

УДК: 51.76; 577.323

## Электронный аналог однородной ДНК

Л. В. Якушевич

Институт биофизики клетки Российской академии наук,  
Россия, 142290, Московская обл., г. Пущино, ул. Институтская, д. 3

E-mail: kind-@mail.ru

*Получено 15.07.2017, после доработки — 31.07.2017.*

*Принято к публикации 08.09.2017.*

Известно, что внутренняя подвижность молекул ДНК играет важную роль в функционировании этих молекул. Этим объясняется большой интерес исследователей к изучению особенностей внутренней динамики ДНК. Сложность, трудоемкость и дороговизна проведения исследований в этой области стимулируют поиск и создание более простых физических аналогов, удобных для имитации различных динамических режимов, возможных в ДНК. Одно из направлений такого поиска связано с использованием механического аналога ДНК — цепочки связанных маятников. В этой модели маятники имитируют азотистые основания, горизонтальная нить, на которой подвешены маятники, имитирует сахаро-фосфатную цепочку, а гравитационное поле имитирует поле, наводимое второй нитью ДНК. Простота и наглядность — основные достоинства механического аналога. Однако модель становится слишком громоздкой в тех случаях, когда необходимо моделировать длинные (более тысячи пар оснований) последовательности ДНК. Другое направление связано с использованием электронного аналога молекулы ДНК, который лишен недостатков механической модели. В данной работе мы исследуем возможность использования в качестве электронного аналога джозефсоновскую линию. Мы рассчитали коэффициенты прямых и не прямых преобразований для простого случая однородной, синтетической ДНК, последовательность которой содержит только аденины. Внутренняя подвижности молекулы ДНК моделировалась уравнением синус-Гордона для угловых колебаний азотистых оснований, принадлежащих одной из двух полинуклеотидных цепей ДНК. При этом вторая полинуклеотидная цепь моделировалась как некоторое усредненное поле, в котором происходят эти колебания. Преобразование, позволяющее перейти от ДНК к электронному аналогу, было получено двумя способами. Первый включает две стадии: (1) переход от ДНК к механическому аналогу (цепочке связанных маятников) и (2) переход от механического аналога к электронному (линии Джозефсона). Второй способ прямой. Он включает только одну стадию — прямой переход от ДНК к электронному аналогу.

Ключевые слова: моделирование динамики ДНК, механический аналог ДНК, электронный аналог ДНК, линия Джозефсона

UDC: 51.76; 577.323

## Electronic analogue of DNA

L. V. Yakushevich

Institute of Cell Biophysics of the Russian Academy of Sciences,  
Institutskaya st. 3, Pushchino, Moscow region, 142290, Russia

E-mail: kind-@mail.ru

*Received 15.07.2017, after completion — 31.07.2017.*

*Accepted for publication 08.09.2017.*

It is known that the internal mobility of DNA molecules plays an important role in the functioning of these molecules. This explains the great interest of researchers in studying the internal dynamics of DNA. Complexity, laboriousness and high cost of research in this field stimulate the search and creation of simpler physical analogues, convenient for simulating the various dynamic regimes possible in DNA. One of the directions of such a search is connected with the use of a mechanical analogue of DNA — a chain of coupled pendulums. In this model, pendulums imitate nitrous bases, horizontal thread on which pendulums are suspended, simulates a sugar-phosphate chain, and gravitational field simulates a field induced by a second strand of DNA. Simplicity and visibility are the main advantages of the mechanical analogue. However, the model becomes too cumbersome in cases where it is necessary to simulate long (more than a thousand base pairs) DNA sequences. Another direction is associated with the use of an electronic analogue of the DNA molecule, which has no shortcomings of the mechanical model. In this paper, we investigate the possibility of using the Josephson line as an electronic analogue. We calculated the coefficients of the direct and indirect transformations for the simple case of a homogeneous, synthetic DNA, the sequence of which contains only adenines. The internal mobility of the DNA molecule was modeled by the sine-Gordon equation for angular vibrations of nitrous bases belonging to one of the two polynucleotide chains of DNA. The second polynucleotide chain was modeled as a certain average field in which these oscillations occur. We obtained the transformation, allowing the transition from DNA to an electronic analog in two ways. The first includes two stages: (1) the transition from DNA to the mechanical analogue (a chain of coupled pendulums) and (2) the transition from the mechanical analogue to the electronic one (the Josephson line). The second way is direct. It includes only one stage — a direct transition from DNA to the electronic analogue.

