



УДК: 539.2, 519.624

MSC 2010: 34C15, 70K75

## Дискретные бризеры и мультибризеры в модели ДНК Пейрара – Бишопа

М. И. Фахретдинов, Ф. К. Закирьянов, Е. Г. Екомасов

Исследуются дискретные бризеры и мультибризеры в модели ДНК Пейрара – Бишопа. Определена область существования дискретных бризеров и мультибризеров. Получены решения в виде односайтовых, двухсайтовых и трехсайтовых дискретных бризеров. Исследованы их свойства и устойчивость по отношению к малым возмущениям.

Ключевые слова: дискретные бризеры, мультибризеры, модель ДНК Пейрара – Бишопа

В 1988 году Сиверс и Такено [1] рассматривали модели идеальных, но нелинейных решеток с ангармоническими потенциалами взаимодействия между частицами и обнаружили локализованные в пространстве периодические колебания большой амплитуды с частотой, выходящей за пределы фононного спектра. Такено назвал эти колебания «внутренними локализованными модами» (intrinsic localized modes), подчеркивая, что они зависят от свойств самой решетки осцилляторов и не зависят от примесей и дефектов решетки. Этот результат вызвал большой интерес научного сообщества к данным объектам, появилось множество публикаций, описывающих локализованные моды или, как их еще называют, дискретные бризеры (ДБ), приближенными аналитическими и численными методами в различных моделях нелинейных решеток. Пейджем были найдены внутренние локализованные моды в дискретной системе Ферми – Паста – Улама [2], Кэмпбелл и Пейрар, а также Флах и Уиллис рассматривали цепочку осцилляторов с потенциалом  $\varphi^4$  и нашли решения типа ДБ с частотой, лежащей за пределами фононного спектра [3, 4]. Были найдены решения типа бризеров в разных моделях дискретных систем, в частности, в цепочках осцилляторов Клейна – Гордона с потенциалами  $\varphi^3$  [5, 6] и системах, описываемых дискретным нелинейным уравнением Шрёдингера [7, 8]. Кроме решений в виде ДБ для нелинейных решеток известны также решения другого типа — в виде кинков, дискретных солитонов [9].

Получено 07 октября 2014 года

После доработки 20 ноября 2014 года

Фахретдинов Марат Ирекович

[fmi106tf@gmail.com](mailto:fmi106tf@gmail.com)

Закирьянов Фарит Кабирович

[farni@rambler.ru](mailto:farni@rambler.ru)

Екомасов Евгений Григорьевич

[ekomasoveg@gmail.com](mailto:ekomasoveg@gmail.com)

Башкирский государственный университет

450076, Уфа, ул. Заки Валиди, 32



Для получения решений в виде ДБ существует множество методов: аналитические, позволяющие находить приближенные ДБ (такие, как дискретный вариационный метод), и численные, позволяющие получать «численно точные» (numerically exact) ДБ [10]. Молекулярная динамика также с успехом используется для определения условий существования и свойств дискретных бризеров в кристаллах, в углеродных нанотрубках [11], в графене [12–15] и в графене [16]. Существование ДБ в графене было подтверждено и с использованием первопринципных расчетов [17].

В 1994 году Маккеем и Обри [18] было дано строгое математическое доказательство существования ДБ в гамильтоновых решетках слабо связанных осцилляторов Клейна–Гордона с гамильтонианом

$$H = \sum_n \left[ \frac{\dot{u}_n^2}{2} + V(u_n) + SW(u_n - u_{n-1}) \right], \quad (1)$$

где  $u_n$  — смещение  $n$ -го осциллятора от положения равновесия,  $V$  — слагаемое, характеризующее взаимодействие осцилляторов с внешним потенциалом подложки,  $SW$  — слагаемое, характеризующее взаимодействие соседних осцилляторов решетки,  $S$  — параметр связи осцилляторов. Уравнения движения, соответствующие гамильтониану (1), имеют вид

$$\ddot{u}_n = S [W'(u_{n+1} - u_n) - W'(u_n - u_{n-1})] - V'(u_n). \quad (2)$$

Предел  $S = 0$  называется антиконтинуальным пределом, при этом система распадается на множество независимых осцилляторов  $u_n$ , движущихся в поле потенциала  $V(u_n)$ .

Если возбужден только один осциллятор ( $n = 0$ ), а все остальные находятся в покое, мы получаем ангармонический осциллятор (3), колеблющийся с частотой  $\omega_b$ , то есть простейший дискретный бризер — периодическое решение дискретной системы, локализованное только на одном узле решетки:

$$\ddot{u} + V'(u) = 0. \quad (3)$$

В работе [18] вводится понятие кодовой последовательности (coding sequence)  $\sigma_n$ . Координата каждого осциллятора  $u_n(t)$  зависит от времени как  $u_n(t) = g_{\omega_n}(\omega_n t + \alpha_n)$ , где  $g_{\omega_n}$  —  $2\pi$ -периодическая функция, описывающая движение одиночного осциллятора с частотой  $\omega_n$  и фазой  $\alpha_n$ . В антиконтинуальном пределе движение системы полностью описывается набором частот  $\omega_n$  и фаз осцилляторов  $\alpha_n$ . В кодовой последовательности  $\sigma_n = 0$ , если осциллятор с индексом  $n$  находится в покое,  $\sigma_n = +1$ , если  $\alpha_n = 0$ , и  $\sigma_n = -1$ , если  $\alpha_n = \pi$ . Например, бризер, локализованный на одном сайте (one-site breather), описывается кодовой последовательностью  $\{\dots, 0, 0, +1, 0, 0, \dots\}$ . ДБ, описываемые другими последовательностями, называются мультибризерами.

