

УДК 577.22+5770.212.4+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

## Ч. II. Молекулярная векторная машина и структура канонического набора физических операторов

**Ключевые слова:** цепные полимеры, бионика, наноэлектроника, молекулярная векторная машина, физические операторы, канонический набор, аминокислоты, белки

*В части II статьи (часть I см.: Биотехносфера. 2008, № 1. С. 2–10), посвященной анализу работ авторов в области кодирования топологии цепных полимеров для бионанотехнологии, рассмотрены представления о молекулярной векторной машине (МВМ), структуре канонического набора физических операторов. Показано, что на формирование водородной связи между  $Q_iH$  и  $X_{i-4}$  атомами, возникающей при образовании замкнутого четырехзвенного цикла цепного полимера, могут действовать 20 векторов, образующих математическую группу. Для задания направлений векторов предложена структура додекаэдра. Канонический набор физических операторов, воссоздающих действие векторов, рассматривается как группа представлений этих векторов. Вместе они формируют элементы молекулярной векторной машины. Модель использована для построения адекватной структуры канонического набора аминокислот на додекаэдре как элемента МВМ белков.*

### Введение

В части 1 нашей работы [1] были изложены основные понятия модели топологического кодирования цепных полимеров, предложенной нами для бионической наноэлектроники. Объектами теоретического анализа в модели [1] служат четырехзвенный фрагмент цепного полимера и его математический аналог — четырехзвенный цепной граф. На основе их анализа была построена суперматрица из 64 конформаций графа, которая была трансформирована в топологический код из 64 триплетов. Для воссоздания этих конформаций необходимы физические операторы, действие которых направлено на

связь  $Q_iH...X_{i-4}$  четырехзвенного фрагмента цепного полимера. Были выделены два типа физических операторов, в качестве которых выступают боковые цепи полимера: операторы связности, способствующие образованию связи  $Q_iH...X_{i-4}$ , и операторы антисвязности, препятствующие образованию этой связи.

Первый тип операторов, способных к образованию водородных связей с атомом  $X_{i-4}$ , должен соответствовать блокам триплетов кода, кодирующих циклические конформации четырехзвенного графа. Второй тип операторов, как правило с неполярными боковыми цепями, должен быть приписан к блокам триплетов, кодирующих ациклические конформации. Сходные по свойствам, но разные по длине операторы (например, операторы связности) имеют различные направления тянущего усилия (вектора действия) [1]. Анализ работы операторов в области связи  $Q_iH...X_{i-4}$  и привел к моделям структуры канонического набора физических операторов [2–5] и молекулярной векторной машины [6–8].

## II. МВМ и ее составные части

### II. 1.1. ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ МВМ

Выделение плоскостей и векторов действия в области  $Q_iH...X_{i-4}$ -связи

Детальный анализ области связи  $Q_iH...X_{i-4}$  (рис. II.1) был проведен в работах [6, 8]. Было принято во внимание, что двойная связь в  $HX_i-R_i=Q_i$ -группах цепных полимеров, например пептидная группа в белках, находится в состоянии резонанса (частично делокализована) [9, 10]. В квантовой химии электронное окружение  $HX_i-R_i=Q_i$ -группы описывается в виде трех взаимно перекрывающихся  $sp^2$ -гибридизованных облаков. На рис. II.1, а показано одно из таких облаков для атома  $X_{i-4}$ .

