

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Внутренняя колебательная энергия в полиатомных молекулах, содержащих цепи тождественных биатомных диполейВ. В. Комаров^{1,a}, А. М. Попова^{1,a}, Л. Шмидт^{2,b}, Х. Юнгклас^{2,b}¹ Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына (НИИЯФ МГУ). Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.² Филиппс-университет, химический факультет. D-06421, Марбург, Германия.
E-mail: ^apopovakomarov@mail.ru, ^bjungclas.staff@uni-marburg.de

Статья поступила 08.09.2010, подписана в печать 24.01.2011

Анализируются закономерности квантовых процессов возбуждения и транспорта колебательной энергии, возникающих под действием ИК излучения в полиатомных органических молекулах, содержащих подструктуры, состоящие из конечного числа тождественных биатомных связей, служащих антеннами для ИК излучения. Предлагается использовать результат этого анализа для разработки метода определения последовательности аминокислотных остатков в олигопептидах.

Ключевые слова: полиатомные молекулы, ИК излучение, молекулярная колебательная энергия.

УДК: 539.19+539.2. PACS: 34.10.+x, 36.40.-c.

В последнее время получили развитие исследования процессов, протекающих под действием интенсивного ИК излучения в полиатомных органических, в том числе биологических, молекулах [1–3]. Интерес к таким проблемам объясняется тем, что изучаемые объекты имеют характерные свойства, присущие как отдельным молекулам, так и сплошным средам. Поэтому знание вероятностей квантовых процессов, протекающих под действием ИК излучений в указанных системах, расширяет возможность их использования при разработке новых методов в прикладной химии и биомедицине, а также в нанотехнологии.

В настоящей работе анализируются закономерности квантовых процессов, которые возникают в полиатомных органических молекулах определенного вида под действием субфемтосекундного интенсивного ИК излучения. Предлагается использовать результат этого анализа для разработки метода определения последовательности аминокислотных остатков в олигопептидах, что является одной из важнейших задач современной биохимии. Предполагается, что рассматриваемые молекулы содержат подструктуры, состоящие из конечного числа тождественных биатомных связей, имеющих дипольный момент и расположенных на равных расстояниях $a \leq 2 \text{ \AA}$. Такими подструктурами могут быть, например, молекулярные цепи $(C_n H_{2n})$, $(C_n F_{2n})$, где $n > 2$, и др. Ранее нами было показано, что эти цепи в полиатомных молекулах играют роль ИК антенн, улавливающих и накапливающих ИК излучение [4]. Диполи этих антенн рассматриваются нами как двухуровневые осцилляторы. Значительный ангармонизм колебательных возбуждений основного электронного состояния двухатомных связей в ИК антенне оправдывает приближение двух уровней при рассмотрении коллективных колебательных процессов в системе тождественных связей-диполей. В основе теоретического анализа поглощения и накопления колебательной энергии в ИК антенне лежит квантовая теория взаимо-

действия ИК излучения с электрическим диполем [5], обобщенная нами на случай резонансного поглощения фотонов системой электрических диполей ИК антенны.

Подобно электронным коллективным состояниям (экситонам), в ИК антеннах вследствие диполь-дипольного взаимодействия между двумя соседними тождественными биатомными связями-диполями происходит передача колебательного возбуждения. Такой процесс приводит к возникновению в ИК антенне полосы коллективных колебательных состояний, нижнее из которых (эксимоль) является изолированным в конечной системе диполей и имеет энергию E_{ex} меньшую, чем возбужденный уровень того же диполя вне антенны [4]. Энергия эксимоля $E_{ex} = h\omega_{ex}$ может быть определена из соотношения

$$E_{ex} = E_{01} - E_{tr}, \quad (1)$$

где $E_{01} = h\omega_{01}$ есть энергия возбужденного колебательного состояния двухуровневого изолированного диполя, E_{tr} — сумма матричных элементов взаимодействия V_{ij} рассматриваемого диполя (i) антенны с диполем (j), находящимся от него на расстоянии a [6]. Величина E_{tr} определяет максимальный красный сдвиг уровней в полосе коллективных колебательных состояний. Анализ, проведенный в работе [7], показал, что энергия эксимоля в антеннах $(C_n H_{2n})$ и $(C_n F_{2n})$ равна соответственно 0.07 эВ и 0.12 эВ. В этой же работе было рассчитано время жизни эксимоля в антенне $(C_n H_{2n})$ $\tau_{ex} = 10^{-11}$ с.

