

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕСТРОЙКИ КОНФОРМАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИАМФОЛИТНЫХ МАКРОМОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОЛЯРИЗОВАННОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

© 2020 г. Н. Ю. Кручинин<sup>1</sup>, \*, М. Г. Кучеренко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Центр лазерной и информационной биофизики  
Оренбургского государственного университета,  
просп. Победы 13, Оренбург, 460018 Россия

\*e-mail: kruchinin\_56@mail.ru

Поступила в редакцию 08.10.2019 г.

После доработки 02.11.2019 г.

Принята к публикации 05.11.2019 г.

Методом молекулярной динамики исследована перестройка конформационной структуры полиамфолитных макроцепей с разными законами распределения заряженных звеньев в электрическом поле поляризованной металлической наночастицы. Рассчитаны зависимости средних угловых распределений и радиальной плотности атомов полипептида. Сформированы распределения средней радиальной плотности атомов полипептида в окрестности положительно и отрицательно заряженных полюсов наночастицы, а также в ее экваториальной области. Представлена аналитическая модель конформационных перестроек адсорбированной макроцепи в поле поляризованной наночастицы. Проанализировано формирование неоднородного распределения плотности атомов полипептида в зависимости от угла между направлением вектора дипольного момента и вектором нормали к поверхности наночастицы. Наблюдалось набухание макромолекулярной “опушки” с преимущественным выбрасыванием петель в направлении оси поляризации.

DOI: 10.31857/S0023291220020081

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время гибридные наносистемы, состоящие из макроцепей, адсорбированных на плазмонных наночастицах, широко применяются в биомедицинских исследованиях, в качестве элементов устройств наноэлектроники, а также для создания различных сенсоров. Особенно актуально создание таких наносистем, свойствами которых можно управлять как посредством воздействия электромагнитным излучением, так и статическим электрическим полем.

Если сферическую металлическую наночастицу поместить в электрическое поле, то на ее поверхности индуцируются электрические заряды, которые будут распределены с поверхностной плотностью, пропорциональной косинусу угла между направлением вектора электрического поля и нормали к поверхности наночастицы. Вследствие появления поля наведенной поляризации первичное электрическое поле вблизи наночастицы будет сильно искажено. Если на поверхности наночастицы размещена полиамфолитная макроцепь, то такое распределение индуцированных зарядов будет оказывать существенное

влияние на характер адсорбции макромолекулы и ее конформацию. Такие и даже более существенные изменения можно получить, используя не только статическое электрическое поле, но и электромагнитное излучение некоторой резонансной частоты, при которой конформация макромолекулы будет успевать изменяться более ощутимо. Для полиамфолитных полипептидов с разными законами распределения положительных и отрицательных звеньев на поверхности поляризованной металлической наночастицы будут формироваться разные конформационные структуры. Такие наносистемы могут быть использованы в разнообразных сенсорах, например в датчиках на основе эффекта гигантского комбинационного рассеяния (ГКР), а также в люминесцентно-оптическом измерителе концентрации молекулярного (в том числе – синглетного) кислорода.

Датчики на основе эффекта ГКР широко используются в биохимии и медицине. В последнее время значительные усилия направлены на повышение чувствительности и расширение возможностей таких сенсоров. Для повышения чувствительности сенсоров на основе эффекта ГКР к по-

лимерным цепям могут добавляться золотые наночастицы [1], поскольку характеристики датчиков с адсорбированными на золотых наночастицах пептидами могут изменяться под действием температуры или внешнего электрического поля [2]. Использование в сенсорах на основе эффекта ГКР полиамфолитных полипептидов, адсорбированных на поляризованных золотых или серебряных наночастицах, с управляемой статическим электрическим полем или электромагнитным излучением конформационной структурой позволит создавать новые сенсоры с регулируемыми параметрами или усовершенствовать уже существующие.

В работах [3–5] исследовалась кинетика кросс-аннигиляции возбужденных электронных состояний молекул кислорода и органических красителей, связанных со звеньями макромолекулы, адсорбированной на поверхности сферических и цилиндрических адсорбентов (фуллерены и углеродные нанотрубки), а также в цилиндрических и сферических нанопорах, для возможного применения таких систем в люминесцентно-оптическом измерителе концентрации кислорода. Использование адсорбентов различной формы и с разной кривизной поверхности оказывало значительное влияние на конформацию адсорбированных макромолекулярных цепей. В работах [6, 7] изучалась адсорбция полиамфолитных полипептидов в присутствии молекул органических красителей на поверхности нейтральной и однородно заряженной золотой наночастицы для возможного использования в люминесцентно-оптическом измерителе концентрации кислорода. Исследование адсорбции полиамфолитных полипептидов на поверхности поляризованной металлической наночастицы позволит направленно изменять и улучшать характеристики такого сенсора, воздействуя на него статическим электрическим полем или электромагнитным излучением определенной частоты.

Таким образом, целью данной работы является изучение перестройки конформационной структуры полиамфолитных полипептидов на поверхности поляризованной металлической наночастицы, а также установление закономерностей этого процесса для возможного использования данной наносистемы в сенсорах и других устройствах.

## 2. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Было произведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование наносистемы, состоящей из золотой наночастицы радиусом 1.5 нм в комбинации с полиамфолитными полипептидами, содержащими от 300 до 400 звеньев и характеризующимися разными законами распределения

положительно и отрицательно заряженных аминокислотных остатков.

