

УДК 577.22+577.212.4+577.112.012

В. А. Карасев, канд. биол. наук**В. В. Лучинин**, д-р техн. наук

Санкт-Петербургский Государственный Электротехнический университет «ЛЭТИ»

МОДЕЛЬ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО КОДИРОВАНИЯ ЦЕПНЫХ ПОЛИМЕРОВ ДЛЯ БИОНИЧЕСКОЙ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

I. Топологический код соответствия физических операторов триплетам кода

Ключевые слова: цепные полимеры, бионика, наноэлектроника, топологический код, физические операторы

Модель топологического кодирования цепных полимеров, предложенная авторами для бионической наноэлектроники, состоит из топологического кода и системы физических операторов. Топологический код построен на основе четырехзвенного цепного графа — аналога четырехзвенного фрагмента цепного полимера. Показано, что все 64 конформации цепного графа описываются матрицами из 6 булевых переменных и образуют блочную суперматрицу, которая преобразуется в триплетный код, изоморфный булеву гиперкубу V^6 . Система физических операторов, воссоздающих конформации полимера, закодированные триплетами, состоит из операторов связности и анти-связности. Модель описывает свойства реального генетического кода.

I Введение

В современной наноэлектронике, возникшей в начале 80-х годов прошлого века [1], существуют два направления развития [2–4]. Первое направление связано с поиском принципиально новых материалов, пригодных для создания молекулярных проводов и элементной базы наноэлектроники [2, 3]. Были синтезированы и исследованы разнообразные материалы [5–12], относящиеся к классу полисопряженных систем, которые нашли применение в технике при создании органических проводов, транзисторов, фотодиодов [6, 7, 13, 14]. Они являются заменой материалов металлической и кремниевой природы, но пока не стали основой системы элементов, пригодной для создания функциональных наноструктур.

В рамках второго направления, которое мы называем бионической наноэлектроникой, ведется поиск принципов построения и работы уже существующих молекулярных устройств, известных в молекулярной биологии [4]. Конечная цель этого направления — использование найденных в биологии закономерностей

и принципов для создания наномолекулярных устройств, обладающих заранее заданными свойствами.

Из электроники известно, что особенности функциональных электронных устройств, обусловлены выбором принципов переноса зарядов и методов построения их топологической архитектуры. В биосистемах, как известно, также происходят процессы, связанные с переносом зарядов (электронов и протонов). Надмолекулярные структуры, из которых построены клетки биосистем, обладают своеобразной топологией. Таким образом, если биосистемы рассматривать как иерархически организованные электронные устройства сверхвысокой сложности, то их структура и свойства также должны быть связаны с принципами переноса зарядов и построения топологии биоструктур. Именно эти проблемы и составляют основу исследований, проводимых нами в рамках бионической наноэлектроники. От концептуальной разработки этих проблем [4] мы вплотную приблизились к этапу практического использования полученных теоретических результатов.

В рамках разработки проблемы переноса зарядов в биоструктурах нами была предложена концепция систем сопряженных ионно-водородных связей (ССИВС) [4, 16–18]. Эти системы выступают в качестве основы построения надмолекулярных биоструктур и в качестве каналов переноса зарядов в этих структурах. В составе ССИВС биомолекулы играют роль электронных модулей. За входы приняты атомы водорода, а за выходы — неподеленные пары электронов. Среди этих молекул выделены молекулярные клапаны, элементы задержки сигнала, источники зарядов [4, 19, 20]. Основными условиями реализации модели переноса зарядов по ССИВС являются симметрия и субъединичное строение биоструктур, а следствием очередности работы субъединиц, что соответствует организации и работе биоструктур.

Построения логических схем на основе принципа непрерывности ССИВС — это один из аспектов разработки бионических наносистем. Другим важным аспектом является поиск принципов конструирования топологии таких систем. Эти проблемы решаются нами в

рамках модели топологического кодирования цепных полимеров [21–28]. Целью настоящей статьи является обзор работ авторов, посвященных развитию этой модели, с акцентом на полученные недавно результаты.

1. Топологический код

1.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИСХОДНЫХ ПОНЯТИЙ

Модель топологического кодирования цепных полимеров [22–28] состоит из трех частей: *топологического кода*, *системы физических операторов* и *алгоритма кодирования*. Наше изложение будет сосредоточено на первых двух частях этой модели.

Под цепными полимерами мы понимаем неразветвленные полимеры, состоящие из унифицированных звеньев. Как видно из рис. 1, а звено образуют два α -атома (ими могут быть, например, α -углеродные атомы) основной цепи и соединительная группа $HQ-R=X$. Если вместо Q подставить атом N , вместо R — атом C , а вместо X — атом O , то мы получим группу $HN-C=O$ — пептидную группу белков. Наша модель предназначена для таких цепных полимеров, в которых соединительные группы основной цепи, а также боковые цепи обладают способностью к образованию ССИВС [4, 20]. В рамках модели эта способность называется свойством связности. Примеры таких групп и цепных полимеров приведены в работах [25, 27]. В биоструктурах соединительными группами являются $HN-C=O$ -группа белков и $HO-P=O$ -группа нуклеиновых кислот.

