

КОНФОРМАЦИОННЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПОЛИАМФОЛИТНЫХ ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ В СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

© 2020 г. Н. Ю. Кручинин¹, *, М. Г. Кучеренко¹

¹Центр лазерной и информационной биофизики Оренбургского государственного университета
пр. Победы, 13, Оренбург, 460018 Россия

*e-mail: kruchinin_56@mail.ru

Поступила в редакцию 28.01.2020 г.

После доработки 13.02.2020 г.

Принята к публикации 20.02.2020 г.

С использованием метода молекулярной динамики исследованы конформационные изменения адсорбированных на поверхности металлической наночастицы полиамфолитных полипептидов при изменении направления ее поляризации с частотой, соответствующей сверхвысокочастотному электрическому полю. Рассчитаны временные зависимости дипольных моментов, радиальные распределения плотности атомов и угловые распределения атомов адсорбированных полипептидов при переполаризации наночастицы. При перестройке конформационной структуры адсорбированного полиамфолитного полипептида на наночастице при периодическом изменении направления ее поляризации наблюдались два эффекта: колебания конформационной структуры адсорбированного полипептида на поверхности наночастицы и образование макромолекулярного кольца в экваториальной области наночастицы.

DOI: 10.31857/S0023291220040060

1. ВВЕДЕНИЕ

Металлические наночастицы с адсорбированными на их поверхности макромолекулами широко применяются во многих областях науки и техники, в частности при создании химических сенсоров и базовых элементов для устройств наноэлектроники, а также в биохимических и биомедицинских исследованиях. Особый интерес вызывает разработка методов управления перестройкой конформаций макромолекулярных цепей, адсорбированных на поверхности наночастицы, под воздействием электромагнитного излучения.

В последнее время значительные усилия направлены на повышение чувствительности и расширение возможностей детектирования датчиков на основе эффектов поверхностного плазмонного резонанса [1] и гигантского комбинационного рассеяния. Для управления характеристиками таких датчиков может использоваться изменение водородного показателя среды у поверхности датчика [2, 3], температуры [4], а также внешнего электрического поля [5, 6].

В ряде работ исследовались наносистемы, в которых макромолекулярные цепи были адсор-

бированы на поверхностях нанообъектов различной формы с целью использования подобных наносистем в люминесцентно-оптическом измерителе концентрации кислорода [7–11]. В частности, была исследована адсорбция полипептидов на поверхности нейтральной золотой наночастицы [9], а также полиамфолитов на поверхности наночастицы с равномерным сферически симметричным распределением зарядов [10], а также поляризованной наночастицы [11].

В электрическом поле на поверхности металлической наночастицы индуцируются электрические заряды, которые распределены по поверхности с плотностью, пропорциональной косинусу угла между направлениями векторов электрического поля и нормали в точке на поверхности наночастицы. Поэтому электрическое поле, однородное в удаленной области, около наночастицы сильно искажено. Такое неравномерное распределение индуцированных зарядов будет оказывать существенное влияние на конформационную структуру полиамфолитных макромолекул, адсорбированных на поверхности наночастицы.

В случае воздействия электромагнитного излучения на данную наносистему конформационная структура полиамфолитной макроцепи будет

изменяться в соответствии с колебаниями плотности индуцированных полем зарядов на поверхности наночастицы. При возбуждении в наночастице плазменных колебаний произойдет усиление локального электрического поля вблизи наночастицы. При этом эффект усиления—ослабления притяжения звеньев к поверхности наночастицы будет заметным при активации высокочастотных плазменных мод — в диапазоне частот плазмонного резонанса, а инициирование конформационных переходов макроцепи вблизи наночастицы становится возможным лишь при возбуждении в ней колебаний в сверхвысокочастотном диапазоне. В последнем случае следует говорить не о плазмонном резонансе, а о плазменной активации конформационной подвижности фрагментов полипептида. При определенных частотах электромагнитного излучения возможно появление резонанса изменений конформационной структуры полиамфолитной макромолекулы на поверхности металлической наночастицы. Кроме того, если использовать сверхвысокочастотное излучение, то под его воздействием также будет происходить и повышение температуры полипептида, что ускорит изменение конформационной структуры.

Поэтому наносистемы, в которых конформация адсорбированных полиамфолитов изменяется под воздействием сверхвысокочастотного электромагнитного излучения, могут найти применение при создании новых и модификации существующих сенсоров на основе эффектов гигантского комбинационного рассеяния или поверхностного плазмонного резонанса, а также в люминесцентно-оптическом измерителе концентрации молекулярного (в том числе синглетного) кислорода.

Целью данной работы является исследование конформационных преобразований полиамфолитных полипептидов на поверхности металлической наночастицы в сверхвысокочастотном электрическом поле.

2. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование было произведено с использованием программного комплекса NAMD 2.13 [12]. Была рассмотрена система, в которой полиамфолитный полипептид располагался на поверхности сферической золотой наночастицы, при этом атомы наночастицы в процессе моделирования оставались зафиксированными. Модель золотой наночастицы была получена путем вырезания шара радиусом 1.5 нм из кристалла золота.

Были рассмотрены четыре полиамфолитных полипептида с разным порядком расположения заряженных аминокислотных остатков:

1) полипептид A200R50D50, состоящий из 300 аминокислотных остатков с 200 звеньями Ala (A) с равномерно распределенными 50 звеньями Asp (D, заряд $-1e$) и 50 звеньями Arg (R, заряд $+1e$) — (ADAARA)₅₀,

2) полипептид A240R30D30, состоящий из 300 аминокислотных остатков с 240 звеньями Ala с равномерно распределенными 30 звеньями Asp и 30 звеньями Arg — (AADAAAARAA)₃₀,

3) полипептид A320R40D40, состоящий из 400 аминокислотных остатков с 320 звеньями Ala с равномерно распределенными 20 парами звеньев Asp и 20 парами звеньев Arg — (A₄RRA₈DDA₄)₂₀,

4) полипептид A272R16D16, состоящий из 304 аминокислотных остатков с 272 звеньями Ala с равномерно распределенными 8 парами звеньев Asp и 8 парами звеньев Arg — A₈(A₈DDA₁₆RRA₈)₈·A₈.

Для полипептидов было использовано силовое поле CHARMM22 [13]. Нековалентные взаимодействия с золотой наночастицей описывались потенциалом Леннард-Джонса, параметризованным в работе [14]. 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, а на большем расстоянии использовался метод “частица—сетка” Эвальда (PME) [15] с шагом сетки 0.11 нм. Вся наносистема была помещена в куб с ребрами длиной 20 нм, заполненный молекулами воды TIP3P [16].

