

ПРОТОТИПЫ ПРИБОРОВ ГЕТЕРОГЕННОЙ ГИБРИДНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ С ВСТРОЕННЫМ БИОМОЛЕКУЛЯРНЫМ ДОМЕНОМ

© 2023 г. М. А. Баранов¹, *, Э. К. Карсеева¹, О. Ю. Цыбин¹

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, 195251 Россия

*E-mail: baranovma1993@gmail.com

Поступила в редакцию 30.05.2023 г.

После доработки 10.09.2023 г.

Принята к публикации 10.09.2023 г.

Макромолекулярная система, встраиваемая в полупроводниковый микроразмерный прибор, рассмотрена в виде биомолекулярного нано или микро размерного домена, выполняющего функции преобразования акустоэлектронных и электромагнитных сигналов. Обсуждены вопросы выбора веществ, структурного, динамического и функционального состояния домена, а также физические основы его взаимодействия с элементами матрицы. Методом суперкомпьютерного неравновесного моделирования молекулярной динамики исследован процесс возбуждения вынужденных колебаний в молекулах аминокислот (на примерах глицина, триптофана, дифенил-L-аланина) при воздействии коротких (10–100 пс) пакетов электрических сигналов ИК диапазона с несущей частотой в интервале 0.5–125 ТГц. Акустоэлектронная интерпретация генерации колебаний осуществлена с помощью адаптированной эквивалентной схемы пептидной группы. Приведены примеры разрабатываемых прототипов гетерогенных приборов. Сделан вывод о том, что встраиваемые биомолекулярные домены могут стать основой многофункциональной элементной базы, перспективной для преобразования сигналов в гибридной микроразмерной электронике.

Ключевые слова: молекулярная динамика, компьютерное моделирование, аминокислота, биомолекулярная электроника

DOI: 10.31857/S0544126923600185, EDN: UXDIUD

1. ВВЕДЕНИЕ

В современной микроразмерной электронике признана необходимость прорывных научно-технических решений. Основные факторы этого состоят в глобальной значимости электроники, проблемах и противоречиях ее современного развития, а также в накопленных в последние десятилетия научно-технических и технологических знаниях, которые могут быть использованы для осуществления преобразований. Требуется многократное увеличение скорости сбора и обработки больших объемов данных в геоинформационных системах, глобальной экономике, астрофизике, задачах искусственного интеллекта и машинного обучения, кристаллографии, криптографии, системах защиты данных, регистрации и распознавании изображений, в аналитических и регистрирующих устройствах, например, научных, технологических, медицинских, а также в томографии, спектроскопии, масс-спектрометрии и др. Необходимы вычислительные системы, готовые к решению задач высшей сложности, например,

моделирования и вычислений объектов Вселенной, глобального климата и погоды, крупномасштабных катаклизмов в природе и деятельности человека, объектов и процессов живой природы: клеток, организмов, головного мозга, других органов, молекулярной медицины, и т.д. Должна быть создана электроника, содержащая высокоэффективные электронные системы с принципиально новыми элементами и архитектурой [1, 2]. Заявлены актуальные направления поиска новых систем микроразмерной электроники, в которых реализуются альтернативные вычислительные состояния; термодинамически неравновесные микросистемы; инновационные механизмы передачи энергии и информации на микроскопические расстояния; наномасштабное управление тепловым режимом; управляемая самосборка сложных наноструктур [2]. В этих системах привлекают внимание исключительные свойства биологических молекул, которые в электронике можно представить как наноразмерные сверхширокополосные комплексы связанных квантовых осцилляторов, устойчивых, универсальных и способных к эффективной об-

работке потока данных. Альтернативную архитектуру гибридных приборов характеризует функциональное расположение на одном микроэлектронном интегральном чипе взаимосвязанных устройств, включая встроенные элементы памяти и другие вычислительные компоненты. Интеграция в масштабе чипа признана важной для будущих информационных технологий как объединение твердотельной и биомолекулярной электроники, фотоники и плазмоники. Встроенные биомолекулярные комплексы (БМК) способны привнести в гибридную микроэлектронику требуемое высокое быстродействие при сверхмалых потоках энергии [3]. Например, быстрая фотонная модуляция возможна с использованием органических электрооптических материалов, в которых фемтосекундный отклик на изменяющиеся во времени электрические поля определяется фазовой релаксацией сопряженной π -электронной системы [4]. Фотохромные соединения рассматриваются как перспективные молекулярные переключатели для создания элементов молекулярной электроники и фотоники, а также устройств памяти [5–7]. Высокоэффективная, “гипер” функциональная природная архитектура биологических объектов в сочетании с устойчивой квантовой “идентичностью” молекул, внутримолекулярной “сверхпроводимостью” при биологической температуре, большая пространственная плотность информации (1 бит в объеме не более 0.1 нм^3) и высокое быстродействие (время реакции до единиц фс), низкие стоимость и экологическая нагрузка в синергетическом сочетании с высокоразвитой технологией полупроводниковой наноэлектроники должны будут обеспечить перспективную “гиперэлектронику”, которая радикально превзойдет по своим функциональным возможностям “классическую” полупроводниковую электронику [8, 9]. В БМК для микроэлектроники важнейшим вопросом можно назвать взаимодействие с электромагнитным полем (ЭМП). В отличие от биосенсоров, реализация биохимических реакций, как одной из составляющих функционирования приборов, не выступает необходимостью. В последние годы в научно-технической литературе осуществление подобных планов предложено в ряде вариантов, которые можно оценивать, однако, как предварительные [10].

Признано, что гетерогенное гибридное объединение полупроводниковых устройств с биомолекулярными, биологическими и био-инспирированными системами имеет основания стать в ближайшем будущем одним из критических источников инноваций в микроэлектронике [2]. Актуальные задачи включают поиск требуемых для микроэлектроники биомолекулярных веществ и их состояний, формирование БМК и их исследование в процессах воздействия ЭМП и преобразования акустоэлектронных сигналов.

