

УДК 539.199; 51-72
DOI 10.25205/2541-9447-2018-13-2-86-94

Н. Ю. Кручинин, М. Г. Кучеренко

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

kruchinin_56@mail.ru, rphys@mail.osu.ru

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИАМФОЛИТОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗОЛОТОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

Методом молекулярной динамики исследовался характер расположения полиамфолитов на поверхности сферической золотой наночастицы, в том числе с адсорбированными на макроцепи молекулами эозина. В результате проведенного молекулярно-динамического моделирования были получены равновесные конформационные структуры полиамфолитных полипептидов, адсорбированных на поверхности сферической золотой наночастицы. Приведено описание радиального распределения плотности звеньев макромолекулы, адсорбированной на поверхности сферической наночастицы на основе специальной математической модели конформационной структуры полимера, созданной с использованием статистической теории макромолекул. Построены зависимости средней радиальной концентрации атомов полиамфолитных полипептидов с дифференциацией по типам звеньев, а также адсорбированных на макроцепи молекул эозина на золотой наночастице. Проведены аппроксимирующие кривые, рассчитанные на основе статистической теории макромолекул. Полученные результаты могут быть использованы для создания наносистем с заданным характером расположения молекул красителей, что может найти применение при создании люминесцентно-оптического измерителя концентрации молекулярного (в том числе синглетного) кислорода.

Ключевые слова: молекулярная динамика, полиамфолиты, золотая наночастица, органические красители, полипептиды.

Введение

Наночастицы и нанотрубки, связанные с молекулами-метками, а также покрытые полимерными цепями, находят широкое применение в различных областях науки и техники как для биомедицинских целей, так и при создании разнообразных сенсоров и функциональных наносистем [1–5]. Одними из перспективных наносистем являются такие системы, в которых на золотой наночастице адсорбирована макромолекула полипептида с молекулами органических красителей.

Данные наносистемы могут найти широкое применение, в частности, при создании люминесцентно-оптического измерителя

концентрации молекулярного (в том числе синглетного) кислорода, а также в качестве сенсоров генерации синглетного кислорода в фотодинамической терапии [6–9]. В люминесцентно-оптическом измерителе концентрации молекулярного и синглетного кислорода в качестве элемента используется наносистема, в которой макромолекула адсорбирована на поверхности наночастицы или в нанопоре и при этом содержит в своей структуре фотоактивные центры (молекулы красителей) [6–9]. Неоднородное размещение молекул красителей оказывает существенное влияние на кинетику двустадийных фотореакций с участием электронно-возбужденных молекул красителей и кислорода, которые могут протекать

Кручинин Н. Ю., Кучеренко М. Г. Молекулярно-динамическое моделирование конформационной структуры полиамфолитов на поверхности золотой наночастицы // Сибирский физический журнал. 2018. Т. 13, № 2. С. 86–94.

в слое из звеньев макромолекулы. При лазерной активации системы часть молекул красителей переходит в возбужденное триплетное состояние. В приповерхностном слое относительно свободно диффундирует молекулярный кислород. На первой стадии происходит тушение молекул в триплетном состоянии возбужденным кислородом. В результате возникают электронно-возбужденные синглетные состояния молекул кислорода, при этом часть из них может вступать в реакцию с молекулами красителей в триплетном состоянии, избежавшими тушения на первой стадии. В результате на второй стадии молекулы красителя переходят из триплетного состояния в первое возбужденное синглетное состояние, поэтому эта стадия сопровождается замедленной флуоресценцией. Важно знать распределение концентрации молекул красителей, так как это будет оказывать существенное влияние на протекание двустадийных реакций в такой наносистеме, и от этого будет зависеть форма импульсного сигнала замедленной флуоресценции.

В данной работе методом молекулярной динамики исследовался характер расположения полиамфолитных полипептидов на поверхности золотой наночастицы, в том числе с молекулами эозина. Выбор полиамфолитных макромолекул был обусловлен возможностью использования макроцепей с упорядоченным расположением заряженных звеньев, которые будут служить центрами адсорбции молекул красителей, находящихся в растворе в ионной форме [10].

Распределение звеньев идеальной макромолекулы на поверхности сферической наночастицы

Радиальное распределение концентрации атомов полипептида, адсорбированного на поверхности сферической наночастицы, аппроксимируется аналитическими зависимостями, полученными для идеальной макромолекулы методами статистической теории макромолекул [9].