В стартовой конфигурации использовались полученные ранее в результате МД-моделирования равновесные конформации полипептидов, адсорбированных на поверхности неполяризованной наночастицы [11]. Моделирование было произведено при постоянных значениях температуры 300 и 900 К (термостат Берендсена) для каждого рассмотренного полипептида.

Локальное электрическое поле задавалось через изменение величины зарядов атомов на поверхности сферической наночастицы по закону косинуса угла ориентации нормали. Кроме того, в процессе МД-моделирования плотности этих зарядов периодически изменялись во времени по закону синуса с периодом колебаний $T = 2.4$ нс (частота колебаний 416.7 МГц) в течение 3–5 периодов колебаний. Пиковое значение индуцированного дипольного момента поляризованной наночастицы составляло $p_{\max}^{\text{np}} = 10.92$ кД. В этом случае на положительно заряженном полюсе наночастицы атомы приобретали парциальные заряды, равные $+1e$. Каждый период колебания был разбит на 8 равных временных отрезков по 0.3 нс

в течение которых поле не изменялось, а значение дипольного момента наночастицы на выбранном отрезке задавалось путем его усреднения по всей длине отрезка. Дипольный момент наночастицы изменялся в следующей последовательности, начиная со стартовой конформации полипептида, полученной на нейтральной наночастице: $+0.69p_{\max}^{\text{np}}$ (среднее значение на участке колебаний от $\pi/8$ до $3\pi/8$), $+0.97p_{\max}^{\text{np}}$ (от $3\pi/8$ до $5\pi/8$), $+0.69p_{\max}^{\text{np}}$ (от $5\pi/8$ до $7\pi/8$), 0 (от $7\pi/8$ до $9\pi/8$), $-0.69p_{\max}^{\text{np}}$ (от $9\pi/8$ до $11\pi/8$), $-0.97p_{\max}^{\text{np}}$ (от $11\pi/8$ до $13\pi/8$), $-0.69p_{\max}^{\text{np}}$ (от $13\pi/8$ до $15\pi/8$), 0 (от $15\pi/8$ до $17\pi/8$).

По результатам МД-моделирования были рассчитаны временные зависимости проекций дипольных моментов адсорбированных полипептидов в направлении вектора поляризации наночастицы. Также были рассчитаны радиальные зависимости плотности атомов полипептидов и угловые распределения атомов по окончании всех временных отрезков МД-моделирования на неполяризованной наночастице и временных отрезков, когда наночастица имеет дипольные моменты $+0.97p_{\max}^{\text{np}}$ и $-0.97p_{\max}^{\text{np}}$. Зависимости угловых распределений атомов адсорбированного полипептида были нормированы на амплитудные значения концентрации атомов в экваториальной области с учетом различий площади поверхности сферических поясов, ограниченных окружностями различного радиуса.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

При МД-моделировании с периодическим изменением полярности наночастицы при температуре 900 К на поверхности золотой наночастицы под воздействием электрического поля наблюдался эффект колебаний конформационной структуры адсорбированного полиамфолитного полипептида. На рис. 1 и 2 представлены конформации полипептидов A200R50D50 (рис. 1) и A320R40D40 (рис. 2) в различные моменты времени от начала МД-моделирования при температуре 900 К со стартовых конфигураций (рис. 1а и 2а), полученных по результатам МД-моделирования на поверхности нейтральной неполяризованной золотой наночастицы [11]. На рис. 1б и 2б изображены конформации данных полипептидов в момент времени 10.2 нс на последнем, пятом периоде колебаний. Этот момент времени соответствует окончанию МД-моделирования на отрезке, при котором дипольный момент наночастицы направлен вверх и равен $+0.97p_{\max}^{\text{np}}$. Видно, что в ходе конформационных изменений произошла адсорбция отрицательно заряженных звеньев Asp данных полипептидов на поверхности заряженного положительно в

данный момент времени полюса наночастицы, который на рис. 1б и 2б находится в верхней части наночастицы, а остатки Arg адсорбировались на поверхности отрицательно заряженного в текущий момент времени полюса наночастицы, который находится внизу. На рис. 1в и 2в изображены конформации полипептидов A200R50D50 и A320R40D40 в момент времени 11.4 нс, когда дипольный момент наночастицы ($-0.97p_{\max}^{\text{np}}$) направлен вниз. В этом случае наблюдается зеркальная картина конформационной структуры полипептидов по отношению к рассмотренному выше случаю положительного направления дипольного момента наночастицы.

Из-за разного порядка расположения заряженных звеньев в макроцепи наблюдаются существенные отличия конформационных изменений полипептида A200R50D50 от таковых для полипептидов A320R40D40 и A272R16D16 на поверхности поляризованной наночастицы. У полипептидов A320R40D40 и A272R16D16 расстояние между несущими положительный заряд звеньями Arg и отрицательными заряженными звеньями Asp в макроцепи значительно больше, чем у полипептидов A200R50D50 и A240R30D30. Поэтому большинство заряженных звеньев располагаются на противоположно заряженных по отношению к ним полюсах наночастицы (рис. 2б и 2в). Меньшая часть заряженных звеньев при этом отдалялась от наночастицы в районах одноименно заряженных полюсов, вытягивая “опушку” макроцепи вдоль направления дипольного момента наночастицы (рис. 2б и 2в). У полипептида A200R50D50 расстояние между заряженными звеньями небольшое, поэтому заряженные звенья находятся, в том числе, и в экваториальной области (рис. 1б и 1в). Наблюдается вытягивание “опушки” макроцепи вблизи полюсов из-за отталкивания одноименно заряженных звеньев по отношению к полюсам наночастицы (рис. 1б и 1в), при этом количество “петель” у полипептида A200R50D50 в полярных областях значительно больше, чем у полипептидов A320R40D40 и A272R16D16. У полипептида A240R30D30 характер конформационных преобразований при периодическом изменении поляризации наночастицы носил промежуточный характер по сравнению с рассмотренными выше случаями.