Маккей и Обри показали [18], что методом продолжения по параметру данное решение можно продолжить в область значений параметра связи осцилляторов  $S \neq 0$  при следующих условиях: а) ангармоничность потенциала  $V$ , то есть частота нелинейного осциллятора должна зависеть от его амплитуды, б) условие отсутствия резонанса колебаний — частота ангармонического осциллятора  $\omega_b$  и все ее гармоники не должны входить в фононный спектр исследуемой дискретной системы (2).

На основе работы [18] Марином и Обри был разработан метод получения точных дискретных бризеров [19] в нелинейных решетках и показаны многочисленные примеры применения этого метода.

Рассмотрим этот метод получения ДБ с заданной частотой  $\omega_b$ . Число частиц бризера возьмем равным  $N$  (так как ДБ сильно локализованы в пространстве, то для численного

расчета, как правило, используют  $N < 10^2$ ; в нашей работе  $N = 65$ ). Обозначим как  $\mathbf{X}(t)$  вектор решений системы (2), такой, что  $\mathbf{X} = \{u_n, \dot{u}_n\}$ . Тогда уравнение (2) можно рассматривать как отображение  $\mathbf{Y} = F(\mathbf{X})$ , переводящее вектор начальных условий  $\mathbf{X}(0)$  в вектор решений (2) в момент времени  $t$ , равный  $\mathbf{X}(t)$ . Если мы проинтегрируем уравнение (2) до времени  $T_b = 2\pi/\omega_b$ , то ДБ с частотой  $\omega_b$  можно представить как неподвижную точку отображения  $F$  за один период ДБ,  $\mathbf{X}(T_b) = F_{\omega_b}(\mathbf{X}(0)) = \mathbf{X}(0)$ . Таким образом, ДБ можно рассматривать как решение уравнения  $\mathbf{X} = F(\mathbf{X})$ .

В качестве начального приближения к решению используется тривиальное бризерное решение (2) в антиконтинуальном пределе  $S = 0$  – решение уравнения (3). Для решения уравнения  $\mathbf{X} = F(\mathbf{X})$  применяется стандартный метод Ньютона. Пусть  $\mathbf{X}$  – начальное приближение к неподвижной точке отображения. Введем небольшую поправку к решению  $\delta$ . Тогда можно записать  $F(\mathbf{X} + \delta) \approx F(\mathbf{X}) + \partial F(\mathbf{X})\delta$ ; с учетом того, что  $\mathbf{X} + \delta$  близко к неподвижной точке отображения, получим  $\mathbf{X} + \delta \approx F(\mathbf{X}) + \partial F(\mathbf{X})\delta$ . Отсюда, выражая  $\delta$ , находим приближение к решению:

$$\mathbf{X}_{new} = \mathbf{X} + \delta \approx \mathbf{X} - (\partial F(\mathbf{X}) - \mathbf{I})^{-1} [F(\mathbf{X}) - \mathbf{X}]. \tag{4}$$

Здесь  $\mathbf{I}$  – единичная матрица порядка  $2N$ ,  $\partial F(\mathbf{X})$  – матрица Якоби порядка  $2N$ . Элементы матрицы  $\partial F(\mathbf{X})$  находятся с помощью интегрирования линеаризованной системы (2) за один период ДБ  $T_b$ :

$$\ddot{\varepsilon}_n = S [(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n) W''(u_{n+1} - u_n) - (\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}) W''(u_n - u_{n-1})] - V''(u_n) \varepsilon_n. \tag{5}$$

Если  $\{u_n(0), \dot{u}_n(0)\}$  является неподвижной точкой отображения  $F$ , то  $\{u_n(\tau), \dot{u}_n(\tau)\}$  также является неподвижной точкой отображения  $F$  для любого  $\tau$ , поэтому  $\{\varepsilon_n(0), \dot{\varepsilon}_n(0)\} = \{u_n(0), \dot{u}_n(0)\}$  – собственный вектор матрицы  $\partial F(\mathbf{X})$  с собственным значением, равным 1. Поэтому матрица  $\partial F(\mathbf{X}) - \mathbf{I}$  становится необратимой и метод Ньютона перестает работать. Для преодоления этой трудности Марин и Обри предложили уменьшить размерность пространства, в котором ищется решение, для исключения собственного значения 1 матрицы  $\partial F(\mathbf{X})$ . Авторы ограничились поиском обратимых по времени решений, откуда автоматически вытекает условие  $\dot{u}_n(0) = 0$  для любого  $n$ . В этом случае задача переходит в нахождение неподвижной точки отображения  $R(\{u_n(0)\}) = F(\{u_n(0); 0\}) = \{u_n(T_b)\}$ . Алгоритм нахождения неподвижной точки отображения  $R$  принимает вид

$$\mathbf{X}_{new} = \mathbf{X} - (\partial R(\mathbf{X}) - \mathbf{I})^{-1} [R(\mathbf{X}) - \mathbf{X}], \tag{6}$$

где  $\partial R(\mathbf{X})$  – матрица порядка  $N$ , являющаяся подматрицей матрицы  $\partial F(\mathbf{X})$  порядка  $2N$ . Если последовательные итерации, определяемые (6), сходятся к неподвижной точке, то обратимая по времени периодическая орбита динамической системы (2) найдена, то есть найдено решение в виде ДБ.