Согласно статистической теории распределения плотности звеньев полимерной цепи на поверхностях адсорбентов [11], плотность звеньев макроцепи $n(\mathbf{r})$ определяется функцией $\psi(\mathbf{r})$:

$$n(\mathbf{r}) = \text{const } \psi^2(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Ранее была определена радиальная зависимость концентрации звеньев на поверхности сферической наночастицы с δ -функциональной ямой, моделирующей притяжение звеньев полимерной молекулы к поверхности наночастицы [9]:

$$\begin{cases} \psi_I = A \frac{e^{-qr} (e^{2qr} - e^{2qR})}{2qr}, & R < r < r_0 \\ \psi_{II} = A \frac{e^{-qr} (e^{2qr_0} - e^{2qR})}{2qr} & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (2)$$

где q – решение трансцендентного уравнения, содержащего параметры потенциала поверхности наночастицы и температуру:

$$q = \frac{3\alpha}{a^2 k_B T} (1 - e^{2q(R-r_0)}). \quad (3)$$

где a – размер мономера, α – глубина потенциальной ямы.

Молекулярно-динамическое моделирование

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование было произведено с использованием программного комплекса NAMD 2.12 [12] для следующих молекулярных систем:

1) полипептид на поверхности золотой наночастицы;

2) полипептид с 10 молекулами эозина на поверхности золотой наночастицы.

Было рассмотрено три варианта полипептидов из 100 аминокислотных остатков:

1) полипептид A90R5D5, состоящий из 90 аминокислотных остатков ALA (A, нейтральный) с равномерно распределенными 5 звеньями ASP (D, заряд $-1e$) и 5 звеньями ARG (R, заряд $+1e$) – AAAADAAAAAAAAA AAAAAAAAAAADAADAAAAAAAAA AAAAAAAAAAADAADAAAAAAAAA DAAAAAAAAAADAADAAAAAAAAA AAAARAAAAA;

2) полипептид A80R10D10, состоящий из 80 звеньев ALA с равномерно распределенными 10 звеньями ASP и 10 звеньями ARG – AADAAARAAAADAAARAAAADAAA ARAAADAAARAAAADAAARAAAA

DAAAARAAAADAAAARAAAADAAAAR
AAAADAA-AARAAAADAAAARAA;

3) полипептид A60R20D20, состоящий из 60 звеньев ALA с равномерно распределенными 10 парами (20 звеньев) ASP и 10 парами (20 звеньев) ARG – AADDAAARRAA ADDAAARRAAADDDAAARRAAADDDAAA RRAAADDDAAARRAAADDDAAARRAAADD AAARRAAADDDAAARRAAADDDAAARRAA ADDAAARRA.

Модель золотой наночастицы была получена путем вырезания шара радиусом 4 нм из кристалла золота (гранецентрированная кубическая решетка), аналогичного используемому в [13]. В стартовой конфигурации полипептид располагался на небольшом расстоянии от поверхности золотой наночастицы. Макромолекула была предварительно свернута в неравновесную клубковую структуру – три разных стартовых клубка для каждого полипептида. Молекулы красителей в начальный момент времени размещались около полипептида. Вся молекулярная система была помещена в куб со стороной 24 нм, заполненный водой. Перед началом МД-моделирования производилась геометрическая оптимизация молекулярной системы методом сопряженных градиентов в течение 5000 шагов.

МД-моделирование производилось при постоянной температуре 300 К с шагом по времени 0,001 пс в воде в течение 15 нс. Данного времени было достаточно для получения равновесных конформаций полипептидов. Для контроля получения равновесных конформаций осуществлялось наблюдение за изменением среднеквадратичного расстояния полипептида (RMSD). Как правило, равновесие устанавливалось через 8–12 нс от начала моделирования. Атомы наночастицы фиксировались. Для поддержания температуры использовался термостат Берендсена. Использовалось силовое поле CHARMM22 [14] для полипептидов, модель воды TIP3P [15]. Взаимодействие с золотой наночастицей описывалось потенциалом Леннард-Джонса (потенциал 6–12) [13; 16], разработанным в [17]. Перераспределение зарядов на поверхности наночастицы под воздействием аминокислотных остатков и молекул красителей не учитывалось, атомы наночастицы задавались нейтральными, как и в работах других авторов, например в [13]. Для эозина (заряд $(-2e)$) использовалось силовое поле

CHARMM General Force Field (CGenFF) [18; 19]. Потенциал Ван-дер-Ваальса обрезался на расстоянии 1,2 нм с помощью функции сглаживания между 1,0 и 1,2 нм. Электростатические взаимодействия рассчитываются непосредственно на расстоянии 1,2 нм, для более дальних дистанций использовался метод частица-сетка Эвальда (PME) [20] с шагом сетки 0,11 нм.

По полученным конечным конформациям рассчитывались радиальные распределения концентрации атомов полипептида и красителей на поверхности наночастицы:

$$n(r) = \frac{dN(r, r + dr)}{2\pi r^2 \cdot dr}, \quad (4)$$

где $dN(r, r + dr)$ – количество атомов на расстоянии r от центра наночастицы в слое dr . После этого проводилась аппроксимация полученной радиальной концентрации (4) формулами (1)–(3).