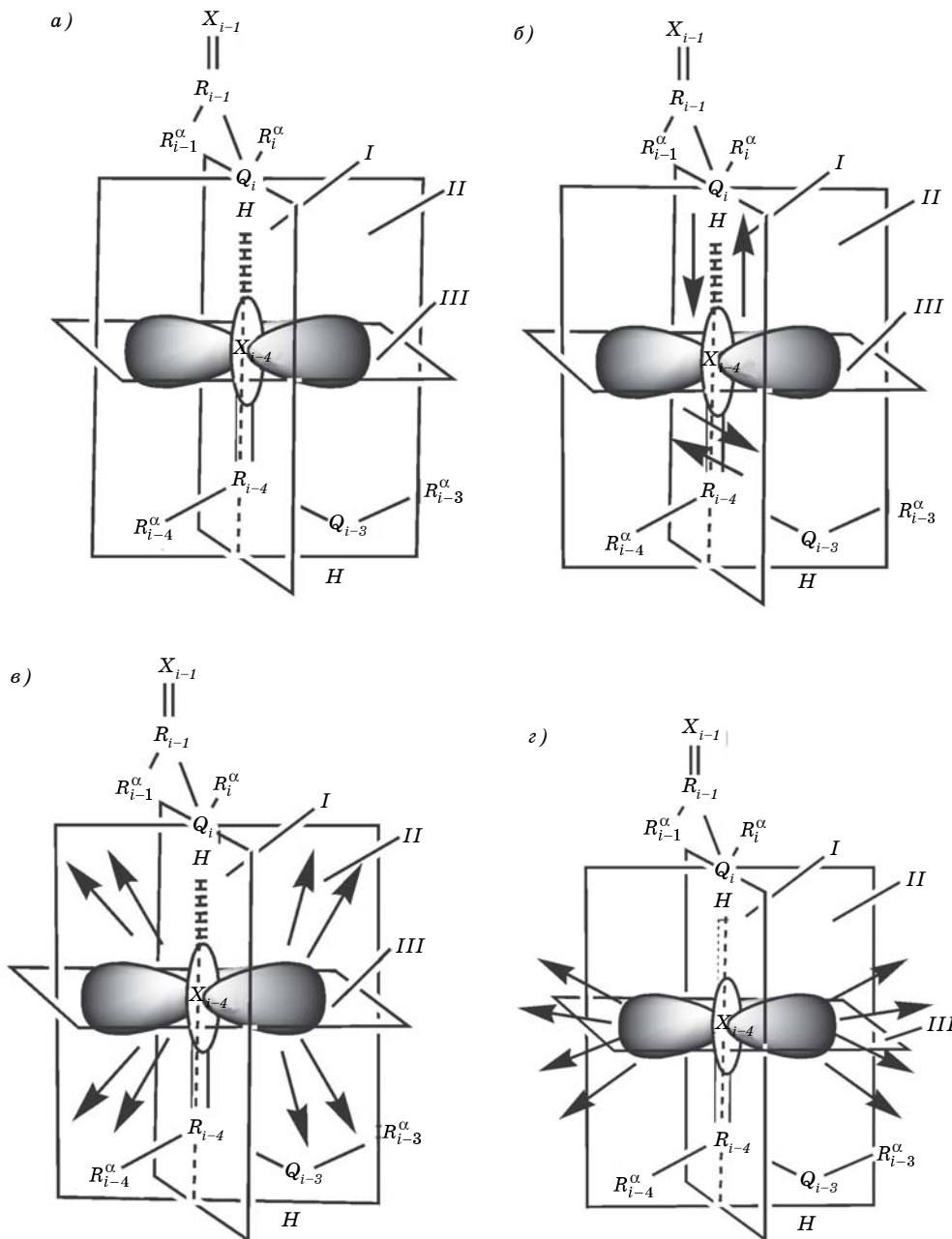


Рис. II.1 Введение плоскостей симметрии (а) и анализ возможных векторов действия физических операторов в области  $Q_iH...X_{i-4}$ -связи (б-г)

Через связь  $Q_iH...X_{i-4}$  были проведены три взаимно перпендикулярные плоскости [6, 8]. Плоскость  $I$  (рис. II.1, а) делит  $sp^2$ -гибридизованные облака на две симметричные лопасти по разные стороны от атома  $X_{i-4}$ . Плоскость  $II$  проходит параллельно плоскости листа (перпендикулярно к плоскости  $I$ ) и разделяет эти облака на переднюю и заднюю половины. Плоскость  $III$  перпендикулярна к двум предыдущим плоскостям. Она разделяет  $sp^2$ -гибридизованные облака на верхнюю и нижнюю половины.

Физические операторы согласно [6, 8] могут действовать на связь  $Q_iH...X_{i-4}$  следующим образом (рис. II.1, б-г). В пределах плоскости  $I$  возможны два направления их действия (в работах [6, 8] они названы векторами действия или векторами) — вдоль связи  $Q_iH...X_{i-4}=R_{i-4}$  и перпендику-

лярно к ней (рис. II.1, б). При действии вдоль этой связи вектор, направленный в сторону атома  $Q_i$  (стрелка вверх), будет способствовать сохранению водородной связи. В то же время симметричный вектор, направленный в сторону атома  $X_{i-4}$  (стрелка вниз), направлен на разрыв водородной связи. В случае действия перпендикулярно к связи  $Q_iH...X_{i-4}=R_{i-4}$  (рис. II.1, в) оба вектора ориентированы в противоположные стороны (симметричны) и направлены на разрыв водородной связи.

Если действие операторов направлено вдоль плоскости  $II$  (рис. II.1, г), то согласно [6, 8] возможно выделение двух пар симметричных векторов, направленных вправо и влево вверх от плоскости  $I$  в сторону атома  $Q_i$  (над плоскостью  $III$ ). Еще две пары векторов, которые направлены вниз

в сторону атома  $X_{i-4}$ , можно выделить под плоскостью  $III$ . В том случае, когда действие операторов направлено вдоль плоскости  $III$  (рис. П.1, *з*), то две пары векторов направлены симметрично влево и вправо от плоскости  $I$  (спереди и сзади от плоскости  $II$  над плоскостью  $III$ ), а еще две пары направлены аналогично под плоскостью  $III$ . Таким образом, анализ области связи  $Q_iH...X_{i-4}$  позволил выявить 20 векторов, связанных преобразованиями симметрии [6, 8].