На рис. 3а изображены зависимости проекций дипольных моментов полипептидов A200R50D50 и A320R40D40 в направлении вектора поляризации наночастицы от времени МД-моделирования при 900 К. Наблюдаются периодические колебания проекции дипольного момента полиамфолитного полипептида на поверхности наночастицы. Это говорит о том, что конформационная структура макромолекулы изменяется вслед за изменением локального электрического поля вблизи по-

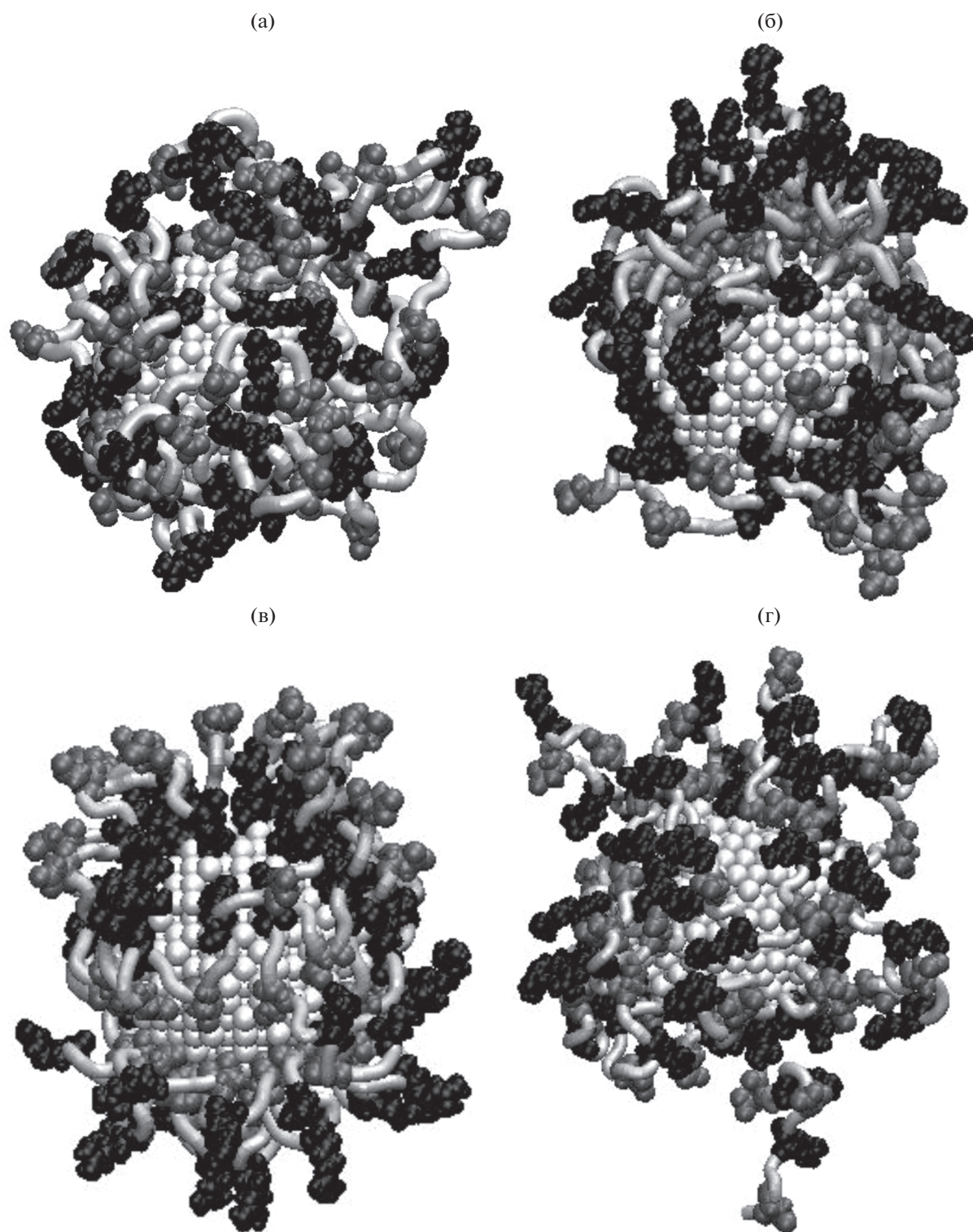


Рис. 1. Конформации полипептида A200R50D50 при МД-моделировании с периодическим изменением поляризации наночастицы при температуре 900 К: (а) стартовая конформация, (б) через 10.2 нс, когда дипольный момент наночастицы направлен вверх, (в) через 11.4 нс, когда дипольный момент наночастицы направлен вниз, (г) через 12 нс, когда наночастица не поляризована (светло-серая трубка — звенья Ala, черным цветом изображены звенья Arg, серым — звенья Asp).