МД-моделирование проводилось с использованием программного комплекса NAMD 2.13 [8]. Для полипептидов было использовано силовое поле CHARMM22 [9], а взаимодействие с золотой наночастицей описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, параметризованным в работе [10]. Атомы наночастицы в процессе моделирования оставались зафиксированными. Потенциал Ван-дер-Ваальса обрезался на расстоянии 1.2 нм с помощью функции сглаживания между 1.0 и 1.2 нм. Электростатические взаимодействия рассчитывались непосредственно на расстоянии 1.2 нм, для больших дистанций использовался метод “частица–сетка” Эвальда (PME) [11] с шагом сетки 0.11 нм. Вся молекулярная система была помещена в куб с ребрами 20 нм, заполненный молекулами воды (TIP3P [12]).

Модель золотой наночастицы была получена путем вырезания шара радиусом 1.5 нм из кристалла золота. Локальное электрическое поле задавалось через изменение зарядов атомов на поверхности сферической наночастицы по закону косинуса, что отвечало ее однородной поляризации. Были получены следующие значения индуцированного дипольного момента наночастицы:  $p_{0.25} = 2.73$  кД,  $p_{0.50} = 5.46$  кД и  $p_{1.00} = 10.92$  кД. При этих значениях момента атомы на положительном заряженном полюсе наночастицы имели парциальные заряды  $+0.25e$ ,  $+0.5e$  и  $+1e$  соответственно.

Были рассмотрены следующие полиамфолитные полипептиды:

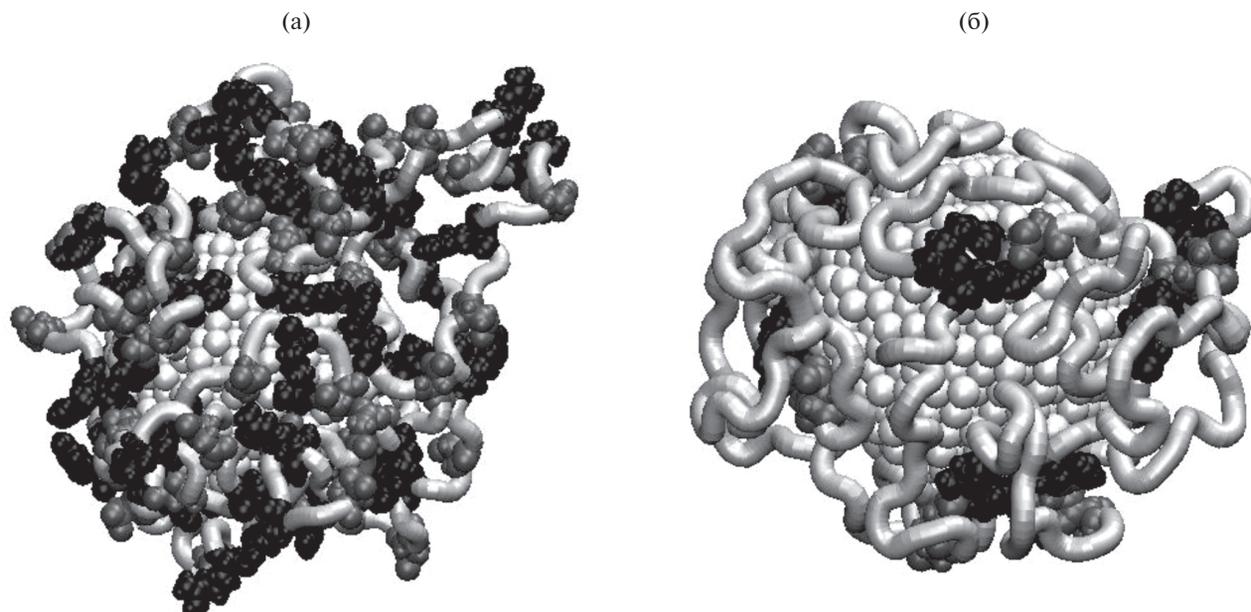
1) полипептид A200R50D50, состоящий из 200 звеньев Ala (A) и равномерно распределенных 50 звеньев Asp (D, заряд  $-1e$ ) и 50 звеньев Arg (R, заряд  $+1e$ ), всего 300 аминокислотных остатков – (ADAARA)<sub>50</sub>,

2) полипептид A240R30D30, состоящий из 240 звеньев Ala и равномерно распределенных 30 звеньев Asp и 30 звеньев Arg, всего 300 аминокислотных остатков – (AADAAAARA)<sub>30</sub>,

3) полипептид A320R40D40, состоящий из 320 звеньев Ala и равномерно распределенных 20 пар звеньев Asp и 20 пар звеньев Arg, всего 400 аминокислотных остатков – (A<sub>4</sub>RRA<sub>8</sub>DDA<sub>4</sub>)<sub>20</sub>,

4) полипептид A272R16D16, состоящий из 272 звеньев Ala и равномерно распределенных 8 пар звеньев Asp и 8 пар звеньев Arg, всего 304 аминокислотных остатка – A<sub>8</sub>(A<sub>8</sub>DDA<sub>16</sub>RRA<sub>8</sub>)<sub>8</sub>A<sub>8</sub>.

МД-моделирование производилось при постоянной температуре (термостат Берендсена) в течение нескольких наносекунд; на начальном участке траектории температура устанавливалась равной 900 К, а на ее конечном участке – 300 К. Это позволяло достигать более глубоких минимумов конформационной энергии макроцепи, в



**Рис. 1.** Полипептиды A200R50D50 (а) и A272R16D16 (б) на поверхности неполяризованной золотой наночастицы после МД-моделирования (светло-серая трубка – звенья Ala, черным цветом изображены звенья Arg, а серым – Asp).