#### Задание векторов с помощью пространственных фигур

Двадцать векторов можно задать на основе какой-либо пространственной фигуры. Для этих целей в работах [6, 8] был использован додекаэдр, имеющий 20 вершин. В центре додекаэдра был помещен атом  $X_{i-4}$ , в одной из вершин — атом  $Q_i$ , а векторы направлены в вершины додекаэдра (рис. П.2, *а*). Разделение области  $Q_iH...X_{i-4}$ -связи тремя плоскостями симметрии, равно как и симметрия положения векторов, было сохранено. Размер додекаэдра определен исходя из параметров четырехзвенного фрагмента полимера.

Чтобы задать вектор, необходимо знать положение двух точек — начальной точки, из которой исходит вектор, и конечной точки, куда он направлен. За начальную точку был принят центр додекаэдра, а конечными точками стали вершины додекаэдра, для которых в работах [6, 8] были введены следующие обозначения (рис. П.2, *б*). В плоскости  $I$  вершина, в которой расположен атом  $Q_i$ , куда направлен один из векторов, обозначена буквой  $A$ , тогда как связанная с ней поворотной симметрией вершина под плоскостью  $III$  — обозначена

на  $-A$ . Для двух других вершин, расположенных в плоскости  $I$ , в которые направлены векторы, перпендикулярные к первым двум (они показаны на рис. П.2, *б*), были использованы обозначения  $B$  и  $-B$ . Вершины, в которые направлены векторы первой группы (рис. П.1, *в*), связанные преобразованиями симметрии, обозначены буквой  $A$  с индексами: слева от плоскости  $I$  все буквы имеют индекс справа внизу, а справа — индекс слева вверху. Так, ближние к  $A$  вершины, находящиеся за плоскостью  $II$ , обозначены  $A_1$  и  ${}^1A$ , а более отдаленные от  $A$ , расположенные перед плоскостью  $II$ , —  $A_2$  и  ${}^2A$ . Для вершин, расположенных под плоскостью  $III$ , эти обозначения соответственно будут:  $-A_1$ ,  $-{}^1A$  (перед плоскостью  $II$ ) и  $-A_2$ ,  $-{}^2A$  (за плоскостью  $II$ ).

Аналогичным образом были обозначены вершины, в которые направлены векторы из второй группы (рис. П.2, *б*), — буквой  $B$  с разными индексами. Вершины, расположенные ближе к вершине  $B$ , за плоскостью  $II$  обозначены  ${}^1B$  и  $B_1$ , а вершины перед плоскостью  $II$  —  ${}^2B$  и  $B_2$ . По отношению к вершине  $-B$  соответственно введены обозначения:  $-{}^1B$  и  $-B_1$  (перед плоскостью  $II$ ) и  $-{}^2B$  и  $-B_2$  (за плоскостью  $II$ ). Таким образом, 20 вершин, в которые направлены 20 векторов, получили свои наименования [6, 8]. Это подготовило основу для введения представления о МВМ и рассмотрения ее свойств.

#### П.1.2. СВОЙСТВА ЧАСТЕЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ВЕКТОРНОЙ МАШИНЫ

В процессе разработки МВМ (рис. П.3) было учтено, что атом  $X_{i-4}$  цепного полимера должен быть в центре додекаэдра, в вершины которого направ-