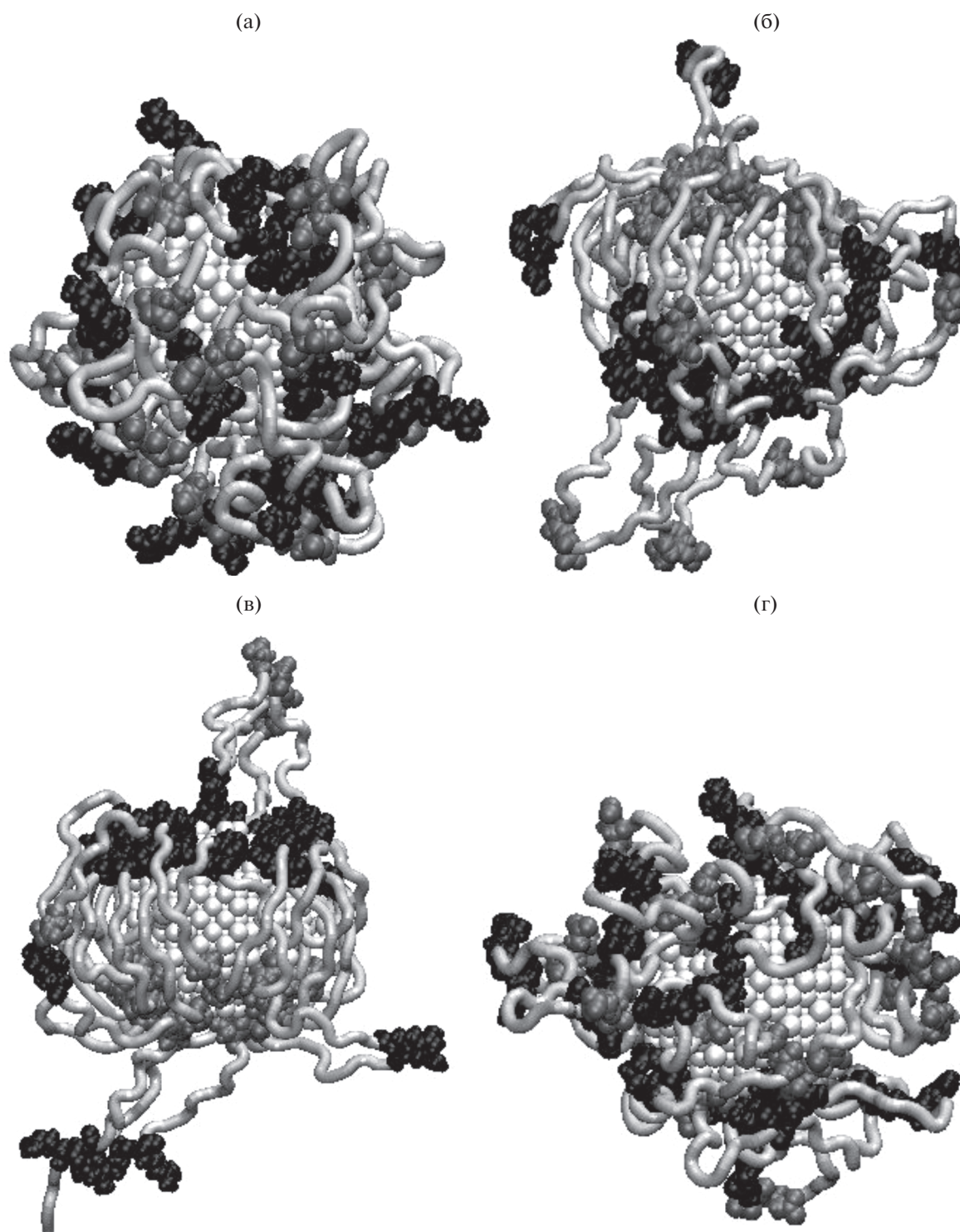


Рис. 2. Конформации полипептида A320R40D40 при МД-моделировании с периодическим изменением поляризации золотой наночастицы при температуре 900 К. Времена моделирования и окраска разных пептидов те же, что и на рис. 1.

верхности металлической наночастицы. Видно, что у полипептида A200R50D50 наблюдается нарастание проекции дипольного момента макромолекулы при нарастании дипольного момента

наночастицы, а у полипептида A320R40D40, наоборот, имеет место уменьшение проекции суммарного дипольного момента макроцепи (рис. 3а). Это различие связано с тем, что у полипептида

A200R50D50 вытягивается опушка в районе полюсов (рис. 1б и 1в) и большая часть дипольных моментов фрагментов полипептида, ограниченных разноименно заряженными звеньями, ориентируется по направлению электрического поля. У полипептидов A320R40D40 и A272R16D16 происходит смещение большей части заряженных звеньев к противоположно заряженному полюсу наночастицы (рис. 2б и 2в). Это приводит к тому, что проекция дипольного момента всей макроцепи направлена в противоположную сторону (рис. 3а). У полипептида A240R30D30 вследствие сложения дипольных моментов фрагментов, ограниченных разноименно заряженными звеньями (часть которых направлена по направлению электрического поля около полюсов наночастицы, а другая часть — в противоположную сторону из-за смещения заряженных звеньев к противоположно заряженному полюсу), значения проекции дипольного момента всей макроцепи изменялись аналогично полипептидам A320R40D40 и A272R16D16, но со значительно меньшей амплитудой.

На рис. 4 изображены радиальные зависимости плотности атомов полипептида A320R40D40 на поверхности золотой наночастицы по окончании МД-моделирования на разных временных отрезках в случаях, когда наночастица не поляризована (рис. 4а), поляризована с дипольным моментом $+0.97p_{\max}^{\text{np}}$ (рис. 4б) и $-0.97p_{\max}^{\text{np}}$ (рис. 4в). Видно, что радиальные распределения плотности атомов в одной фазе изменения поверхностной плотности заряда наночастицы практически совпадают. По окончании тех временных отрезков, когда наночастица была не поляризована, радиальное распределение плотности атомов полипептида (рис. 4а) значительно отличается от случаев, когда наночастица поляризована (рис. 4б и 4в). При этом в случаях поляризации наночастицы в разных направлениях (рис. 4б и 4в) кривые радиальных распределений плотностей атомов полипептида практически не отличаются друг от друга. Поэтому периодическое изменение локального электрического поля наночастицы во времени приводит к колебаниям конформационной структуры адсорбированного полиамфолитного полипептида, при которых состояниям поляризованной и неполяризованной частицы соответствуют сильно различающиеся радиальные распределения плотности атомов полипептида.

Кроме того, случаям неполяризованной и поляризованной в разных направлениях наночастицы также соответствуют и различные угловые распределения атомов адсорбированного полипептида. Так, на рис. 5а представлены угловые распределения атомов полипептида A320R40D40, усредненные по всем конформациям, полученным по окончании МД-моделирования всех временных отрезков, когда наночастица была не поля-

ризована, то есть в моменты времени от 0 до 12 нс с шагом $T/2$ нс. На рис. 5б изображены угловые распределения атомов полипептида по окончании МД-моделирования всех временных отрезков, когда дипольный момент наночастицы был равен $+0.97p_{\max}^{\text{np}}$ (в моменты времени $0.6 \text{ нс} + Tn$, где n принимает значения от 0 до 4), а на рис. 5в — аналогичные распределения для случая, когда дипольный момент наночастицы был равен $-0.97p_{\max}^{\text{np}}$ (в моменты времени $1.8 \text{ нс} + Tn$). На графиках по оси абсцисс отложены средние значения углов, соответствующие выбранному сферическому сегменту, ограниченному окружностями разных широт от нижнего полюса (-90°) к верхнему (90°). Наблюдается характерное перераспределение заряженных звеньев (Arg и Asp) из одного полушария в другое в зависимости от направления поляризации наночастицы (сравните рис. 5б и 5в) [11].

При МД-моделировании с периодическим изменением во времени полярности золотой наночастицы при температуре 300 К наблюдалось смещение звеньев адсорбированного полиамфолитного полипептида в экваториальную область наночастицы, окружающих наночастицу полипептидной “опушкой” в виде кольца. На рис. 6 изображены конформации полипептидов A320R40D40 и A272R16D16 через 7.2 нс МД-моделирования (3 периода колебаний) при 300 К. Схожие конформационные структуры при данных условиях также имели полипептиды A200R50D50 и A240R30D30. За данное время произошла трансформация стартовых конформационных структур полипептидов (рис. 2а) в конформационные структуры в виде кольца в экваториальной области наночастицы (рис. 6а и 6б).

