

## 甘氨酸色氨酸寡肽链的红外光谱的密度泛函研究\*

李鑫<sup>1)</sup> 羊梦诗<sup>1)</sup> 叶志鹏<sup>1)</sup> 陈亮<sup>2)†</sup> 徐灿<sup>3)</sup> 储修祥<sup>2)</sup>

1) (浙江农林大学工程学院, 临安 311300)

2) (浙江农林大学理学院, 临安 311300)

3) (兰州大学磁学与磁性材料教育部重点实验室, 兰州 730000)

(2012年12月17日收到; 2013年4月17日收到修改稿)

运用密度泛函理论, 在 6-31 G(d) 基组水平上对甘氨酸色氨酸交替组成的六种寡肽链结构进行几何优化, 并进行了结合能和振动光谱地分析. 结果表明, 寡肽的生长利于结构的稳定性. 随着肽链的生长, 单一基团的振动存在蓝移或奇偶震荡现象; 同类官能团的耦合振动存在红移现象; 而肽链端部基团的振动频率基本不变. 这些丰富的频移现象和尺寸效应、耦合效应、诱导效应、奇偶效应等因素共同竞争有关. 该结果对应用红外光谱对寡肽链的残基数及长度地测量等工作有指导意义.

**关键词:** 寡肽链, 红外光谱, 耦合效应, 尺寸效应

**PACS:** 61.46.-w, 31.15.E-, 87.14.ef

**DOI:** 10.7498/aps.62.156103

## 1 引言

蛋白质分子的结构比较复杂, 分子量大, 由于实验方法的时间限制, 只能对少量的蛋白质体系进行研究. 计算机模拟已成为一种研究寡肽和蛋白质结构、性质的重要方法, 这种方法对小分子氨基酸和寡肽体系的计算具有高精度. 而计算所得的相应结论可以为大分子蛋白质的研究提供相应的信息和有力的指导. 目前在理论和实验方面, 对氨基酸和寡肽的研究都有大量的报道<sup>[1-5]</sup>. 由于甘氨酸是最简单的氨基酸, 对它的研究也是最多的<sup>[6-8]</sup>. 色氨酸是人体的必需氨基酸和生糖氨基酸, 同时也是植物体内生长素生物合成重要的前体物质, 在高等植物中普遍存在, 所以对色氨酸的研究也很重要. 其中, Perczel 等<sup>[9,10]</sup>用肽模型来研究残基数目对构象倾向性的影响中发现, 随残基数目的逐渐增加, 残基的构象倾向性会发生变化. 在纳米领域的研究中, 纳米体系随着单元数的增长, 物理化学属性过渡性变化的现象已被大量发现<sup>[11,12]</sup>, 且纳米体系常具有不同于固体材料和单个分子的独特性质, 如

纳米微粒中的尺寸效应和各向异性现象等<sup>[13-17]</sup>. Wenbo Yu 等<sup>[18-20]</sup>对氨基酸、二肽、三肽做了详细的分析, 发展了一种肽链生长的高效寻找寡肽稳定构型的基因遗传算法. 然而, 对于肽链生长从小分子到大团簇的过程中, 是否存在物理化学属性的变化、尺寸效应等现象并未做详细研究, 该方面的工作罕见报道. 在本文所选择的研究对象甘氨酸色氨酸交替组成的 GW 寡肽模型中, 一方面能找出肽链生长的过渡性信息; 另一方面通过选择较大体积的色氨酸基团, 能给出受寡肽侧链基团影响的主链信息. 这些研究和信息对蛋白质的研究有着重大的基础意义.

本文运用密度泛函方法优化计算了甘氨酸色氨酸交替组成的寡肽 GW, GWG, GWGW, GWGWG, GWGWGW, GWGWGWG 总计六种结构, 通过残基数的增加来模拟肽链的生长, 计算了平均结合能, 并侧重对振动红外光谱的频移现象做详细分析. 找出氨基酸肽链生长从小分子到大体系的振动红外光谱的过渡信息, 不同氨基酸基团相互影响以及受寡肽侧链基团影响的主链信息. 总之, 寡肽分子结构红外光谱的研究对寡肽结构的特性

\* 国家杰出青年科学基金(批准号: 50925103)和2013年浙江省大学生科技创新活动计划(新苗人才计划)项目资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: liang.chen05@126.com