Результаты исследования МД-моделирование полиамфолитных полипептидов на поверхности золотой наночастицы

Было произведено МД-моделирование для каждого полипептида из трех разных стартовых клубков на поверхности золотой наночастицы без молекул красителей. Во всех случаях происходила адсорбция полипептидов. На рис. 1 изображены некоторые результаты МД-моделирования полипептидов A80R10D10, A90R5D5 и A60R20D20 на поверхности золотой наночастицы через 15 нс при температуре 300 К.

Были получены средние радиальные распределения концентрации атомов полипептида с дифференциацией по типам звеньев (рис. 2). Согласно формулам (1)–(3) были построены аппроксимирующие кривые к распределениям средней радиальной концентрации атомов полипептида без различия по типам звеньев. Параметры аппроксимирующей кривой для полипептида A80R10D10 (рис. 2, а): $r_0 = 4,3$ нм, $R = 4$ нм, $a = 0,5$ нм, $q = 1,61$ нм⁻¹, $\alpha = 0,0056$ эВ·нм. Как видно из рис. 2, а, радиальная зависимость концентрации атомов полипептида A80R10D10 хорошо аппроксимируется формулами (1)–(3), а радиальные зависимости концентрации атомов по типам звеньев

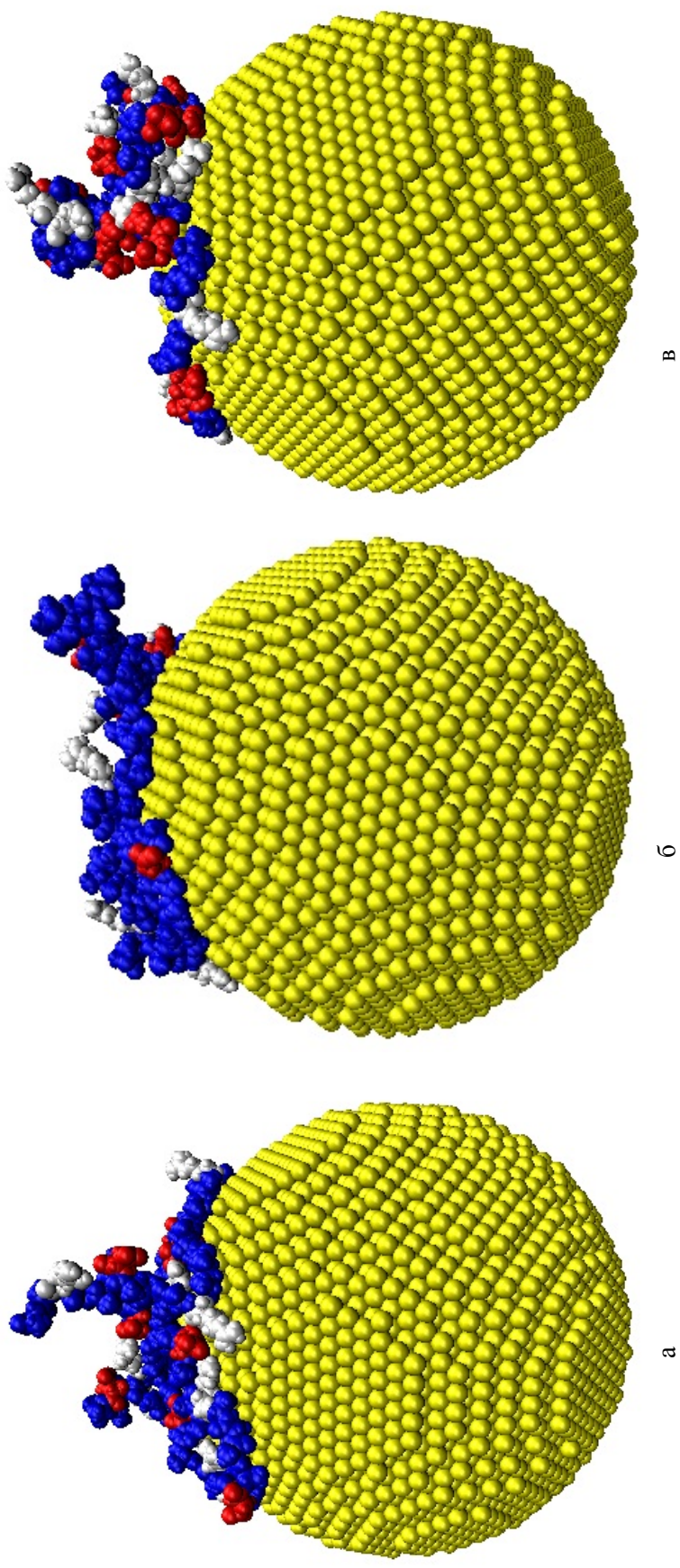


Рис. 1. Макромолекула A80R10D10 (а), A90R5D5 (б) и A60R20D20 (в) на поверхности золотой наночастицы после МД-моделирования (синим цветом изображены звенья ALA, белым – ARG, красным – ASP)