В качестве начального приближения для поиска ДБ по формуле (6) используется простейший ДБ в антиконтинуальном пределе  $S = 0$ , заданный кодовой последовательностью  $\sigma_n$ . В процессе нахождения решения методом Ньютона параметр  $S$  маленькими шагами  $dS$  увеличивается, при этом решение на текущем шаге  $S$  является приближением к решению на следующем шаге  $S + dS$ . Решение можно продолжить вплоть до некоторого  $S_{max}$ , при котором метод Ньютона перестает сходиться, при этом матрица  $\partial R(\mathbf{X}) - \mathbf{I}$  становится необратимой.

Для интегрирования уравнений движений в методе Ньютона и при исследовании устойчивости ДБ нами использовался высокоточный многошаговый метод Адамса с автоматическим выбором шага. Итерации метода Ньютона продолжались, пока разность между последовательными приближениями решения не становилась меньше  $10^{-12}$ .

В данной работе мы используем эти методы для исследования бризеров и мультибризеров в модели молекулы ДНК Пейрара–Бишопа [20]. Эта модель была разработана для исследования процесса денатурации молекулы ДНК, хорошо себя зарекомендовала и имеет значительное количество модификаций [21].

Рассмотрим безразмерный гамильтониан, описывающий  $y_n(t)$  — растяжение водородной связи в молекуле ДНК модели Пейрара–Бишопа [22]:

$$H = \frac{1}{2} \dot{y}_n^2 + \frac{1}{2} S (y_n - y_{n-1}) + \left[ 1 - \exp(-\sqrt{2}y_n) \right]; \quad (7)$$

ему соответствуют уравнения движения, являющиеся системой автономных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\ddot{y}_n = S (y_{n-1} - 2y_n + y_{n+1}) - 2\sqrt{2} \exp(-\sqrt{2}y_n) \left( 1 - \exp(-\sqrt{2}y_n) \right), \quad (8)$$

где  $S = k/Da^2$  — безразмерный параметр связи осцилляторов,  $k$  — константа взаимодействия вдоль цепи,  $D$  и  $a$  — параметры потенциала Морзе,  $D$  — энергия диссоциации полинуклеотидных цепочек, а  $a$  — параметр, обратный длине (пространственный масштаб потенциала). Числовые параметры  $a$ ,  $k$ ,  $D$  в разных работах принимают разные значения:  $D = 0.33$  эВ,  $a = 1.8/\text{Å}$ ,  $k = 0.003$  эВ/Å<sup>2</sup> [20],  $D = 0.1$  эВ,  $a = 2/\text{Å}$ ,  $k = 1.5$  эВ/Å<sup>2</sup> [23], величина параметра стэкинг-взаимодействия  $k$  лежит в широком диапазоне значений  $k = 0.003..4.8$  эВ/Å<sup>2</sup> [24]. При этом безразмерный параметр  $S$  может изменяться от 0.002 до 3.75.

Фононный спектр уравнения (8) имеет вид  $\omega = \sqrt{4 + 4S \sin^2(q/2)}$ . Он лежит в интервале от  $\omega_{ph1} = 2$  до  $\omega_{ph2} = \sqrt{4 + 4S}$ . Известно, что для систем с потенциалом типа Морзе частота бризеров лежит ниже нижней границы фононного спектра, то есть  $0 < \omega_b < 2$ .

Условие отсутствия резонанса гармоник ДБ в рассматриваемой системе выражается соотношением  $z\omega_b \in [\omega_{ph1}, \omega_{ph2}]$ , где  $z$  — натуральное число. Это соотношение накладывает ограничения на максимальное значение параметра связи осцилляторов  $S_{\max}$  и частоту ДБ:

$$\frac{2}{n} < \omega_b < \frac{2}{n-1}, \quad S_{\max} < \frac{1}{4} (n^2 \omega_b^2 - 4), \quad n > 1. \quad (9)$$

На рисунке 1 серым цветом показаны значения параметров, при которых в исследуемой системе могут существовать ДБ, а пунктирной линией — граница, определяющая максимальное значение параметра связи осцилляторов  $S_{\max}$  при данной частоте. С увеличением частоты ДБ максимальное допустимое при расчете значение параметра связи осцилляторов  $S_{\max}$  растет и достигает максимума  $S_{\max} = 3$  при частоте, равной нижней границе фононного спектра  $\omega_{ph1} = 2$ . Из рисунка 1 видно, что возможны два сценария продолжения решения по параметрам модели. Если совершается продолжение решения по параметру  $S$  при заданной частоте, то оно производится непрерывно от  $S = 0$  до  $S_{\max}$ . Если же проводится продолжение решения по частоте ДБ, то необходимо рассматривать отдельные интервалы частот, границы которых кратны нижней частоте фононного спектра системы.