том числе на более коротком участке траектории. Для контроля получения равновесных конформаций наблюдали за изменением среднеквадратичного расстояния между атомами полипептида в различных конформациях.

В начальный момент времени макромолекула полипептида располагалась в виде неравновесного клубка рядом с поверхностью неполяризованной сферической золотой наночастицы. Было рассмотрено три разных стартовых клубка для каждого полипептида. По результатам МД-моделирования были получены по три равновесные конформационные структуры для каждого рассмотренного полипептида. Впоследствии эти структуры были использованы в качестве стартовых конфигураций для МД-моделирования на поверхности поляризованной наночастицы.

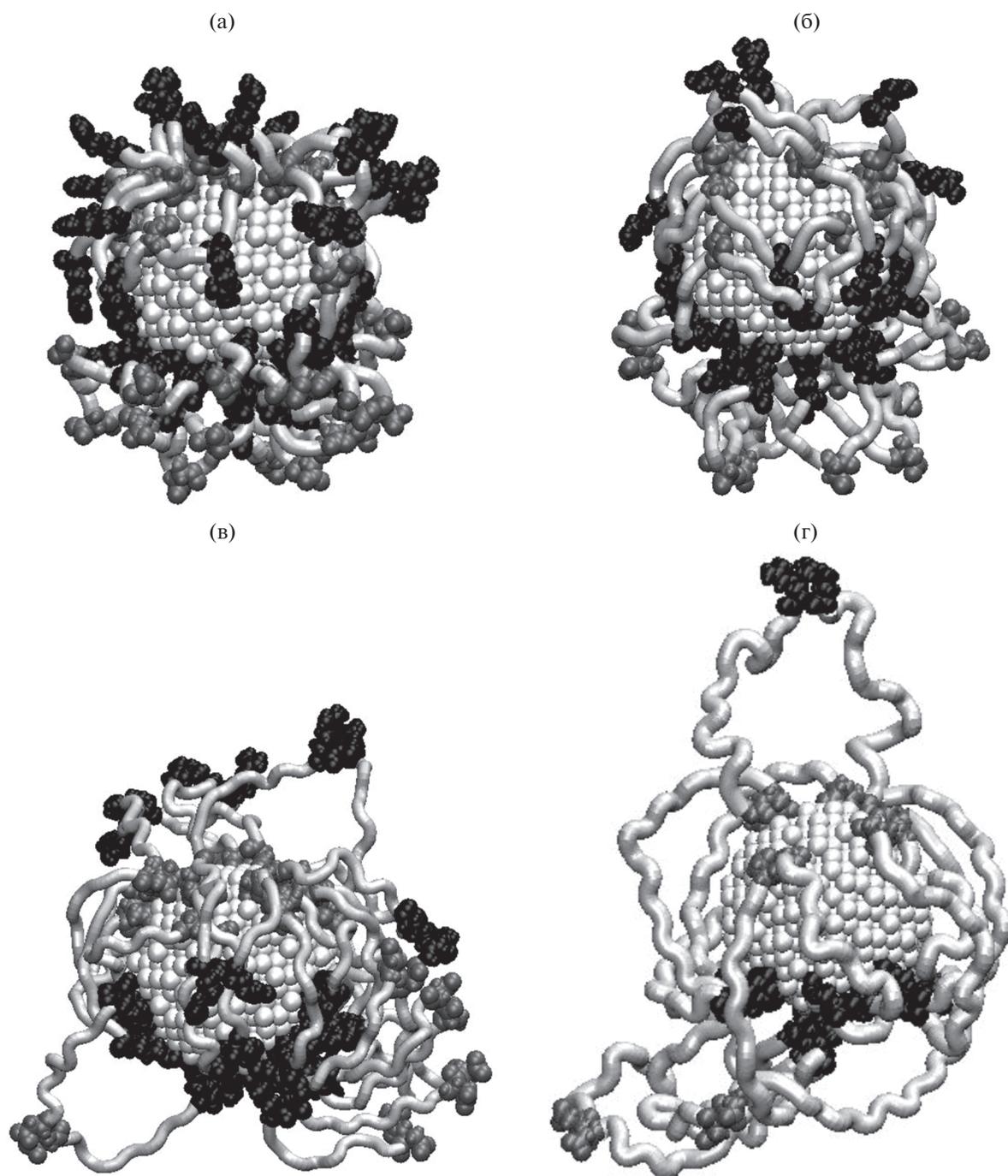
По результатам МД-моделирования на конечном стационарном участке траектории по всем полученным конформациям при различных значениях дипольного момента наночастицы на ее поверхности рассчитывались распределения средней радиальной плотности атомов полипептида с дифференциацией по типам звеньев, зависимости средних угловых распределений атомов полипептида. Кроме того, формировались распределения средней радиальной плотности атомов полипептида в направлениях положительно и отрицательно заряженных полюсов поляризованной наночастицы, а также в ее экваториаль-

ной области. Зависимости угловых распределений атомов адсорбированного полипептида были нормированы на амплитудные значения атомной плотности в экваториальной области, с учетом различий площади поверхности сферических поясов, ограниченных окружностями различного радиуса.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

По результатам МД-моделирования полипептидов, состоящих из более чем 300 аминокислотных остатков, на поверхности нейтральной неполяризованной золотой наночастицы радиусом 1.5 нм было обнаружено, что полипептиды такого размера полностью и одинаково плотно обволакивают наночастицу (рис. 1) [13]. Характер адсорбции атомов полипептида схож с ранее рассмотренными случаями адсорбции полиамфолитных полипептидов, состоящих из 100 аминокислотных остатков, на нейтральной поверхности золотой наночастицы радиусом 4 нм [6, 7]: на нейтральной поверхности наночастицы происходила адсорбция остатков полипептидов вне зависимости от их типа.