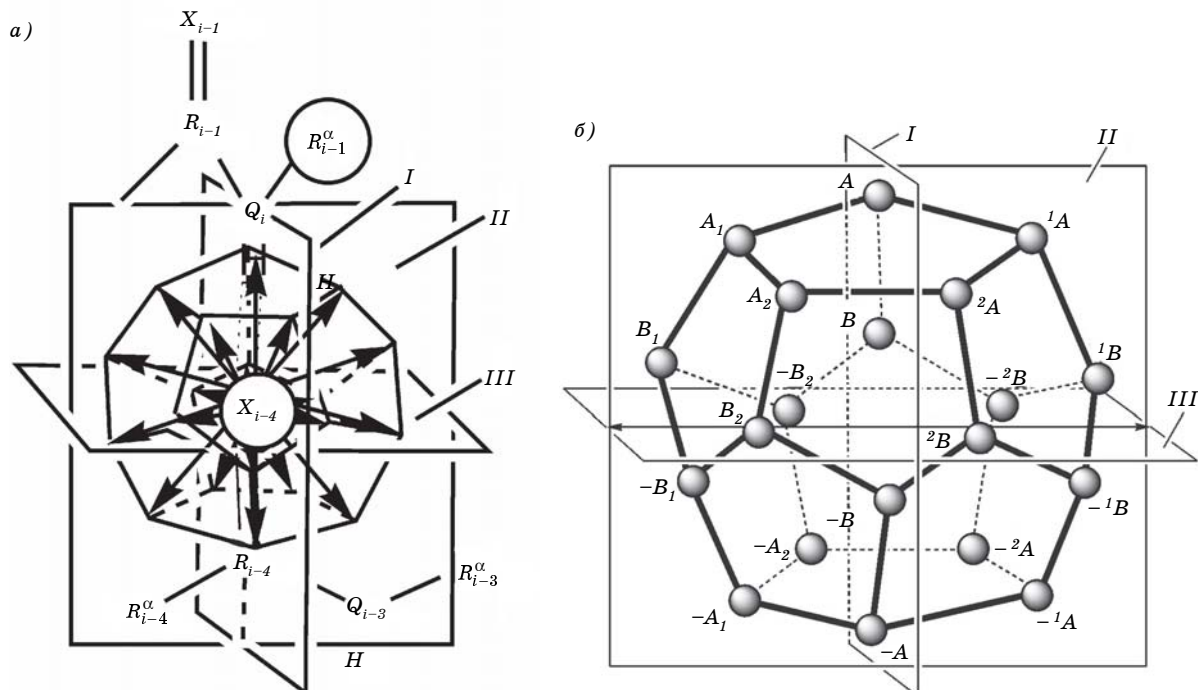


Рис. П.2 | Задание векторов с помощью додекаэдра (а) и обозначение вершин додекаэдра (б)

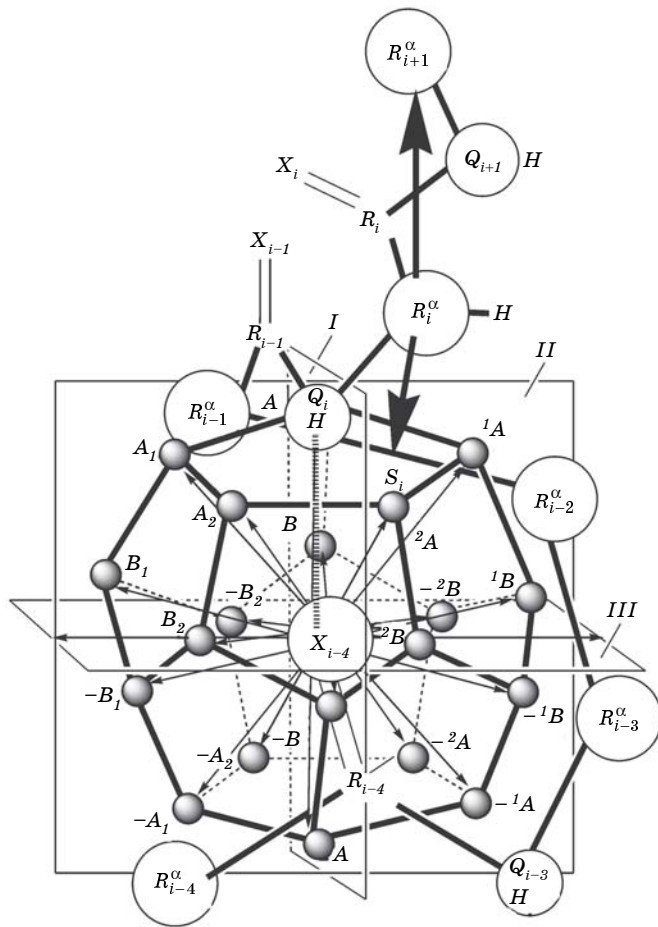


Рис. II.3 Молекулярная векторная машина

лены векторы, а атом  $Q_i$ , способный к образованию водородной связи с  $X_{i-4}$ , — в вершине  $A$  додекаэдра [6, 8]. К плоскостям, разделяющим область  $Q_iH...X_{i-4}$ -связи, и додекаэдру с обозначениями вершин (см. рис. II.2, б) добавился четырехзвенный фрагмент цепного полимера с номерами  $\alpha$ -атомов ( $R^\alpha$ ). Наиболее важным в МВМ является  $R_i^\alpha$ -атом со стрелкой, обозначающей сменяемый физический оператор  $S_i$ , от которого отходит фрагмент  $i + 1$ -го звена со стрелкой, указывающей направление на атом  $R_{i+1}^\alpha$ . Для удобства анализа в структуре МВМ были выделены три составные части [8]: додекаэдр, содержащий группу из 20 векторов — радиусов додекаэдра, канонический набор сменяемых физических операторов, воссоздающих действие этих векторов, и тетраэдрический  $R_i^\alpha$ -й атом, к которому прикрепляются физические операторы.

Свойства векторов додекаэдра

**Преобразования симметрии.** Векторы внутри додекаэдра образуют три группы, связанные взаимными преобразованиями симметрии. В работах [6, 8] векторы обозначены так же, как и вершины додекаэдра, в которые они направлены. Полное совмещение вектора самого с собой обозначено цифрой 1. Преобразование симметрии относительно плоскости  $I$  (отражение  $I$ ) обозначено буквой  $\alpha$ , относительно плоскости  $II$  (отражение  $II$ ) — буквой  $\beta$  и относительно плоскости  $III$  (вращение) — буквой  $\gamma$ . Все преобразования векторов описываются табл. II.1 [6, 8].