В качестве минимального объекта для последующего теоретического анализа был выбран четырехзвенный фрагмент цепного полимера (рис. 1, б). Выбор именно этого фрагмента не случаен. Он связан с тем, что для ряда таких полимеров (например, белков) в этом фрагменте образуется водородная связь между двумя соединительными группами $X_{i-1}=R-Q_iH, \dots, X_{i-4}=R-Q_{i-3}H$, что приводит к образованию цикла с фиксированными i -м и $i-4$ -м атомами (показано штриховой линией).

Аналогом цепных полимеров, может служить n -звенный цепной граф [22–24]. Для данного белкового фрагмента таким аналогом является четырехзвенный цепной граф (рис. 1, в). В этом графе вершины ($i, i-1, \dots, i-4$) соответствуют α -атомам повторяющихся звеньев полимера, а структурные ребра — связям, соединяющим α -атомы звеньев в цепь. Для описания конформаций полимера и графа нами были введены дополнительно ребра связности (на рис. 1, в — штриховая линия), которые соответствуют фиксированным атомам в полимере. Эти ребра соединяют несмежные вершины. Длина структурного ребра соответствует константе k_s и для цепного полимера является постоянной величиной, а ребра связности — константе k_c , которая может варьировать в пределах $0 - 2k_s$. Может существовать несколько констант k_c .

Для матричного описания конформации полимера и цепного графа существенны только ребра связности. Наличие ребра связности мы будем обозначать как 1, а отсутствие ребра — как 0. В применении к показанному четырехзвенному фрагменту такое описание приведено на рис. 1, г. Общий вид матрицы, описывающей конформации четырехзвенного фрагмента белка и гра-

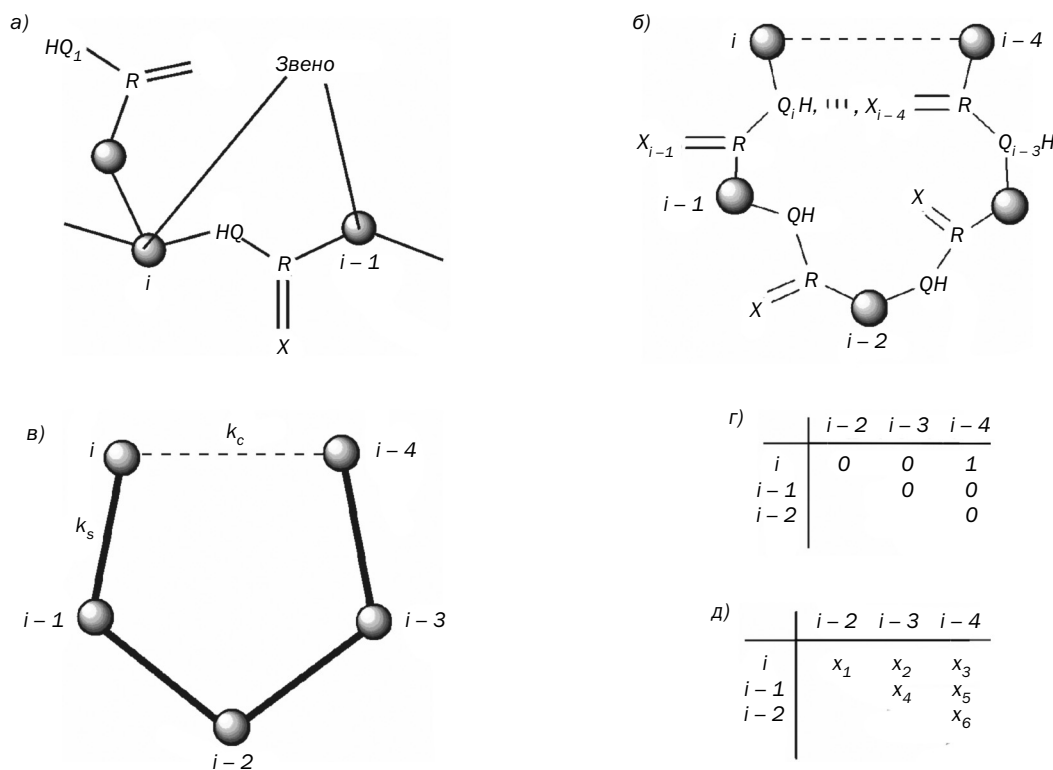


Рис. 1 Основные понятия модели топологического кодирования цепных полимеров: а — звено цепного полимера; б — четырехзвенный фрагмент; в — четырехзвенный граф; г — матрица, описывающая конформацию данных фрагментов полимера и графа; д — общий вид матрицы

фа, показан на рис. 1, д, где $i, i - 1, \dots, i - 4$ — обозначения α -атомов или вершин графа, x_1, x_2, \dots, x_6 — переменные, принимающие значения 0 или 1.

1.2. Построение топологического кода

1.2.1. ПРИНЦИП ПОСТРОЕНИЯ СУПЕРМАТРИЦЫ КОНФОРМАЦИЙ ЧЕТЫРЕХЗВЕННОГО ГРАФА

Нами были рассмотрены все возможные конформации четырехзвеного графа: от полностью развернутой, матрица которой состоит из нулей, до полностью связной, которая описывается матрицей, состоящей из шести единиц [22–28]. Общее их количество 64. В упорядоченном виде они представляют собой блочную суперматрицу конформаций четырехзвеного графа (рис. 2).