Вследствие существенного диполь-дипольного взаимодействия между тождественными двухатомными связями в антенне происходит передача коллективного колебательного возбуждения — эксимоля по цепи диполей антенны. При этом эксимолы не накапливаются в одном из диполей антенны. Эксимоль перемещается по $(C_n H_{2n})$ антенне за время $\tau_{tr} \approx 10^{-14}$ с. Все возбужденные эксимолы остаются в антенне в течение своего времени жизни.

Перемещение колебательного возбуждения по антенне определяет свойство делокализации эксимолей и объясняет квантовый процесс накопления колебательных возбуждений в ИК антеннах, т.е. локальный нагрев этих антенн при облучении молекул ИК фотонами с резонансной частотой $\omega_R = \omega_{ex}$ в течение времени $\tau_R \leq \tau_{ex}$. Если время τ_{tr} меньше времени облучения τ_R , то каждый диполь антенны может быть источником возбуждения эксимолей $N = \tau_R/\tau_{tr}$ раз. Таким образом, эффективное число диполей, принимающих участие в поглощении резонансных фотонов с энергией E_{ex} , равно $M_{eff} = NM_A$, если M_A — реальное число диполей в антенне.

За время облучения τ_R в антенне может возбудиться с максимальной вероятностью K эксимолей, где целое число K определяется из уравнения $K = M_A \cdot N \cdot P_{ex}$ [8]. Здесь P_{ex} — вероятность возбуждения одного эксимоля в диполе ИК антенны под действием потока ИК фотонов с интенсивностью F в течение времени τ_R . Функция P_{ex} может быть определена на основе квантовой электродинамики в виде

$$P_{ex} = (8\pi^2 e^2 / 3hc E_{ex}) D_0^2 \mathfrak{M}^2 F \tau_R. \quad (2)$$

Здесь D_0 — безразмерный параметр, равный значению дипольного момента двухатомной связи ИК антенны, \mathfrak{M} — матричный элемент дипольного перехода при возбуждении эксимоля в двухатомной связи антенны. На основе уравнения (2) можно определить критическое значение F_{cr} , при котором вероятность $P_{ex} = 1$.

Значение F_{cr} при фиксированном τ_R и известных параметрах, характеризующих ИК антенну, определяется из уравнения

$$F_{cr} = [(8\pi^2 e^2 / 3hc E_{ex}) D_0^2 \mathfrak{M}^2 \tau_R]^{-1}. \quad (3)$$

Таблица 1

τ_R , с	10^{-12}	10^{-13}	10^{-14}	10^{-15}
F_n , Дж/см ² ·с	$4.2 \cdot 10^{10}$	$4.2 \cdot 10^{11}$	$4.2 \cdot 10^{12}$	$4.2 \cdot 10^{13}$

В табл. 1 приведены значения F_{cr} , рассчитанные для антенны $C_n H_{2n}$ при нескольких значениях τ_R . Заметим, что величина P_{ex} линейно зависит от двух переменных F_{cr} и τ_R , поэтому удобно рассматривать P_{ex} как функцию плотности потока энергии $\Phi = F_{cr} \tau_R$. Тогда критическое значение Φ_{cr} , при котором вероятность $P_{ex} = 1$, определяется выражением

$$\Phi_{cr} = [(8\pi^2 e^2 / 3hc E_{ex}) D_0^2 \mathfrak{M}^2]^{-1}. \quad (4)$$

Из (4) следует, что Φ_{cr} является постоянной, не зависящей от τ_R величиной для рассматриваемой молекулярной антенны и определяется только структурными и физическими свойствами этой антенны. Для антенны $C_n H_{2n}$, в частности, $\Phi_{cr} = 0.042$ Дж/см².

