisotropy spectroscopy // *Applied Surface Science*. 2006. Vol. 252. No. 15. Pp. 5462–5465.
10. Ytreberg F. M., Zuckerman D. M. Simple estimation of absolute free energies for biomolecules // *The Journal of Chemical Physics*. 2006. Vol. 124. No. 10. P. 104105.
11. Liu X., Fu T., Ward J., Gao H., Yin B., Woodard T., Lovley D. R., Yao J. Multifunctional protein nanowire humidity sensors for green wearable electronics // *Advanced Electronic Materials*. 2020. Vol. 6. No. 9. P. 2000721.
12. Баранов М. А., Цыбин О. Ю., Величко Е. Н. Структурированные биомолекулярные пленки для микроэлектроники // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2021. Т. 14. № 1. С. 85–99.
13. Taylor P., Jayaraman A. Molecular modeling and simulations of peptide-polymer conjugates // *Annual Review of Chemistry and Biomolecular Engineering*. 2020. Vol. 11. Pp. 257–276.
14. Lagerwall J. P. F., Scalia G. A new era for liquid crystal research: applications of liquid crystals

in soft matter nano-, bio- and microtechnology // *Current Applied Physics*. 2012. Vol. 12. No. 6. Pp. 1387–1412.

15. **Larijani H. T., Jahanshahi M., Ganji M. D., Kiani M. H.** Computational studies on the interactions of glycine amino acid with graphene, h-BN and h-SiC monolayers // *Physical Chemistry, Chemical Physics*. 2017. Vol. 19. No. 3. Pp. 1896–1908.

16. **Campo M. G.** Molecular dynamics simulation of glycine zwitterion in aqueous solution // *The Journal of Chemical Physics*. 2006. Vol. 125. No. 11. P. 114511.

17. **Amdursky N., Glowacki E. D., Meredith P.** Macroscale biomolecular electronics and ionics // *Advanced Materials*. 2018. Vol. 31. No. 3. P. 1802221.

18. **Schosser W. M., Zotti L. A., Cuevas J. C., Pauly F.** Doping hepta-alanine with tryptophan: a theoretical study of its effect on the electrical conductance of peptide-based single-molecule junctions // *The Journal of Chemical Physics*. 2019. Vol. 150. No. 17. P. 174705.

19. **Guo C., Yu X., Refaely-Abramson S., Sepunaru L., Bendikov T., Pecht I., Kronik L., Vilan A., Sheves M., Cahen D.** Tuning electronic transport via hepta-alanine peptides junction by tryptophan doping // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA*. 2016. Vol. 113. No. 39. Pp. 10785–10790.

20. **MacKerell A. D. Jr., 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.

21. **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.

22. **Christ C. D., Mark A. E., Van Gunsteren W. F.** Basic ingredients of free energy calculations: a review // *Journal of Computational Chemistry*. 2010. Vol. 31. No. 8. Pp. 1569–1582.

## REFERENCES

1. **Wang Y., Harrison C. B., Schulten K., McCammon J. A.** Implementation of accelerated molecular dynamics in NAMD, *Comput. Sci. Disc.* 4 (1) (2011) 015002.

2. **Mohan A., Rajendran S. R. C. K., He Q. S., et al.** Encapsulation of food protein hydrolysates and peptides: a review, *RSC Adv.* 5 (97) (2015) 79270–79278.

3. **Pirsa S., Sharifi K. A.** A review of the applications of bioproteins in the preparation of biodegradable films and polymers, *J. Chem. Lett.* 1 (2) (2020) 47–58.

4. **Xiao B.-L., Ning Y.-N., Niu N.-N., et al.** Steered molecular dynamic simulations of conformational lock of Cu, Zn-superoxide dismutase, *Sci. Rep.* 9 (1) (2019) 4353.

5. **Baranov M. A., Velichko E. N., Rozov S. V.** Dehydrated films of protein solutions: structural properties, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 12 (4) (2019) 25–37.

6. **Rakos B.** Modeling of dipole–dipole-coupled, electric field-driven, protein-based computing architectures, *Int. J. Circ. Theor. Appl.* 43 (1) (2013) 60–72.