Как видно на рис. 2, в суперматрице имеются четыре блока с общими переменными x_3, x_4 (показаны крупными цифрами). Ряды в блоках образованы матрицами с одинаковыми первыми парами переменных (x_1, x_2) в порядке 00, 10, 01, 11, а столбцы — матрицами, единичными третьими парами (x_5, x_6), но в порядке 00, 01, 10, 11. Полностью несвязный граф, описываемый матрицей с шестью переменными 0, расположился в левом верхнем углу суперматрицы, а граф с полностью связными вершинами, описываемый матрицей с переменными 1, в правом нижнем углу. В блоках 00 и 01 находятся ациклические конформации графа (переменная $x_3 = 0$), а в блоках 10 и 11 — циклические ($x_3 = 1$). В суперматрице имеются три типа симметрии, рассмотренные в работах [24, 26, 27].

Расположение матриц и графов в таблице таково, что соседние элементы в блоке отличаются друг от друга только на одно значение (один бит информации). Таким обра-

2	00				01			
	00	01	10	11	00	01	10	11
1								
00								
10								
01								
11								
00								
10								
01								
11								
2	10				11			

Рис. 2 Суперматрица конформаций четырехзвеного графа и их матричные описания

зом, данная система напоминает код Грея, в котором различия между соседними элементами минимально [29], что минимизирует ошибки в процессе передачи информации. Однако это сходство является формальным, поскольку мы имеем дело со структурным описанием графов, а не с кодированием. Двумерное расположение элементов в суперматрице не отражает всех возможных однобитовых переходов. В работах [22–24] показана пространственная структура суперматрицы в форме булева гиперкуба B^6 . В ней однобитовыми переходами связаны все элементы.

1.2.2. ТРАНСФОРМАЦИЯ СУПЕРМАТРИЦЫ В ТРИПЛЕТНЫЙ ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ КОД

Форма представления информации о структуре графа в виде матриц, состоящих из шести булевых переменных, очевидно, мало подходит для передачи, воспроизведения и тиражирования. По этой причине возникает необходимость в ее перекодировании в пригодную для этих целей линейную цепь [22–24]. Поскольку количество переменных в матрицах, описывающих состояния связности четырехзвенных цепных графов, равно шести, т. е. составляет три пары, то каждую пару можно обозначить своей буквой, например:

$$x_1x_2 — X; \quad x_3x_4 — Y; \quad x_5x_6 — Z. \quad (*)$$

В результате образуется триплет XYZ. Каждая пара переменных в триплете может принимать четыре значения (00, 01, 10, 11). Их можно закодировать с помощью четырехбуквенного кода, присвоив каждой паре свою букву:

$$K — 00; \quad L — 01; \quad N — 10; \quad P — 11. \quad (**)$$

На основе использования этих соответствий суперматрица была трансформирована в триплетный топологический код, показанный на рис. 3. В закодированном виде, информация о структуре четырехзвенных графов будет носить характер одномерной цепи. Ациклические конформации графа, в которых переменная $x_3 = 0$, закодированы триплетами, содержащими буквы K и L во втором положении, а циклические ($x_3 = 1$) — триплетами, содержащими во втором положении буквы N и P. Симметрия триплетов в коде аналогична симметрии матриц в суперматрице.

1.2.3. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА ТОПОЛОГИЧЕСКОГО КОДА

Как мы упоминали в разделе 1.2.1, пространственным представлением суперматрицы, описывающей конформации четырехзвенного графа с помощью матриц из шести переменных, является гиперкуб B^6 . Для топологического кода, преобразованного из суперматрицы, пространственным представлением будет структура, изоморфная булеву гиперкубу B^6 (рис. 4). С несколько иными буквенными обозначениями она была рассмотрена нами в работе [24].

Как следует из рисунка, триплеты с двумя общими неизменными буквами и третьей варьирующей расположились в виде квартетов, друг над другом. В данной

структуре сохранились все свойства гиперкуба, описанные в работах [22–24], в частности иерархия структур. Симметрия триплетов имеет в гиперкубе те же особенности, что и в таблице кода [22–24]. Преобразование антисимметрии в гиперкубе осуществляется путем замены букв триплетов по правилу $K \leftrightarrow P, N \leftrightarrow L$. Выделенные жирным шрифтом триплеты верхней части гиперкуба преобразуются на основе этого правила в триплеты нижней половины гиперкуба. При этом они занимают симметричное положение (гр. симм. C_2), например: $NKK \leftrightarrow LPP, PKK \leftrightarrow KPP, PNK \leftrightarrow KLP$ и т. д.

2. Физические операторы и их соответствия триплетам топологического кода

2.1. ВВЕДЕНИЕ ПОНЯТИЯ «ФИЗИЧЕСКИЙ ОПЕРАТОР»

Для воссоздания закодированной структуры графа цепным полимером необходимо, чтобы между кодирующим триплетом и боковой цепью полимера, воссоздающей закодированную структуру, существовало определенное соответствие [26, 27]. Как и выше, в качестве элементарного объекта в нашем анализе выступает четырехзвенный фрагмент цепного полимера. На рис. 5, а показано, что водородная связь атомов Q_iH, \dots, X_{i-4} является единственной областью, на которую могут воздействовать боковые цепи полимера при образовании четырехзвенного цикла (показано стрелкой). Описание конформации этого цикла, как и ранее (см. рис. 1, д), осуществляется с помощью матрицы из шести переменных (на рис. 5, а справа), причем наиболее существенной для его формирования является связь i -й и $i-4$ -й вершин, описываемая переменной x_3 (выделена жирным шрифтом).