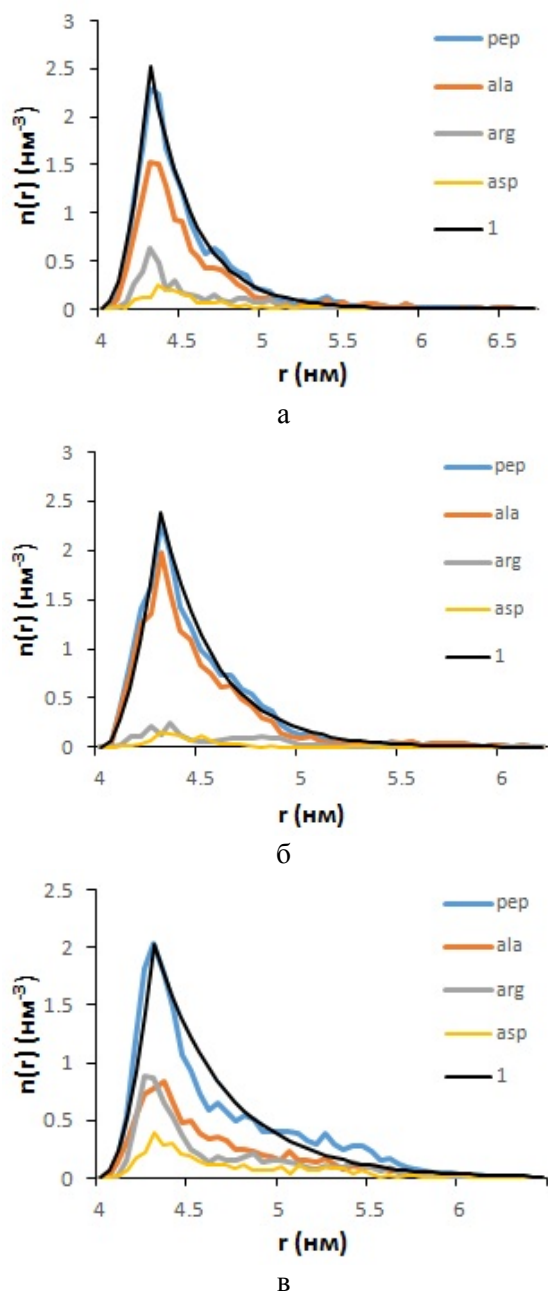


Рис. 2. Средняя радиальная зависимость концентрации атомов полипептида A80R10D10 (а), A90R5D5 (б) и A60R20D20 (в) на поверхности золотой наночастицы с дифференциацией по типам звеньев: pep – средняя радиальная зависимость концентрации атомов по всем атомам полипептида; ala, arg и asp – средние радиальные зависимости концентрации атомов по типам аминокислотных остатков; цифрой 1 обозначена аппроксимирующая кривая, построенная по формулам (1)–(3)

в целом повторяют профиль радиальной концентрации полипептида. При этом пик радиального распределения концентрации атомов аминокислотных остатков ARG вы-

ше, чем для того же количества остатков ASP. Это связано с тем, что остатки ARG состоят из вдвое большего количества атомов, чем остатки ASP (24 атома у ARG и 12 у ASP).

Изображены средние радиальные распределения концентрации атомов полипептида A90R5D5 (рис. 2, б) и A60R20D20 (рис. 2, в) с дифференциацией по типам звеньев. Параметры аппроксимирующей кривой (1)–(3) к распределению средней радиальной концентрации атомов полипептида A90R5D5 без различия по типам звеньев получились равными параметрам, полученным для полипептида A80R10D10: $r_0 = 4,3$ нм, $R = 4$ нм, $a = 0,5$ нм, $q = 1,61$ нм⁻¹, $\alpha = 0,0056$ эВ·нм. Параметры аппроксимирующей кривой (1)–(3) к распределению средней радиальной концентрации атомов полипептида A60R20D20 без различия по типам звеньев: $r_0 = 4,3$ нм, $R = 4$ нм, $a = 0,5$ нм, $q = 1,02$ нм⁻¹, $\alpha = 0,0048$ эВ·нм. Отличия в параметрах полипептида A60R20D20 от A80R10D10 и A90R5D5 связаны с увеличившейся долей заряженных звеньев ARG и ASP в цепи из нейтральных звеньев ALA.