分析、寡肽分子奇偶、长度确定和计算机模拟蛋白质分子等方面都有着重大的意义。

## 2 研究和计算方法

对甘氨酸色氨酸交替组成的 GW 寡肽的不同肽数的几何构型进行优化, 对寡肽频率以及能量做相关的计算和分析. 寡肽构型的优化先用半经验

PM3 方法对不同结构和长度的寡肽结构进行初步优化, 得出结构变化的基本趋势. 然后用密度泛函 RB3LYP 方法在 6-31 G(d) 水平下对不同的寡肽分子结构进行优化结构和频率计算. 在 RB3LYP 方法中, 交换能以 Becke 形式<sup>[21]</sup>表示, 相关能以 LYP 形式<sup>[22]</sup>表示. 所有结构的频率均没有出现虚频, 说明优化所得的构型是稳定的, 优化的结果如图 1 所示. 本文计算和结果分析均使用 Gaussian09<sup>[23]</sup> 软件包.

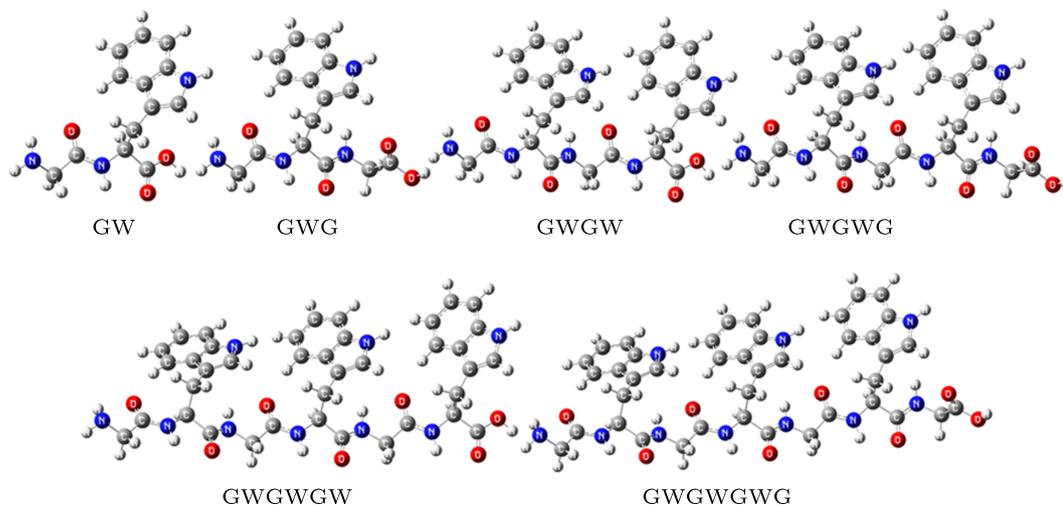


图 1 GW 寡肽的六种优化后的结构 (● 代表 C 原子, ● 代表 O 原子, ● 代表 N 原子, ● 代表 H 原子; G 表示甘氨酸, W 表示色氨酸)

## 3 结果分析讨论

### 3.1 平均结合能和寡肽官能团频率的分析

为了说明 GW 寡肽六种结构的稳定性, 我们对这六种结构的寡肽进行了平均结合能<sup>[24]</sup>的计算, 计算公式如下:

$$E_b = \frac{E_{\text{total}} - \frac{1}{2}n_1E_{N_2} - \frac{1}{2}n_2E_{O_2} - \frac{1}{2}n_3E_{H_2} - n_4E_C}{n_1 + n_2 + n_3 + n_4},$$

式中的  $E_b$  为平均结合能,  $E_{\text{total}}$  为寡肽总能量,  $E_{N_2}$ ,  $E_{O_2}$ ,  $E_{H_2}$ ,  $E_C$  分别表示氮原子、氧原子、氢原子和碳原子的能量  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$ ,  $n_4$  分别为寡肽中氮原子、氧原子、氢原子和碳原子个数.

GW 寡肽的平均结合能随着寡肽残基数的增加呈奇偶震荡下降趋势, 当寡肽的残基数  $n$  为奇数时, GW 寡肽的平均结合能随寡肽残基数的增加呈单调递减变化, 当寡肽的残基数  $n$  为偶数时, GW 寡肽的平均结合能随寡肽残基数的增加也呈单调递减变化, 但平均结合能受寡肽侧链基团的影响较大, 如图 2 所示. 该结果表明 GW 寡肽链的六种结构

从能量上是越来越稳定的, 寡肽链状构型在能量上存在优势. 有文献报道, 在一些无机分子构成的纳米链、棒体系中, 化学反应活性主要集中在链的两端<sup>[25]</sup>. 因此, 我们从平均结合能的结果推测氨基酸寡肽存在链状构型的自组装现象. 另外, 色氨酸侧链较大基团对平均结合能的影响很大, 说明在寡肽生长过程中, 除了链状生长的趋势外还可能存在着优先组装大分子的特性.