В зависимости от оказываемого эффекта мы выделяем два типа таких боковых цепей, называемых нами физическими операторами — операторами связности и антисвязности (рис. 5, б и в).

Операторы связности — это такие боковые цепи полимера, которые обеспечивают дополнительную фиксацию четырехзвенного фрагмента (например, за счет водородных связей) в соответствии с закодированным фрагментом цепного графа. Для реализации этой функции они должны удовлетворять ряду требований, а именно: боковая цепь должна иметь на конце группы, способные к образованию водородных связей; размер цепи должен быть одного порядка с областью, на которую он действует; пространственное положение боковой цепи должно быть всегда одинаковым. Последнее обстоятельство может быть реализовано только в случае хиральности звеньев цепного полимера (D - или L -типа). Обобщенный вид оператора связности показан на рис. 5, б. Переменная x_3 в матрице равна 1.

Операторы антисвязности — это боковые цепи полимера, которые препятствуют формированию замкнутого 4х-звенного цикла, действуя в соответствии с закодиро-

2	$K \leftrightarrow 00$				$L \leftrightarrow 01$			
	$K \leftrightarrow 00$	$L \leftrightarrow 01$	$N \leftrightarrow 10$	$P \leftrightarrow 11$	$K \leftrightarrow 00$	$L \leftrightarrow 01$	$N \leftrightarrow 10$	$P \leftrightarrow 11$
00 ↓ K	0 0 0 0 0 0	0 0 0 0 0 1	0 0 0 0 1 0	0 0 0 0 1 1	0 0 0 1 0 0	0 0 0 1 0 1	0 0 0 1 1 0	0 0 0 1 1 1
10 ↓ N	1 0 0 0 0 0	1 0 0 0 0 1	1 0 0 0 1 0	1 0 0 0 1 1	1 0 0 1 0 0	1 0 0 1 0 1	1 0 0 1 1 0	1 0 0 1 1 1
01 ↓ L	0 1 0 0 0 0	0 1 0 0 0 1	0 1 0 0 1 0	0 1 0 0 1 1	0 1 0 1 0 0	0 1 0 1 0 1	0 1 0 1 1 0	0 1 0 1 1 1
11 ↓ P	1 1 0 0 0 0	1 1 0 0 0 1	1 1 0 0 1 0	1 1 0 0 1 1	1 1 0 1 0 0	1 1 0 1 0 1	1 1 0 1 1 0	1 1 0 1 1 1
00 ↓ K	0 0 1 0 0 0	0 0 1 0 0 1	0 0 1 0 1 0	0 0 1 0 1 1	0 0 1 1 0 0	0 0 1 1 0 1	0 0 1 1 1 0	0 0 1 1 1 1
10 ↓ N	1 0 1 0 0 0	1 0 1 0 0 1	1 0 1 0 1 0	1 0 1 0 1 1	1 0 1 1 0 0	1 0 1 1 0 1	1 0 1 1 1 0	1 0 1 1 1 1
01 ↓ L	0 1 1 0 0 0	0 1 1 0 0 1	0 1 1 0 1 0	0 1 1 0 1 1	0 1 1 1 0 0	0 1 1 1 0 1	0 1 1 1 1 0	0 1 1 1 1 1
11 ↓ P	1 1 1 0 0 0	1 1 1 0 0 1	1 1 1 0 1 0	1 1 1 0 1 1	1 1 1 1 0 0	1 1 1 1 0 1	1 1 1 1 1 0	1 1 1 1 1 1
2	$N \leftrightarrow 10$				$P \leftrightarrow 11$			

Рис. 3 Трансформация суперматрицы конформаций четырехзвенного цепного графа в три-плетный топологический код

ванном фрагментом цепного графа. Боковые цепи операторов антисвязности должны вклиниваться в область водородной связи основной цепи и не допускать образования водородной связи в этой области (рис. 5, в). Переменная x_3 в матрице принимает значение, равное 0. В отличие от операторов связности боковые цепи операторов антисвязности не должны иметь на конце группы, способные к образованию водородных связей. Остальные требования к их свойствам аналогичны.

2.2. СООТВЕТСТВИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ БЛОКАМ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО КОДА

Как следует из раздела 1.2.1, в суперматрице имеются два типа блоков [24, 26, 27]: два блока с ациклическими структурами (блоки 00 и 01), в матрицы которых входит переменная $x_3 = 0$, и два блока с циклическими конформациями графа (блоки 10 и 11), для которых $x_3 = 1$. Групповым свойством операторов антисвязности является воссоздание открытых конформаций графа ($x_3 = 0$), поэтому они должны быть приписаны

к блокам 00 и 01, тогда как свойством операторов связности является воссоздание циклических конформаций ($x_3 = 1$) и они должны соответствовать блокам 10 и 11. Если принять во внимание соответствия упомянутых переменных буквам триплетов (**), то для триплетного топологического кода (см. рис. 3) блокам триплетов, содержащим во втором положении K и L ($K = 00, L = 01$), должны соответствовать операторы антисвязности, а блокам N и P ($N = 10, P = 11$) — операторы связности.

