

## СРАВНЕНИЕ ДВУХ КЛАССОВ МОДЕЛЕЙ ДИНАМИКИ ДНК С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ ВОЗМОЖНОСТИ ОПИСАНИЯ ЕЁ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ

Закирьянов Ф.К., Галина Г.К.

Башкирский государственный университет,  
Россия, 450005, г. Уфа, ул. З. Валиди, 32, +7(347) 273 67 23, farni@rambler.ru

Общая картина внутренней подвижности ДНК очень сложна и разнообразна. Она включает движения отдельных атомов, небольших атомных групп и целых фрагментов двойной спирали, характеризующиеся своими временами и амплитудами. Особый интерес с точки зрения функционирования ДНК представляют движения, сопровождаемые образованием так называемого «открытого состояния».

Открытые состояния определяются как мобильные локальные области длиной от нескольких до нескольких десятков пар оснований, внутри которых водородные связи разорваны. Образование таких открытых состояний может быть связано 1) со значительными угловыми отклонениями (*вращениями*) оснований от положений равновесия и 2) с *поперечными смещениями* оснований в плоскости, перпендикулярной оси ДНК. Соответственно для описания таких движений рассматриваются *два класса* математических моделей: это так называемые Y-модели и РВ-модели. С математической точки зрения эти модели представляют собой нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных:  $\sin$ -Гордона (и его модификаций) и Клейна-Гордона соответственно. Нелинейные волновые решения соответствующих уравнений являются теми математическими образами, которые могут имитировать открытые состояния ДНК.

Интересно сравнить модели названных классов с точки зрения возможности описания различных конформационных изменений, возникающих в процессе функционирования ДНК. Наибольший интерес, как правило, представляют процессы репликации, транскрипции и конформационных А-В-переходов. Анализ возможных решений уравнения  $\sin$ -Гордона (и его модификаций) приводит к выводу о том, что математическими образами, соответствующими открытым состояниям в молекуле ДНК, возникающим при *транскрипции* и *репликации* являются соответственно:  $2\pi$ -кинк и  $\pi$ -кинк (а также пара  $\pi$ -кинк- $\pi$ -антикинк). Решений, описывающих А-В-переходы, по-видимому, не существует. В то же время в случае использования уравнений Клейна-Гордона транскрипции соответствует динамический солитон (отсутствующий как устойчивое решение в случае уравнения  $\sin$ -Гордона), репликации – кинк (а также пара кинк-антикинк) и квазикинк, А-В-переходам – кинк (а также пара кинк-антикинк). По-видимому, в случае использования уравнения  $\sin$ -Гордона можно получить решение, подобное динамическому солитону (соответствующее образованию гомоклинической траектории на фазовом портрете), только при учёте диссипации и внешнего воздействия.

На наш взгляд, при прочих равных условиях, РВ-модели обладают *большими* возможностями по сравнению с Y-моделями с точки зрения возможности описания различных конформационных изменений в процессе функционирования ДНК.