Keywords: modeling of DNA dynamics, DNA mechanical analogue, DNA electronic analogue, Josephson line

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2017, vol. 9, no. 5, pp. 789–798 (Russian).

## 1. Введение

Внутренняя подвижность молекул ДНК и, в частности, угловые колебания азотистых оснований играют важную роль в функционировании этих молекул. Этим объясняется большой интерес исследователей к более глубокому и детальному изучению особенностей динамики ДНК. Однако экспериментальные исследования в этой области сложны, трудоемки и дороги. Это стимулирует поиск и создание более простых физических аналогов, удобных для изучения различных динамических режимов, возможных в ДНК.

Одно из направлений такого поиска связано с использованием механического аналога ДНК. В частном (однородном) случае такой аналог представляет собой цепочку одинаковых маятников, колеблющихся в плоскостях, ортогональных плоскости листа (рис. 1). В общем (неоднородном) случае такой аналог представляет собой цепочку из неодинаковых маятников, расположенных вдоль цепи в определенном порядке, соответствующем последовательности оснований в ДНК [Yakushevich, 2017]. Достоинство этих механических моделей состоит в том, что они достаточно простые, дешевые и позволяют легко воспроизводить и визуально наблюдать различные динамические режимы, которые могут возникать в однородной (синтетической) и неоднородной (нативной) ДНК при различных начальных и граничных условиях.

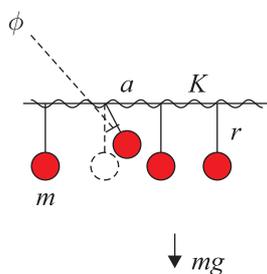


Рис. 1. Цепочка одинаковых маятников:  $\phi$  — угол отклонения маятника от положения равновесия,  $m$  — масса маятника,  $a$  — расстояние между точками подвеса маятников,  $K$  — жесткость пружин, соединяющих маятники,  $r$  — длина маятника,  $g$  — гравитационная постоянная

Недостаток механических моделей заключается в том, что для длинных последовательностей ДНК (например, длиной в несколько тысяч пар оснований) такие модели становятся очень громоздкими, состоящими из нескольких тысяч связанных маятников. Отсюда возникает необходимость найти другие, более удобные и компактные аналоги молекулы ДНК.

Направление поиска таких аналогов подсказывает классическая работа Скотта [Scott, 1969], где был исследован электронный аналог цепочки одинаковых маятников, представляющий собой джозефсоновскую линию, соответствующая эквивалентная схема которой представлена на рис. 2.

Преимущество электронной модели, по сравнению с механической, в том, что она не такая громоздкая и при этом сохраняет все плюсы механической модели; в частности, она тоже достаточно простая, дешевая и ее можно легко использовать для изучения разнообразных динамических режимов, которые могут возникать в ДНК.

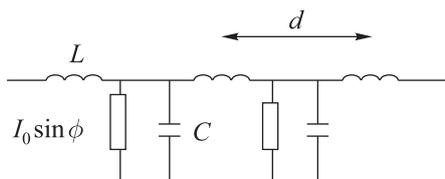


Рис. 2. Эквивалентная схема джозефсоновской линии:  $L$  — индуктивность,  $C$  — емкость,  $\phi$  — джозефсоновская фаза,  $J_0$  — критическое значение тока,  $d$  — размер ячейки

Очевидно, что, объединив результаты этих двух работ, мы получим возможность построить электронный аналог ДНК в два этапа: осуществив сначала переход от ДНК к механическому аналогу с помощью метода, изложенного в работе [Yakushevich, 2017], и затем перейдя от механического аналога к электронному, как это описано в работе [Scott, 1969].

В настоящей работе мы строим такой электронный аналог. Для этой цели мы рассчитываем коэффициенты преобразования, позволяющего перейти от однородной, синтетической ДНК, последовательность которой содержит только аденины, к механическому аналогу. Затем находим коэффициенты преобразования от механического аналога к электронному. И наконец, объединив эти два преобразования, находим коэффициенты прямого преобразования от ДНК к электронному аналогу. В заключение обсуждаются достоинства и недостатки предложенного подхода, а также возможность снять ограничение частным, однородным случаем.