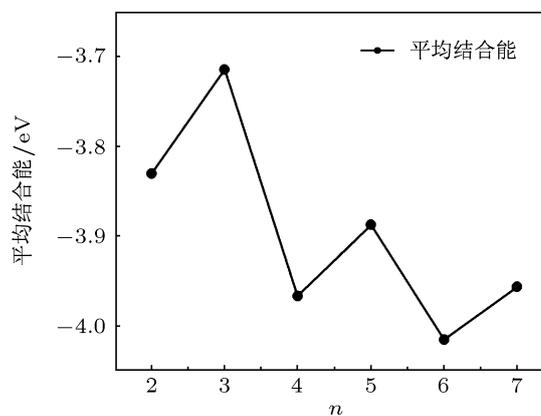


图 2 平均结合能与寡肽残基数的关系

### 3.2 红外振动光谱结果和分析

在表 1 中, 给出了结构中主要官能团的振动频率的实验值和理论值的数据对比. 我们计算模拟的寡肽特征官能团, 所得的振动频率数据与理论计算值数据和实验室测量的振动频率数据基本符合, 说明本文的计算方法合理, 计算结果准确、可信. 因此, 所发现的现象、分析得到的结论准确性高, 对实验将具有一定理论指导和分析意义.

从振动红外光谱中可以发现一些特征峰的振动频率会随着寡肽肽链的增长发生频移现象. 由于在红外光谱实验中, 一般只能找到最强峰的振动频率, 且红外光谱对振动耦合效应的分辨率不高, 所以我们统计了振动强度在 20—300 a.u. 之间的中波

段的典型振动的变化规律. 根据本文结果总结为以下四种情况: 频率红移现象, 频率蓝移现象, 频率的奇偶效应和频率不移动.

### 3.3 振动频率随着寡肽肽链生长发生红移现象

在主链的振动中, 最重要的两个振动分别是肽键 C=N 的链向伸缩振动、肽链上羰基 C=O 的径向伸缩振动, 为相同基团的集体振动, 如图 3(a), (b) 所示. 寡肽中肽键的振动频率和肽链上羰基的振动频率均随着寡肽残基数增加向低频率方向移动, 即产生了频率红移.

表 1 理论和实验的红外振动光谱频率对比

官能团	振动类型	实验值/cm <sup>-1</sup>	理论值/cm <sup>-1</sup>	本文结果/cm <sup>-1</sup>
NH <sub>2</sub> +CH <sub>2</sub>	N-H 面外摇摆 +C-H 摇摆	893 <sup>[6]</sup>	897 <sup>[8]</sup>	894—898
NH <sub>2</sub>	N-H 剪式振动	1610 <sup>[6]</sup>	1673 <sup>[8]</sup>	1671—1673
CONH	C-N 伸缩振动	1550 <sup>[6]</sup>	1558 <sup>[8]</sup>	1535—1559
CO	C=O 伸缩振动	1703 <sup>[6]</sup>	1753 <sup>[8]</sup>	1741—1767
COOH	C=O 伸缩 +O-H 面内摇摆	1780 <sup>[26]</sup>	1811 <sup>[26]</sup>	1827—1850
苯环	类呼吸振动	950—1225 <sup>[27]</sup>	—	1041—1048
苯环	C-H 面外摇摆	730—770 <sup>[27]</sup>	750 <sup>[27]</sup>	761—767