В данной статье методом суперкомпьютерного неравновесного моделирования молекулярной динамики исследован процесс возбуждения вынужденных колебаний в молекулах аминокислот (на примерах глицина, триптофана, дифенил-L-аланина) при воздействии коротких (10–100 пс) видеоимпульсов, а также пакетов электрических сигналов ТГц и ИК диапазонов с частотой в интервале 0.5–125 ТГц. Предложена адаптированная эквивалентная схема пептидных групп, с помощью которой осуществляется акустоэлектронная интерпретация генерации колебаний. Рассмотрены положения, согласно которым система, встраиваемая в полупроводниковый микроэлектронный прибор, представлена в виде биомолекулярного нано или микро размерного домена, состоящего из аминокислот, пептидов или белков и выполняющего функции преобразования акустических и электромагнитных сигналов. Обсуждаются вопросы выбора веществ, динамических, структурных и функциональных свойств домена, а также физические основы его взаимодействия с элементами матрицы. Сделан вывод о том, что такие встраиваемые домены, или импланты, перспективны для преобразования сигналов в гетерогенной гибридной микроэлектронике.

2. ВЫБОР ВЕЩЕСТВ, ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ДОМЕНОВ

Ряд известных микроэлектронных приборов реализован в виде гетерогенных гибридов полупроводниковой матрицы с ДНК и крупными белковыми молекулами с использованием электропроводности и биологической функции импланта [5, 6, 11]. Исследования находятся в стадии поиска идей и прототипов, и при рассмотрении альтернативных вариантов стали выделять такие биомолекулы, как аминокислоты и малые пептиды.

Учитывая большее количество составляющих молекулу атомов, многообразие вторичных и более высоких структур, а также возможное наличие иных, кроме аминокислотных остатков, включений, белковые БМК выглядят существенно сложнее по сравнению с аминокислотами, имеют огромное разнообразие структурных, динамических и функциональных характеристик, которые воспроизводятся с большой точностью только статистически. В первичных цепях биомолекул пептидные группы в виде аминокислотных остатков служат основными “строительными блоками”, однако этим блокам в разработках прототипов микроэлектроники уделено значительно меньшее внимание, чем построенным из них белковым молекулам. Аминокислоты являются базовыми элементами биомолекул, их отличает сравнительно простая структурная схема и, соответственно, более широкие идентичность, стабильность и

универсальность. Аминокислотные БМК характеризуются почти идеальной повторяемостью, способностью к самоорганизации, а также простотой производства, низкой стоимостью и экологически чистой технологией [12–16].

Встраиваемые БМК можно рассматривать в классическом и квантовом приближениях как нано- или микроразмерные биомолекулярные домены (БМД), в которых собраны молекулы, объединенные пептидными, межмолекулярными и иными связями. Доменный подход является новым и мало изученным, имеющим некоторые аналогии с малыми частицами и квантовыми точками. Типичные БМД в виде нанокристаллов, кластеров, пленок состоят, например, из 1–100 и более биомолекул, локализованных в объеме 1–100 нм³. Требуется определить их функциональные возможности.

Рассмотрим подходы к определению структурных, динамических и функциональных свойств БМД. В биологических и физико-химических науках структуру первичной цепи пептидов и белков обычно изображают с аминокислотными группами в геометризованном виде, в котором показаны только структурные связи, а функциональные свойства межатомных связей не обозначены. Например, так показана на рис. 1а структурная схема параллельного и антипараллельного бета-листов типичной белковой молекулы. Такие бета-листы стабильны и воспроизводимы, они могут быть использованы как быстродействующие акустоэлектронные наносоединители элементов, а сеть динамических состояний каждой аминокислотной группы как линию передачи сигналов в микроэлектронной нано телекоммуникационной цепи [17–19]. Межатомные связи, взаимодействия и состояния обусловлены перераспределенными электронными подсистемами атомов, динамика которых в локальных реализациях зависит от движения ядерной и электронной подсистем. Распределение электронной плотности имеет повышенные значения в локальных областях межатомных валентных связей, и модулируется колебаниями атомов. В результате возможен синхронизм волновых процессов на основе квазигармонических колебаний электронной и ядерной подсистем атомов. Это выражается в дискретном спектре частот амплитудно-временной реализации динамических локальных дипольных моментов [20].

Применительно к задачам микроэлектроники, структуру аминокислотной группы в первичной цепи пептидов и белков целесообразно представить в виде адаптированной эквивалентной схемы, учитывающей физические свойства межатомных связей по отношению к электромагнитным взаимодействиям и колебательным состояниям (рис. 1а, 1б). Пептидная группа в эквивалентной

схеме представляется в виде многополюсника, содержащего внутренние активные элементы – осцилляторы и их “контакты” с внешними акустоэлектронными цепями (рис. 1). Собственные состояния осцилляторов в нулевом внешнем ЭМП или акустическом поле задаются квазиравновесными самосогласованными колебаниями, зависящими от частоты и температуры осциллятора, а неравновесные вынужденные локальные и коллективные колебания возбуждаются внешними силовыми полями.

Локальные колебания при нулевом ЭМП внешнего облучения, согласованные с собственным полем, реализуются преимущественно в среднем и ближнем ИК, а также в видимом диапазонах. Коллективные, распределенные, колебания в белках реализуются в диапазоне частот 10⁹–10¹² Гц, то есть в ГГц–ТГц и дальнем ИК диапазонах, где осуществляют эффективное управление конформациями, биохимическими реакциями и переносом биологической энергии [21]. Г. Фрелих в [21] обосновал модель, в которой БМ при внешнем электромагнитном облучении рассматривается как открытая система, а сценарий активации нормальных колебательных мод подобен квантовой конденсации Бозе–Эйнштейна. Особенности этой модели целесообразно учитывать при исследовании облучения БМ высокочастотным ЭМП соответствующего диапазона частот в условиях резонансных взаимодействий. На рис. 1б показаны типичные локальные осцилляторы в цепях передачи электромагнитных и акустических сигналов, образующих известную универсальную внутримолекулярную сеть в аминокислотах [22–31]. Девять характерных колебательных полос локальных осцилляторов являются основными в ИК-спектре (называемых амидами А, В, I, II, III, ...), в которых амиды I расположены между 1600 и 1700 см⁻¹, амиды II между 1500 и 1600 см⁻¹ [32]. Невозмущенный резонанс С=О группы (Amide I) находится на частоте 1688 см⁻¹, при этом частота смещается при наличии воды или других растворителей, а также зависит от конформации. Симметричный резонанс N–H группы (Amide II) соответствует частотам 1530–1580 см⁻¹, асимметричный N–H₂ – 3333 см⁻¹. Резонанс Ca–N (Amide III) соответствует частотам 1200–1340 см⁻¹.