МД-моделирование полиамфолитных полипептидов с молекулами эозина на поверхности золотой наночастицы

Было проведено МД-моделирование полипептидов A60R20D20 и A80R10D10 с 10 молекулами эозина на поверхности золотой наночастицы из трех разных стартовых клубковых конфигураций макроцепи. На рис. 3 изображены результаты некоторых вариантов МД-моделирования полипептидов A60R20D20 и A80R10D10 с молекулами эозина на поверхности золотой наночастицы. Видно, что молекулы эозина адсорбируются на макроцепи преимущественно в местах расположения положительно заряженных звеньев ARG. При МД-моделировании полипептида A60R20D20 почти все молекулы эозина оставались адсорбированными на макроцепи (рис. 3, а), а при расчетах с A80R10D10 часть красителей десорбировалась с макромолекулы (рис. 3, б). Это связано с тем, что у A60R20D20 положительные звенья ARG, являющиеся центрами адсорбции, расположены попарно, а у A80R10D10 они расположены по отдель-

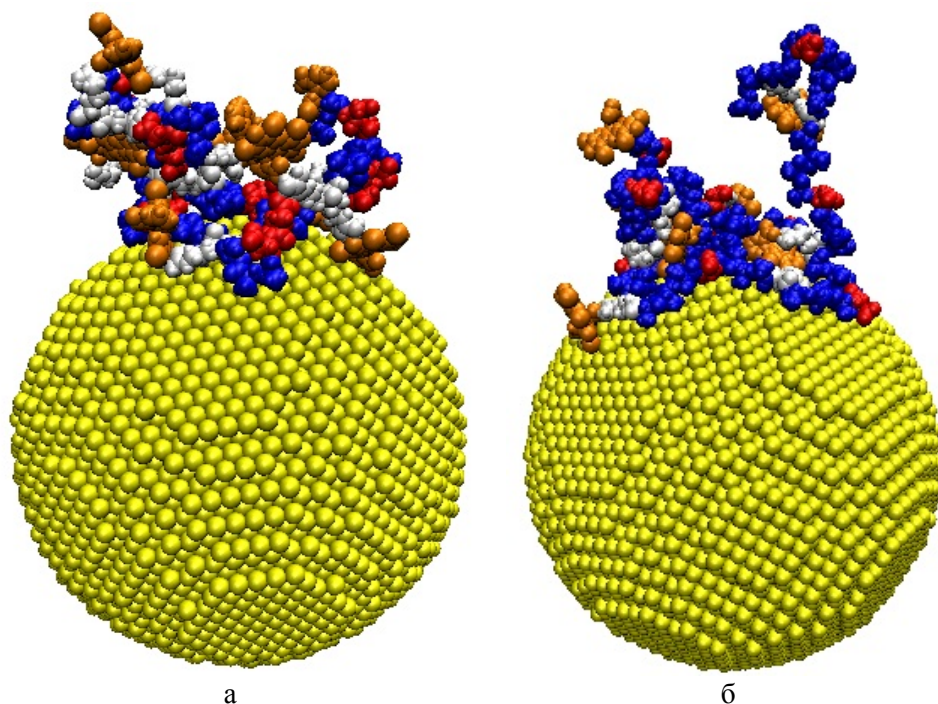


Рис. 3. Полипептиды A60R20D20 (а) и A80R10D10 (б) с адсорбированными молекулами эозина (выделены оранжевым цветом) на поверхности золотой наночастицы после МД-моделирования (синий цветом изображены звенья ALA, белым – ARG, красным – ASP)

сти и их в два раза меньше. Из рис. 3 также видно, что наличие отрицательно заряженных молекул эозина ($-2e$) оказывает существенное влияние на конформационную структуру полипептида. Из-за привнесенного отрицательного заряда наблюдается разбухание полипептида на поверхности наночастицы и выбрасывание петель макроцепи в раствор.

Были получены средние радиальные распределения концентрации атомов полипептида с дифференциацией по типам звеньев, а также радиальные распределения концентрации атомов молекул эозина (рис. 4). Параметры аппроксимирующей кривой (1)–(3) к распределению средней радиальной концентрации атомов полипептида A60R20D20 без различия по типам звеньев: $r_0 = 4,35$ нм, $R = 4$ нм, $a = 0,5$ нм, $q = 0,7$ нм $^{-1}$, $\alpha = 0,0039$ эВ·нм, а к распределению средней радиальной концентрации атомов адсорбированных молекул эозина: $r_0 = 4,35$ нм, $R = 4$ нм, $a = 0,5$ нм, $q = 0,46$ нм $^{-1}$, $\alpha = 0,0036$ эВ·нм (рис. 4, а). Профиль радиальной зависимости концентрации атомов молекул эозина сходен с профилем ради-