## 2. Математическая модель однородной ДНК

В качестве математической модели, имитирующей угловые колебания азотистых оснований в одной из двух полинуклеотидных цепей (рис. 3), содержащей только аденины, возьмем уравнение синус-Гордона [Grinevich, Ryasik, Yakushevich, 2015.]:

$$I_A \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - KR_A^2 b^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + k_{A-T} R_A^2 \sin \phi = 0. \quad (1)$$

Здесь  $\phi_A(z, t)$  — угловое отклонение азотистого основания (аденина) 1-й полинуклеотидной цепочки,  $I_A = M_A R_A^2$  — момент инерции аденина,  $M_A$  — масса аденина,  $R_A$  — расстояние от центра масс аденина до сахаро-фосфатной цепочки,  $K$  — коэффициент жесткости (на растяжение) сахаро-фосфатной цепочки,  $k_{A-T}$  — константа, характеризующая жесткость связи между основаниями внутри пары А–Т,  $b$  — расстояние между парами оснований. Значения коэффициентов уравнения (1) представлены в таблице 1.

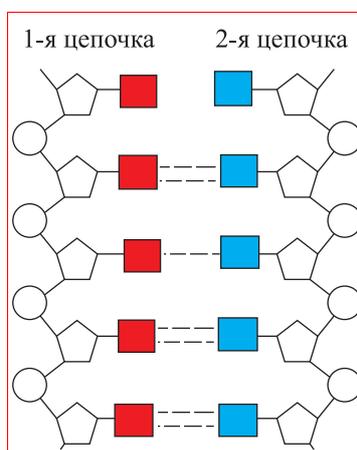


Рис. 3. Схематическое изображение однородной двойной цепи ДНК. Красным цветом обозначены аденины, синим — тимины, кружочками — фосфатные группы, пятиугольниками — сахара. Цветная версия рисунка доступна в электронной версии на сайте журнала

Таблица 1. Коэффициенты уравнения (1) [Yakushevich, 2017]

Последовательность	$I_A \times 10^{-44}$ , кг·м <sup>2</sup>	$R_A \times 10^{-10}$ , м	$K \times 10^{-18}$ , Дж	$b \times 10^{-10}$ , м	$k_{A-T} \times 10^{-2}$ , Н/м
Poly (A)	7.61	5.80	6.99	3.4	6.21

Гамильтониан, отвечающий модельному уравнению (1), имеет вид

$$H_{\Lambda} = \int \left[ \frac{I_{\Lambda}}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{KR_{\Lambda}^2 b^2}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 + k_{\Lambda-T} R_{\Lambda}^2 (1 - \cos \phi) \right] \frac{dz}{b}. \quad (2)$$

Один из наиболее интересных динамических режимов, которые могут наблюдаться в ДНК, — это возникновение и распространение открытых состояний (open states), которые, в свою очередь, определяют как небольшие локально расплетенные участки (bubbles) в двойной спирали ДНК. Считается, что открытым состояниям отвечают решения в виде кинков:

$$\phi = 4 \arctan \left[ \exp \left( \frac{\eta_{\Lambda}}{d_{\Lambda}} (z - v_{\Lambda} t - z_{0\Lambda}) \right) \right],$$

где  $v_{\Lambda}$  — скорость кинка в ДНК,  $z_{0\Lambda}$  — произвольная константа,  $d_{\Lambda} = b \sqrt{K / k_{\Lambda-T}}$  — размер кинка,  $\eta_{\Lambda} = \sqrt{1 - (v_{\Lambda} / C_{0\Lambda})^2}$ ,  $C_{0\Lambda} = a \sqrt{KR_{\Lambda}^2 / I_{\Lambda}}$  — скорость звука в ДНК. Минимальная энергия кинка определяется формулой  $E_{\Lambda} = 8R_{\Lambda}^2 \sqrt{Kk_{\Lambda-T}}$ . Подставляя в эти формулы значения параметров ДНК, собранные в таблице 1, получим  $d_{\Lambda} = 3.61 \times 10^{-9}$  м (~10.6 пар оснований),  $E_{\Lambda} = 1.77 \times 10^{-18}$  Дж.