На рис. 3б изображены зависимости проекций дипольных моментов полипептидов A200R50D50 и A320R40D40 в направлении вектора поляризации наночастицы от времени МД-моделирования при 300 К. Видно, что амплитуда изменений проекции дипольного момента макроцепи значительно меньше, чем при температуре 900 К (рис. 3а). Это связано с тем, что при температуре 900 К при изменении полярности наночастицы происходило смещение заряженных звеньев от одного полюса к другому, а также наблюдалось выбрасывание “петель” макроцепи в полярных областях. В то же время при температуре 300 К изменения дипольного момента макроцепи связаны с переориентацией фрагментов полипептида в слабо заряженной экваториальной области.

На рис. 5г изображены зависимости углового распределения атомов полипептида A320R40D40 с дифференциацией по типам звеньев, соответствующие конформационной структуре, изображенной на рис. 6а и 6б. В данном случае пик максимального значения углового распределения атомов полипептида A320R40D40 находится в

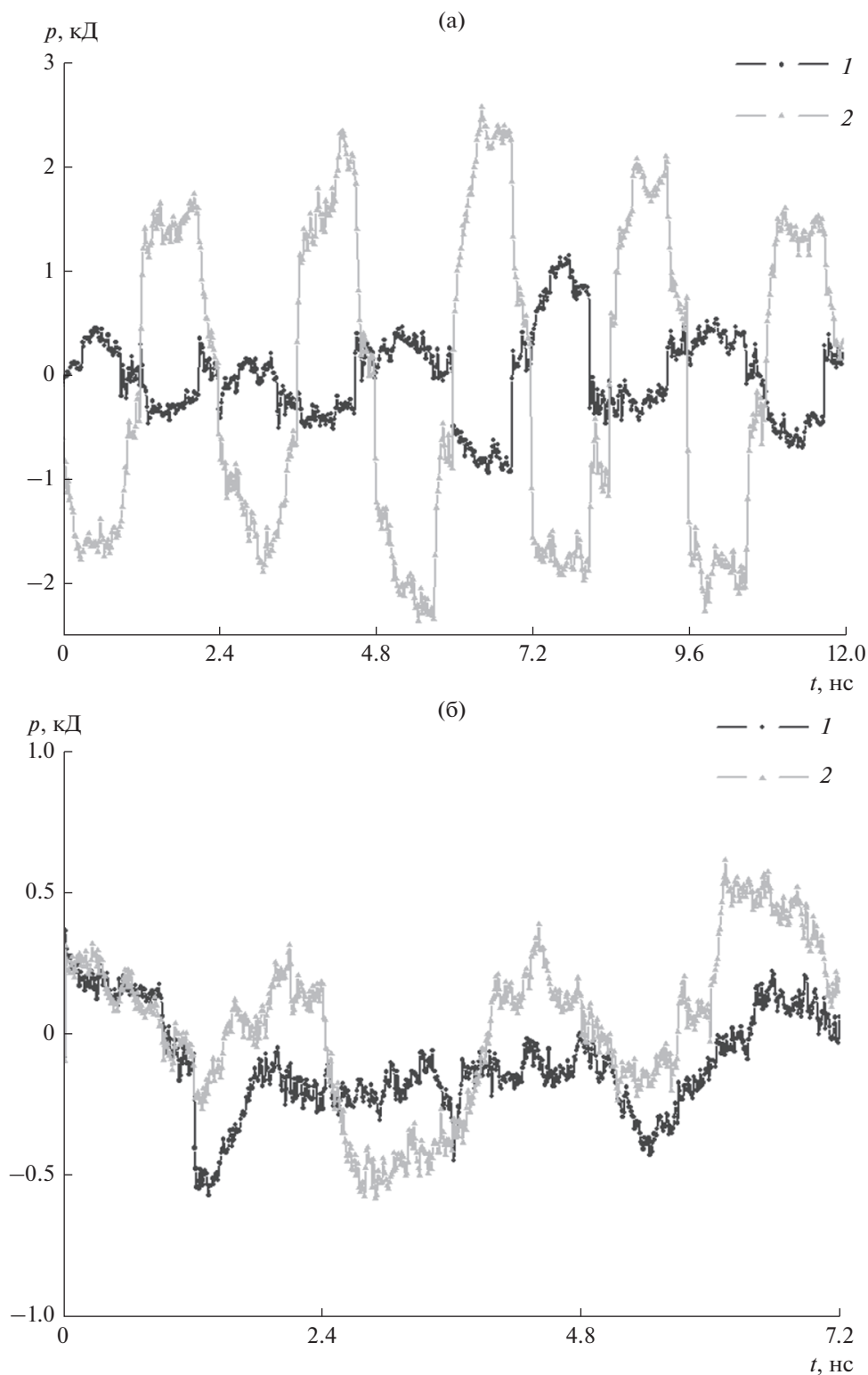
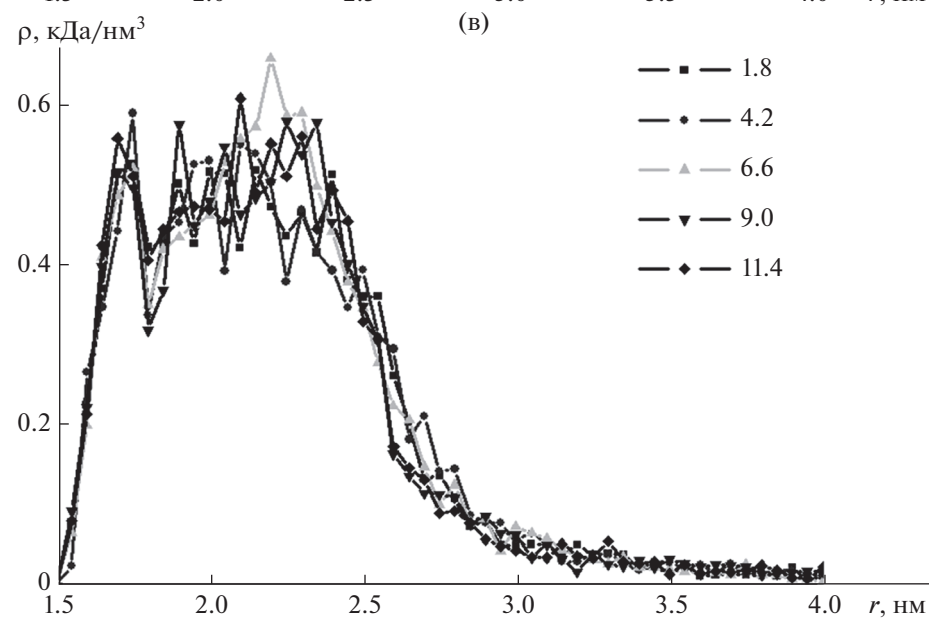
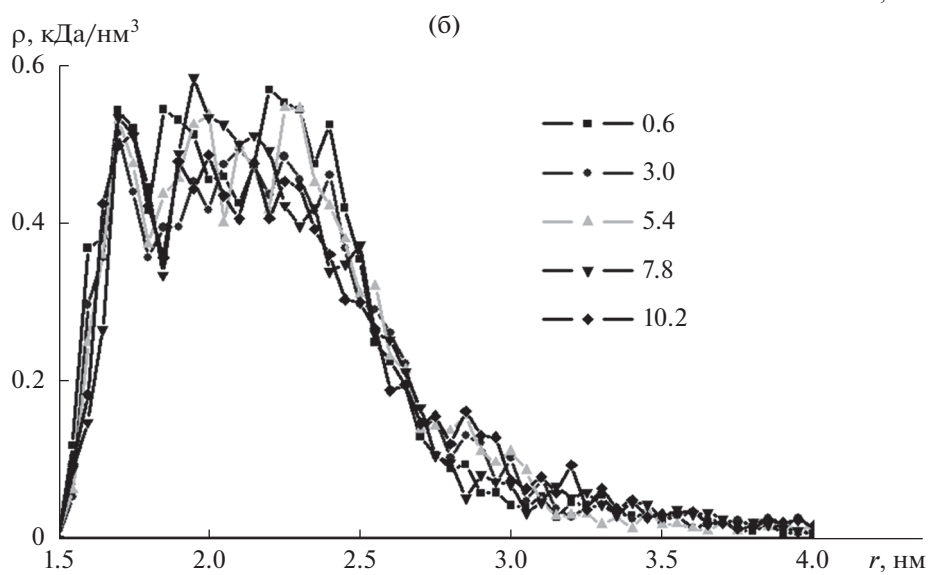
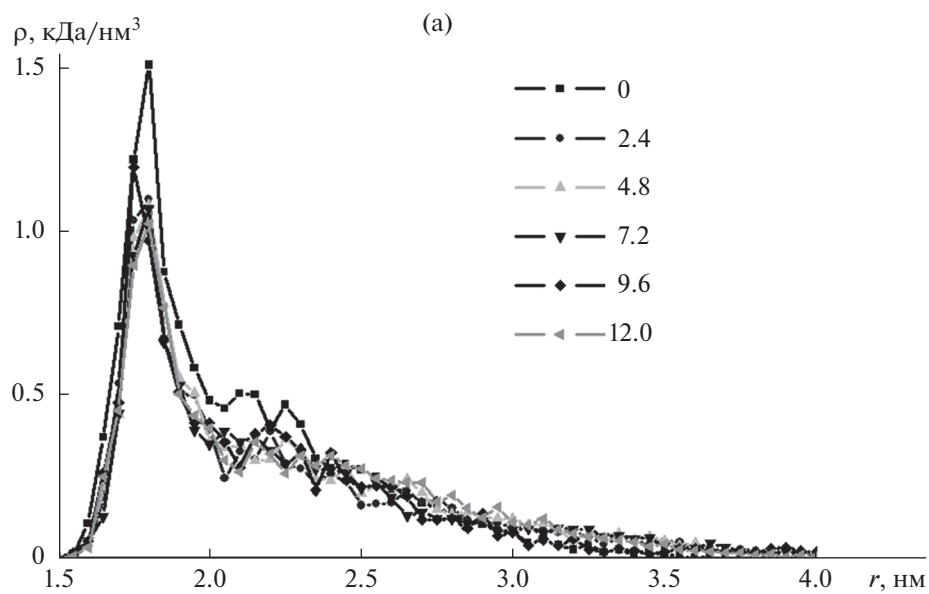