альной концентрации атомов полипептида (см. рис 4, а). Для случаев МД-моделирования полипептида A60R20D20 из других стартовых клубковых конфигураций с молекулами эозина на поверхности золотой наночастицы наблюдается аналогичный характер конформационной структуры макромолекулы и расположения молекул эозина. Если сравнить профили распределений средней радиальной концентрации атомов для случая МД-моделирования полипептида с молекулами эозина (см. рис. 4, а) и без них (см. рис. 2, в), то можно отметить, что значение максимума радиальной концентрации атомов полипептида с молекулами красителей уменьшилось, а ширина профиля распределения увеличилась, что отражают параметры аппроксимирующих кривых.

Параметры аппроксимирующей кривой (1)–(3) к распределению радиальной концентрации атомов полипептида A80R10D10 без различия по типам звеньев: $r_0 = 4,3$ нм, $R = 4$ нм, $a = 0,5$ нм, $q = 0,94$ нм $^{-1}$, $\alpha = 0,0047$ эВ·нм (рис. 4, б).

При МД-моделировании с A80R10D10 часть красителей десорбировалась с поли-

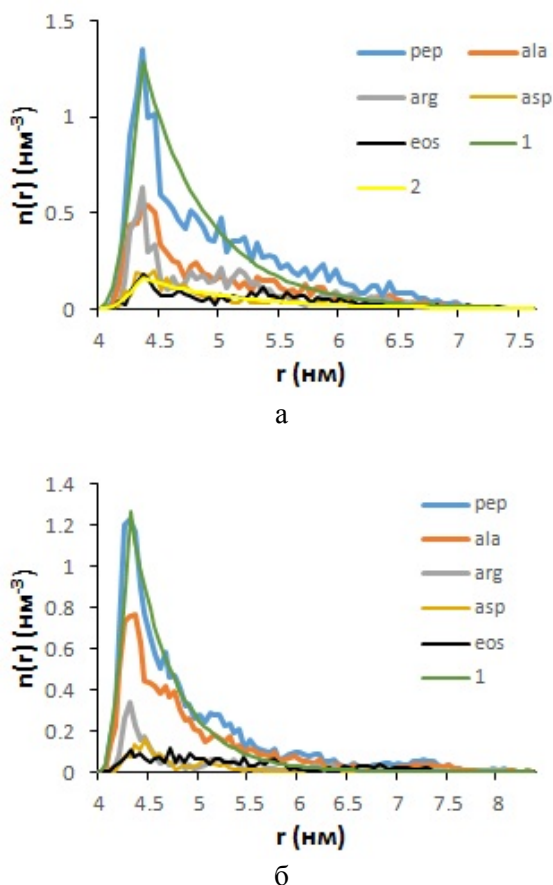


Рис. 4. Средняя радиальная зависимость концентрации атомов полипептида A60R20D20 (а) и A80R10D10 (б) с дифференциацией по типам звеньев и молекул эозина на поверхности золотой наночастицы после МД-моделирования: pep – средняя радиальная зависимость концентрации атомов по всем атомам полипептида; ala, arg и asp – средние радиальные зависимости концентрации атомов по типам аминокислотных остатков; eos – средняя радиальная зависимость концентрации атомов адсорбированных молекул эозина; цифрами 1 и 2 обозначены аппроксимирующие кривые

пептида, поэтому аппроксимирующая кривая к распределению радиальной концентрации атомов молекул эозина не строилась. При сравнении параметров аппроксимирующих кривых к распределениям радиальных концентраций атомов полипептидов A80R10D10 с молекулами эозина (рис. 4, б) и без них (см. рис. 2, а), видно, что они значительно отличаются, а ширина профиля радиального распределения концентрации атомов полипептида при МД-моделировании с красителями увеличилась.

Заключение

Методом молекулярной динамики была исследована конформационная структура полиамфолитных полипептидов (в том числе с молекулами эозина) на поверхности золотой наночастицы. Построены радиальные распределения концентрации атомов полипептидов с дифференциацией по типам звеньев, а также адсорбированных молекул эозина.

Из результатов МД-моделирования полиамфолитных полипептидов на поверхности золотой наночастицы видно, что распределения средней концентрации атомов полипептида могут аппроксимироваться формулами (1)–(3), полученными методами статистической теории макромолекул. Распределения средней концентрации атомов по отдельным звеньям в целом схожи с концентрацией звеньев всей макроцепи. Различия в значениях концентрации атомов по типам звеньев обусловлены как разным количеством звеньев в макроцепи (ALA по сравнению с ASP и ARG), так и количеством атомов в разных аминокислотных остатках.