Коллективные колебания обусловлены динамикой групп атомов на относительно более низких частотах. Дальние диполь-дипольные взаимодействия в водородных цепях возникают, когда атом водорода ковалентно связан с атомом с высокой электроотрицательностью (обычно кислород). Диполь создается путем децентрализации электронного облака вокруг электроотрицательного атома. Соответственно, модель коллективных акустоэлектронных осцилляторов представляется возможной для упрощенного описания

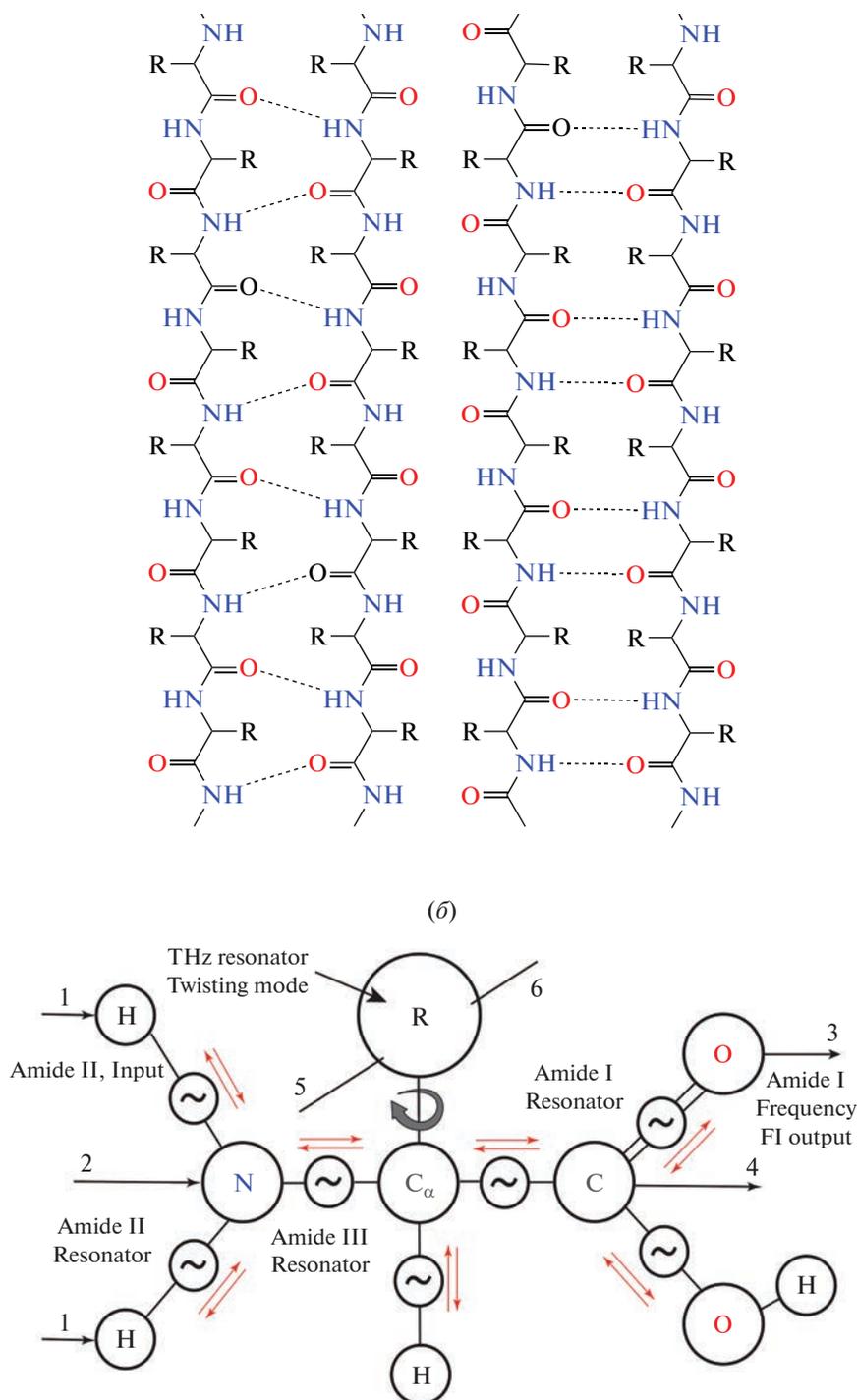


Рис. 1. Структурная схема (а) параллельного (а, слева) и антипараллельного (а, справа) бета-листов типичной белковой молекулы. Эквивалентная схема (б) аминокислотной группы с учетом электромагнитных и акустических связей локальных акустоэлектронных осцилляторов, представленная в виде многополюсника с “контактами” электронных, электромагнитных и колебательных связей (1, 2 – “входные” контакты с предыдущими группами, 3, 4 – “выходные” контакты с последующими группами в первичной белковой цепи; 1, 3 – связи с водородными цепями; 5, 6 – связи боковой цепи).

динамики процессов в водородных цепях. В отличие от локальных атом-атомных диполей, распределенные волноведущие структуры образованы водородными O–H связями, в которых могут рас-

пространяться волны, например, в виде солитонов Давыдова [31].

В известных литературных источниках принято называть частотой волновое число, вычисляе-

мое для электромагнитной волны, распространяющейся со скоростью света. При этом значение длины электромагнитной волны, обратное этому числу, значительно превышает размер молекулы, и соответствует измерениям волн, осуществляемому на значительном удалении от молекулы, как, например, в экспериментальной спектроскопии. Для определения длины акустической волны, возбуждаемой в молекуле, исходим из скорости распространения гиперзвука в цепи осциллятора, составляющей порядка 10^3 м/с, и получаем существенно меньшую длину волны, соизмеримую с размерами молекулы. Соответственно, активные элементы на схеме (рис. 1б) могут представлять собой полосовые или резонансные усилители и генераторы акустических и электромагнитных, в частности, электрических, сигналов. На основании теории Фрелиха можно принять, что поглощенная энергия облучающего ЭМП переводит избранные генераторы и усилители преимущественно в селективные активные состояния, а не перераспределяет ее равномерно по степеням свободы молекулы. Предлагаемая упрощенная эквивалентная схема представляется полезной в гетерогибридной микроэлектронике для интерпретации и качественного анализа собственных и вынужденных локальных и коллективных колебаний, распространения акустических и электромагнитных сигналов и других электродинамических явлений, реализуемых в пептидных группах первичной цепи. Воспользуемся далее эквивалентной схемой (рис. 1б) для интерпретации динамических характеристик молекул аминокислот во внешнем ЭМП, получаемых компьютерным моделированием методами молекулярной динамики (МД).

3. ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ И ЛОКАЛЬНЫЕ ВЫНУЖДЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ В ПЕПТИДНЫХ ГРУППАХ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ТГц И ИК ДИАПАЗОНОВ

Реализация МД позволяет выявлять не только внутримолекулярные колебания в самосогласованном собственном поле, но также и сценарии переходных процессов и вынужденных колебаний во внешнем облучающем ЭМП [20, 33, 34]. В содержательном обзоре [33] рассмотрены способы включения статических и переменных полей в различные формы компьютерного моделирования, а также полученные характеристики биомолекул и биологических сред. Прямое моделирование МД в различных полях существенно дополняет новыми данными результаты равновесного рассмотрения, обосновывает методику и результаты спектроскопических исследований. В [20] разработана и применена методика супер-

компьютерной МД для записи амплитудно-временной реализации суммарного дипольного момента единичной молекулы, что позволило преобразованием Фурье вычислить спектры собственных локальных и вынужденных локальных осцилляторов в ТГц и ИК диапазонах частот. Рассмотрены динамические сценарии в импульсах облучения большой длительности порядка 500–1000 пс, однако для сценариев переходных процессов и переизлучения в микроэлектронных приборах более значимыми являются характеристики сверхбыстрых явлений, на один-два порядка короче по длительности. Используя разработанный в [20] суперкомпьютерный программно-вычислительный комплекс на базе Санкт-Петербургского Политехнического университета Петра Великого, оснащенный кластером “РСК-Торнадо” с пиковой производительностью 10^{15} терафлопс 668 двухпроцессорных узлов (Intel Xeon E5 2697 v3), из которых 56 имеют два ускорителя вычислений NVIDIA K40, здесь мы впервые рассмотрели переходные процессы локальных осцилляторов в аминокислотах глицин, триптофан, дифенилаланин. Для каждого атома системы решали уравнение динамики Ньютона, по временным шагам определяли координаты атомов, параметры силового поля, температуру системы, давление и т. п. В результате получали мгновенные значения координат и скорости атомов, используя которые вычисляли зависимости от времени значений интегрального электрического дипольного момента (ЭДМ) $\vec{D}(t)$ путем суммирования парциальных моментов:

$$\vec{D}(t) = \sum_{n=1}^N q_n [\vec{r}_n(t) - \vec{r}_n(0)]. \quad (1)$$

Здесь $\vec{r}_n(0)$ – радиус-вектор пространственного положения заряда q_n в момент времени $t = 0$, $\vec{r}_n(t)$ – его текущее значение. Последовательность значений амплитудно-временной реализации интегрального ЭДМ $\vec{D}(t)$ (уравнение (1)) представляла суперпозицию локальных колебаний внутримолекулярных атомных осцилляторов при воздействии единичных коротких электрических импульсов с длительностью огибающей 10–100 пс без заполнения, а также и с заполнением несущей на частотах ИК диапазона. Импульсы с заполнением создавали плоско-поляризованное электрическое поле на частотах приблизительно 0.5–125 ТГц с амплитудой размаха (0.01–1) В/нм. Заполняющее напряжение задавали в виде прямоуглольного симметричного меандра с фронтами длительностью не более 1 фс. Подобная форма волны, удобная в нашем случае для исследования динамики биомолекул, была использована ранее лишь при исследовании свойств воды в диапазо-

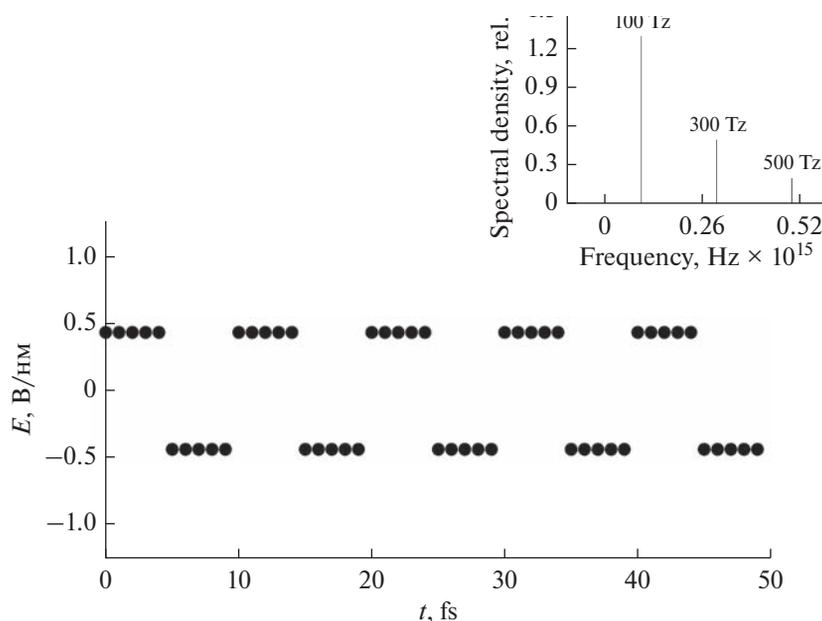


Рис. 2. Эпо́ра электрического поля на резонансной частоте 3333 см^{-1} с гармониками (показаны на врезке), соответствующего формуле (1) и амплитудно-временным реализациям на рис. 3.

не частот 20–500 ГГц [35]. Полученные типичные амплитудно-временные и Фурье-спектральные характеристики интегрального ЭДМ представлены на рис. 2–3. Частотный спектр меандра был

представлен типичным набором нечетных гармоник, учитывались изменения спектра при включении импульсной огибающей в соответствии с формулой:

$$S(\omega) \sim \tau A \left[\frac{\sin\left(\frac{(\omega - \omega_0)\tau}{2}\right)}{\frac{(\omega - \omega_0)\tau}{2}} + \frac{1}{3} \frac{\sin\left(\frac{(\omega - 3\omega_0)\tau}{2}\right)}{\frac{(\omega - 3\omega_0)\tau}{2}} + \frac{1}{5} \frac{\sin\left(\frac{(\omega - 5\omega_0)\tau}{2}\right)}{\frac{(\omega - 5\omega_0)\tau}{2}} \right], \quad (2)$$

где ω — несущая частота, ω_0 — частота 1-й гармоники, τ — длительность импульса, A — амплитуда первой гармоники (учтены три первые нечетные гармоники). Частоту поля изменяли в широких пределах, варьируя количество точек дискретизации в периоде меандра и значения частоты дискретизации. Эпо́ра электрического поля на резонансной частоте 3333 см^{-1} , соответствующего формуле (2), показана на рис. 2.