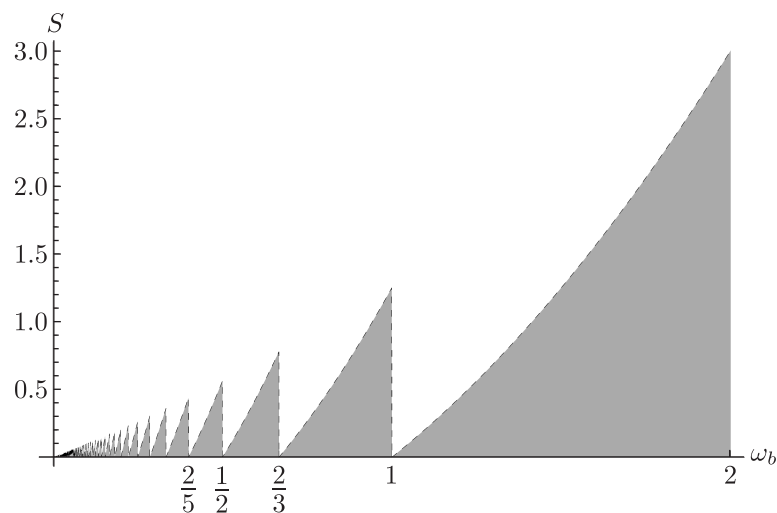


Рис. 1. Область существования ДБ.

### 1. Односайтовые ДБ

Получим ДБ с кодовой последовательностью  $\{\dots 0, 0, +1, 0, 0 \dots\}$ , то есть бризер, локализованный на одном сайте, в антиконтинуальном приближении. Частоту ДБ возьмем равной  $\omega_b = 1.8$ , то есть чуть ниже нижней границы фононного спектра  $\omega_{ph1} = 2$ . Соответствующая этой частоте начальная амплитуда решения в антиконтинуальном пределе равна  $A = 0.404$ , а максимально возможное значение параметра связи осцилляторов, согласно (9), равно  $S_{\max} = \omega_b^2 - 1 = 2.24$ . Используя указанные ранее численные значения параметров модели ДНК, с помощью описанного выше метода, получим бризер с частотами, лежащими в интервале  $1.0 \dots 1.6$  ТГц.

На рисунке 2а показано решение системы (8) в виде дискретного бризера для  $S = 1.7$  за один период. Ширина бризера составляет примерно 14 узлов.

### 2. Мультибризеры

Рассмотрим симметричный мультибризер с кодовой последовательностью  $\{\dots 0, 0, +1, +1, 0, 0 \dots\}$  — двухсайтовый ДБ. На рисунке 2а представлен профиль движения двухсайтового ДБ для параметров  $S = 1.7$ ,  $\omega_b = 1.8$  за один период.

Помимо двухсайтовых ДБ в исследуемой системе существуют устойчивые мультибризеры с более чем двумя частицами в антиконтинуальном приближении. На рисунке 3 показаны профили устойчивых трехсайтовых ДБ.

Устойчивыми являются симметричная последовательность  $\{\dots -1, +1, -1 \dots\}$  и эквивалентная ей  $\{\dots +1, -1, +1 \dots\}$ , а также последовательность  $\{\dots -1, 0, +1, \dots\}$  и эквивалентная ей  $\{\dots +1, 0, -1 \dots\}$ .

### 3. Исследование устойчивости ДБ

Для исследования корректности полученных решений система (8) численно интегрировалась на временах от 0 до  $10\,000 T_b$ , в качестве начальных условий были использованы полученные ДБ. Решения оставались локализованными, и для них строго выполнялось



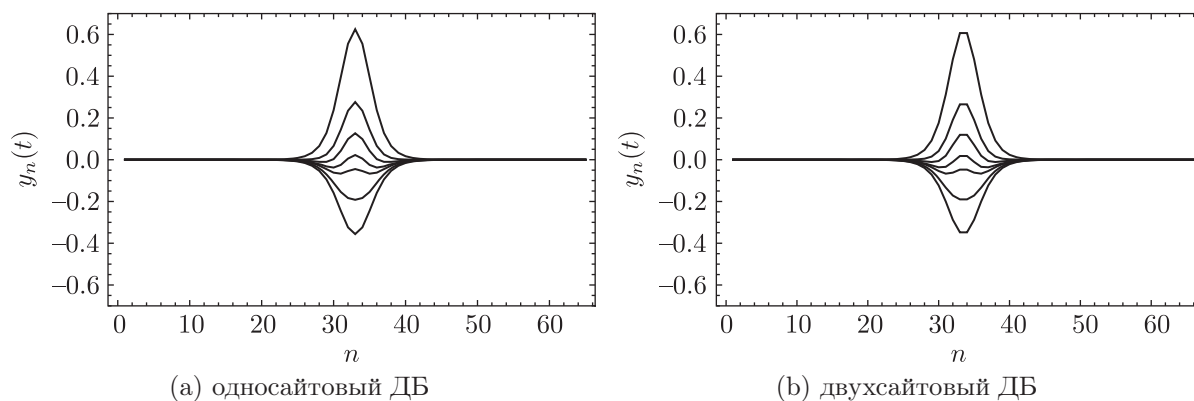


Рис. 2. Стробоскопическая картина движения бризеров.