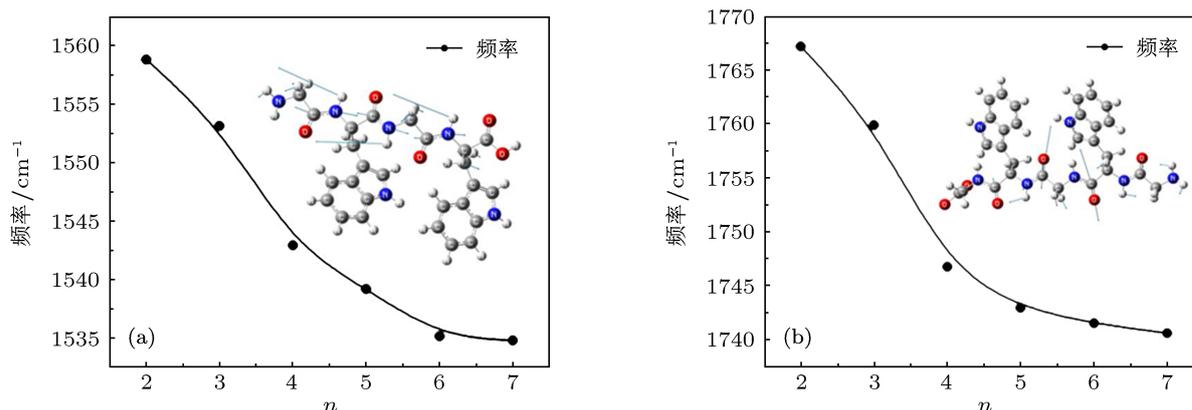


图 3 (a) 肽键振动频率与残基数的关系; (b) 肽链上羰基振动频率与残基数的关系

随着寡肽残基数的增加, 相同基团数目增加, 使得同类基团的振动的频率出现裂分, 导致振动产生耦合效应, 振动的频率出现频移. 在我们的结果中, 振动强度最大的频率偏向于红移, 而强度很小的振动偏向于蓝移. 由于振动强度上的优势, 光谱图中频率的红移现象非常清晰, 而蓝移现象不明显.

此外, 我们计算了各个结构的偶极矩, 由图 4 可知, 结构的偶极矩以 X 轴分量为主, 并且随着寡肽残基数增加呈单调递增, 说明随着肽链的生长, 导致各基团之间在链向方向 (X 轴向) 偶极矩越来越大, 从而使诱导效应越来越弱, 最终导致切向方向的振动频率为红移. 此外, 随着寡肽肽链的增长, 寡肽链体

系中的共轭体肽键个数增加,也将导致频率红移.因此,在多种因素共同的作用下,导致了这些基团振动的频率存在红移现象.

### 3.4 振动频率随着肽链的生长发生蓝移现象

除了相同基团的集体振动外,还存在基团的单一振动.例如,寡肽链端部的氨基-NH<sub>2</sub>面外摇摆和亚甲基-CH<sub>2</sub>的面内摇摆的组合振动;寡肽侧链苯环上氢垂直苯环平面的面外摇摆振动,如图5(a),(b)所示.我们发现,随着肽链的生长,这两种单一基团的振动频率向高频方向移动,存在频率蓝移这一反常现象.

虽然这两种频率都是蓝移趋势,但我们分析认为导致这两种振动频率蓝移的原因并不完全相同.虽然结构偶极矩变大,结构整体诱导效应变弱,但对NH<sub>2</sub>-端部氨基酸残基而言,使得电子云密度增加,诱导效应变强,产生了反常的蓝移现象.对于侧链苯环-H的面外摇摆振动,随着侧链基团的增加,侧链基团之间位阻效应逐渐变强,从而导致了蓝移现象.也就是说,诱导效应既导致了主链上的切向振动频率的红移,又导致了NH<sub>2</sub>-端部氨基酸残基的振动频率的蓝移;而侧链基团振动频率的蓝移趋势则来源于侧链基团之间的位阻效应.值得一提的是Yu等在缬氨酸单分子体系内发现了氢键既可导致红移又可导致蓝移现象<sup>[25,28]</sup>.氢键分别作为电子受体和供体的特点,决定了电子云的分布及诱导效应变化,与本文结果相符.

### 3.5 振动频率随着肽链的生长发生奇偶震荡

在上述讨论的端部振动分析中,由于-NH<sub>2</sub>离侧链基团距离较远,因此受侧链基团位阻效应的影响非常小,而在寡链的另一-COOH端部残基,则受侧链基团影响很大.我们分别给出了-COOH端部甘氨酸残基的振动和羧基的振动.由图6(a)可知,-COOH端部甘氨酸残基的振动频率随着寡肽残基数增加存在奇偶震荡:当寡肽残基数 $n$ 为偶数,无甘氨酸残基的特征振动;当寡肽残基数 $n$ 为奇数,振动频率随着残基数的增加产生蓝移现象.在图6(b)中,肽链端部-COOH的振动方式是羰基-C=O的伸缩振动和羟基-OH的摇摆振动的组合.频率变化同样存在奇偶震荡:当寡肽残基数 $n$ 为偶数

时,寡肽端部羧基的振动频率随着寡肽残基数的增加产生了蓝移;当寡肽残基数 $n$ 为奇数时,寡肽端部羧基的振动频率随着寡肽残基数的增加产生了红移.