Рис. 3. Зависимости проекций дипольных моментов полипептидов A200R50D50 (1) и A320R40D40 (2) в направлении вектора поляризации золотой наночастицы от времени МД-моделирования при 900 (а) и 300 К (б).

Рис. 4. Радиальные распределения плотности атомов полипептида A320R40D40 на поверхности золотой наночастицы по окончании МД-моделирования при 900 К на разных временных отрезках МД-моделирования (нс, указаны в поле рисунков) в случаях, когда наночастица не поляризована (а), поляризована с дипольным моментом $+0.97\rho_{\max}^{\text{np}}$ (б) или $-0.97\rho_{\max}^{\text{np}}$ (в).



экваториальной области, а сами угловые распределения почти не изменяются при поляризации наночастицы в различных направлениях в отличие от случаев МД-моделирования при 900 К (рис. 5а, 5б и 5в). Такое отличие, связано с тем, что после смещения полипептида в экваториальную область его конформационная структура изменяется незначительно в слабом поле этой области наночастицы.

Наблюдаемые различия в перестройке конформационной структуры полиамфолитных полипептидов при МД-моделировании с периодическим изменением во времени полярности наночастицы при температурах 300 и 900 К обусловлено тем, что при изменении полярности наночастицы происходит смещение заряженных звеньев к противоположно заряженным по отношению к этим звеньям полюсам наночастицы.

При высокой температуре МД-моделирования потенциальные барьеры между звеньями макроцепи под воздействием локального электрического поля поляризованной наночастицы преодолеваются легче, чем при низкой температуре, поэтому заряженные звенья смещаются от одного полюса к другому (рис. 1б и 1в, рис. 2б и 2в). В случае низкой температуры несущие заряды разного знака звенья полипептида, смещаясь к противоположно заряженным полюсам, встречаются друг с другом в экваториальной области, в которой локальное электрическое поле поляризованной наночастицы наиболее слабое. Поэтому разные по знаку заряда звенья полипептида, притягиваясь к друг к другу, образуют нейтрализованный фрагмент макроцепи, который не может быть разъединен на отдельные заряженные фрагменты под воздействием слабого локального электрического по-