При МД-моделировании полиамфолитных полипептидов с молекулами эозина на поверхности золотой наночастицы молекулы красителей (анионы) преимущественно адсорбировались на положительно заряженных звеньях макромолекулы (ARG). Профиль радиального распределения концентрации атомов эозина, адсорбированных на макроцепи, был сходен с профилем радиального распределения концентрации атомов полипептида с попарным распределением заряженных звеньев (A60R20D20). Параметры аппроксимирующих кривых (1)–(3) к радиальному распределению концентрации атомов полипептида A60R20D20 в случаях МД-моделирования с молекулами красителей и без них почти не изменились, однако при расчетах с красителями ширина профиля радиального распределения увеличилась. При МД-моделировании полипептида (A80R10D10) с более низкой линейной концентрацией заряженных звеньев часть молекул эозина десорбировалась с макроцепи, а характер адсорбции и параметры аппроксимирующих кривых (1)–(3) значительно изменились.

Таким образом, проведенное МД-моделирование показывает, что возможно ис-

пользование полиамфолитных полипептидов для создания наносистем с заданным характером расположения молекул красителей, что может найти применение при создании люминесцентно-оптического измерителя концентрации молекулярного (в том числе синглетного) кислорода.

Список литературы

1. Yan X., Blacklock J., Li J., Möhwald H. One-pot synthesis of polypeptide-gold nanoconjugates for in vitro gene transfection // *ACS Nano*. 2012. Vol. 6. Is. 1. P. 111–117.
2. Stewart M. H., Huston A. L., Scott A. M., Oh E., Algar W. R., Deschamps J. R., Susumu K., Jain V., Prasuhn D. E., Blanco-Cano J., Dawson P. E., Medintz I. L. Competition between Förster Resonance Energy Transfer and Electron Transfer in Stoichiometrically Assembled Semiconductor Quantum Dot-Fullerene Conjugates // *ACS Nano*. 2013. Vol. 7. Is. 10. P. 9489–9505.
3. Yang Y., Burkhard P. Encapsulation of gold nanoparticles into self-assembling protein nanoparticles // *Journal of Nanobiotechnology*. 2012. Vol. 10:42.
4. Wang X., Wang C., Cheng L., Lee S., Liu Z. Noble metal coated single-walled carbon nanotubes for applications in surface enhanced Raman scattering imaging and photothermal therapy // *J Am Chem Soc*. 2012. Vol. 134. Is. 17. P. 7414–7422.
5. Chen Y., Cruz-Chu E. R., Woodard J., Gartia M. R., Schulten K., Liu L. Electrically induced conformational change of peptides on metallic nano-surfaces // *ACS Nano*. 2012. Vol. 6. Is. 10. P. 8847–8856.
6. Кучеренко М. Г., Русинов А. П., Чмерева Т. М., Игнатъев А. А., Кислов Д. А., Кручинин Н. Ю. Кинетика фотореакций в регулярной пористой наноструктуре с цилиндрическими ячейками, заполненными активаторсодержащими макромолекулами // *Оптика и спектроскопия*. 2009. Т. 107, № 3. С. 510–516.
7. Кучеренко М. Г., Чмерева Т. М., Измоденова С. В., Кручинин Н. Ю. Влияние структуры полимерной цепи в кислородсодержащих нанополостях пористых сред на кинетику аннигиляционной замедленной флуоресценции красителей // *Фотоника молекулярных наноструктур: Материалы Междунар. конф. Оренбург, 2009*. С. 26–28.
8. Kucherenko M. G., Izmodenova S. V., Kruchinin N. Yu., Chmerева T. M. Change in the Kinetics of Delayed Annihilation Fluorescence During Rearrangement of Polymer-Chain Structure in a Nanocavity of a Solid Adsorbent // *High Energy Chemistry*. 2009. Vol. 43. № 7. P. 592–598.
9. Кучеренко М. Г., Измоденова С. В., Чмерева Т. М., Кручинин Н. Ю., Подрезова Н. С. Кинетика диффузионно контролируемых фотореакций в приповерхностном слое фуллерен-тубуленовой наночастицы с адсорбированной полимерной цепью // *Вестн. ОГУ*. 2013. № 9. С. 100–109.
10. Кручинин Н. Ю., Кучеренко М. Г. Молекулярно-динамическое моделирование адсорбции полипептидов с фотоактивными молекулами поверхностью углеродной нанотрубки // *Химическая физика и мезоскопия*. 2016. Т. 18, № 2. С. 225–238.
11. Гросберг А. Ю., Хохлов А. П. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. 344 с.
12. Phillips J. C., Braun R., Wang W., Gumbart J., Tajkhorshid E., Villa E., Chipot C., Skeel R. D., Kale L., Schulten K. Scalable molecular dynamics with NAMD // *Journal of Computational Chemistry*. 2005. Vol. 26. Is. 16. P. 1781–1802.
13. Mhashal A. R., Roy S. Effect of Gold Nanoparticle on Structure and Fluidity of Lipid Membrane // *PLoS One*. 2014. Vol. 9 Is. 12: e114152.
14. MacKerell A. D. Jr., Bashford D., Bellott M., Dunbrack R. L., Evanseck J. D., Field M. J., Fischer S., Gao J., Guo H., Ha S., Joseph-McCarthy D., Kuchnir L., Kuczera K., Lau F. T., Mattos C., Michnick S., Ngo T., Nguyen D. T., Prodhom B., Reiher W. E., Roux B., Schlenkrich M., Smith J. C., Stote R., Straub J., Watanabe M., Wiorkiewicz-Kuczera J., Yin D., Karplus M. All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins // *Journal of Physical Chemistry B*. 1998. Vol. 102. Is. 18. P. 3586–3616.
15. Jorgensen W. L., Chandrasekhar J., Madura J. D., Impey R. W., Klein M. L. Comparison of simple potential functions for simulating liquid water // *J. Chem. Phys.* 1983. Vol. 79. Is. 2. P. 926–935.
16. Shao Q., Hall C. K. Binding Preferences of Amino Acids for Gold Nanoparticles: A Molecular Simulation Study // *Langmuir*. 2016. Vol. 32 Is. 31. P. 7888–7896.