Из табл. II.1 видно, что в состав МВМ входят четыре группы векторов: 1-я и 2-я группы векторов локализованы в плоскости  $I$  и включают соответственно две пары векторов, связанных тождественным преобразованием 1 и преобразованием вращения  $\gamma$  вокруг оси  $C_2$  относительно плоскости  $III$ . По отношению друг к другу эти пары векторов взаимно перпендикулярны. Две группы (3-я и 4-я) содержат по восемь векторов, связанных преобразованиями 1,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и их сочетанием. Операции, показанные в табл. II.1 для  $A_1$  и  $B_1$ , могут быть проведены для любого из векторов этих двух групп.

**Возможность применения теоретико-группового подхода.** Теоретико-групповой подход оказался очень эффективным в теоретической физике [11]. Система векторов МВМ рассмотрена в работах [6, 8] как математическая группа. Аксиомы теории групп утверждают, что группа должна обладать свойством ассоциативности и содержать нейтральный и обратный элементы. Согласно [8] ассоциативность векторов можно понимать так, что для любых векторов из этой группы результат их действия будет всегда один и тот же, если сохраняется одна и та же последовательность их действия. Вектор  $A$ , действие которого направлено на формирование циклического четырехзвенного фрагмента, рассматривается как нейтральный элемент группы, а вектор  $-A$ , направленный на разрушение четырехзвенного фрагмента, — как обратный элемент.

Канонический набор физических операторов

**Физические операторы как представления группы векторов.** По аналогии с элементами группы и их представлениями [11], физические операторы

Таблица II.1 Группа векторов, связанные преобразованиями симметрии

Группа	1	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\alpha\beta$	$\alpha\gamma$	$\beta\gamma$	$\alpha\beta\gamma$
1	A			-A				
2	B			-B				
3	$A_1$	${}^1A$	$A_2$	$-A_1$	${}^2A$	$-{}^1A$	$-A_2$	$-{}^2A$
4	$B_1$	${}^1B$	$B_2$	$-B_1$	${}^2B$	$-{}^1B$	$-B_2$	$-{}^2B$

были рассмотрены как «неприводимые представления» группы векторов [6–8]. Используя эту аналогию, было проведено сопоставление между группой векторов и группой физических операторов, воссоздающих действие этих векторов.

**Физические операторы, реализующие действие нейтрального и обратного элементов.** Точкой приложения обоих множеств — векторов и физических операторов МВМ — являются вершины додекаэдра. С одной стороны, это точки, в которые направлены векторы, действующие на связь  $Q_i H \dots X_{i-4}$ , а с другой стороны, они являются местом приложения физических операторов, реализующих действие этих векторов.

Так, вектор, рассматриваемый в группе векторов как нейтральный элемент, воссоздает физическим оператором, работа которого не должна влиять на структуру четырехзвенного фрагмента. Такой оператор может вообще не иметь боковой цепи и быть «пустым» звеном в цепи полимера. Вектор, соответствующий обратному элементу группы, имеет обратное по действию направление и связан с разрывом связи  $Q_i H \dots X_{i-4}$ . Его может реализовать такой физический оператор, у которого атом  $Q_i$  в принципе не может образовать водородную связь с группой  $X_{i-4}$ .

**Свойства подгрупп физических операторов.** Свойства остальных операторов, образующих две подгруппы и реализующих действие векторов, связанных преобразованиями симметрии, были рассмотрены в работе [8].

1. Длина оператора должна увеличиваться по мере изменения направления вектора в сторону атома  $X_{i-4}$  (см. рис. II.3).

2. Векторы, направленные вправо от плоскости  $I$ , должны воссоздаваться более короткими операторами, чем операторы, реализующие действие векторов, направленных влево от этой плоскости. Это обусловлено асимметричным сдвигом вправо  $R_i^\alpha$ -атома, к которому прикрепляются физические операторы (см. рис. II.3).

3. Векторы, ориентированные симметрично относительно плоскости  $II$ , должны воссоздаваться близкими по размеру операторами. Расстояние до вершин, в которые направлены векторы, находящиеся за плоскостью  $II$ , (направлены от нас), и перед плоскостью  $II$  (направлены к нам), различаются не очень сильно (см. рис. II.3).

4. Векторы, расположенные над плоскостью  $III$ , должны воссоздаваться более короткими физическими операторами, чем те, которые расположены под плоскостью  $III$ . Вершины векторов, направленных в сторону группы  $HQ_i-R=X_{i-1}$ , расположенные над плоскостью  $III$ , находятся значительно ближе в  $R_i^\alpha$ -атому, чем направленных в противоположную сторону (см. рис. II.3). Эти векторы связаны операцией вращения  $\gamma$ , поэтому операторы с короткими боковыми цепями должны противостоять операторам с длинными цепями.