Зависимость амплитуды вынужденных резонансных колебаний биомолекул аминокислот от напряженности поля имела линейный характер в поле меандра с амплитудой приблизительно от 0.1 до 0.4 В/нм.

На рис. 3 показаны типичные эпо́ры интегрального ЭДМ (в квадрате) и ее усредненная огибающая (с фильтрацией нижних частот) в молекуле глицина и в молекуле триптофана при воздействии электрического поля амплитудой 0.4 В/нм на резонансной частоте локального ос-

циллятора 3333 см^{-1} с прямоугольной огибающей длительностью 20 пс. Видно, что имеются сценарии, когда энергия поперечных колебаний, пропорциональная $|D_{\perp}(t) - D_{\perp}(t)|^2$, за время не более единиц пикосекунд при включении поля возрастает и затем немонотонно увеличивается за время импульсного пакета.

После достижения максимума и выключения поля энергия поперечных колебаний снижается за время около 5–10 пс до установившегося значения (с заметными иногда послеимпульсами), что позволяет считать данный процесс в определенных пределах управляемым переключением резонансного осциллятора сигналом на частоте 100 ТГц. Подобные процессы управления были обнаружены в интервале частот приблизительно 0.5–125 ТГц (коллективные колебания на частотах 20–200 см^{-1} и локальные выше 200 см^{-1}). Не все наблюдаемые динамические сценарии являются достаточно убедительно интерпретируемыми.

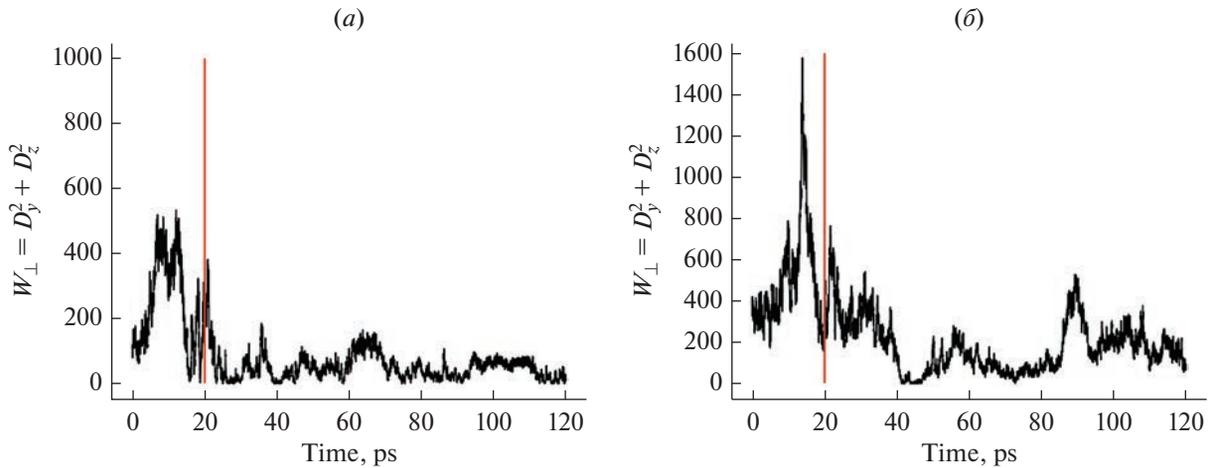


Рис. 3. Типичные амплитудно-временные реализации квадратичного интегрального ЭДМ $|\vec{D}_\perp(t) - \vec{D}_\perp(t)|^2$ глицина (а) и дифенилаланина (б) при воздействии электрического поля амплитудой 0.4 В/нм с длительностью пакета 20 ps на резонансной частоте 3333 см^{-1} локального осциллятора (Amide II).

Вероятно, это может быть обусловлено как сложной нелинейной динамикой осцилляторов, так и интерференцией с внутримолекулярными коллективными колебаниями, реализуемыми на более низких частотах, где колебательная энергия конденсируется в соответствии с моделью Фрелиха.

4. ТЕХНОЛОГИЯ И ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БИОМОЛЕКУЛЯРНОГО ДОМЕНА С ЭЛЕМЕНТАМИ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО МИКРОЭЛЕКТРОННОГО ПРИБОРА

Формирование домена и его встраивание в микроэлектронный прибор представляются возможными в технологии наноинженерного конструирования, обеспечивающей выполнение требуемых функциональных характеристик [36–39] при задании структуры доменов в виде самоорганизованных слоев, метаматериалов и кристаллов [40–42]. Доменные структуры в виде микропленок, молекулярных нитей, кристаллов аминокислот и пептидов обладают большим потенциалом для применений в высокоскоростной гиперактивной электронике в сочетании с фотоникой. Указанные структуры представляются стабильными, устойчивыми с большим временем функционирования, особенно в иммобилизованном состоянии в полупроводнике. Встроенный домен может быть частично открытым, например, в связанном состоянии на поверхности или в приповерхностном объеме, а также закрытым в микрополости в объеме твердого тела. Подобно известным квантовым точкам в полупроводниках, БМД может представлять собой принципиально квантовый объект в виде микро или нано сгустка (кластера, кристалла и др.), состоящего из биомолекул.

В предельном случае это относится к микрополости в полупроводнике, заполненной биомолекулярным материалом. Собственно, сама полупроводниковая микрополость без заполнения также является фундаментальным квантовым объектом, в котором может реализоваться активное состояние электромагнитного поля [43]. Квантовое описание полупроводниковой микрополости с биомолекулярным заполнением может иметь большое значение для микроэлектроники, но из-за новизны и сложности такое рассмотрение выходит за рамки данной публикации. Ограничимся здесь упрощенным качественным классическим описанием характеристик БМД на основе параметров входящих в его состав единичных аминокислот с учетом данных, приведенных выше в разделах II, III. Электродинамические процессы, происходящие в домене, неразрывно связаны с явлениями в его граничном окружении, и наоборот. Уравнение для определения состояния домена вблизи или внутри полупроводниковой матрицы следует из закона сохранения энергии и импульса в рамках классической электродинамики. Интегральная по объему плотность силы Лоренца \vec{f}_{em} , действующей на все заряды и токи в объеме V домена, равна:

$$\vec{f}_{em} = \rho \vec{E} + \vec{J} \times \vec{B}, \tag{3}$$

а полная по объему сила есть интеграл

$$\vec{F}_{em} = \int_V (\rho \vec{E} + \vec{J} \times \vec{B}) dv. \tag{4}$$

Сила \vec{F}_{em} определена взаимодействием объемных зарядов с плотностью ρ и объемных токов с плотностью \vec{J} с компонентами ЭМП \vec{E}, \vec{B} .