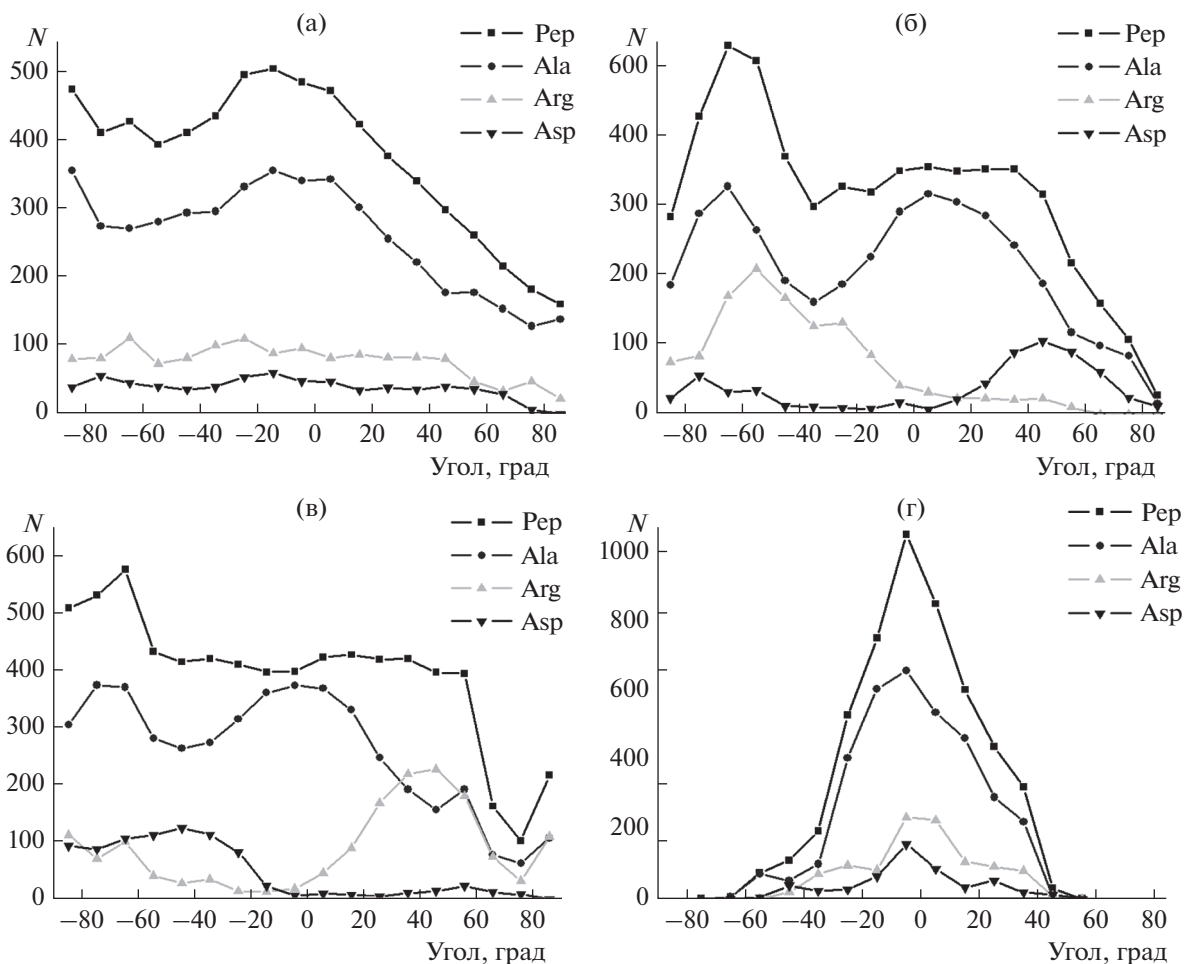


Рис. 5. Средние угловые распределения атомов A320R40D40 по всем конформациям по окончании МД-моделирования при 900 К на разных временных отрезках в случаях, когда наночастица не поляризована (а), поляризована с дипольным моментом $+0.97p_{\max}^{\text{np}}$ (б) или $-0.97p_{\max}^{\text{np}}$ (в). Зависимость углового распределения атомов полипептида A320R40D40 по окончании МД-моделирования при 300 К (г). Pep – угловое распределение по всем атомам полипептида; Ala, Arg и Asp – угловые распределения по типам аминокислотных остатков.