Отсюда колебательная энергия $E(K, F)$, локализованная в антенне, равная сумме энергий K эксимолей, возбужденных в антенне под действием потока ИК фотонов с интенсивностью F в течение времени τ_R , определяется выражением

$$E(K, F) = \{8\pi^2 e^2 / 3hc\} M_{eff} D_0^2 \mathfrak{M}^2 F \tau_R. \quad (5)$$

Из уравнения (5) следует, что при фиксированных значениях τ_R и эффективном числе диполей в антенне M_{eff}

величина колебательной энергии, накопленной в антенне, линейно растет с ростом величины интенсивности F потока ИК излучения. Такая зависимость вероятности квантового процесса возбуждения и накопления эксимолей от плотности потока ИК излучения была обнаружена экспериментально при исследовании молекул, содержащих несколько тождественных биатомных связей [9–12].

Заметим, что процессы в полиатомных органических молекулах, возникающие под действием ИК излучения с интенсивностью $F \gg F_{cr}$, когда открываются каналы многофотонного электронного возбуждения, в настоящей работе не рассматриваются.

Другим важным квантовым процессом в полиатомных молекулах, содержащих ИК антенны, является субфемтосекундная безызлучательная релаксация накопленной энергии эксимолей. Этим процессом может быть передача энергии эксимолей из антенны в диполи-ловушки в результате диполь-дипольного взаимодействия. Такими ловушками являются имеющие дипольный момент валентные связи между двумя группами атомов внутри молекулы [8].

Диполь-дипольный переход накопленной в антенне энергии в ловушку может привести к ее диссоциации, если $E(K, F) \geq E_d(B)$, где $E_d(B)$ — энергия связи ловушки B .

Это условие определяет пороговую интенсивность потока фотонов F_{thr} , при которой открывается канал диссоциации диполя-ловушки:

$$F_{thr} = E_d(B) \{ [8\pi^2 e^2 / 3hc] M_A (\tau_R^2 / \tau_{tr}) D_0^2 \mathfrak{M}^2 \}^{-1}. \quad (6)$$

Вероятность P_f фрагментации молекулы в результате диссоциации ловушки B отлична от нуля при $F \geq F_{thr}$ и имеет вид

$$P_f = P_{ex} \cdot P_M^K \cdot P, \quad (7)$$

где

$$P_M^K = [2\pi M P_{ex} (1 - P_{ex})]^{-1/2} \times \exp\{ -(K - M P_{ex})^2 [2M P_{ex} (1 - P_{ex})]^{-1} \} \quad (8)$$

и

$$P = [0.37 \cdot 2\pi^{-2} / h E_q] K^2 (2e^2 D_0 D_B \mathfrak{M})^2 q^3 \alpha_B^5 \times \exp(-q^2 \alpha_B^2) [\Theta_{iB}^2(\vartheta_i \vartheta_B)] \cdot L_{iB}^{-6}. \quad (9)$$

Здесь L_{iB} определяет расстояние между диполем связи-ловушки и диполем (i) антенны. Функция $\Theta_{iB}(\vartheta_i \vartheta_B)$ определяет относительное положение этих диполей в пространстве. В уравнении (9) $q = p/h$, где p — импульс относительного движения двух фрагментов диссоциации связи-ловушки, $E_q = q^2 h^2 / 2\mu_B$, где μ_B — относительная масса ловушки, $\alpha_B = (h/2\mu_B \omega_B)^{1/2}$, где ω_B — собственная частота связи-ловушки, рассматриваемой как осциллятор. Анализ уравнения (9) показывает, что функция P имеет максимум при выполнении условий $E_q = h\omega_B$ и $q = 1/\alpha_B$ и, следовательно, при

$$E(K, F)_{max} = E_d + h\omega_B, \quad (10)$$

где $h\omega_B$ есть энергия первого колебательного состояния связи-ловушки. Условие (10) определяет количество