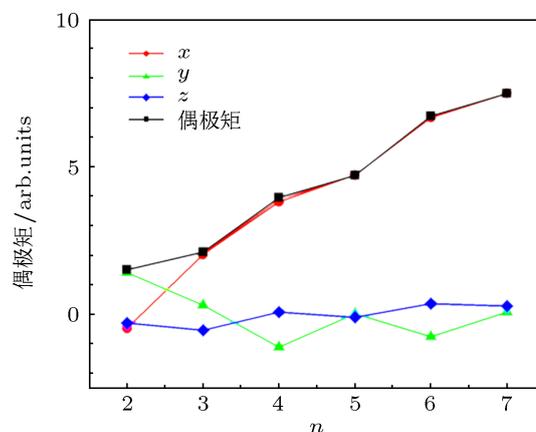


图4 偶极矩与寡肽残基数的关系

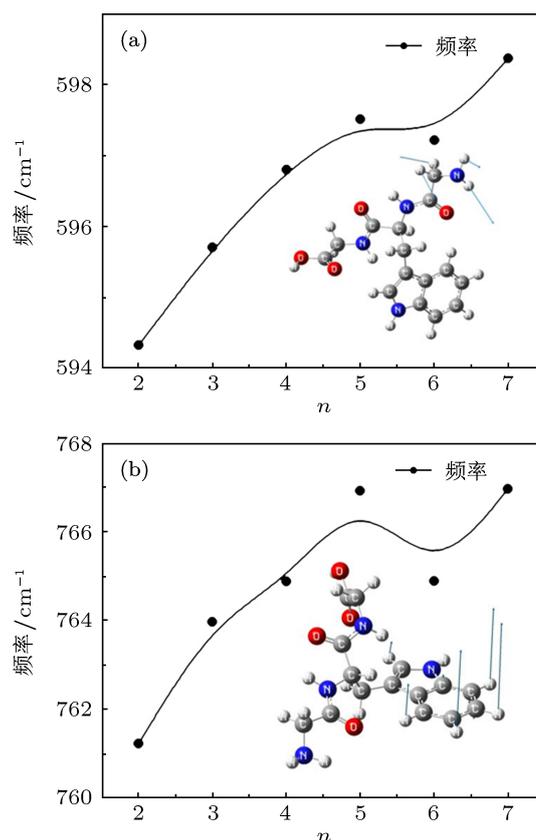


图5 (a) 寡肽端部氨基和亚甲基的组合振动频率与残基数的关系; (b) 寡肽侧链苯环上氢的振动频率与残基数的关系

这两种振动频率随着寡肽残基数的增加均存在奇偶效应.其主要原因是寡肽-COOH端部氨基酸残基的种类不同:只有当寡肽残基数 $n$ 为奇数时,-COOH端部为甘氨酸残基,具有甘氨酸残基的特

征振动;当寡肽残基数  $n$  为偶数时,其端部为色氨酸残基,因此不具有甘氨酸残基的特征振动.这类寡肽(残基数  $n$  为奇数时)的结构偶极矩随着寡肽残基数的增加而变大,结构整体诱导效应变弱,但对-COOH 端部氨基酸残基而言,电子云密度也是增加的,诱导效应变强,产生了蓝移现象,如图 6(a)所示.