Когда ЭМП взаимодействует с зарядами и токами в объеме V , необходимо учитывать импульс, связанный с ЭМП, чтобы гарантировать законы сохранения. Уравнения Максвелла с соответствующими граничными условиями описывают силовое поле, связанное с законом сохранения импульса в системе с ЭМП [44]:

$$\oint_S \vec{f}_S \cdot d\vec{a} = \vec{F}_{em} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \vec{P} \cdot dV, \quad (5)$$

где вектор Пойнтинга \vec{P} в объеме V равен скорости изменения плотности импульса ЭМП за счет радиационных потерь или поступления энергии через окружающую поверхность S . По условиям вывода уравнения (4), поверхность интегрирования S является замкнутой, охватывающей рабочий объем с молекулярными зарядами и токами в нем. Уравнение (4) имеет фундаментальный характер в классической электродинамике и устанавливает взаимодействие домена с окружающим пространством на частотах активности биомолекул, совпадающих с окнами прозрачности граничных материалов. Например, для белков и полупроводников такие условия могут быть выполнены в ИК и видимом диапазонах. В соответствии с (4), результирующий суммарный вектор сил Лоренца, действующих на движущиеся заряженные частицы в объеме, с точностью до термина $\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \vec{P} \cdot dV$ равен сумме сил, действующих на окружающие электропроводящие поверхности. Эта компонента не обязательно равна нулю даже в случае отсутствия зарядов и токов в объеме и на окружающих поверхностях. Высокочастотные молекулярные колебания могут генерировать излучение ЭМП и акустических волн на границе. В условиях квантового рассмотрения следует ожидать в домене дискретный спектр энергии носителей заряда, туннельные эффекты и усиленную фотолуминесценцию. Соответственно, и в классическом, и в квантовом рассмотрении перевод встроенного домена в активное состояние может осуществляться горячими электронами на границе раздела S [45]. Генерация горячих электронов в полупроводниковой матрице для активирования БМД осуществляется и управляется электронными, СВЧ, ТГц и ИК потоками облучения [45]. Возбужденный домен является, например, трансформатором типа электромагнитной волны, генератором акусто-электронной волны, преобразователем частоты сигнала, волноводом в нано телекоммуникационной сети [46–49]. Поверхностный пленочный БМД обеспечивает новые функциональные возможности приборов с функциями ТГц туннельного диода [50] и радиометра [48, 51]. В [49] обосновано распространение волны на частоте 23.81 ТГц по ло-

кальным осцилляторам в первичной цепи полиглицина на расстояние до 1000 групп. Аналогичными волноведущими свойствами должны обладать бета-листы (рис. 1а) с выполнением функций электромагнитной нано телекоммуникационной и акустоэлектронной связи. Для этих целей возможны упорядоченные устойчивые воспроизводимые плоские монослойные и многослойные нанокластерные наноструктуры на твердых подложках, сформированные по технологии дегидратированных пленок из растворов в ЭМП [16, 41, 52, 53]. Интегральные элементы ИМС для встроенного домена являются “наночастицами”, на которых усиливается поле облучения. Фотоника на основе БМД, в частности, бета-листов в микрополости, может быть интегрирована с электрическими элементами микросхем, такими, как процессоры или устройства памяти, обеспечивая высокие пропускную способность сигнальных соединений и скорость переключений, многофункциональное переизлучение первичного ЭМП.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Уникальные виды динамических взаимодействий в наноструктурных масштабах состояния вещества, поля, времени, пространства, энергии представляется возможным реализовывать с помощью БМД. В гетерогенных гибридных микроэлектронных устройствах динамические процессы в доменах, в том числе на уровне малых биомолекул, могут быть использованы для эффективного преобразования сигналов, установления электромагнитных соединений и акустоэлектронных связей на частотах ИК и видимого диапазонов.

Принципы биогетерогридной микроэлектроники, обусловленные электродинамическими свойствами биомолекулярных доменов, включают электропроводность, в том числе электронное и протонное туннелирование; способность к трансформации ЭМВ, к переизлучению ЭМП; действие принципов конденсации по Фрелиху; альтернативные принципы переключений. На этой основе перспективные прототипы представляют трансформаторы типа ЭМВ с активированием горячими электронами; микрополостные БМД в структуре ИМС; альтернативную архитектуру гетерогенного объединения на микроэлектронном интегральном чипе, включая встроенные элементы памяти и другие вычислительные компоненты. На современном этапе разработки прототипов гетерогридной электроники целесообразно продолжить исследования свойств требуемой биомолекулярной системы, а также поиск конструктивных, технологических и иные решений, определяющих объединение биомолекулярных компонентов с полупроводниковой микроэлектроникой.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках программы “Суперкомпьютерное моделирование и технология биомолекулярных пленочных структур” (грант № 21–72–20029).