Таблица 2

Аминокислота (<i>j</i>)	<i>m/z</i> фрагм. NH ₃ ⁺ -C ₁ HR _{1j}	<i>F</i> , Дж/см ² ·с, ×10 ¹⁰	±Δ <i>F</i> , Дж/см ² ·с, ×10 ¹⁰
Аланин (А)	45	3.0	0.14
Валин (V)	73	2.3	0.09
Лейцин (L)	87	1.4	0.05
Глицин (G)	31	3.5	0.14
Изолейцин (I)	87	1.4	0.056
Метионин (M)	105	1.75	0.07
Серин (S)	61	3.5	0.14
Тиреонин (T)	75	2.3	0.09
Цистеин (C)	77	3.5	0.14
Фенилаланин (F)	121	3.5	0.14
Тирозин (Y)	137	3.5	0.14
Триптофан (W)	159	3.5	0.14
Аспарагиновая кислота (D)	89	3.5	0.14
Глутаминовая кислота (E)	103	1.75	0.07
Аспарагин (N)	98	3.5	0.14
Пролин (P)	72	1.16	0.016
Гистидин (H)	111	3.5	0.14
Лизин (K)	102	0.875	0.035
Аргинин (R)	131	1.16	0.076

эксимолей $K_{\max} = E(K, F)_{\max}/E_{\text{ex}}$, при возбуждении которых вероятность распада ловушки максимальная. Соответствующая интенсивность потока ИК фотонов определяется соотношением

$$F_{\max} = (E_d + h\omega_B) \cdot [(8\pi^2 e^2 / 3hc) M_A (\tau_R^2 / \tau_{\text{tr}}) D_0^2 \mathfrak{M}^2]^{-1} = F_{\text{thr}} + \Delta F. \quad (11)$$

Заметим, что уравнения (6) и (11) совместно определяют положение максимума функции P_f в зависимости от интенсивности F при фиксированном $\tau_R < \tau_{\text{ex}}$. Величина

$$\Delta F = h\omega_B \cdot [(8\pi^2 e^2 / 3hc) M_A (\tau_R^2 / \tau_{\text{tr}}) D_0^2 \mathfrak{M}^2]^{-1}$$

определяет полуширину максимума функции вероятности P_f в точке $F = F_{\max}$. Если в полиатомной органической молекуле имеются две связи ловушки B_1 и B_2 , причем $E_d(B_1) < E_d(B_2)$, то вероятность диссоциации P_f как функции F будет иметь два максимума в точках $F_{\max}(B_1)$ и $F_{\max}(B_2)$. Эти максимумы разделяются, если

$$[F_{\max}(B_1) - F_{\max}(B_2)] < [\Delta F(B_1) + \Delta F(B_2)].$$

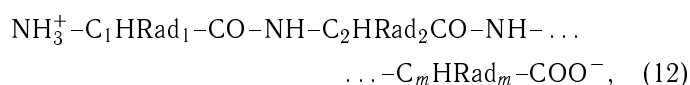
Полученный результат показывает, что управлением интенсивностью ИК излучения при фиксированном τ_R можно проводить селективную диссоциацию полиатомных молекул содержащих ИК антенны. Кроме того, из уравнения (9) видно, что функция вероятности диссоциации ловушки зависит от L_{iB}^{-6} . Отсюда следует, что функция P принимает максимальное значение, когда переход энергии в связь-ловушку происходит из наиболее близкого к ней ($i = 1$) диполя антенны, т.е. при $L_{iB} = L_{1B}$. Эта зависимость существенно огра-

ничивает возможность диссоциации различных связей в рассматриваемых молекулах. С заметной вероятностью должны диссоциировать те связи ловушки, для которых $L_{1B} < 2 \text{ \AA}$. Важную роль, определяющую значение вероятности диссоциации, играет угловая функция $\Theta_{1B}(\vartheta_1, \vartheta_B)$, меняющаяся от нуля в случае перпендикулярности упомянутых выше диполей до единицы в случае их параллельности.

