

СОЛИТОННАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ НАЧАЛЬНЫХ СТАДИЙ РЕПЛИКАЦИИ МОЛЕКУЛЫ ДНК

Ф.К.Закирьянов, М.И.Фахретдинов, В.А.Балашова

Башкирский государственный университет,
Россия, 450074, г. Уфа, ул. З. Валиди, 32, (347)22-99-645, farni@rambler.ru

Большинство предложенных ранее моделей нелинейной динамики ДНК имели дело с *одиночной* молекулой. Во многих случаях этого бывает достаточно, например, при описании *денатурации* ДНК в рамках РВ-моделей [1]. В то же время известно, что в начальных стадиях *репликации* ДНК прокариот активно участвуют *белки*: топоизомераза «распрямляет» спираль, переводя ДНК в «плоскую» форму, а геликаза разъединяет и разводит в стороны комплементарные цепи. Кроме того, «классические» РВ-модели не учитывают *геликоидальной* структуры реальной молекулы ДНК, так как в них рассматривается только взаимодействие ближайших соседей. Но в реальности водородная связь между комплементарными основаниями характеризуется конечным дипольным моментом. Растяжение пар оснований приводит к изменению дипольного момента и, соответственно, взаимодействия между диполями, зависящего от расстояния как $1/r^3$. С учётом такого *дальнегодействия* становится важной *спиральная форма* молекулы.

В настоящей работе для описания начальных стадий репликации нами предлагается модель, являющаяся развитием РВ-модели с учётом спиральной геометрии и белков топоизомеразы и геликазы. Для описания взаимодействия молекулы ДНК с белками используется подход, аналогичный предложенному в работе [2]. Основная идея заключается в том, что присутствие белка *локально* изменяет динамику ДНК. Предложенная нами модель допускает решения в виде нелинейных уединённых волн (солитонов). При этом в рамках нашей модели начальная стадия репликации представляется как два последовательных этапа: 1) локальный переход молекулы ДНК под действием топоизомеразы из спиральной формы в плоскую, описываемый *кинком*, и 2) образование открытого состояния в плоской форме ДНК под действием геликазы, описываемое *квазикинком*.

Компьютерное моделирование показало, что учёт взаимодействия ДНК с белками расширяет область существования и устойчивости солитонных решений по сравнению с «классическими» РВ-моделями. Предлагаемая модель позволяет также учитывать влияние диссипации и внешних сил и может быть модифицирована для учёта неоднородности молекулы ДНК по основаниям.

Литература

1. *Peyrard M., Bishop A.* // Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 2755.
2. *Derks G., Gaeta G.* // Physica D **240** (2011), 1805-1817.