2.3. ВОССОЗДАНИЕ СИММЕТРИЧНЫХ КОНФОРМАЦИЙ ФИЗИЧЕСКИМИ ОПЕРАТОРАМИ

В работах [26, 27] было показано, что симметричные конформации графов и описывающие их матрицы расположены внутри блоков симметрично относительно их главных диагоналей. Это вытекает из принципов построения суперматрицы. Рассмотрим, какие физические операторы должны воссоздавать эти конформации. Предположим, что это будут операторы связности (рис. 6). Как показано на рис. 6, а, оператор связности имеет направление

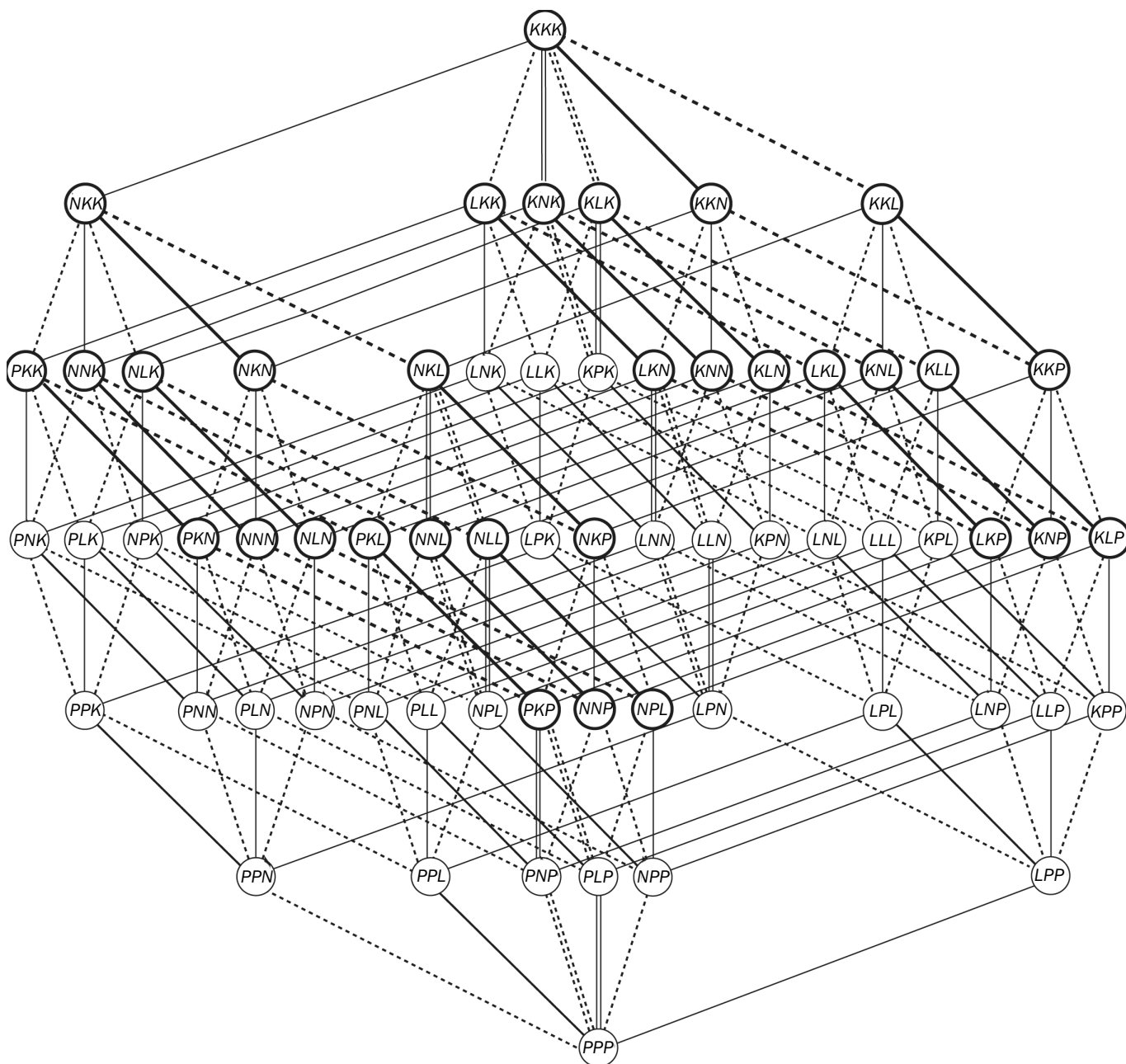


Рис. 4 | Пространственная структура триплетного топологического кода, изоморфная булеву гиперкубу B^6

(вектор) действия влево вверх, в результате чего разложение сил будет приводить к связности атомов $i - 2 - i - 4$ (показано штриховой линией), что описывается соответствующей матрицей справа. На рис. 6,б другой оператор, сходный по структуре с функциональной группировкой, но имеющий меньшую длину цепи, имеет вектор действия, направленный вправо вверх, что фиксируют атомы $i - i - 2$. Это также описывается матрицей (справа рис. 6, б). Сравнение показывает, что они описывают симметричные конформации. Таким образом, для воссоздания симметричных конформаций необходимы разные по длине физические операторы. При этом могут быть как сходные функциональные группы, так и различные [26, 27].

Обратим внимание на то, что близкие по структуре, но разные по длине физические операторы связности имеют разные векторы действия на связь QiH, \dots, X_{i-4} полимера. Это послужило отправной точкой рассмотре-

ния вопроса о построении системы физических операторов (канонического набора) в рамках модели молекулярной векторной машины (МВМ).

