

МОЖНО ЛИ СОЗДАТЬ ЭЛЕКТРОННЫЙ АНАЛОГ МОЛЕКУЛЫ ДНК?

Якушевич Л.В.

Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290, Пущино, Институтская ул. 3,
(466)7739252, E-mail kind-@mail.ru

Создание механических, электронных и других физических аналогов живых систем, включая целостные организмы, отдельные органы, клетки и даже биологические молекулы, помогает углубить наши знания о природе этих систем, а также открывает новые возможности для конструирования сложных систем с искусственным интеллектом.

В настоящем докладе представлен обзор основных работ по математическому моделированию электронного аналога молекулы ДНК, а также недавно полученные нами результаты в этом направлении. Мы опишем кратко историю вопроса, начиная с первых работ Скота [1] и Инглэндера [2], а также включая обсуждение наиболее важных публикаций по созданию механического аналога ДНК как предшественника электронного.

Мы показываем, что математическая часть задачи по созданию электронного аналога ДНК, сводится к поиску преобразования от уравнений, имитирующих внутреннюю подвижность молекулы ДНК, к уравнениям механического аналога, а затем и электронного. Такой подход позволил нам рассчитать параметры механического аналога, как для случая однородной (синтетической) ДНК, так и для неоднородной (нативной) ДНК [3]. Мы показываем, что аналогичный алгоритм может быть использован для поиска математического преобразования от механического аналога к электронному в случае однородной ДНК [4], а также для поиска решения задачи в случае неоднородной ДНК. Таким образом, ответ на вопрос о том можно ли создать электронный аналог молекулы ДНК, представляется нам полностью положительным.

В заключении приводится подробное обсуждение достоинств и недостатков механического и электронного аналогов и перспективы их применения в научных исследованиях, в приложениях и в преподавании.

Литература

1. Scott A. C., A nonlinear Klein-Gordon equation // *Am. J. Phys.* **37**, 1, 1969, 52–61.
2. Englander S.W, Kallenbach N.R, Heeger A.J, Krumhansl J.A, Litwin S., Nature of the open state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations // *PNAS*, **77**, 12, 1980, 7222–7226.
3. Yakushevich L.V., On the mechanical analogue of DNA // *J. Biol. Phys.* **43**, 1, 2017, 113–125.
4. Якушевич Л.В. Электронный аналог однородной ДНК // *КИМ*, **9**, 5, 2017, 787-796.