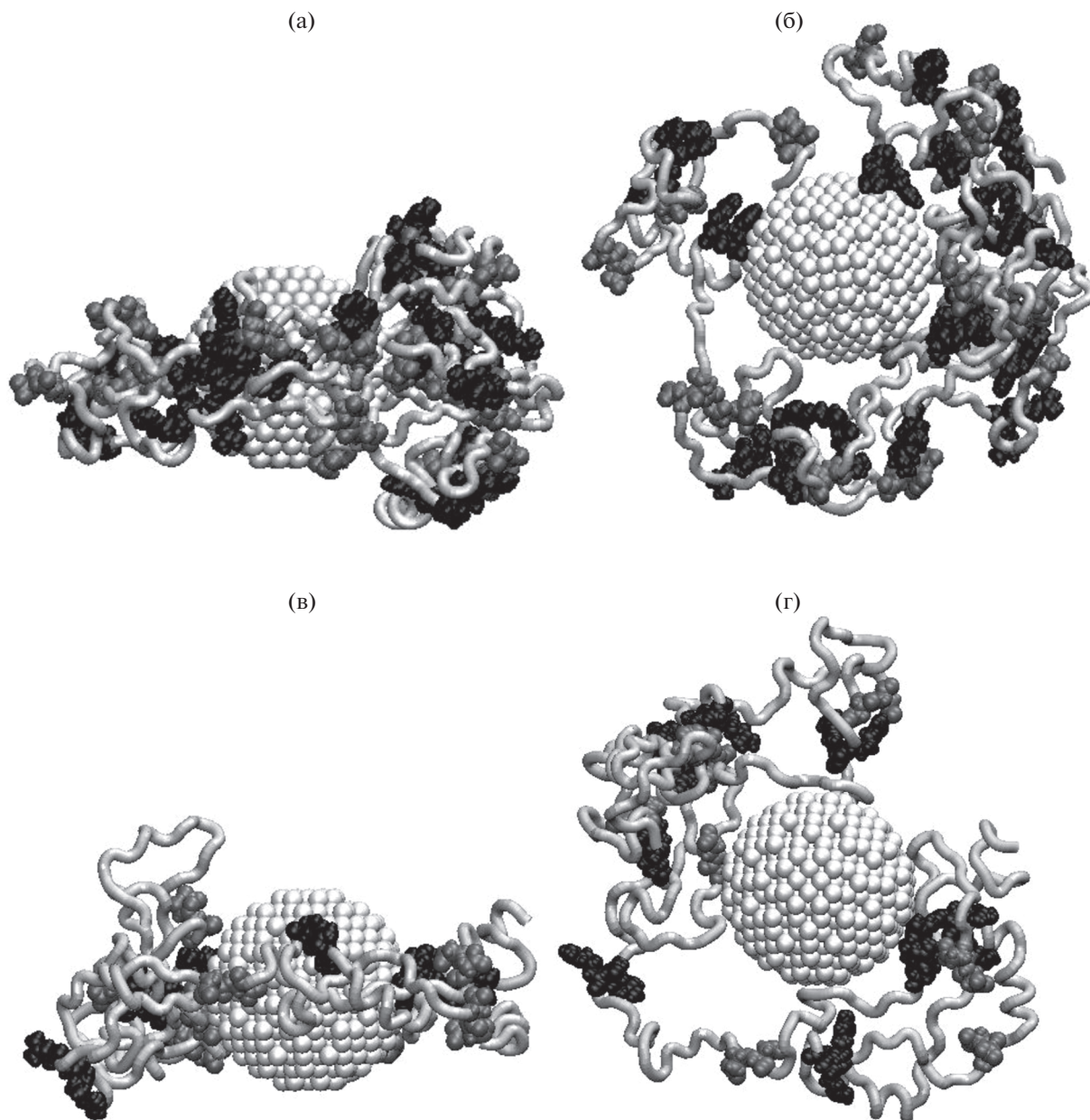


Рис. 6. Конформации полипептидов A320R40D40 (а – вид сбоку, б – вид сверху) и A272R16D16 (в – вид сбоку, г – вид сверху) по окончании МД-моделирования с периодическим изменением поляризации наночастицы при температуре 300 К (светло-серая трубка – звенья Ala, черным цветом изображены звенья Arg, серым звенья Asp).

ля экваториальной области наночастицы при 300 К (рис. 6). Как следствие, в течение примерно двух периодов колебаний T вся макроцепь собирается в экваториальной области и остается локализованной там при дальнейшем МД-моделировании.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При МД-моделировании с периодическим изменением во времени полярности металлической

наночастицы с частотой, соответствующей сверхвысокочастотному электрическому полю, происходят значительные конформационные изменения адсорбированного на поверхности наночастицы полиамфолитного полипептида. Были обнаружены два возможных случая таких конформационных изменений.

В первом случае наблюдался эффект колебаний во времени конформационной структуры адсорбированного полиамфолитного полипептида на поверхности поляризованной наночастицы

при периодическом изменении направления ее поляризации. Такой эффект имел место, когда температура МД-моделирования была достаточно высокой для того, чтобы легко преодолевались межзвенные потенциальные барьеры адсорбированной макромолекулы. При этом характер изменения проекций суммарного дипольного момента полипептида в направлении оси поляризации со временем МД-моделирования зависел от закона распределения заряженных звеньев макроцепи. Так, когда расстояние между разноименно заряженными звеньями было небольшим, преобладал эффект вытягивания значительного числа фрагментов полипептида между разноименно заряженными звеньями в направлении дипольного момента наночастицы в ее полярных областях. При этом проекция суммарного дипольного момента макроцепи на ось поляризации была направлена в ту же сторону, что и дипольный момент наночастицы. В случае большого расстояния между положительно и отрицательно заряженными аминокислотными остатками полипептида преобладал эффект смещения заряженных звеньев к противоположно заряженным полюсам наночастицы. При этом проекция суммарного дипольного момента макроцепи на ось поляризации была направлена противоположно вектору дипольного момента наночастицы.

Во втором случае наблюдалось образование макромолекулярного кольца в экваториальной области наночастицы при периодическом изменении во времени направления ее поляризации. Этот эффект имел место, когда температура МД-моделирования была достаточно низкой, так что при смещении заряженных звеньев макроцепи от одного полюса к другому при переполаризации наночастицы слабое локальное электрическое поле экваториальной области наночастицы было недостаточным для преодоления взаимного притяжения заряженных звеньев полипептида.

Таким образом, воздействием сверхвысококачественного электромагнитного излучения может производиться перестройка конформационной структуры адсорбированных на поверхности металлической наночастицы макромолекулярных цепей, что может найти применение при создании новых и модификации уже существующих сенсоров на основе явлений гигантского комбинационного рассеяния или поверхностного плазмонного резонанса. Кроме того, обнаруженные эффекты будут учитываться при разработке люминесцентно-оптического измерителя концентрации молекулярного кислорода в газовых смесях и жидкостях.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Оренбургской области в рамках научного проекта № 19-43-560003, а также Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2020-0003.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сотников Д.В., Жердев А.В., Дзантиев Б.Б. // Успехи биол. химии. 2015. Т. 55. С. 391.
2. Kesal D., Christau S., Krause P., Möller T., Klitzing R. // *Polymers*. 2016. V. 8. Article 134.
3. Emilsson G., Schoch R.L., Oertle P., Xiong K., Lim R.Y.H., Dahlin A.B. // *Appl. Surf. Sci.* 2017. V. 396. С. 384.
4. Lee J., Chung K., Lee J., Shin K., Kim D.H. // *Adv. Funct. Mater.* 2015. V. 25. P. 6716.
5. Kyaw H.H., Boonruang S., Mohammed W.S., Dutta J. // *AIP Adv.* 2015. V. 5. P. 107226.
6. Chen Y., Cruz-Chu E.R., Woodard J., Gartia M.R., Schulten K., Liu L. // *ACS Nano*. 2012. V. 6. P. 8847.
7. 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.
8. Kucherenko M.G., Izmodenova S.V., Kruchinin N.Yu., Chmerева T.M. // *High Energy Chem.* 2009. V. 43. P. 592.
9. Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Сибирский физ. журн. 2018. Т. 18. № 2. С. 86.
10. Кручинин, Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоид. журн. 2019. Т. 81. С. 175.
11. Кручинин, Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоид. журн. 2020. Т. 82. С. 177.
12. 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.
13. 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.
14. Heinz H., Vaia R.A., Farmer B.L., Naik R.R. // *J. Phys. Chem. C*. 2008. V. 112. P. 17281.
15. Darden T., York D., Pedersen L. // *J. Chem. Phys.* 1993. V. 98. P. 10089.
16. Jorgensen W.L., Chandrasekhar J., Madura J.D., Impey R.W., Klein M.L. // *J. Chem. Phys.* 1983. V. 79. P. 926.