### 3. Математическая модель цепочки одинаковых маятников

Уравнение, имитирующее колебания маятников, колеблющихся в плоскостях, ортогональных плоскости листа (рис. 1), имеет следующий вид [Трубецков, Рожнев, 2001]:

$$mr^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tau^2} - kr^2 a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + mgr \sin \phi = 0, \quad (3)$$

где  $\phi(\xi, \tau)$  — угловые отклонения маятника в плоскости, ортогональной плоскости рисунка,  $m$  — масса маятника,  $r$  — длина маятника,  $g$  — гравитационная постоянная,  $k$  — жесткость пружинок на горизонтальной нити,  $a$  — расстояние между маятниками. Выберем такие значения параметров  $m$ ,  $r$  и  $a$  (таблица 2), чтобы было удобно визуально наблюдать волновые процессы. Значение жесткости пружинок  $k$  подбиралось таким образом, чтобы размер кинка  $d_{mech}$ , измеренный в количестве маятников, совпадал с размером кинка в ДНК  $d_{\Lambda}$  (в парах оснований).

Таблица 2. Коэффициенты уравнения (3) [Yakushevich, 2017]

Модель	$m$ , кг	$r$ , м	$g$ , м/с <sup>2</sup>	$a$ , м	$k$ , Н/м
Цепочка одинаковых маятников	0.1	0.1	2.27	0.03	1111.11

Гамильтониан, отвечающий уравнению (1), имеет вид

$$H_{mech} = \int \left[ \frac{mr^2}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right)^2 - \frac{kr^2 a^2}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 + mgr (1 - \cos \phi) \right] \frac{d\xi}{a}. \quad (4)$$

Размер и минимальная энергия нелинейных волн (кинков), которые могут наблюдаться в цепочке связанных маятников, определяются формулами  $d_{mech} = a \sqrt{kr / mg}$ ,  $E_{mech} = 8r \sqrt{krmg}$ . Подставляя значения параметров из таблицы 2 в эти формулы, получим  $d_{mech} = 0.32$  м (~10.6 маятников),  $E_{mech} = 8.35$  Дж.

#### 4. Преобразование, связывающее ДНК и ее механический аналог

Чтобы построить механический аналог однородной ДНК, введем преобразование от модели ДНК к механической модели:

$$\begin{aligned}\tau &= \beta_{\Lambda} t, \\ \xi &= \eta_{\Lambda} z.\end{aligned}\quad (5)$$

Подставляя (5) в (1), получим

$$M_{\Lambda} R_{\Lambda}^2 \beta_{\Lambda}^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tau^2} - Kb^2 R_{\Lambda}^2 \eta_{\Lambda}^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + k_{\Lambda-T} R_{\Lambda}^2 \sin \phi = 0. \quad (6)$$

Перепишем уравнение (6) в эквивалентном виде:

$$\frac{M_{\Lambda} R_{\Lambda}^2 \beta_{\Lambda}^2}{mr^2} \left[ mr^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tau^2} - \left( \frac{\eta_{\Lambda}^2 Kb^2 m}{\beta_{\Lambda}^2 M_{\Lambda} ka^2} \right) kr^2 a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + \left( \frac{r k_{\Lambda-T}}{g M_{\Lambda} \beta_{\Lambda}^2} \right) mgr \sin \phi \right] = 0. \quad (7)$$

Потребуем выполнения следующих двух условий:

$$\frac{\eta_{\Lambda}^2 Kb^2 m}{\beta_{\Lambda}^2 M_{\Lambda} ka^2} = 1, \quad \frac{r k_{\Lambda-T}}{g M_{\Lambda} \beta_{\Lambda}^2} = 1. \quad (8)$$

Из условий (8) находим искомые коэффициенты преобразования от ДНК к механическому аналогу:

$$\beta_{\Lambda} = \sqrt{\frac{r k_{\Lambda-T}}{g M_{\Lambda}}}, \quad \eta_{\Lambda} = \frac{a}{b} \sqrt{\frac{k_{\Lambda-T} kr}{K mg}}. \quad (9)$$