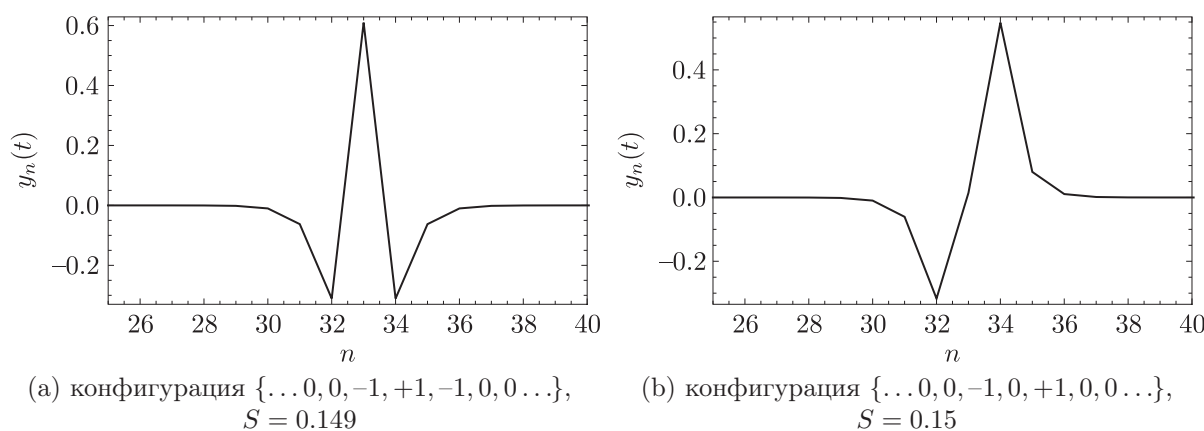


Рис. 3. Профили устойчивых конфигураций кодовой последовательности для трехсайтовых ДБ.

условие периодичности  $y_n(t) = y_n(t + T_b)$  на всем промежутке времени интегрирования. В физических приложениях, однако, имеет смысл рассматривать только решения, обладающие устойчивостью по отношению к малым возмущениям.

Для исследования устойчивости ДБ добавим небольшое возмущение к найденному точному бризерному решению  $\hat{u}_n(t) = u_n(t) + \varepsilon_n(t)$  и подставим его в (8). Разложим это выражение в ряд в окрестности бризерного решения  $u_n(t)$ . Предполагая, что возмущение мало, оставим только линейные по  $\varepsilon_n(t)$  члены. Тогда мы получим следующую систему уравнений:

$$\ddot{\varepsilon}_n = S(\varepsilon_{n+1} - 2\varepsilon_n + \varepsilon_{n-1}) - 4 \left[ \exp(-\sqrt{2}y_n) \left( 2 \exp(-\sqrt{2}y_n) - 1 \right) \right] \varepsilon_n. \quad (10)$$

Решая численно (8) совместно с (10) по времени за один период  $T_b$  и используя в качестве начальных условий для  $y_n(0)$  исследуемое решение в виде ДБ, получим матрицу монодромии. Абсолютные значения мультипликаторов Флоке  $|\lambda|$  матрицы монодромии определяют устойчивость ДБ по отношению к малым возмущениям. С помощью метода продолжения по параметру возможно исследовать зависимость стабильности ДБ от параметров модели.

На рисунке 4 представлены абсолютные значения мультипликаторов Флоке  $|\lambda|$  в зависимости от параметра связи осцилляторов  $S$  для односайтового и двухсайтового бризеров (частота  $\omega_b = 1.8$ ).

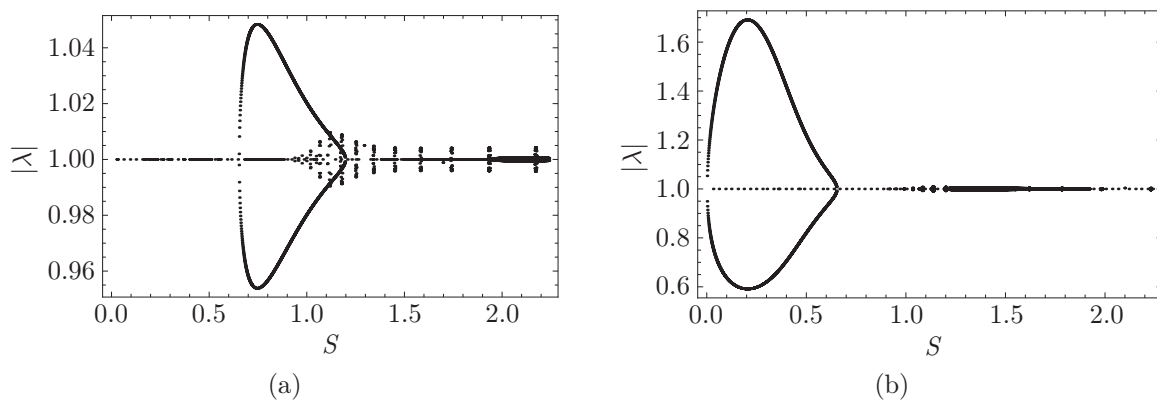


Рис. 4. Диаграмма устойчивости для односайтового (а) и двухсайтового (б) ДБ.

Односайтовые ДБ при  $0 < S \leq 0.6519$  являются устойчивыми. При  $0.652 < S < 1.21$  нет устойчивых решений, а при  $S > 1.21$  есть как устойчивые, так и неустойчивые бризерные решения.

Двухсайтовые ДБ являются неустойчивыми при  $0 < S \leq 0.6519$ . При  $S \geq 0.652$  есть как устойчивые, так и неустойчивые решения.