3. Модель топологического кодирования цепных полимеров и биоструктуры

Хотя отправной точкой создания нашей модели были биоструктуры, в настоящем виде она носит обобщенный характер. Теперь уже биоструктуры могут служить для иллюстрации наших теоретических положений и выступать в качестве частного случая модели топологического кодирования цепных полимеров. Покажем это на примере белков и генетического кода.

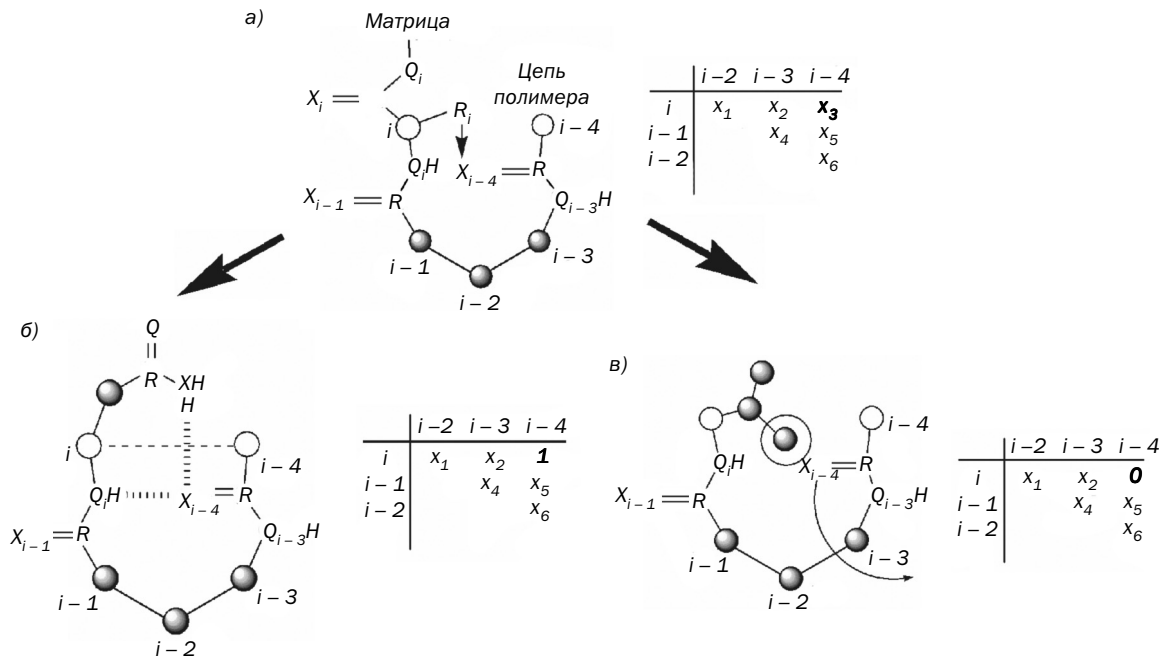


Рис. 5 Введение понятия «физический оператор»: а — область действия физического оператора; б — оператор связности; в — оператор антисвязности

Белки представляют собой цепной полимер. В качестве α -атомов в звеньях в них выступают α -углеродные атомы аминокислот. Соединительной группой звеньев в белках является $\text{HN}-\text{C}=\text{O}$ -группа. Если подставить эту группу в четырехзвенный фрагмент полимера (см. рис. 1, б), то получим четырехзвенный фрагмент белковой спирали с одной водородной связью между двумя пептидными группами $\text{N}_i\text{H}, \dots, \text{O}_{i-4}$ [29]. Таким образом, результаты анализа четырехзвенного фрагмента цепного полимера и его аналога четырехзвенного цепного графа можно целиком перенести на полипептиды и белки.

Рассмотрим теперь вопрос о трансформации суперматрицы конформаций четырехзвенного цепного графа в топологический код. Используем в (*) вместо букв К, L, N, P первые буквы названий азотистых оснований РНК:

$$\text{C} - 00; \text{U} - 01; \text{G} - 10; \text{A} - 11.$$

Выбор соответствий переменных определенным буквам был обусловлен свойствами боковых цепей аминокислот [22–28]. В результате подстановки на основе этих соответствий топологический код был трансформи-

рован в триплетный генетический код (рис. 7). Как видно из рисунка, в результате трансформации образовались четыре блока триплетов с общими буквами С, U, G, А во втором положении каждого триплета блока. Свойства симметрии и особенности структуры генетического кода совпадают со свойствами топологического кода [22–28]. Пространственная структура генетического кода, предложенная независимо от нашей модели, оказалась изоморфной булеву гиперкубу B^6 [21, 24–27]. Таким образом, исходя из нашей модели, было показано, что генетический код имеет топологическую природу.