С учетом (9) уравнение (6) преобразуется к виду

$$\frac{k_{\Lambda-T} R_{\Lambda}^2}{mgr} \left[ mr^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tau^2} - kr^2 a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + mgr \sin \phi \right] = 0, \quad (10)$$

а гамильтониан (2) приобретет вид

$$H_{\Lambda} = \frac{a Kb^2 R_{\Lambda}^2}{b ka^2 r^2} \int \left[ \frac{mr^2}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right)^2 - \frac{kr^2 a^2}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 + mgr (1 - \cos \phi) \right] \frac{d\xi}{a}. \quad (11)$$

Подставляя значения параметров из таблиц 1 и 2, мы рассчитали значения коэффициентов преобразования:  $\beta_{\Lambda} = 5.29 \times 10^{10}$ ,  $\eta_{\Lambda} = 2.80 \times 10^7$ .

#### 5. Математическая модель джозефсоновской линии

Модельное уравнение для джозефсоновской фазы  $\phi(\tilde{\xi}, \tilde{\tau})$  имеет вид [Scott, 1969]

$$C \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\tau}^2} - \frac{d^2}{L} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\xi}^2} + I_0 \sin \phi = 0, \quad (12)$$

где  $I_0$  — критическое значение тока,  $C$  — емкость,  $L$  — индуктивность,  $d$  — размер ячейки,  $\Phi_0$  — квант магнитного потока (рис. 2). Один из возможных наборов параметров эквивалентной схемы, изображенной на рис. 3, представлен в таблице 3.

Таблица 3. Коэффициенты уравнения (12) [PSCAN dimensionless units; Клушин и др., 2016]

Модель	$C \times 10^{-15}$ , $A^2 c^4 / \text{кг м}^2$	$L \times 10^{-12}$ , $\text{кг м}^2 / c^2 A^2$	$I_0 \times 10^{-6}$ , А	$d \times 10^{-6}$ , м	$\Phi_0 \times 10^{-15}$ , $\text{кг м}^2 / c^2 A$
Джозефсоновская линия	455	2.64	1.25	8	2.07

Учитывая, что слагаемые модельных уравнений (1) и (3) имеют размерность энергии, то для проведения в дальнейшем сравнительного анализа и расчетов удобно переписать модельное уравнение (12) для джозефсоновской фазы таким образом, чтобы его слагаемые также имели размерность энергии. Для этого умножим каждое слагаемое уравнения (12) на множитель  $\frac{\Phi_0}{2\pi}$ . В результате модельное уравнение для джозефсоновской фазы приобретет следующий вид:

$$C \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\tau}^2} - \frac{d^2}{L} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\xi}^2} + I_0 \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right) \sin \phi = 0, \quad (13)$$

а гамильтониан, отвечающий модельному уравнению (13), приобретет вид

$$H_{el} = \int \left[ \frac{C}{2} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \left( \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\tau}} \right)^2 - \frac{d^2}{2L} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \left( \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\xi}} \right)^2 + I_0 \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right) (1 - \cos \phi) \right] \frac{d\tilde{\xi}}{d}. \quad (14)$$

Третье слагаемое в квадратных скобках в формуле (14) — джозефсоновская энергия. Односолитонное решение уравнения (13) в виде кинка будет иметь в этом случае следующий вид:

$$\phi = 4 \arctan \left[ \exp \left( \frac{\eta_{el}}{d_{el}} (z - v_{el} t - z_{0el}) \right) \right],$$

где  $v_{el}$  — скорость кинка в электронной модели,  $z_{0el}$  — произвольная константа,  $d_{el} = d \sqrt{\Phi_0 / 4\pi I_0 L}$  — размер кинка,  $\eta_{el} = \sqrt{1 - (v_{el} / C_{0el})^2}$ ,  $C_{0el} = d / \sqrt{LC}$ . Минимальная энергия кинка определяется формулой  $E_{el} = \frac{8d\Phi_0}{2\pi} \sqrt{\Phi_0 I_0 / 4\pi L}$ . Подставляя значения параметров из таблицы 3 в эти формулы, получим  $d_{el} = 8.00 \times 10^{-5}$  м (~10 ячеек),  $E_{el} = 3.30 \times 10^{-21}$  Дж.