При МД-моделировании на поверхности поляризованной наночастицы по мере увеличения дипольного момента наночастицы изменялась конформация адсорбированной полиамфолитной макроцепи. Аминокислотные остатки с зарядом, противоположным заряду полюса, смеша-



**Рис. 2.** Полипептиды A200R50D50 (а), A240R30D30 (б), A320R40D40 (в) и A272R16D16 (г) на поверхности поляризованной в вертикальном направлении (вверху положительный полюс, внизу – отрицательный) золотой наночастицы с дипольным моментом  $p_{1,00}$  после МД-моделирования (светло-серая трубка – звенья Ala, черным цветом изображены звенья Arg, а серым – Asp).

лись к поверхности данного полюса. Кроме того, наблюдалось в разной степени выраженное, в зависимости от расстояния между положительно и отрицательно заряженными звеньями, вытягивание “опушки” макроцепи в районе полюсов из-за

отталкивания одноименно заряженных полюсу наночастицы аминокислотных остатков (рис. 2). Такая перестройка конформационной структуры начинала происходить при значении дипольного момента наночастицы  $p_{0,50}$ , а при меньших значе-

ниях дипольного момента конформационные изменения были слабо выражены.

На рис. 2 изображены некоторые из полученных конечных конформационных структур полиамфолитных полипептидов при максимальном рассмотренном значении дипольного момента золотой наночастицы  $p_{1.00}$ . Видно, что для полипептида A200R50D50 (рис. 2а) с наименьшим расстоянием между положительно и отрицательно заряженными звеньями смещение макромолекулярной опушки в направлении поляризации выражено слабее, чем для полипептидов A240R30D30 (рис. 2б), A320R40D40 (рис. 2в) и A272R16D16 (рис. 2г). По мере увеличения расстояния между положительно и отрицательно заряженными звеньями полипептида наблюдается “выбрасывание” значительных по длине петель макроцепи в направлении оси поляризации, а промежуточные нейтральные звенья Ala связывают положительно и отрицательно заряженные звенья на разных полюсах наночастицы (рис. 2в и 2г).

На рис. 3 изображены распределения средних радиальных плотностей полипептидов A200R50D50 (рис. 3а и 3б) и A320R40D40 (рис. 3в и 3г) на поверхности неполяризованной и поляризованной золотой наночастицы. Рисунки 3а и 3в представляют распределение средней радиальной плотности атомов полипептида на поверхности неполяризованной наночастицы. Видно, что зависимости средней радиальной плотности по типам звеньев в целом повторяют профиль радиальной плотности по всем атомам полипептида. На рис. 3б и 3г представлены радиальные распределения плотности полипептида на поверхности сильно поляризованной (дипольный момент  $p_{1.00}$ ) золотой наночастицы. Видно, что в этом случае максимум радиальной плотности заряженных звеньев Arg и Asp полипептида находится у поверхности наночастицы, а профиль радиальной плотности нейтральных звеньев Ala смещен от поверхности. Также значительно изменился профиль средней радиальной плотности по всем атомам полипептида: он значительно уширился, а максимум средней радиальной плотности уменьшился более чем в два раза.