5. Физические операторы, воссоздающие векторы противоположного направления, например  $A_1$  —

$(-^1A)$ ,  $B_1$  —  $(-^1B)$  и т. д., должны обладать противоположными свойствами. Наклон оси этих векторов одинаков, поскольку они направлены в противоположные вершины додекаэдра и вместе составляют его диаметр.

**Модель структуры канонического набора физических операторов.** На основе анализа свойств канонического набора физических операторов была предложена модель их структуры на додекаэдре [6, 8]. По форме модель идентична структуре, показанной на рис. II.2, б, с тем отличием, что в вершинах додекаэдра помещены аналогично обозначенные боковые цепи полимера. При этом принцип их расположения основан не на симметрии, как для векторов, а на антисимметрии. Эта модель была успешно применена к каноническому набору аминокислот (см. п. II.2.2.).

#### Тетраэдрический $\alpha$ -атом.

Особенностью  $\alpha$ -атома, к которому прикрепляются набор боковых цепей полимера, является то, что все четыре связи образуют тетраэдр, в который входят связи  $Q_i - R_i^\alpha$ ,  $R_i^\alpha - H$ ,  $R_i^\alpha - R_i$  и связь  $R_i^\alpha$  с атомом боковой цепи  $S_j$ . Вращение вокруг связи  $Q_i - R_i^\alpha$  (см. рис. II.3) является свободным, и возникает своеобразное «коромысло» между направлением боковой цепи  $S_j$ , реализующей действие того или иного вектора, и направлением на  $i + 1$ -го  $\alpha$ -атом-цепного полимера, куда входит связь  $R_i^\alpha - R_i$ . В процессе работы физических операторов полимер как бы программирует свою последующую структуру. В зависимости от типа оператора возможно образование водородной связи  $Q_{i+1}$  атома с атомами  $X_{i-4}$ ,  $X_{i-2}$  и  $X_{i-2}$ , что приводит к разному типу структур. Детально этот вопрос освещен в работе [8]. Однако полная его разработка пока не завершена, поэтому мы его не рассматриваем.

## II. 2. Применение молекулярной векторной машины к белковым структурам

Проведенный в работах [6-8] анализ был применен к конкретным цепным полимерам — белкам. В данном обзоре мы остановимся лишь на вопросе, связанном со структурой канонического набора аминокислот.

### II.2.1. ВВЕДЕНИЕ В ПРОБЛЕМУ КЛАССИФИКАЦИИ АМИНОКИСЛОТ

Вопрос о том, почему в составе белков присутствуют, за редкими исключениями, только 20 аминокислот, до сих пор остается неясным [12]. От его решения зависит понимание многих проблем, связан-

ных со структурой белков. Попытки осуществить классификацию аминокислот способствуют этому решению. Общепринятой является их классификация на основе физико-химических свойств [13]. Однако боковые цепи аминокислот образуют довольно разнородную по своим химическим свойствам группу, включающую карбоновые кислоты (Asp и Glu), их амиды (Asn, Gln), амины (Lys, Arg), ароматические гетероциклы (His, Tyr и Trp) и т. д. Это указывает на то, что принципы, по которым подбирались боковые цепи в состав белков, лишь косвенно связаны с их физико-химическими свойствами.

Современные работы по классификации аминокислот часто используют генетический код как природную основу для их классификации [15, 16]. Для этих целей могут служить и пространственные модели генетического кода [17, 18], хотя аминокислоты в них играют подчиненную роль. Существуют и другие классификации, подробно изложенные в работе [8]. В целом вопрос о природе канонического набора аминокислот остается пока не вполне ясным.

### II.2.2. МОДЕЛЬ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ БОКОВЫХ ЦЕПЕЙ АМИНОКИСЛОТ

Разработка модели пространственной структуры канонического набора аминокислот на додекаэдре (рис. II.4), основанной на принципе антисимметрии боковых цепей [2–5], первоначально осуществлялась независимо от модели МВМ. В окончательном виде, с учетом модели МВМ, она дана в работе [8]. В рамках МВМ выявилась ее природа как одной из частей этой машины.

Как видно на рис. II.4, через структуру додекаэдра проведены три взаимно перпендикулярные плоскости (I, II, III), которые являются плоскостями антисимметрии. Боковые цепи аминокислот помещены в кружки в вершинах додекаэдра. В самом верхней вершине находится глицин (обозначен кружком с треугольником, соответствующим его  $\alpha$ -углеродному атому), не имеющий боковой цепи. Через нее в модели МВМ додекаэдр прикрепляется к основной цепи полимера. Остальные боковые цепи приведены с углеродными атомами вверх. Через эти атомы они прикрепляются к основной цепи белка.

Выше отмечалось, что длина оператора должна увеличиваться и по мере продвижения по мере изменения направления вектора в сторону атома  $X_{i-4}$  (в белках это атом  $O_{i-4}$ ). По этой причине все боковые цепи аминокислот были расположены на додекаэдре в порядке увеличения размера сверху вниз.