В точке  $S_{\text{crit}} = 0.6519$  происходит бифуркация решений и так называемое явление обмена стабильностью (stability exchange) между двухсайтовыми и односайтовыми ДБ. Впервые этот эффект был обнаружен Кэмпбеллом и Пейраром [3] для бризеров в цепочке осцилляторов с потенциалом  $\varphi^4$ .

Для односайтового бризера вблизи  $S_{\text{crit}}$  две изолированные пары собственных значений матрицы монодромии приближаются к реальной оси и при достижении параметром  $S$  значения  $S_{\text{crit}}$  покидают единичную окружность (см. рис. 5): ДБ становится неустойчивым по отношению к малым возмущениям. При этом наблюдается исчезновение локализованных собственных векторов матрицы монодромии. Для двухсайтового ДБ, наоборот, действительные изолированные собственные значения, лежащие за пределами единичной окружности, при достижении параметром  $S$  значения  $S_{\text{crit}}$  возвращаются на единичную окружность, и ДБ становится устойчивым по отношению к малым возмущениям (см. рис. 6).

#### 4. Исследование устойчивости трехсайтовых ДБ

Для трехсайтовых ДБ наблюдается несколько иной сценарий.

- ДБ с конфигурацией  $\{\dots 0, 0, -1, +1, -1, 0, 0 \dots\}$ . Продолжение решения возможно до значения  $S_{\text{max}} = 0.333$ . С увеличением параметра  $S$  два изолированных мультипликатора Флоке перемещаются от действительной оси по окружности. Потеря устойчивости происходит при столкновении изолированных собственных значений с фоновым спектром при  $S = 0.095$  и  $S = 0.186$  (см. рис. 7а) в результате бифуркаций Хопфа при столкновении мультипликаторов Флоке на единичной окружности в точках, отличных от 1 и  $-1$  (см. рис. 8).
- ДБ с конфигурацией  $\{\dots 0, 0, -1, 0, +1, 0, 0 \dots\}$ . Продолжение решения возможно до значения  $S_{\text{max}} = 0.363$ . Потеря устойчивости происходит при столкновении изолированных собственных значений с фоновым спектром при  $S = 0.254$  в результате бифуркации Хопфа (см. рис. 7б, 9а, 9б).



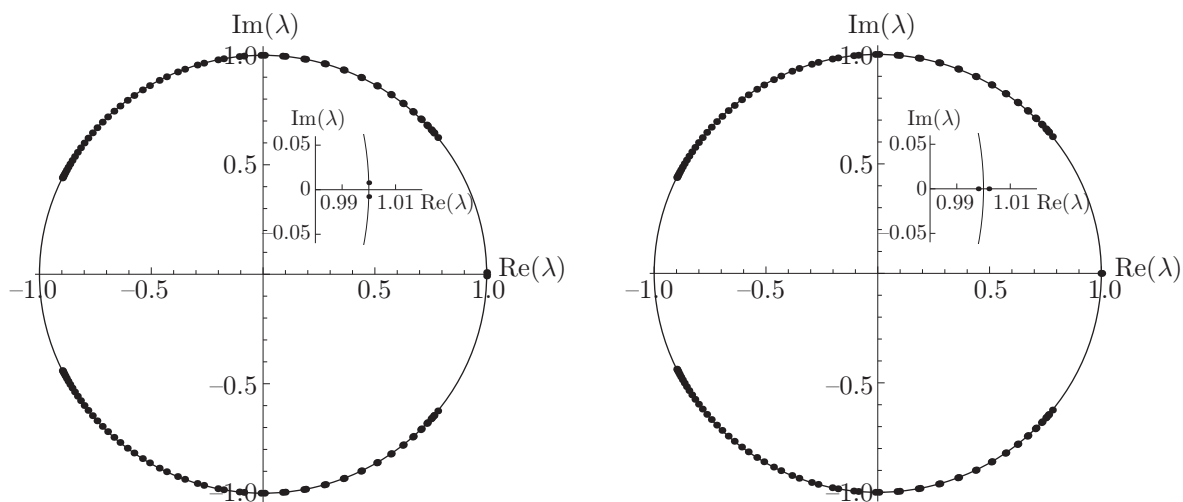


Рис. 5. Изменение устойчивости односайтового ДБ при переходе параметра  $S$  через  $S_{crit}$ .