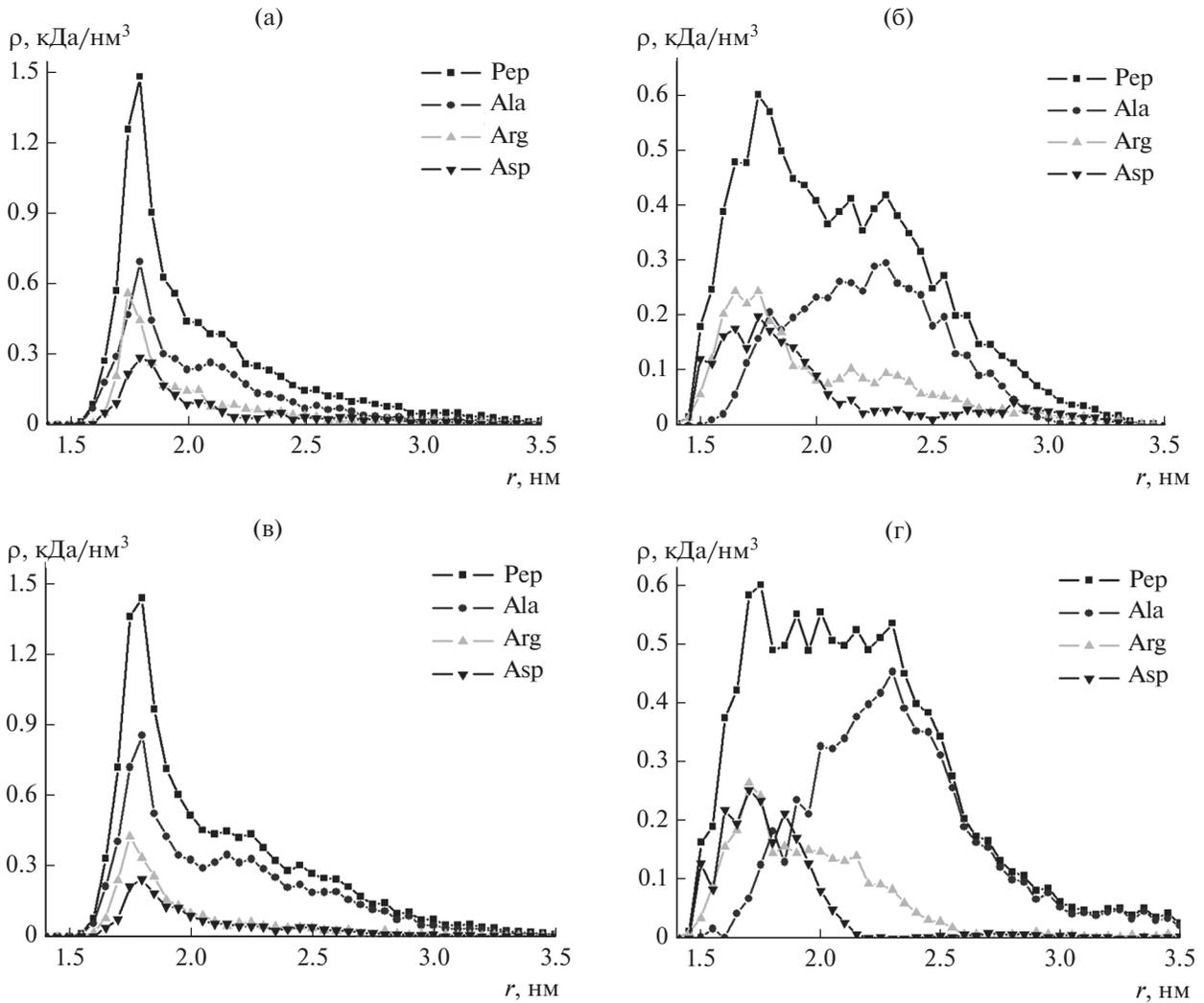
На рис. 4 представлены зависимости угловых распределений атомов полипептида A320R40D40 на поверхности неполяризованной (рис. 4а) и поляризованной (рис. 4б) золотой наночастицы с дифференциацией по типам звеньев. Расчет углового распределения производился с шагом в  $10^\circ$ , начиная с отрицательно заряженного полюса (угол  $-90^\circ$ ), через экваториальную область ( $0^\circ$ ) до положительно заряженного полюса ( $90^\circ$ ). Поэтому на графиках по оси абсцисс отложены средние

значения углов, соответствующие выбранному сферическому сегменту, ограниченному окружностями разных широт. На рис. 4б видно, что произошло перераспределение положительных аминокислотных остатков Arg в отрицательно заряженное полушарие, отрицательно заряженные остатки Asp сместились в положительно заряженную область наночастицы, а нейтральные звенья Ala в основном сосредоточены в экваториальной области. Такое перераспределение звеньев сильнее выражено у полипептида A272R16D16 (рис. 2г) с наибольшим расстоянием между положительными и отрицательными звеньями макроцепи, но слабее – у полипептидов A200R50D50 и A240R30D30 с небольшим расстоянием между разноименно заряженными звеньями.

Также были построены зависимости средней радиальной плотности полипептидов на поверхности наночастицы вблизи полюсов и экватора (рис. 5). В области полюсов данные распределения рассчитывались в сферическом сегменте, ограниченном широтами  $60^\circ$  и  $90^\circ$  в положительно заряженном полушарии, а в отрицательно заряженном полушарии – в сферическом сегменте, ограниченном широтами  $-60^\circ$  и  $-90^\circ$ . В экваториальной области сферический сегмент был ограничен широтами  $-30^\circ$  и  $30^\circ$ . На поверхности неполяризованной наночастицы средние распределения плотности атомов полипептида во всех рассмотренных сегментах были схожими друг с другом и с распределением средней радиальной плотности по всей поверхности наночастицы (рис. 3а и 3в). По мере увеличения дипольного момента наночастицы происходила перестройка конформационной структуры, при которой на поверхности сферического сегмента положительно заряженного полюса наночастицы располагались только звенья Asp (рис. 5а), а на поверхности сферического сегмента ее отрицательно заряженного полюса – только звенья Arg (рис. 5б). В экваториальной области наночастицы на поверхности располагалось незначительное количество заряженных звеньев (рис. 5в).

#### 4. АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОНФОРМАЦИОННЫХ ПЕРЕСТРОЕК АДсорБИРОВАННОЙ МАКРОЦЕПИ В ПОЛЕ ПОЛЯРИЗОВАННОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

Адсорбционный потенциал поверхности сферической наночастицы в случае ван-дер-ваальсовой адсорбции может быть эффективно представлен комбинацией простейших модельных потенциалов “твердая стенка–дельта-функциональная яма”:  $V_i(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0)$  ( $R$  – радиус сферы) [3–5]. При помещении сферической наночасти-



**Рис. 3.** Зависимости средней радиальной плотности атомов полипептидов A200R50D50 (а, б) и A320R40D40 (в, г) на поверхности неполяризованной (а, в) и поляризованной (со значением дипольного момента  $p_{1,00}$ ) (б, г) золотой наночастицы с дифференциацией по типам звеньев. На рисунке: Pep – зависимость средней плотности по всем атомам полипептида; Ala, Arg и Asp – усредненные радиальные плотности по типам аминокислотных остатков.