Дальнейший анализ боковых цепей аминокислот в качестве физических операторов показал [26], что полярные аминокислоты можно рассматривать как операторы связности, а неполярные и слабополярные — как операторы антисвязности. Вывод о том, что операторы антисвязности должны соответствовать блокам триплетов, кодирующих ациклические конформации (в генетическом коде — блоки С, U), а операторы связности — блокам триплетов, кодирующих циклические конформации (в коде — блоки G, A), полностью подтвердил-

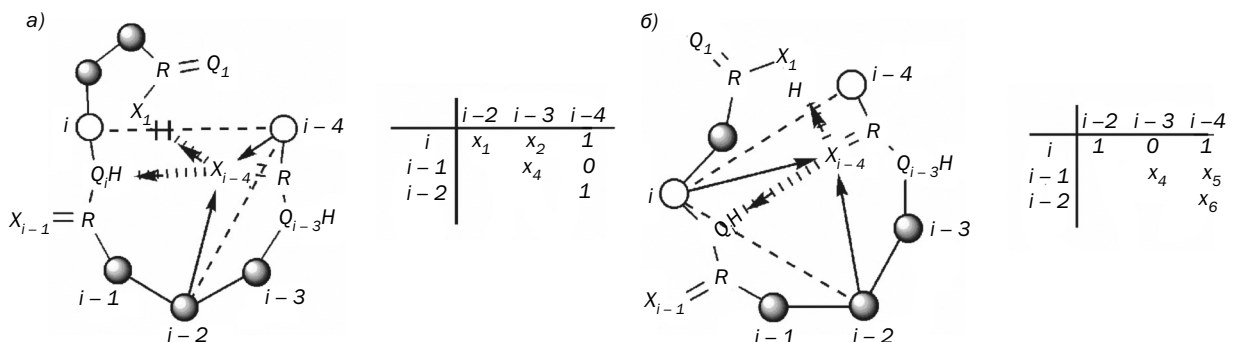


Рис. 6 Соответствия физических операторов триплетам, кодирующим симметричные конформации графа

2	C ↔ 00				U ↔ 01			
3	C ↔ 00	U ↔ 01	G ↔ 10	A ↔ 11	C ↔ 00	U ↔ 01	G ↔ 10	A ↔ 11
1	0 0 0 0 0	0 0 0 0 0	0 0 0 0 1	0 0 0 0 1	0 0 0 1 0	0 0 0 1 0	0 0 0 1 1	0 0 0 1 1
00 ↓ C	CCC Pro	CCU Pro	CCG Pro	CCA Pro	CUC Leu	CUU Leu	CUG Leu	CUA Leu
10	1 0 0 0 0	1 0 0 0 0	1 0 0 0 1	1 0 0 0 1	1 0 0 1 0	1 0 0 1 0	1 0 0 1 1	1 0 0 1 1
10 ↓ G	GCC Ala	GCU Ala	GCG Ala	GCA Ala	GUC Val	GUU Val	GUG Val	GUA Val
01	0 1 0 0 0	0 1 0 0 0	0 1 0 0 1	0 1 0 0 1	0 1 0 1 0	0 1 0 1 0	0 1 0 1 1	0 1 0 1 1
01 ↓ U	UCC Ser	UCU Ser	UCG Ser	UCA Ser	UUC Phe	UUU Phe	UUG Leu	UUA Leu
11	1 1 0 0 0	1 1 0 0 0	1 1 0 0 1	1 1 0 0 1	1 1 0 1 0	1 1 0 1 0	1 1 0 1 1	1 1 0 1 1
11 ↓ A	ACC Thr	ACU Thr	ACG Thr	ACA Thr	AUC Ile	AUU Ile	AUG Met	AUA Ile
00	0 0 1 0 0	0 0 1 0 0	0 0 1 0 1	0 0 1 0 1	0 0 1 1 0	0 0 1 1 0	0 0 1 1 1	0 0 0 1 1
00 ↓ C	CGC Arg	CGU Arg	CGG Arg	CGA Arg	CAC His	CAU His	CAG Gln	CAA Gln
10	1 0 1 0 0	1 0 1 0 0	1 0 1 0 1	1 0 1 0 1	1 0 1 1 0	1 0 1 1 0	1 0 1 1 1	1 0 1 1 1
10 ↓ G	GGC Gly	GGU Gly	GGG Gly	GGA Gly	GAC Asp	GAU Asp	GAG Glu	GAA Glu
01	0 1 1 0 0	0 1 1 0 0	0 1 1 0 1	0 1 1 0 1	0 1 1 1 0	0 1 1 1 0	0 1 1 1 1	0 1 1 1 1
01 ↓ U	UGC Cys	UGU Cys	UGG Cys	UGA Cys	UAC Tyr	UAU Tyr	UAG T	UAA T
11	1 1 1 0 0	1 1 1 0 0	1 1 1 0 1	1 1 1 0 1	1 1 1 1 0	1 1 1 1 0	1 1 1 1 1	1 1 1 1 1
11 ↓ A	AGC Ser	AGU Ser	AGG Ser	AGA Ser	AAC Asn	AAU Asn	AAG Lyz	AAA Lyz
2	G ↔ 10				A ↔ 11			

Рис. 7 Трансформация суперматрицы, описывающей конформации четырехзвенного графа, в триплетный генетический код

ся. В самом деле, как следует из рис. 7, блокам триплетов C, U соответствуют неполярные аминокислоты Pro, Ala, Leu, Val, Phe, Ile, Met и слабополярные — Ser, Thr. В то же время блокам триплетов G, A соответствуют аминокислоты, способные образовывать водородные связи с основной цепью (операторы связности), — Cys, Trp, Tyr, His, Gln, Asn, Asp, Glu, Arg, Lys [26].

Таким образом, модель топологического кодирования цепных полимеров описывает особенности реальных биологических структур и может быть использована для разработки и применения в бионической наноэлектронике.