В плоскости I, как указывалось, должны находиться четыре оператора. Мы расположили в пределах этой плоскости аминокислоты Gly (над плоскостью III) и Pro (под плоскостью III). Им приписываются свойства нейтрального и обратного элементов. Перпендикулярно к этим аминокислотам помещены боковые цепи Ala и Leu.

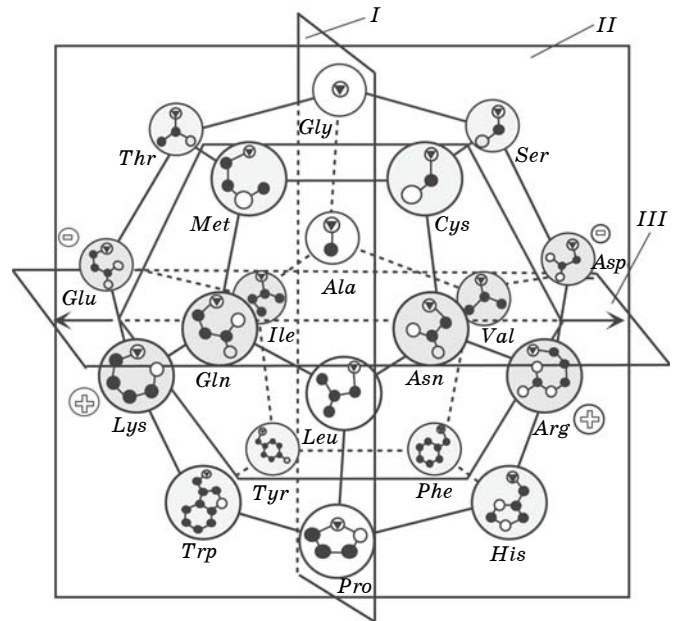


Рис. II.4 Модель структуры канонического набора боковых цепей аминокислот на додекаэдре: I, II, III — плоскости антисимметрии; боковые цепи аминокислот — в кружках, под ними приведены трехбуквенные обозначения аминокислот

Векторы, направленные вправо от плоскости I, должны воссоздаваться более короткими операторами, что связано с асимметрией положения  $R_i^\alpha$ -атома (в белках это  $C_i^\alpha$ -атом) в модели МВМ (см. рис. II.3). Среди аминокислот имеются пары боковых цепей, близких по свойствам, но различных по длине. Справа от плоскости I помещены аминокислоты с более короткой цепью, а слева, симметрично, — с более длинной цепью (рис. II.4): Ser — Thr, Cys — Met, Asp — Glu, Asn — Gln, Arg — Lys, Val — Ile, His — Trp, Phe — Tyr.

Векторы, направленные симметрично относительно плоскости II, должны воссоздаваться близкими по размеру операторами, поскольку расстояние до вершин, в которые направлены векторы, находящиеся за плоскостью II (направлены от нас), и перед плоскостью II (направлены к нам) различаются не очень сильно (см. рис. II.3). В составе набора аминокислот можно найти боковые цепи, близкие по размерам, но гомологичные по свойствам. На додекаэдре они были расположены симметрично сзади и спереди от плоскости II. За плоскостью II находятся Ser — Thr, Asp — Glu, Val — Ile, Phe — Tyr. Перед плоскостью II расположены Cys — Met (гомологи Ser и Thr), Asn — Gln (гомологи Asp и Glu), Arg — Lys (рассматриваются как гомологи Val и Ile) и His — Trp (гомологи Phe и Tyr).

Наконец, векторы, расположенные над плоскостью III, должны воссоздаваться более короткими физическими операторами, чем те которые расположены под плоскостью III. Вершины векторов, направленных в сторону группы  $NQ_i-R=X_{i-1}$  (в белках это пептидная группа  $HN_i-C=O_{i-1}$ ), расположенные над плоскостью III, находятся значи-

тельно ближе в  $R_i^\alpha$ -атому, чем направленных в противоположную сторону (см. рис. П.3). Модель структуры канонического набора боковых цепей аминокислот на додекаэдре также удовлетворяет этому требованию. В самом деле, наибольшими различиями обладают боковые цепи, расположенные в вершинах верхней и нижней граней додекаэдра: Ser — His, Cys — Phe, Thr — Trp, Met — Tyr. В то же время боковые цепи, расположенные в экваториальной области, имеют более близкие размеры, но обладают противоположными свойствами: Asp<sup>-</sup> — Arg<sup>+</sup> и Glu<sup>-</sup> — Lys<sup>+</sup>. Нейтральные боковые цепи, способные к образованию водородных связей, оказались при этом симметричными неполярным боковым цепям: Asn — Val, Gln — Ile.

В целом, сам факт построения системы боковых цепей аминокислот на додекаэдре на основе требований, сформулированных в разделе «Канонический набор физических операторов», свидетельствует, вероятно, об адекватности этих требований свойствам канонического набора аминокислот. Это позволило в работе [8] использовать данную модель в качестве элемента структуры белковой MBM.