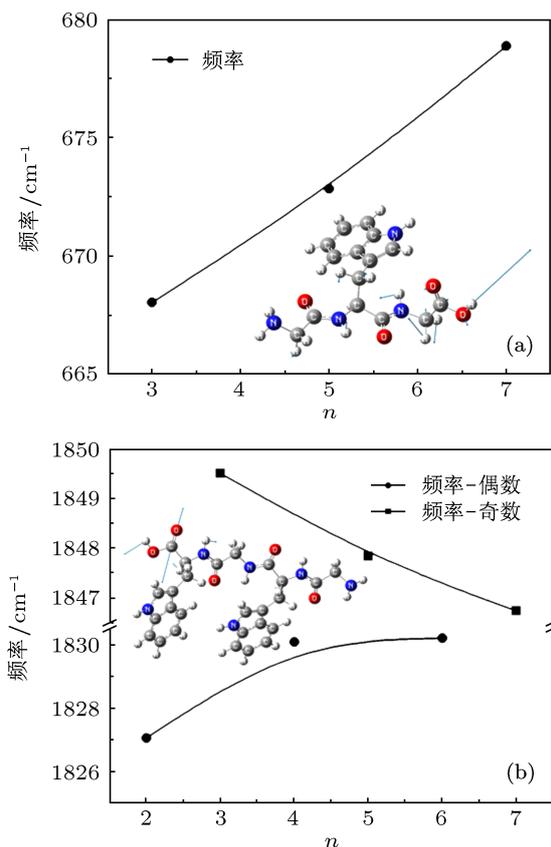


图 6 (a) 寡肽端部甘氨酸残基的振动频率与残基数的关系; (b) 寡肽端部羧基的振动频率与残基数的关系

对于图 6(b) 振动频移的现象:当残基数  $n$  从偶数到奇数的变化过程中,即 GW 寡肽增加了一个甘氨酸残基后,导致甘氨酸羧基与寡肽侧链吡啶环的距离变得更近,空间位阻变大,存在明显的频率跃变.对于端部甘氨酸羧基而言,随着肽链的生长、侧链基团的不断引入,侧链基团的位阻效应将越来越弱,使得其位阻效应越来越小,形成了红移现象,如图 6(b) 中,频率-奇数曲线所示;而对于端部氨基酸残基区域的-COOH 端而言,随着寡肽残基数的增加,诱导效应变强,使得端部-COOH 振动存在蓝移现象,如图 6(b) 中,频率-偶数曲线所示.我们把这类振动的原因总结为由于端部残基的不同导致端部基团振动频率出现奇偶现象:端部氨基酸残基区域的诱导效应变强,使得端部残基的振动存在蓝

移现象;随着寡肽残基数的增加,侧链基团的不断引入,侧链基团的位阻效应变弱,又使得端部振动频率存在红移现象.在多种因素共同竞争的作用下,产生了本文列出的丰富的频移现象.随着肽链的继续生长,各种因素的作用都将减小,导致振动频率趋于某一固定值.

在所有振动类型中,绝大多数振动因耦合效应导致频率裂分,其红外强度都有偏好,使得在光谱图中表现出该频率的红移或者蓝移;但也有少数的振动,其红外光谱频率裂分都具有一定强度,如图 7 所示的寡肽侧链上苯环的类呼吸振动.振动频率耦合中最大频率蓝移和最小频率红移现象.

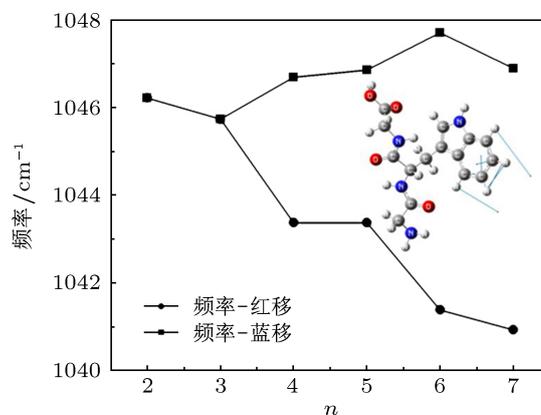


图 7 寡肽侧链上苯环类似呼吸振动的耦合效应

由图 7 可知,随着寡肽残基数的增加,相同基团数目增加,使得同类基团的振动的频率出现裂分,导致振动产生耦合效应,振动的频率出现频移.频移一般规律为最大频率发生蓝移,最小频率发生红移.在耦合效应中寡肽频率裂分的最小频率和最大频率随着残基数的增加存在奇偶现象.最小频率中:当寡肽残基数  $n$  为偶数时,寡肽侧链上苯环类似呼吸振动频率随着残基数的增加发生红移现象;当寡肽残基数为奇数时,寡肽侧链上苯环类似呼吸振动频率随着残基数的增加发生红移现象.最大频率中:当寡肽残基数为偶数时,寡肽侧链上苯环类似呼吸振动频率随着残基数的增加发生蓝移现象;当寡肽残基数为奇数时,寡肽侧链上苯环类似呼吸振动频率随着残基数的增加发生蓝移现象.

### 3.6 振动频率不随寡肽残基数的增加发生频移,其振动频率基本保持不变

除了振动频率出现丰富的频移现象外,还存在频率基本保持不变的振动,这类振动大多为寡肽链

端部上的 H 原子的振动. 图 8 为寡肽端部氨基上氢的剪式振动, 该振动频率随着寡肽残基数的增加基本不发生移动. 由图 1 可知, 端部的氨基在整个肽链的增长中处于较孤立的位置, 所以在寡肽链生长过程中受其他基团影响的变化较小, 其结构不随寡肽链的增长而发生变化. 导致端部  $\text{-NH}_2$  振动频率不随寡肽残基数的增加而发生频率现象, 其振动频率基本保持不变.