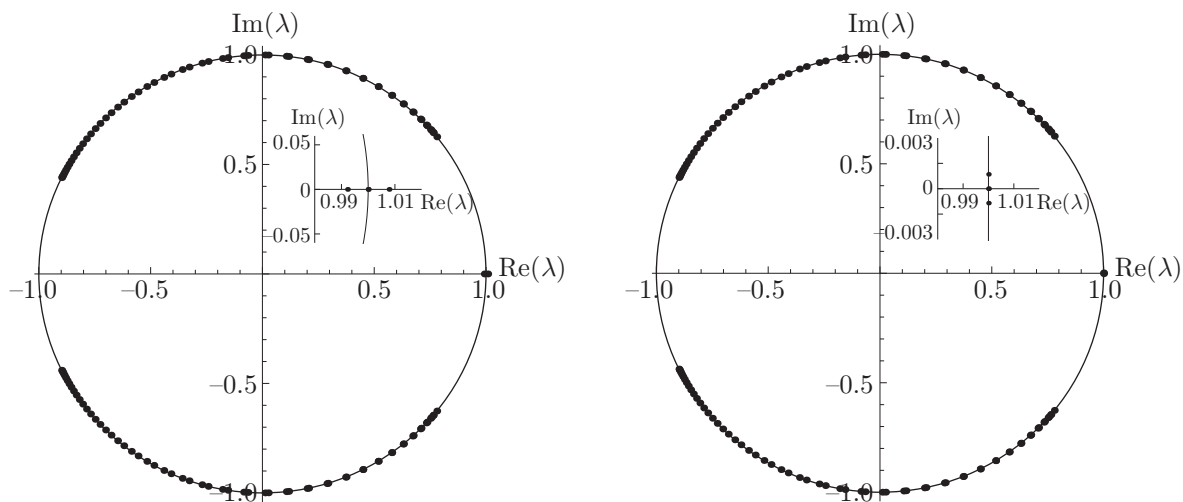
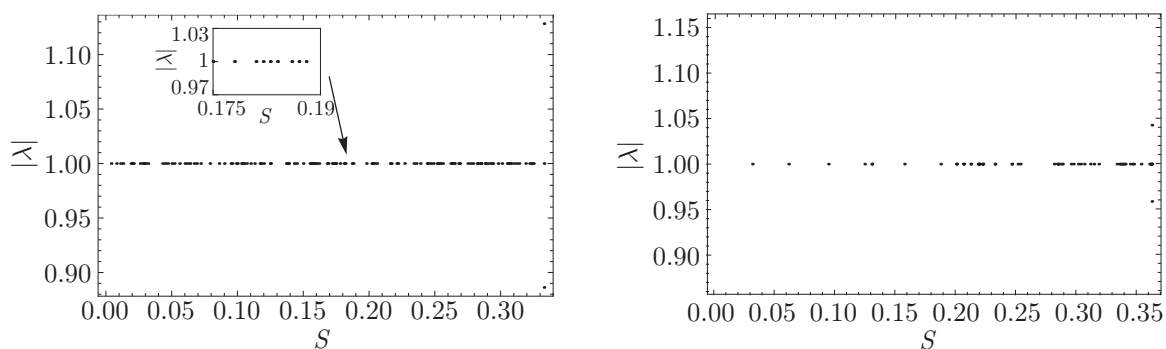


Рис. 6. Изменение устойчивости двухсайтового ДБ при переходе параметра  $S$  через  $S_{crit}$ .



(a) последовательность  $\{\dots, 0, -1, +1, -1, 0, \dots\}$

(b) последовательность  $\{\dots, 0, -1, 0, +1, 0, \dots\}$

Рис. 7. Диаграмма устойчивости для трехсайтовых ДБ.



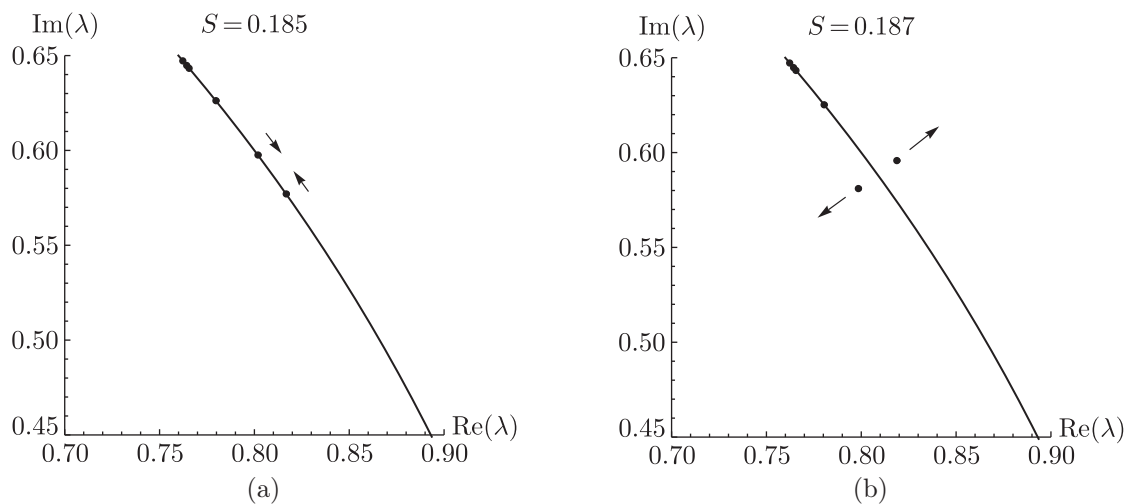


Рис. 8. Изменение устойчивости трехсайтового ДБ с кодовой последовательностью  $\{\dots 0, 0, -1, +1, -1, 0, 0 \dots\}$ .