7. **Wang N., Yang A., Fu Y., et al.** Functionalized organic thin film transistors for biosensing, *Acc. Chem. Res.* 52 (2) (2019) 277–287.

8. **Velichko E., Zezina T., Baranov M., et al.** Dynamics of polypeptide cluster dipole moment for nano communication applications, In: “Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems”, *Proc. 18-th Intern. Conf., NEW2AN, and 11-th Conf. ruSMART 2018*, St. Petersburg, Russia, August 27–29, 2018. Ed. by O. Galinina, S. Andreev, S. Balandin, E. Koucheryavy, Cham, Switzerland, 2018; *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*. Springer Verlag, Vol. 11118 LNCS (2018) 675–682.

9. **Silaghi S. D., Zahn D. R. T.** Monitoring the ordering in biomolecular films on vicinal silicon surfaces by reflectance difference/anisotropy spectroscopy, *Appl. Surf. Sci.* 252 (15) (2006) 5462–5465.

10. **Ytreberg F. M., Zuckerman D. M.** Simple estimation of absolute free energies for biomolecules, *J. Chem. Phys.* 124 (10) (2006) 104105.

11. **Liu X., Fu T., Ward J., et al.** Multifunctional protein nanowire humidity sensors for green wearable electronics, *Adv. Electron. Mater.* 6 (9) (2020) 2000721.

12. **Baranov M. A., Tsybin O. Yu., Velichko E. N.** Structured biomolecular films for microelectronics, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 14 (1) (2021) 85–99.

13. Taylor P., Jayaraman A., Molecular modeling and simulations of peptide-polymer conjugates, *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.* 11 (2020) 257–276.
14. Lagerwall J. P. F., Scalia G., A new era for liquid crystal research: applications of liquid crystals in soft matter nano-, bio- and microtechnology, *Curr. Appl. Phys.* 12 (6) (2012) 1387–1412.
15. Larijani H. T., Jahanshahi M., Ganji M. D., Kiani M. H., Computational studies on the interactions of glycine amino acid with graphene, h-BN and h-SiC monolayers, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19 (3) (2017) 1896–1908.
16. Campo M. G., Molecular dynamics simulation of glycine zwitterion in aqueous solution, *J. Chem. Phys.* 125 (11) (2006) 114511.
17. Amdursky N., Glowacki E. D., Meredith P., Macroscale biomolecular electronics and ionics, *Adv. Mater.* 31 (3) (2018) 1802221.
18. Schosser W. M., Zotti L. A., Cuevas J. C., Pauly F., Doping hepta-alanine with tryptophan: a theoretical study of its effect on the electrical conductance of peptide-based single-molecule junctions, *J. Chem. Phys.* 150 (17) (2019) 174705.
19. Guo C., Yu X., Refaely-Abramson S., et al., Tuning electronic transport via hepta-alanine peptides junction by tryptophan doping, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 113 (39) (2016) 10785–10790.
20. MacKerell A. D. Jr., 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.
21. Mao Y., Zhang Y., Thermal conductivity, shear viscosity and specific heat of rigid water models, *Chem. Phys. Lett.* 542 (23 July) (2012) 37–41.
22. Christ C. D., Mark A. E., Van Gunsteren W. F., Basic ingredients of free energy calculations: a review, *J. Comput. Chem.* 31 (8) (2010) 1569–1582.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**БАРАНОВ Максим Александрович** — ассистент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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 инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
 oleg.tsybin@gmail.com  
 ORCID: 0000-0002-8308-059X

**ВЕЛИЧКО Елена Николаевна** — доктор физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

ORCID: 0000-0001-8983-3719

### 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, Russian Federation

oleg.tsybin@gmail.com

ORCID: 0000-0002-8308-059X

**VELICHKO Elena N.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

ORCID: 0000-0001-8983-3719

*Статья поступила в редакцию 30.09.2021. Одобрена после рецензирования 04.10.2021.  
Принята 04.10.2021.*

*Received 30.09.2021. Approved after reviewing 04.10.2021. Accepted 04.10.2021.*