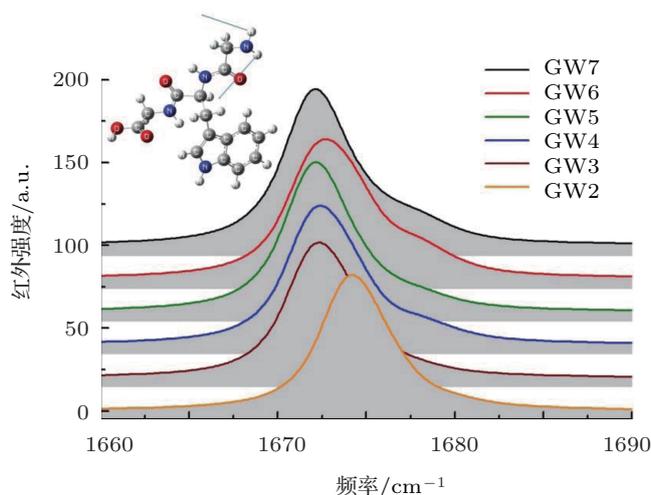


图 8 端部氨基上氢的红外光谱

## 4 结论

由平均结合能分析推测, 氨基酸生长成寡肽链过程中存在链状构型存在自组装现象, 并且有优先组装大分子的特性. GW 寡肽侧链及其他基团对寡肽的振动频率有着很大的影响, 随着寡肽残基数的增加, 基团的振动频率存在尺寸效应. 频移规律表现为寡肽主链上肽键  $\text{C}=\text{N}$  的链向伸缩振动、肽链上羰基  $\text{C}=\text{O}$  的径向伸缩振动频率存在红移现象; 寡肽端部氨基和亚甲基的氢的摇摆振动以及苯环上氢的摇摆振动频率存在蓝移现象; 寡肽另一端部羧基振动、甘氨酸振动频率由于寡肽端部的氨基酸残基种类不同存在奇偶效应; 寡肽端部氨基上氢的剪切振动频率基本不随寡肽残基数的增加而发生变化. 综上结果表明随着 GW 寡肽残基数的增加, 寡肽中特征基团的振动频率会发生频移, 并且寡肽主链振动频率受侧链吡啶环基团影响十分突出, 对肽链生长从小分子到大团簇的过程中, 物理化学属性也可能有较明显的过渡性变化. 本文的结果对肽链在红外光谱的测定和寡肽的合成等研究有一定指导意义.