Литература

1. **Carter F. L., Siatkowski R. E., Wohltgen H.** Molecular Electronic Devices//Elsevier. — New York, 1982.
2. **Aviram A., Ratner M.** Molecular electronics: science and technology. New York: Acad. Sci., 1998. — V. 852.
3. **Bredas J.-L.** Conjugated oligomers, polymers and dendrimers: from polyacetylene to DNA. Paris — Bruxelles: De Boeck Université, 1999.

4. **Karasev V. A., Luchinin V. V., Stefanov V. E.** A Model of Molecular Electronics Based on the Concept of Conjugated Ionic-Hydrogen Bond Systems//Adv. Mater. Opt. Electron. — 1994, v.4. — P. 203–218.
5. **Molecular electronics: science and technology/** M. A. Ratner, B. Davis, M. Kemp [et al]. New York Acad. Sci., 1998, v. 852. — P. 22–37.
6. **MacDiarmid A. G.** Synth.Met. —1997, v. 84. — P.27–35.
7. **Kraft A., Grimsdale C., Holmes A. B.,** Agew.Chem., Int. Ed. Engl. 1998, v. 37. — P. 402–412.
8. **Skotheim T. A., Eisenbaumer R. L., Reynolds J. R.** Handbook of Conducting Polymers. The 2-nd Edition. — Marcel Dekker; New York, 1998.
9. **Naiva H. S., Shirk J. S.** Phtalocyanines, Properties and Applications VCH. — New York, 1996, v. 4. — P. 79.
10. **Molecular electronics: science and technology/** N. S. Hash, J. R. Reimers, L. E. Hall [et al]. — New York: Acad. Sci., 1998, v. 852. — P. 1–21.
11. **Mullen K., Rabe J. P.** Molecular electronics: science and technology. — New York: Acad. Sci. — 1998, v. 852. — P. 205–210.

12. **Leuninger J., Mullen K.** Conjugated oligomers, polymers and dendrimers: from polyacetylene to DNA. — Paris — Bruxelles: De Boeck Université, 1999. — P. 205–265.
13. **Sirringhaus H., Tessler N., Friend R. H.** Science. — 1998, v. 280. — P. 1741–1743.
14. **Nature**/M. Granstrom, K. Petritch, A. C. Arias [et al]. — 1988, v. 395. — P. 257–259.
15. **Science**/M. A. Reed M, C. Zhou, C. J. Muller [et al]. — 1997, v. 278. — P. 252–256.
16. **Карасев В. А.** О роли систем сопряженных ионно-водородных связей в надмолекулярных структурах.// Вестн. Ленинград. ун-та. — 1974, № 9. — С.74–86.
17. **Карасев В. А., Стефанов В. Е., Курганов Б. И.** Надмолекулярные биоструктуры: организация, функционирование, происхождение//Итоги науки и техники. Сер. Биол. химия, т. 31. — М.: ВИНТИ, 1989. — 199 с.
18. **Карасев В. А., Стефанов В. Е.** Эволюционный структурно-функциональный подход к надмолекулярным структурам// Успехи биол. хим. — М.: Наука, 1991, т. 32. — С. 114–145.
19. **Карасев В. А., Стефанов В. Е.** Об элементной базе молекулярной биоэлектроники//Биомолекулярная электроника и проблема самосборки надмолекулярных структур/Под ред. П. И. Лазарева. — Пушкино: Науч. центр биол. исслед., 1987. — С. 45–53.
20. **Карасев В. А., Лучинин В. В., Стефанов В. Е.** Как построить биочип//Биотехнология. — 1993, № 2. — С. 3–15.
21. **Карасев В. А., Сорокин С. Г.** О топологической структуре генетического кода//Генетика. — 1997, т. 3. — С. 744–751.
22. **Карасев В. А.** Как закодировать топологию биочипа?//Биотехнология. — 1998, № 3. — С. 62–75.
23. **Карасев В. А., Лучинин В. В.** Проблемы создания искусственных бионических микро- и наносистем// Изв. вузов. Электроника. — 1998, № 6. — С.5–15.
24. **Karasev V. A., Demchenko E. L., Stefanov V. E.** Topological coding of polymers and protein structure prediction//Chemical topology: applications and techniques/Ser. Math.Chem. D. Bonchev & D. Rouvray eds. — New-York; London; Paris: Gordon&Breach, 2000, v. 6. — P. 295–345.
25. **Карасев В. А., Лучинин В. В.** Молекулярная архитектура органических сенсорных наносистем//Петербург. ж. электроники. — 2001, № 4. — С. 12–32.
26. **Karasev V. A., Stefanov V. E.** Topological nature of the genetic code// J. Theor. Biol. — 2001, v. 209. — P. 303–317.
27. **Karasev V. A., Luchinin V. V., Stefanov V. E.** Topological coding: Towards new materials for molecular electronics//Adv.Funct.Mater. — 2002, No 12. — P. 461–469.
28. **Нанотехнология.** Физика. Процессы. Диагностика. Приборы/Под ред. В. В. Лучинина и Ю. М. Таирова. — М.: Физматлит, 2006. — С. 65–97.
29. **Шульц Г., Ширмер Р.** Принципы структурной организации белков: Пер. с англ. — М.: Мир, 1982. — 354 с.

Продолжение следует