17. Heinz H., Vaia R. A., Farmer B. L., Naik R. R. Accurate Simulation of Surfaces and Interfaces of Face-Centered Cubic Metals Using 12–6 and 9–6 Lennard-Jones Potentials // *J. Phys. Chem. C*. 2008. Vol. 112. Is. 44. P. 17281–17290.

18. Vanommeslaeghe K., Hatcher E., Acharya C., Kundu S., Zhong S., Shim J., Darian E., Guvench O., Lopes P., Vorobyov I., MacKerell A. D. Jr. CHARMM General Force Field: A Force field for Drug-Like Molecules Compatible with the CHARMM All-Atom Additive Biological Force Field // *J. Comput. Chem.* 2010. Vol. 31. Is. 4. P. 671–690.

19. Yu W., He X., Vanommeslaeghe K., MacKerell A. D. Jr. Extension of the CHARMM General Force Field to Sulfonyl-Containing Compounds and Its Utility in Biomolecular Simulations // *J. Comput. Chem.* 2012. Vol. 33. Is. 31. P. 2451–2468.

20. Darden T., York D., Pedersen L. Particle mesh ewald: An $n \log(n)$ method for ewald sums in large systems // *J. Chem. Phys.* 1993. Vol. 98. Is. 12. P. 10089–10092.

Материал поступил в редколлегию 01.03.2018

N. Yu. Kruchinin, M. G. Kucherenko

*Laser and Information Center of Biophysics
Orenburg State University
13 Pobedy Ave, Orenburg, 460018, Russian Federation*

kruchinin_56@mail.ru, rphys@mail.osu.ru

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF CONFORMATIONAL STRUCTURES POLYAMPHOLYTES ON THE SURFACE OF GOLD NANOPARTICLE

Using molecular dynamics we studied the nature of the location polyampholytes on the surface of spherical gold nanoparticles, including adsorbed on the macrochain molecules of eosin. As a result of the molecular dynamics simulation, equilibrium conformational structures of polyampholyte polypeptides adsorbed on the surface of a spherical gold nanoparticle were obtained. A description is given of the radial distribution of the density of the links of a macromolecule adsorbed on the surface of a spherical nanoparticle on the basis of a special mathematical model of the conformational structure of a polymer created using the statistical theory of macromolecules. The dependences of the average radial concentration of atoms of polyampholyte polypeptides with differentiation by the types of links, as well as the eosin molecules adsorbed on the macrochain on a gold nanoparticle, are constructed. Approximating curves calculated on the basis of the statistical theory of macromolecules are given. The obtained results can be used to create nanosystems with a specified character of the arrangement of dye molecules, which can be used to create a luminescence-optical sensor of the concentration of molecular (including singlet) oxygen.

Keywords: molecular dynamics, polyampholytes, gold nanoparticle, organic dyes, polypeptides.

For citation:

Kruchinin N. Yu., Kucherenko M. G. Molecular Dynamics Simulation of Conformational Structures Polyampholytes on the Surface of Gold Nanoparticle. *Siberian Journal of Physics*, 2018, vol. 13, no. 2, p. 86–94. (In Russ.)

DOI 10.25205/2541-9447-2018-13-2-86-94