- [1] Toroz D, Van Mourik T 2006 *Mol. Phys.* **104** 559
- [2] Bakker J, Plutzer C, Hunig I, Haber T, Compagnon I, von Helden G, Meijer G, leinermanns K 2005 *Chem. Phys. Chem.* **6** 120
- [3] Abo-Riziq A G, Bushnell J E, Crews B, Callahan M P, Grace L, De Vries M S 2005 *Int. J. Quantum Chem.* **105** 437
- [4] Hayakawa S, Hashimoto M, Matsubara H, Turecek F 2007 *J. Am. Chem. Soc.* **129** 7936
- [5] Kapota C, Ohanessian G 2005 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7** 3744
- [6] Santosh K, Amareshwar K R, Singh V B, Rai S B 2005 *Spectrochim Acta A* **61** 2741
- [7] Medhat I, Abdel A M, Osama O, Mohamed A E, May E 2011 *Spectrochim Acta A* **81** 724
- [8] Malgorzata B, Julien B, Ivan C, Pawel P, Vincenzo B 2012 *J. Mol. Struct.* **1009** 74
- [9] Perczel A, MeAllister M A, Csaszar P, Csizmadia I G 1994 *Can. J. Chem.* **72** 2050
- [10] Perezel A, Endredi G, MeAllister M A, Farkas O, Csaszar P, Ladik J, Csizmadia I G 1994 *J. Mol. Struct.* **331** 5
- [11] Xu C, Cao J, Gao C Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4221 (in Chinese) [徐灿, 曹娟, 高晨阳 2006 物理学报 **55** 4221]
- [12] Cao J, Xu C, Zhu L F, Gao C Y 2007 *Spectrosc. Spect. Anal.* **27** 1715 (in Chinese) [曹娟, 徐灿, 朱莉芳, 高晨阳 2007 光谱学与光谱分析 **27** 1715]
- [13] Zhou G R, Teng X Y, Wang Y, Geng H R, Hur B Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 066101 (in Chinese) [周国荣, 滕新营, 王艳, 耿浩然, 徐甫宁 2012 物理学报 **61** 066101]
- [14] Pan R Q, Xu Z J, Zhu Z Y 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 1321
- [15] Yao J N, Fu H B 2002 *Physics* **2** 31 (in Chinese) [姚建年, 付红兵 2002 物理 **2** 31]
- [16] Wei J, Chen Y J, Xu Z 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 057502 (in Chinese) [魏杰, 陈彦均, 徐卓 2012 物理学报 **61** 057502]
- [17] Li C, Hou Q Y, Zhang Z D, Zhang B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 077102 (in Chinese) [李聪, 侯清玉, 张振铎, 张冰 2012 物理学报 **61** 077102]
- [18] Yu W B, Liang L, Lin Z J, Ling S L, Haranczyk M, Gutowski M 2009 *J. Comput. Chem.* **30** 589
- [19] Yu W, Wu Z, Chen H, Liu X, MacKerell A D, Lin Z 2012 *J. Phys. Chem. B* **116** 2269
- [20] Yu W B, Xu X, Li H B, Pang R, Fang K, Lin Z J 2009 *J. Comput. Chem.* **30** 2105
- [21] Wada K, Nakashita M, Bundo M 1998 *Chem. Lett.* **1** 765
- [22] Becke A D 1988 *Phys. Rev. A* **38** 3098
- [23] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B 2004 Gaussian 09, Revision C. 01, Wallingford CT: Gaussian, Inc.
- [24] Xu C, Cao J, Zhu L F, Gao C Y 2006 *Acta Phys. Chim. Sin.* **22** 451 (in Chinese) [徐灿, 曹娟, 朱莉芳, 高晨阳 2006 物理化学学报 **22** 451]
- [25] Chen L, Xu C, Zhang X F, Cheng C, Zhou T, Zhu L F 2009 *Int. J. Quantum Chem.* **109** 349
- [26] Mario T R, Maria Leonor T S D, Rui F 1998 *Vib. Spectrosc.* **16** 35
- [27] China Normal University 2011 *analytical chemistry* (Beijing: High Education Press) p91-96 (in Chinese) [华中师范大学等编 2011 分析化学第四版(下册)(北京: 高等教育出版社) 第 91—96 页]
- [28] Yu W, Lin Z, Huang Z 2006 *Chem. Phys. Chem.* **7** 828

# DFT research on the IR spectrum of glycine tryptophan oligopeptides chain\*

Li Xin<sup>1)</sup> Yang Meng-Shi<sup>1)</sup> Ye Zhi-Peng<sup>1)</sup> Chen Liang<sup>2)</sup>†  
Xu Can<sup>3)</sup> Chu Xiu-Xiang<sup>2)</sup>

1) (School of Engineering, Zhejiang A&F University, Linan 311300, China)

2) (School of Science, Zhejiang A&F University, Linan 311300, China)

3) (Key Lab for Magnetism and Magnetic Materials, Ministry of Education, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

(Received 17 December 2012; revised manuscript received 17 April 2013)

## Abstract

By using the density functional theory, six structures of oligopeptides chain configuration, consisting of glycine and tryptophan alternatively, are optimized at the B3LYP/6-31 G(d) level. The average binding energy and IR spectrum are calculated. Results show that the stability of oligopeptides grows monotonously with the peptide chain growth. The vibration infrared spectrum analysis show that with the growth of oligopeptides peptide chain, the vibration frequency of one functional group shows blue shift or even-odd shift; while coupling vibration of the same functional group shows red shift, and steady frequencies at the end of chain appear on the infrared spectrum, that is to say, coupling effect, parity effect and size effect exist when, glycine tryptophan oligopeptides, consisting of glycine and tryptophan alternatively, change with peptide chain. The result is significant in measuring the length and number of residue of peptide chain.

**Keywords:** oligopeptides, infrared spectrum, coupling effect, size effect

**PACS:** 61.46.-w, 31.15.E-, 87.14.ef

**DOI:** 10.7498/aps.62.156103

\* Project supported by the National Science Fund for Distinguished Young Scholars of China (Grant No. 50925103), and the Science and Technology Innovation Plan of University Students (Xinmiao Personnel Plan) Item, Zhejiang province, China.

† Corresponding author. E-mail: liang\_chen05@126.com