Рассмотренные выше закономерности квантовых резонансных процессов, протекающих в полиатомных органических молекулах при захвате ими ИК фотонов, могут быть применены при разработке физических методов анализа структуры и свойств этих молекул.

В настоящей работе предлагается метод определения последовательности аминокислотных остатков в олигопептидах на основе анализа спектров фрагментов их диссоциации в потоке ИК фотонов заданной интенсивности. В основе этого метода лежат изученные нами выше свойства вероятности транспорта колебательной энергии эксимолей, накопленной в антенне, в диполи-ловушки рассматриваемой молекулы. Использована зависимость вероятности фрагментации полиатомных молекул в поле ИК излучения от структурных и кулоновских свойств этих молекул.

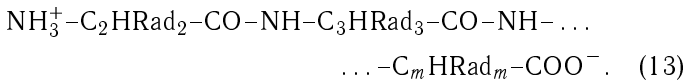
Как известно, общая формула, определяющая структуру олигопептидов, содержащих (m) аминокислотных остатков, соединенных пептидной связью, имеет вид:



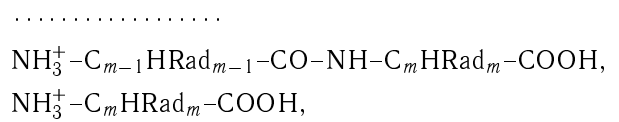
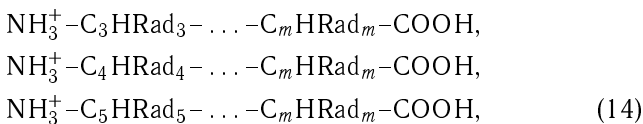
где символом R_i обозначены аминокислотные остатки, отсчитанные от N-конца. Как следует из общего

вида аминокислот, каждый остаток R_i содержит ИК антенну типа $C_n H_{2n}$, в которой могут накапливаться эксимолы под действием ИК излучения с частотой $\omega_R = \omega_{ex} = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$.

При анализе кулоновских свойств скелетной пептидной связи в олигопептидах было показано, что дипольные моменты валентных связей C_i-C и C_i-N ($i = 2, \dots, m-1$), наиболее близко расположенных к СН-диполям ИК антенны аминокислотного остатка R_i , оказываются почти перпендикулярны к этим СН-диполям [13]. Отсюда следует, что вероятность перехода энергии эксимолей, накопленной в антеннах аминокислотных остатков R_i ($i = 2, \dots, m-1$), в диполи пептидной связи C_i-C и C_i-N пренебрежимо мала и, следовательно, их диссоциация маловероятна. Исключение составляет связь C_1-C , дипольный момент которой почти параллелен диполям антенны в R_1 . Таким образом, следует ожидать, что энергия эксимолей, накопленная в ИК антенне аминокислотного остатка R_1 , может перейти в связь C_1-C , что приведет к ее диссоциации при условии, что $E(K, F) \geq E_d(B)$, и максимума вероятности этого перехода следует ожидать при $F = F_{max}$. При этом в спектре фрагментов диссоциации олигопептидов должен присутствовать пик, соответствующий фрагменту $NH_3^+-C_1HR_1$, значения m/z которого для разных аминокислот приведены в табл. 2. В этой же таблице приведены рассчитанные по формуле (10) значения интенсивностей ИК излучения, при которых происходит разрыв связей C_1-C с максимальной вероятностью. Расчет был проведен для случая $\tau_R = 10^{-12} \text{ с}$ и с учетом числа реальных диполей в ИК антенне каждого аминокислотного остатка. Полученные оценки F_{max} показывают, что эксперимент в предлагаемом методе следует проводить в следующем диапазоне интенсивностей ИК излучения: $(0.8 \cdot 10^{-10} - 4 \cdot 10^{-10}) \text{ Дж/см}^2 \cdot \text{с}$ при $\tau_R = 10^{-12} \text{ с}$. Как видно из табл. 2, все возможные виды фрагмента $NH_3^+-C_1HR_1$ имеют несовпадающие значения параметра m/z . Это позволяет на основе анализа масс-спектра селективной диссоциации исследуемого олигопептида определить, какой именно аминокислотный остаток расположен на его N -конце. Из исследуемого олигопептида (12), разрывая с помощью УФ излучения ближайшую к его N -концу пептидную связь $CO-NH$, можно получить молекулу усеченного олигопептида [14]:



Так как молекулярная масса исходного олигопептида (12) известна и масса аминокислотного остатка R_1 определена, то масса олигопептида (13) также известна. Создавая образец из олигопептида (13) с помощью масс-разделительной установки и исследуя масс-спектр фрагментов его диссоциации под действием ИК излучения, можно установить вид аминокислотного остатка R_2 . Последовательно проводя аналогичные исследования усеченных олигопептидов



можно определить вид первого аминокислотного остатка в каждом из них и, следовательно, установить последовательность R_i ($i = 1, \dots, m$) в первичном исследуемом олигопептиде. Заметим, что ключевым этапом в последовательности действий предлагаемого метода определения структуры олигопептидов является экспериментальное установление вида первого аминокислотного остатка со стороны N -конца в олигопептидах (12)-(14). Для этого, например, может быть использована установка, использованная в работе [8], в которой процесс диссоциации полиатомных молекул с ИК антеннами происходит под действием периодического кулоновского поля, возникающего при их скольжении на атомном расстоянии вдоль органической пленки. Эффективность определения первого аминокислотного остатка в этом экспериментальном методе можно проверить на примере исследования олигопептидов известной структуры: YGGFL, YGGFK и YGGFLR (используемые обозначения олигопептидов приведены в табл. 2). В этих олигопептидах первый аминокислотный остаток со стороны N -конца — это аминокислотный остаток тирозина. Указанные олигопептиды могут диссоциировать в периодическом кулоновском поле, возникающем при их скольжении на атомных расстояниях от системы тождественных экранированных атомов, введенных в состав органической пленки на поверхности. Интенсивность F_{coul} указанного поля с частотой ω_{ex} , возникающего при относительном скольжении со скоростью v_{gr} , может быть получена из уравнения

$$F_{coul} = (Z^2 e^2 c \omega_{ex} / 2 v_{gr} b^3) \left\{ -2R_z [(a_{eff}^{-1})^2 + (\omega_{ex} / v_{gr})^2]^{1/2} \right\}, \quad (15)$$

где Z — заряд ядра атома в системе молекул поверхности, a_{eff} — эффективный радиус этого заряда, b — расстояние между атомами в указанной системе. Расчет, основанный на уравнении (5), при $E(K, F) = (E_d + h\omega_B)$ и $F = F_{coul}$ показал, что интенсивность $F_{max} = (3.5 \pm 0.14) \cdot 10^{10} \text{ Дж/см}^2 \cdot \text{с}$, необходимая для диссоциации связи (C_1-C) в этих скользящих олигопептидах и образования с наибольшей вероятностью фрагмента $NH_3^+-C_1HR_1$ (Y), где R_1 (Y) есть аминокислотный остаток тирозина, может быть достигнута при скольжении олигопептидов YGGFL, YGGFK и YGGFLR на расстоянии от поверхности 1.75 Å со скоростями $v_{gr} = 1.18, 1.05$ и 1.054 соответственно. Во всех экспериментально полученных масс-спектрах диссоциации рассматриваемых олигопептидов, скользящих с указанными скоростями, проявился пик при значении $m/z = 137$, что соответствует ожидаемому фрагменту, имеющему структурную формулу $NH_3^+-CHR_1$, где R_1 — аминокислотный остаток тирозина. Это показывает, что установка работы [8] может быть использована для анализа структуры олигопептидов.

Отметим в заключение, что рассмотренный метод определения последовательности аминокислот в изучаемых олигопептидах характерен тем, что для его применения требуется на порядок меньшее количество

изучаемого вещества, чем в существующих методах газовой хроматографии с использованием масс-спектрометров по времени пролета [15] и методах лазерной ионизации и диссоциации исследуемого олигопептида, внедренного в матрицу, с последующим масс-спектрометрическим анализом фрагментов [16]. При этом в нашем методе время определения последовательности аминокислотных остатков в олигопептидах на порядок меньше, чем в упомянутых выше методах, что позволяет нам существенно увеличить статистическую точность эксперимента.