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Roco M.C.* The long view of nanotechnology development: The National Nanotechnology Initiative at 10 years // *J. Nanoparticle Research*. 2011. V. 13. № 2. P. 427–445. <https://doi.org/10.1007/s11051-010-0192-z>
2. IEEE International Roadmap for Devices and Systems – IEEE IRDS. 2020. Accessed: Apr. 04, 2023. [Online]. Available: <https://irds.ieee.org/>.
3. *Apter B., Lapshina N., Handelman A., Fainberg B.D., Rosenman G.* Peptide Nanophotonics: From Optical Waveguiding to Precise Medicine and Multifunctional Biochips // *Small*. 2018. V. 14. № 34. <https://doi.org/10.1002/sml.201801147>
4. *Heni W. et al.* Silicon–Organic and Plasmonic–Organic Hybrid Photonics // *American Chemical Society*. 2017. V. 4. № 7. P. 1576–1590. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.7b00224>
5. *Пугачев А., Ожогин И., Козленко А.* Новый негативно фотохромный спиропиран для элементов молекулярной электроники и фотовольтаики. Проблемы разработки перспективных микро- и нанoeлектронных систем. 2021. V. 4. P. 155–161.
6. *Pugachev A.D. et al.* New spiroyrans for creating elements of molecular electronics and photonics // *Probl. Adv. micro- Nanoelectron. Syst. Dev.* 2020. P. 139–146. <https://doi.org/10.31114/2078-7707-2020-3-139-146>
7. *Huang X., Li T.* Recent progress in the development of molecular-scale electronics based on photoswitchable molecules // *J. Materials Chemistry C*. 2020. V. 8. № 3. P. 821–848. <https://doi.org/10.1039/c9tc06054e>
8. *Liu G.* Grand Challenges in Biosensors and Biomolecular Electronics // *Front. Bioeng. Biotechnol.* 2021. V. 9. <https://doi.org/10.3389/fbioe.2021.707615>
9. *Величко Е.Н., Цыбин О.Ю.* Гибридная биомолекулярная электроника: монография–СПб.: Политех-Пресс, 2021. 261 с. ISBN 978-5-7422-7302-8
10. *Dunn K., Trefzer M., Johnson S., Tyrrell A.* Towards a Bioelectronic Computer: A Theoretical Study of a Multi-Layer Biomolecular Computing System That Can Process Electronic Inputs // *Int. J. Mol. Sci.* 2018. V. 19. № 9. P. 2620. <https://doi.org/10.3390/ijms19092620>
11. *Ing N.L., El-Naggar M.Y., Hochbaum A.I.* Going the Distance: Long-Range Conductivity in Protein and Peptide Bioelectronic Materials // *J. Physical Chemistry B*. 2018. V. 122. № 46. P. 10403–10423. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b07431>
12. *Schiattarella C. et al.* Solid-state optical properties of self-assembling amyloid-like peptides with different charged states at the terminal ends // *Sci. Rep.* 2022. V. 12. № 1. P. 1–10. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-04394-2>
13. *Kovalchuk M.V. et al.* Structural characteristics of lysozyme Langmuir layers grown on a liquid surface from an oligomeric mixture formed during the early stages of lysozyme crystallization // *Thin Solid Films*. 2019. V. 677. P. 13–21. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2019.02.051>
14. *Бойкова А.С. и др.* Получение многослойных пленок на основе белка лизоцима и ионов осадителя (йода и калия) на кремниевой подложке модифицированным методом Ленгмюра–Шеффера // *Кристаллография*. 2018. Т. 63. № 5. С. 703–707. <https://doi.org/10.1134/s0023476118050065>
15. *Ковальчук М. и др.* Модификация метода Ленгмюра–Шеффера для получения упорядоченных белковых пленок // *Кристаллография*. 2017. Т. 62. № 4. С. 650–656.
16. *Baranov M., Tsybin O., Velichko E.* Structured biomolecular films for microelectronics // *St. Petersburg. Polytch. State Univ. J. Phys. Math.* 2021. V. 14. № 1. P. 85–99. <https://doi.org/10.18721/JPM.14106>
17. *Velichko E., Zezina T., Baranov M., Nepomnyashchaya E., Tsybin O.* Dynamics of Polypeptide Cluster Dipole Moment for Nano Communication Applications // *Lect. Notes Comput. Sci. (including Subser. Lect. Notes Artif. Intell. Lect. Notes Bioinformatics)*, 2018. V. 11118 LNCS. P. 675–682. https://doi.org/10.1007/978-3-030-01168-0_62
18. *Velichko E., Zezina T., Cheremiskina A., Tsybin O.* Nano communication device with embedded molecular films: Effect of electromagnetic field and dipole moment dynamics,” *Lect. Notes Comput. Sci. (including Subser. Lect. Notes Artif. Intell. Lect. Notes Bioinformatics)*. 2015. V. 9247. P. 765–771. https://doi.org/10.1007/978-3-319-23126-6_71
19. *Tsybin O.* Nano-device with an embedded molecular film: Mechanisms of excitation // in *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*. 2015. V. 9247. P. 772–777. https://doi.org/10.1007/978-3-319-23126-6_72
20. *Непомнящая Э.К., Баранов М.А., Цыбин О.Ю.* Компьютерная резонансная динамика молекулы глицина в электрическом поле инфракрасного диапазона // *Письма в ЖТФ*. 2023. Т. 49. № 7. С. 8–11. <https://doi.org/10.21883/PJTF.2023.07.54913.19435>