## 6. Преобразование, связывающее электронный аналог и механическую модель

Чтобы построить электронный аналог цепочки маятников, введем преобразование от электронной модели к механической:

$$\begin{aligned} \tau &= \tilde{\beta} \tilde{\tau}, \\ \xi &= \tilde{\eta} \tilde{\xi}. \end{aligned} \quad (15)$$

Подставляя (15) в (13), получим

$$C \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \tilde{\beta}^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\tau}^2} - \frac{d^2}{L} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \tilde{\eta}^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\xi}^2} + I_0 \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right) \sin \phi = 0. \quad (16)$$

Перепишем уравнение (16) в эквивалентном виде:

$$\frac{C}{mr^2} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \tilde{\beta}^2 \left[ mr^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\tau}^2} - \left( \frac{d^2}{LC} \frac{\tilde{\eta}^2}{\tilde{\beta}^2} \frac{m}{ka^2} \right) kr^2 a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\xi}^2} + \left( \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^{-1} \frac{1}{C \tilde{\beta}^2} \frac{r}{g} I_0 \right) mgr \sin \phi \right] = 0. \quad (17)$$

Потребуем выполнения следующих двух условий:

$$\frac{d^2 \tilde{\eta}^2}{LC \tilde{\beta}^2} \frac{m}{ka^2} = 1, \quad \left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right)^{-1} \frac{1}{C \tilde{\beta}^2} \frac{r}{g} I_0 = 1. \quad (18)$$

Из условий (18) находим искомые коэффициенты преобразования от механического аналога к электронному:

$$\tilde{\beta} = \sqrt{\left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right)^{-1} \frac{I_0 r}{C g}}, \quad \tilde{\eta} = \frac{a}{d} \sqrt{LI_0 \left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right)^{-1} \frac{kr}{mg}}. \quad (19)$$

С учетом (19) уравнение (16) преобразуется к виду

$$\frac{1}{mgr} I_0 \left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right) \left[ mr^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{t}^2} - kr^2 a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{\xi}^2} + mgr \sin \phi \right] = 0, \quad (20)$$

а гамильтониан (14) приобретет вид

$$H_{эл} = \frac{a}{d} \frac{L}{ka^2 r^2} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right)^2 \int \left[ \frac{mr^2}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}}\right)^2 - \frac{kr^2 a^2}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\xi}}\right)^2 + mgr(1 - \cos \phi) \right] \frac{d\tilde{\xi}}{a}. \quad (21)$$

Подставляя значения параметров из таблиц 2 и 3, мы рассчитали значения коэффициентов преобразования (15):  $\tilde{\beta} = 9.22 \times 10^9$ ,  $\tilde{\eta} = 1.26 \times 10^3$ .

## 7. Прямое преобразование, связывающее ДНК и ее электронный аналог

Чтобы построить электронный аналог ДНК, проведем последовательно два преобразования. Сначала проведем преобразование (5) от ДНК к механической модели. Затем проведем преобразование от механической модели к электронной, которое является обратным к (15). В результате получим искомое преобразование от ДНК к электронной модели:

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= \frac{\beta_\Lambda}{\tilde{\beta}} t, \\ \tilde{\xi} &= \frac{\eta_\Lambda}{\tilde{\eta}} z. \end{aligned} \quad (22)$$

Подставляя в (22) значения коэффициентов преобразований (5) и (15), находим формулы преобразования:

$$\frac{\beta_\Lambda}{\tilde{\beta}} = \sqrt{\left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right) \frac{Ck_{\Lambda-T}}{I_0 M_\Lambda}}, \quad (23)$$

$$\frac{\eta_\Lambda}{\tilde{\eta}} = \frac{d}{b} \sqrt{\left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right) \frac{k_{\Lambda-T}}{LI_0 K}}. \quad (24)$$

Подставляя в (22) и в (23) значения параметров из таблиц 1 и 3, мы получили значения коэффициентов преобразования (22):  $\frac{\beta_\Lambda}{\tilde{\beta}} = 5.74$ ,  $\frac{\eta_\Lambda}{\tilde{\eta}} = 2.22 \times 10^4$ .