## Заключение

На основе анализа действия векторов в области  $Q_i H \dots X_{i-4}$ -связи нами было показано [6–8], что в этой области можно выделить как минимум 20 направлений, образующих группу векторов. Однако в топологическом коде, как показал анализ [1], должно быть 64 конформации четырехзвенного графа, которые требуют для своего воссоздания соответственно наличия 64 векторов действия. Если принять во внимание, что терминальные группы в физических операторах могут иметь несколько вариантов водородных связей, обеспечивающих реализацию пучка векторов, то это противоречие снимается и приводит к двухъярусной модели структуры канонического набора физических операторов [8]. Структура верхнего яруса соответствует додекаэдру, и каждая вершина принадлежит одному из 20 физических операторов, а нижележащий ярус задается ромбоикосододекаэдром, имеющим 62 грани. В рамках этой модели, устанавливающей связь между числом водородных связей оператора и количеством кодирующих этот оператор триплетов, становится более ясной природа вырожденности триплетов в генетическом коде и ряда других свойств топологического кода. Эти вопросы нами разрабатываются в настоящее время.

В целом, как показано в настоящем обзоре, теория топологического кодирования цепных полимеров имеет хорошие перспективы не только для дальнейшей разработки проблем бионической нанoeлектроники, но и для ее практического применения к белковым структурам.

## Литература

1. Карасев В. А., Лучинин В. В. Модель топологического кодирования цепных полимеров для бионической нанoeлектроники. Ч. 1. Топологический код и соответствия физических операторов триплетам кода // Биотехносфера. 2008, т. 1, № 1. С. 2–10.
2. Карасев В. А. Об антисимметриях канонического набора аминокислот. Деп. ВИНТИ 23.03.2004. № 470-B2004.
3. Karasev V. A., Luchinin V. V., Stefanov V. E. Symmetry and spatial structure of the canonical set of amino acids // Fourth International Conference on Bioinformatics of Genome Regulation and Structure. BGRS'2004, Novosibirsk, Russia. 2004, July 25–30. Novosibirsk: IC&D, 2004. Vol.1. P. 278–281.
4. Karasev V. A., Luchinin V. V., Stefanov V. E. A dodecahedron-based model of spatial representation of the canonical set of amino acids // Ser. Math. Biol. and Med. Vol. 8. Proc. Intern. Conf. «Advances in Bioinformatics and its Applications». Eds.: M. He, G. Narasimhan, S. Petoukhov. 2005. P. 482–493. World Scientific Publishing Co. Ltd.. New Jersey et al.
5. Нанотехнология. Физика, процессы, диагностика, приборы / Под ред. В. В. Лучинина и Ю. М. Таирова. М.: Физматлит, 2006. С. 65–97.
6. Карасев В. А. Аминокислоты канонического набора как неприводимые представления группы векторов — диаметров додекаэдра. Деп. в ВИНТИ 25.04.2007. № 461-B2007.
7. Karasev V. A., Luchinin V. V., Stefanov V. E. A model of the «molecular vector machine» for protein folding // Proceedings of the 3-rd Moscow conference on computational molecular biology. Moscow, Russia. 2007, July 27–31. P. 134–136.
8. Карасев В. А., Лучинин В. В. Введение в конструирование бионических наносистем. М.: Физматлит, 2008. 464 с.
9. Pauling L. The Nature of the Chemical Bond. 3rd ed. Ithaca, New York: Cornell Univ. Press, 1960. 644 p.
10. Шульц Г., Ширмер Р. Принципы структурной организации белков. Пер. с англ. М.: Мир, 1982. 354 с.
11. Петрашень М. И., Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике. М.: Наука, 1967. 308 с.
12. Петухов С. В. Матричная генетика, алгебры генетического кода, помехоустойчивость. М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2008. 316 с.
13. Campbell P. N., Smith A. D. Biochemistry Illustrated. Edinburgh-London-Madrid-Tokio: Curchill Livingstone, 1994. P. 8–9.
14. Siemion I. Z., Cebrat M., Kluczyk A. The problem of amino acid complementarity and antisense peptides // Curr. Protein Pept. Sci. 2004, Vol.5. P. 507–527.
15. Biro J. C., Benyo B., Sansom C. [et al]. A common periodic table of codons and amino acids // Biochem. Biophys. Res. Commun. 2003, Vol. 306. P. 408–415.
16. Balakrishnan J. Symmetry scheme for amino acid codons // Phys. Rev. E Stat. Nonlin. Soft. Matter. Phys. 2002, Vol. 65 (2 Pt 1). 021912.
17. Карасев В. А., Сорокин С. Г. О топологической структуре генетического кода // Генетика. 1997, т. 33. С. 744–751.
18. Jimenez-Montañó M. A., de la Mora-Basañez C. R., Pöschel Th. The hypercube structure of the genetic code explains conservative and non-conservative amino acid substitutions in vivo and in vitro // BioSystems. 1996, Vol. 39. P. 117–125.