21. *Fröhlich H.* The Biological Effects of Microwaves and Related Questions. Elsevier, UK, 1980. P. 85–152.
22. *Millefiori S., Alparone A., Millefiori A., Vanella A.* Electronic and vibrational polarizabilities of the twenty naturally occurring amino acids // *Biophys. Chem.* 2008. V. 132. № 2–3. P. 139–147.
<https://doi.org/10.1016/j.bpc.2007.11.003>
23. *Wang W.N., Li H.Q., Zhang Y., Zhang C.L.* Correlations between terahertz spectra and molecular structures of 20 standard α -amino acids // *Acta Phys. Chim. Sin.* 2009. V. 25. № 10. P. 2074–2079.
<https://doi.org/10.3866/pku.whxb20090931>
24. *Barth A., Zscherp C.* What vibrations tell us about proteins // *Q. Rev. Biophys.* 2002. V. 35. № 4. P. 369–430.
<https://doi.org/10.1017/S0033583502003815>
25. *Mohamed M.E., Mohammed A.M.A.* Experimental and Computational Vibration Study of Amino Acids // *Int. Lett. Chem. Phys. Astron.* 2013. V. 15. № 1. P. 1–17.
<https://doi.org/10.56431/p-177d21>
26. *Matei A., Drichko N., Gompf B., Dressel M.* Far-infrared spectra of amino acids // *Chem. Phys.* 2005. V. 316. № 1–3. P. 61–71.
<https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2005.04.033>
27. *Wolpert M., Hellwig P.* Infrared spectra and molar absorption coefficients of the 20 alpha amino acids in aqueous solutions in the spectral range from 1800 to 500 cm^{-1} // *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* 2006. V. 64. № 4. P. 987–1001.
<https://doi.org/10.1016/j.saa.2005.08.025>
28. *Zhang F., Tominaga K., Hayashi M., Wang H.-W.* Low-frequency vibration study of amino acids using terahertz spectroscopy and solid-state density functional theory // in *Infrared, Millimeter-Wave, and Terahertz Technologies III*. 2014. V. 9275. P. 92750D.
<https://doi.org/10.1117/12.2071528>
29. *Yi W. et al.* Broadband terahertz spectroscopy of amino acids // *Instrum. Sci. Technol.* 2017. V. 45. № 4. P. 423–439.
<https://doi.org/10.1080/10739149.2016.1270961>
30. *Зезина Т.И., Цыбин О.Ю.* Субпикосекундная динамика дипольного момента молекулярных полиаланинов // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2017. Т. 10. № 4. С. 100–110.
<https://doi.org/10.18721/JPM.10408>
31. *Deniz E. et al.* Through bonds or contacts? Mapping protein vibrational energy transfer using non-canonical amino acids // *Nat. Commun.* 2021. V. 12. № 1. P. 3284.
<https://doi.org/10.1038/s41467-021-23591-1>
32. *Mancini T., Mosetti R., Marcelli A., Petrarca M., Lupi S., D'arco A.* Terahertz Spectroscopic Analysis in Protein Dynamics: Current Status // *Radiation*. 2022. V. 2. № 1. P. 100–123.
<https://doi.org/10.3390/radiation2010008>
33. *English N.J., Waldron C.J.* Perspectives on external electric fields in molecular simulation: Progress, prospects and challenges // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015. V. 17. № 19. P. 12407–12440.
<https://doi.org/10.1039/c5cp00629e>
34. *Kelly C.M. et al.* Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field // *Biophys. Chem.* 2015. V. 196. P. 16–24.
<https://doi.org/10.1016/j.bpc.2014.08.009>
35. *Reale R., English N.J., Marracino P., Liberti M., Apollo- nio F.* Dipolar response and hydrogen-bond kinetics in liquid water in square-wave time-varying electric fields // *Mol. Phys.* 2014. V. 112. № 14. P. 1870–1878.
<https://doi.org/10.1080/00268976.2013.867081>
36. *He L., Dexter A.F., Middelberg A.P.J.* Biomolecular engineering at interfaces // *Chem. Eng. Sci.* 2006. V. 61. № 3. P. 989–1003.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.05.064>
37. *Lenci S., Tedeschi L., Pieri F., Domenici C.* UV lithography-based protein patterning on silicon: Towards the integration of bioactive surfaces and CMOS electronics // *Appl. Surf. Sci.* 2011. V. 257. № 20. P. 8413–8419.
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2011.04.096>
38. *Kislov V.V. et al.* Electronics of molecular nanoclusters // *Int. J. Nanosci.* 2004. V. 3. № 1–2. P. 137–147.
<https://doi.org/10.1142/S0219581X04001912>
39. *Баранов М.А., Цыбин О.Ю., Величко Е.Н.* Структурированные биомолекулярные пленки для микроэлектроники // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2021. Т. 14. № 1. С. 85–99.
<https://doi.org/10.18721/JPM.14106>
40. *Gatto E., Toniolo C., Venanzi M.* Peptide self-assembled nanostructures: From models to therapeutic peptides // *Nanomaterials*. 2022. V. 12(3). P. 456.
<https://doi.org/10.3390/nano12030466>
41. *Baranov M., Velichko E., Tsybin O.* Self-assembled biomolecular films as a new material for nano-telecommunication devices // in *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*. 2020. V. 12526 LNCS. P. 384–393.
https://doi.org/10.1007/978-3-030-65729-1_34
42. *Ravanfar R., Bayles C.J., Abbaspourrad A.* Structural chemistry enables fluorescence of amino acids in the crystalline solid state // *Cryst. Growth Des.* 2020. V. 20(3). P. 1673–1680.
<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01430>
43. *Deveaud B.* The Physics of Semiconductor Microcavities: From Fundamentals to Nanoscale Devices. John Wiley and Sons, 2007.
44. *Toptygin I.N.* Electromagnetic phenomena in matter: Statistical and quantum approaches. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2015.
45. *Величко Е., Цыбин О.* Биомолекулярный сенсор с микроэлектронным генератором электромагнитной волны. патент RU 2749698 С1, 2021.
46. *Dyubo D., Tsybin O.Y.* Nano communication device with an embedded molecular film: Electromagnetic signals integration with dynamic operation photodetector // *Lect. Notes Comput. Sci. (including Subser. Lect. Notes Artif. Intell. Lect. Notes Bioinformatics)*.

2017. V. 10531 LNCS. P. 206–213.
https://doi.org/10.1007/978-3-319-67380-6_19
47. *Karothu D.P., Dushaq G., Ahmed E., Catalano L., Polavaram S., Ferreira R., Li L., Mohamed S., Rasras M., Naumov P.* Mechanically robust amino acid crystals as fiber-optic transducers and wide bandpass filters for optical communication in the near-infrared // *Nat. Commun.* 2021. V. 12(1). P. 1326.
<https://doi.org/10.1038/s41467-021-21324-y>
48. *Dyubo D., Tsybin O.Y.* Computer simulation of a surface charge nanobiosensor with internal signal integration // *Biosensors.* 2021. V. 11. № 10.
<https://doi.org/10.3390/bios11100397>
49. *Miao L., Seminario J.M.* Molecular dynamics simulations of signal transmission through a glycine peptide chain // *J. Chem. Phys.* 2007. V. 127. № 13.
<https://doi.org/10.1063/1.2786078>
50. *Celestin M., Krishnan S., Bhansali S., Stefanakos E., Goswami D.Y.* A review of self-assembled monolayers as potential terahertz frequency tunnel diodes // *Nano. Res.* 2014. V. 7. № 5. P. 589–625.
<https://doi.org/10.1007/S12274-014-0429-8>
51. *Dyubo D., Tsybin O.Y., Baranov M.A., Alekseenko A.P., Velichko E.N.* Study of electric properties of self-assembled films of albumin during their dehydration Recent citations Study of electric properties of self-assembled films of albumin during their dehydration // *J. Phys.* 2018. V. 1124. № 3. P. 31013.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1124/3/031013>
52. *Baranov M., Velichko E., Greshnevikov K.* Analysis of Fractal Structures in Dehydrated Films of Protein Solutions // *Symmetry (Basel).* 2021. V. 13. № 123. P. 1–11.
<https://doi.org/10.3390/sym13010123>
53. *Nepomnyashchaya E., Baranov M., Tsybin O.* Measurement of Refraction Coefficients in thin Biomolecular Films Studies; Measurement of Refraction Coefficients in thin Biomolecular Films Studies. *Int. Conf. Electr. Eng. Photonics*, 2022.
<https://doi.org/10.1109/EEXPOLYTECH56308.2022.9950914>