## 8. Обсуждение

В данной работе мы показали, что джозефсоновская линия может быть использована в качестве электронного аналога ДНК. Рассчитаны коэффициенты прямых и непрямых преобразований от модели ДНК к электронному аналогу для простого случая однородной, синтетической ДНК, последовательность которой содержит только аденины. Очевидно, что аналогичным способом могут быть рассчитаны коэффициенты преобразований и для последовательностей, содержащих только тимины, или только гуанины, или только цитозины. Во всех этих случаях коэффициенты модельных уравнений являются константами.

В общем (неоднородном) случае, когда коэффициенты модельных уравнений не являются константами, а зависят от последовательности оснований, задача существенно усложняется. Однако ее можно решить в квазиоднородном приближении, когда коэффициенты модельных уравнений усредняются по всей последовательности оснований и становятся снова константами, а неоднородная задача сводится фактически к однородному случаю, уже рассмотренному в данной работе.

Достоинство рассмотренной в работе электронной модели в ее простоте, компактности и дешевизне. Она не такая громоздкая, как механическая модель. Как следует из таблиц 2 и 3, общая длина механического аналога фрагмента ДНК длиной, к примеру, 100 пар оснований составляет 3 м, а длина электронного аналога — всего  $8 \times 10^{-4}$  м. При этом электронная модель сохраняет все плюсы механической модели. В частности, ее можно легко использовать для изучения различных динамических режимов, которые могут возникать в ДНК при разнообразных начальных и граничных условиях. Можно ожидать, что с помощью электронной модели можно будет опытным (экспериментальным) путем получить много новых интересных решений.

Необходимо отметить, однако, ряд ограничений предложенного выше подхода. Так, расчеты коэффициентов преобразования были выполнены в рамках простой математической модели ДНК, имитирующей угловые колебания азотистых оснований в одной из двух полинуклеотидных цепей. Вторая цепочка моделировалась как некоторое среднее поле, в котором происходят колебания оснований. Еще одно ограничение связано с тем, что модель не учитывает взаимодействие угловых колебаний оснований с поперечными и продольными движениями нуклеотидов. Она также не учитывает спиральный характер структуры ДНК. Учет этих особенностей структуры и внутренней подвижности молекулы ДНК, несомненно, приведет к более сложному математическому описанию ДНК, что, в свою очередь, усложнит задачу о поиске механических и электронных аналогов молекулы. Однако можно ожидать, что основные принципы и подходы, которые были детально описаны в данной работе, окажутся полезными и в случае более сложных и точных математических моделей ДНК.

## Список литературы (References)

*Клушин А. М., Пестов Е. Е., Галин М. А., Левичев М. Ю.* Джозефсоновские контакты из высокотемпературных сверхпроводников для эталонов напряжения // *Физика твердого тела*. — 2016. — Т. 58, № 11. — С. 2121–2126.

*Klushin A. M., Pestov E. E., Galin M. A., Levichev M. Yu.* Dzhozefsonovskie kontakty iz vysoko-temperaturnykh sverhprovodnikov dlya ehtalonov napryazheniya // *Fizika tverdogo tela*. — 2016. — Vol. 58, no. 11. — P. 2121–2126 (in Russian).

*Трубецков Д. И., Рожнев А. Г.* Линейные колебания и волны. — М.: Физматлит, 2001.

*Trubeckov D. I., Rozhnev A. G.* Linejnyye kolebaniya i volny. — Moscow: Fizmatlit, 2001.

*Grinevich A. A., Ryasik A. A., Yakushevich L. V.* Trajectories of DNA Bubbles // *Chaos, Solitons & Fractals*. — 2015. — Vol. 75, no. 1. — P. 62–75.

PSCAN dimensionless units [Electronic resource]: <http://www.physics.sunysb.edu/Physics/RSFQ/Lib/units.html>

*Scott A. C.* A Nonlinear Klein-Gordon Equation // *Am. J. Phys.* — 1969. — Vol. 37, no. 1. — P. 52–61.

*Yakushevich L. V.* On the Mechanical Analogue of DNA // *Journal of Biological Physics.* — 2017. — Vol. 43, no. 1. — P. 113–125.