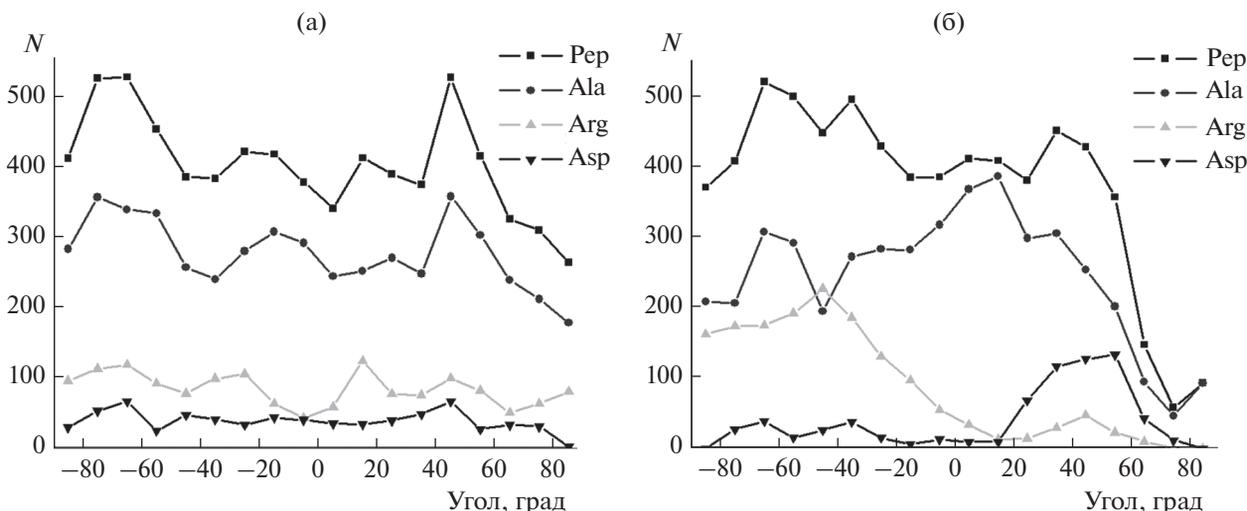
цы в однородное электрическое поле шаровая симметрия системы утрачивается и потенциал поля, создаваемого поляризованной частицей, приобретает зависимость от угловой переменной  $\theta$ . Если используется переменное монохроматическое СВЧ-поле  $E(t) = E_0 \exp(-i\omega t)$ , то оно поляризует наночастицу по гармоническому закону с частотой  $\omega$ , и к адсорбционному потенциалу  $V_1(r)$  добавляется как потенциал внешнего поля  $E_0$ , так и потенциал поля поверхности  $V_2(r, \theta) = -eE_0 r \cos \theta + V_p(r, \theta)$  поляризованного шара. Тогда суммарный потенциал поля в пространстве вне наночастицы может быть записан в виде

$$V(\mathbf{r}) = V_1(r) + V_2(r, \theta) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0) - eE_0 r \cos \theta + V_p(r, \theta), \quad (1)$$

где

$$V_2(r, \theta) = -eE_0 r \cos \theta + \frac{\epsilon_1(\omega) - \epsilon_2}{\epsilon_1(\omega) + 2\epsilon_2} R^3 eE_0 \frac{\cos \theta}{r^2}. \quad (2)$$

Диэлектрические проницаемости  $\epsilon_1(\omega)$ ,  $\epsilon_2$  в (2) характеризуют металл частицы и окружающую среду соответственно. В случае слабого СВЧ-поля учет потенциала (2) может быть произведен в рамках теории возмущений. Плотность  $n(\mathbf{r}) = \psi^2(\mathbf{r})$  звеньев адсорбированной макроцепи в поле поляризованной частицы будут определять конформационные функции  $\psi_l(\mathbf{r}) = F_l(r)P_l(\cos \theta)$ , где  $P_l(\cos \theta)$  – полином Лежандра порядка  $l$ , а радиальные функции  $F_l(r)$  представляются функциями Бесселя мнимого аргумента  $I_{l+1/2}(qr)$  и  $K_{l+1/2}(qr)$  с полуцелым индексом  $l + 1/2$ .



**Рис. 4.** Зависимости средних угловых распределений атомов полипептида A320R40D40 на поверхности неполяризованной (а) и поляризованной (со значением дипольного момента  $p_{1,00}$ ) (б) золотой наночастицы с дифференциацией по типам звеньев. На рисунке: Pep – усредненное угловое распределение по всем атомам полипептида, Ala, Arg и Asp – усредненные угловые распределения по типам аминокислотных остатков.

$$\begin{cases} F_l^I(r) = A_l \left[ \frac{I_{l+1/2}(q_l r)}{\sqrt{r}} - \frac{I_{l+1/2}(q_l R) K_{l+1/2}(q_l r)}{K_{l+1/2}(q_l R) \sqrt{r}} \right], & R < r < r_0 \\ F_l^{II}(r) = A_l \left[ \frac{I_{l+1/2}(q_l r_0)}{K_{l+1/2}(q_l r_0)} - \frac{I_{l+1/2}(q_l R)}{K_{l+1/2}(q_l R)} \right] \frac{K_{l+1/2}(q_l r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases} \quad (3)$$

В общем случае произвольного индекса  $l$  для определения параметров  $q_l$  (важными случаями являются  $l = 0$  и  $l = 1$ ) необходимо решить следующее трансцендентное уравнение:

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{I_{l+1/2}(q_l r_0)}{K_{l+1/2}(q_l r_0)} \right] \left[ q_l \frac{K'_{l+1/2}(q_l r_0)}{K_{l+1/2}(q_l r_0)} - \frac{1}{2r_0} \right] - \\ & - \frac{2r_0 q_l I'_{l+1/2}(q_l r_0) - I_{l+1/2}(q_l r_0)}{2r_0 K_{l+1/2}(q_l r_0)} = \\ & = - \frac{6\alpha}{a^2 k T} \left[ \frac{I_{l+1/2}(q_l r_0)}{K_{l+1/2}(q_l r_0)} - \frac{I_{l+1/2}(q_l R)}{K_{l+1/2}(q_l R)} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

Выражения для радиально-углового распределения плотности звеньев адсорбированной макроцепи в однородном СВЧ-поле могут быть записаны в виде

$$n_I(r, \theta) = n_I^{(l=0)}(r) + n_I^{(1)}(r) \cos \theta + n_I^{(2)}(r) \cos^2 \theta, \quad R < r < r_0, \quad (5)$$

$$n_{II}(r, \theta) = n_{II}^{(l=0)}(r) + n_{II}^{(1)}(r) \cos \theta + n_{II}^{(2)}(r) \cos^2 \theta, \quad r_0 < r < \infty, \quad (6)$$

где

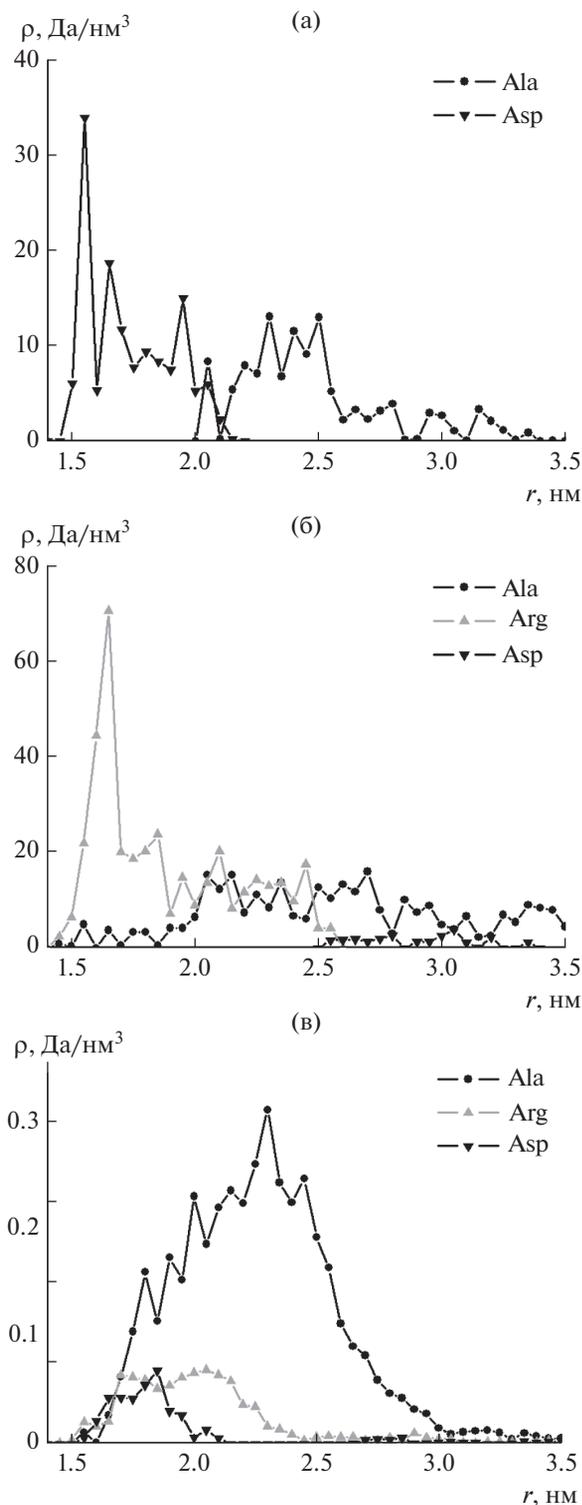
$$\begin{aligned} n_{I,II}^{(1)}(r) &= 2 \frac{\langle \Psi_{I,II}^{(l=0)} | V_2 | \Psi_{I,II}^{(l=1)} \rangle}{\epsilon_1^{(0)} - \epsilon_0^{(0)}} F_0^{I,II}(r) F_1^{I,II}(r), \\ n_{I,II}^{(2)}(r) &= \frac{\left| \langle \Psi_{I,II}^{(l=0)} | V_2 | \Psi_{I,II}^{(l=1)} \rangle \right|^2}{\left| \epsilon_1^{(0)} - \epsilon_0^{(0)} \right|^2} \left| F_1^{I,II}(r) \right|^2. \end{aligned}$$

Собственные значения  $\epsilon_1$  находим из уравнения  $\epsilon_l = -q_l^2 a^2 k T / 6$ , а коэффициенты  $\langle \Psi_{I,II}^{(l=0)} | V_2 | \Psi_{I,II}^{(l=1)} \rangle$  представляют собой следующие интегралы:

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{I,II}^{(l=0)} | V_2 | \Psi_{I,II}^{(l=1)} \rangle = \\ & = \begin{cases} \int_R^{r_0} F_0^I(r) V_2(r) F_1^I(r) r^2 dr, & I: R < r < r_0 \\ \int_{r_0}^{\infty} F_0^{II}(r) V_2(r) F_1^{II}(r) r^2 dr, & II: r_0 < r < \infty \end{cases}, \end{aligned} \quad (7)$$

которые легко вычисляются от комбинаций показательных и степенных функций.