Теоретическое значение представленного исследования состоит в установлении возможности существования нестатистического быстрого процесса накопления и передачи внутренней колебательной энергии в полиатомных молекулах, в частности в полипептидах (местный нагрев).

Список литературы

1. Коварский В.А. // УФН. 1999. **169**. P. 887.
2. Gorostizat P., Isacoff E. // *Molecular Biosystem*. 2007. **3**. P. 686.
3. Макаров Г.Н. // УФН. 2005. **175**. P. 41.
4. Komarov V.V., Schmidt L., Fritch H.-W., Jungclas H. // *Computation Material Science*. 1994. **2**. P. 427.
5. Шифф Л. // *Квантовая механика*. М., 1957. Гл. 14.
6. Давыдов А.С. // *Квантовая механика*. 1963. М., 1963. Гл. 12.
7. Jungclas H., Wieghaus A., Schmidt L., Popova A.M., Komarov V.V. // *J. Amer. Soc. Mass Spectr.* 1999. **10**. P. 471.
8. Jungclas H., Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Stureiko I.O. // *Z. Phys. Chem*. 2007. **221**. P. 1071.
9. Jungclas H., Schmidt L., Popova A.M., Komarov V.V., Zulauf A. // *Z. Naturforsch*. 2007. **62a**. P. 324.
10. Del Bello U., Borsella E., Fantoni R., Giasdini-Guidoni F., Cantzell C.D. // *Chem. Phys. Lett.* 1985. **114**. P. 467.
11. Alimpiev S.S., Karlov N. V., Nikiforov S.M., Starkov A. // *Opt. Commun.* 1978. **31**. P. 309.
12. Летохов В.С. // *Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах*. М., 1983.
13. Кнорре Д.Г., Мызина С.Д. // *Биологическая химия*. М., 2002.
14. Yalcin T., Gszmadia I.G., Peterson M.R., Harrison A.G. // *J. Am. Soc. Mass Spectrom*. 1996. **7**. P. 233.
15. Pons. A. et al. // *Biochemistry*. 2003. **42**. P. 8342.
16. Marzilli L.A., Golden T.R., Cotter R.J., Woods A.S. // *J. Amer. Soc. Mass Spectr*. 2000. **11**. P. 1000.

Internal vibration energy in polyatomic molecules containing chained biatomic dipoles

V. V. Komarov^{1,a}, A. M. Popova^{1,a}, L. Schmidt^{2,b}, H. Jungclas^{2,b}

¹*D. V. Skobeltzin Institute of Nuclear Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*

²*Philipps-University, D-06421 Marburg, Germany.*

E-mail: ^apopovakomarov@mail.ru, ^bjungclas.staff@uni_marburg.de.

Quantum processes of excitation and transportation of vibration energy under external IR radiation in polyatomic organic molecules were analysed. The molecules under consideration contains substructures of limit numbers identical biatomic valence bonds, which serves as antennas for IR radiation. The result of this analysis can be used for establish sequences of amino acids in oligopeptides.

Keywords: poliatomic molecules, IR radiation, molecular vibration energy.

PACS: 34.10.+x, 36.40.-c.

Received 8 September 2010.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 4(2011).

Сведения об авторах

1. Комаров Вячеслав Викторович — докт. физ.-мат. наук, профессор, вед. науч. сотр.; e-mail: popovakomarov@mail.ru.
2. Попова Анна Михайловна — докт. физ.-мат. наук, профессор, вед. науч. сотр.; e-mail: popovakomarov@mail.ru.
3. Шмидт Лотар — доктор; e-mail: jungclas.staff@uni_marburg.de.
4. Юнгклас Хартмут — доктор, профессор; e-mail: jungclas.staff@uni_marburg.de.