Заметим, что выражение (2) для потенциала  $V_2(r, \theta) = -eE_0 r \cos \theta + V_p(r, \theta)$  записано для случая однородно заряженной макроцепи с зарядом звена, равным  $e$ . В случае макроцепного полиамфолита вместо заряда  $e$  можно ввести эффективный



**Рис. 5.** Зависимости средней радиальной плотности полипептида A320R40D40 на поверхности поляризованной (со значением дипольного момента  $p_{1,00}$ ) золотой наночастицы с дифференциацией по типам звеньев в области положительно заряженного полюса (а), отрицательно заряженного полюса (б) и экваториальной области (в). На рисунке: Ala, Arg и Asp — усредненные радиальные плотности по типам аминокислотных остатков.

дипольный момент  $p$  электронной нейтральной группы звеньев,  $e \rightarrow p$ . В этом случае, усредняя разброс ориентаций диполей относительно вектора напряженности СВЧ-поля, для потенциала  $V_2(r)$  можно записать

$$V_2^p(r) = -pE_0 - 2 \frac{\epsilon_1(\omega) - \epsilon_2}{\epsilon_1(\omega) + 2\epsilon_2} \left(\frac{R}{r}\right)^3 pE_0. \quad (8)$$

Напряженность СВЧ-поля предполагается адиабатически медленно изменяющейся со временем величиной. Аналитические выражения для плотности звеньев адсорбированной макроцепи в виде (5) и (6) хорошо коррелируют с распределениями, полученными в результате МД-моделирования.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, под воздействием электрического поля неоднородно распределенных электрических зарядов на поверхности поляризованной сферической металлической наночастицы происходят изменения конформаций полиамфолитных макромолекул, которые значительно отличаются от изменений как в случае неполяризованной нейтральной наночастицы, так и в случае равномерного, сферически симметричного распределения зарядов на поверхности заряженной наночастицы [6, 7]. На поверхности поляризованной металлической наночастицы формируется неоднородное распределение плотности атомов полипептида в зависимости от угла между направлением вектора дипольного момента и вектором нормали к поверхности наночастицы. Также, в отличие от неполяризованной металлической наночастицы, наблюдается набухание макромолекулярной опушки с преимущественным выбрасыванием петель в направлении оси поляризации. Такие значительные изменения конформации адсорбированной на поверхности наночастицы полиамфолитной макроцепи будут существенно влиять на фотохимические процессы, протекающие в многопетлевом слое полимерной опушки. Следовательно, они могут быть использованы для создания и/или модификации сенсорных устройств с перестраиваемой (переключаемой) под воздействием электрического поля конформацией макромолекул. К таким системам могут быть отнесены, например, сенсоры на основе эффекта ГКР, а также люминесцентно-оптические измерители концентрации молекулярного (в том числе — синглетного) кислорода.

## ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Оренбургской области в рамках научного проекта № 19-43-560003.

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zengin A., Tamer U., Saykara T. // J. Colloid Interface Sci. 2015. V. 448. P. 215.
2. Chen Y., Cruz-Chu E.R., Woodard J., Gartia M.R., Schulten K., Liu L. // ACS Nano. 2012. V. 6. P. 8847.
3. Кучеренко М.Г., Русинов А.П., Чмерева Т.М., Игнатьев А.А., Кислов Д.А., Кручинин Н.Ю. // Оптика и спектроскопия. 2009. Т. 107. С. 510.
4. Kucherenko M.G., Izmodenova S.V., Kruchinin N.Yu., Chmerева T.M. // High Energy Chem. 2009. V. 43. P. 592.
5. Кучеренко М.Г., Измоденова С.В., Чмерева Т.М., Кручинин Н.Ю., Подрезова Н.С. // Вестник ОГУ. 2013. № 9. С. 100.
6. Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Сибирский физ. журн. 2018. Т. 18. № 2. С. 86.
7. Кручинин, Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоид. журн. 2019. Т. 81. С. 175.
8. Phillips J.C., Braun R., Wang W., Gumbart J., Tajkhorshid E., Villa E., Chipot C., Skeel R.D., Kale L., Schulten K. // J. Comput. Chem. 2005. V. 26. P. 1781.
9. MacKerell A.D., Jr., Bashford D., Bellott M., Dunbrack R.L., Jr., Evanseck J.D., Field M.J., Fischer S., Gao J., Guo H., Ha S., Joseph-McCarthy D., Kuchnir L., Kuczera K., Lau F.T.K., Mattos C., Michnick S., Ngo T., Nguyen D.T., Prodhom B., Reiher W.E. III, Roux B., Schlenkrich M., Smith J.C., Stote R., Straub J., Watanabe M., Wiorkiewicz-Kuczera J., Yin D., Karplus M. // J. Phys. Chem. B. 1998. V. 102. P. 3586.
10. Heinz H., Vaia R.A., Farmer B.L., Naik R.R. // J. Phys. Chem. C. 2008. V. 112. P. 17281.
11. Darden T., York D., Pedersen L. // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 10089.
12. Jorgensen W.L., Chandrasekhar J., Madura J.D., Impey R.W., Klein M.L. // J. Chem. Phys. 1983. V. 79. P. 926.
13. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. // J. Mol. Graphics. 1996. V. 14. P. 33.