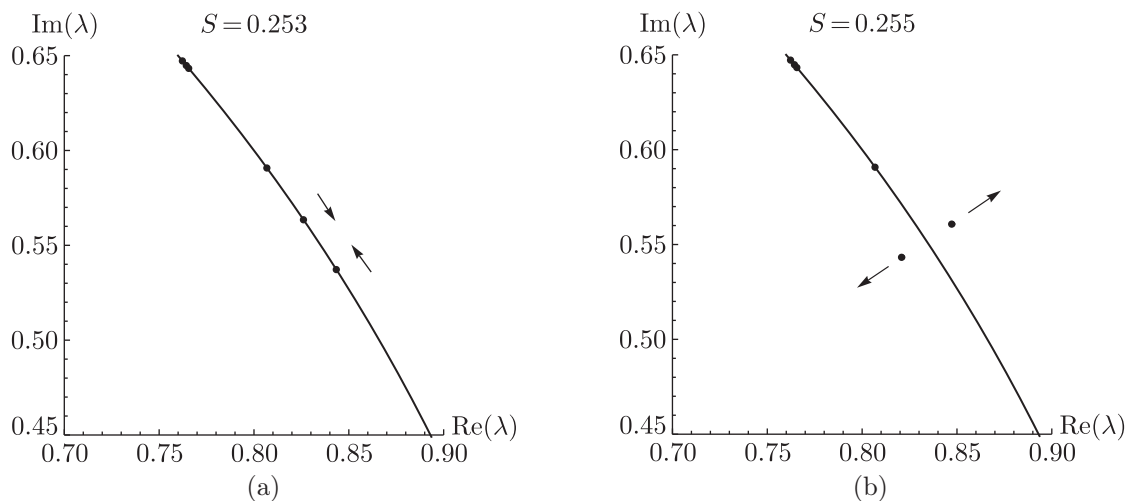


Рис. 9. Изменение устойчивости трехсайтового ДБ с кодовой последовательностью  $\{\dots 0, 0, -1, 0, +1, 0, 0 \dots\}$ .

### 5. Энергия и амплитуда ДБ

ДБ локализуют энергию молекулы ДНК в небольшой области пространства, что может быть ответственно, например, за образование открытого состояния в процессе функционирования ДНК. Энергию ДБ можно найти численно подстановкой решения уравнения (8) в гамильтониан (7).

На рисунке 10а показаны зависимости энергии односайтового  $E_1$  и двухсайтового  $E_2$  ДБ, а также их разности от параметра межчастичного взаимодействия  $S$ . Энергия двухсайтового ДБ больше энергии односайтового ДБ при  $S < 0.623$ . При  $S \approx 0.623$  односайтовый и двухсайтовый ДБ имеют одинаковое значение энергии, и при  $S > 0.623$  энергия односайтового ДБ больше энергии двухсайтового ДБ на незначительную величину, непрерывно уменьшающуюся с увеличением  $S$ . На рисунке 10б показана зависимость амплитуды односайтового и двухсайтового ДБ от параметра межчастичного взаимодействия  $S$ . Амплитуда  $A_2$  двухсайтового ДБ монотонно возрастает от 0.404 до 0.60 с увеличением  $S$ , а амплитуда



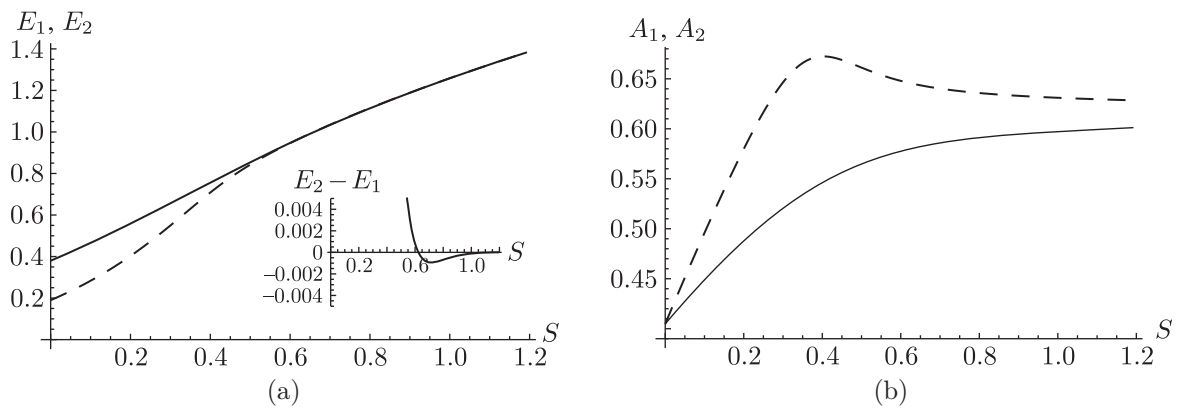


Рис. 10. (а) Энергия односайтового (штрихованная линия) и двухсайтового (сплошная линия) ДБ и разность энергий двухсайтового и односайтового ДБ (на врезке); (б) амплитуда односайтового (штрихованная) и двухсайтового (сплошная линия) ДБ в зависимости от параметра  $S$ .

да односайтового ДБ увеличивается до максимального значения, равного  $\max(A_2) = 0.672$  при  $S = 0.403$ , а затем монотонно убывает до величины 0.628.

Таким образом, в данной работе показана возможность существования устойчивых двух- и трехсайтовых мультибризеров в модели ДНК Пейрара–Бишопа. Исследована их устойчивость по отношению к малым внешним возмущениям. Получены зависимости амплитуды и энергии ДБ от параметра связи осцилляторов. Полученные решения представляют собой новый тип динамического поведения в известной модели ДНК Пейрара–Бишопа.

## Список литературы

- [1] Sievers A. J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals // *Phys. Rev. Lett.*, 1988, vol. 61, no. 8, pp. 970–973.
- [2] Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems // *Phys. Rev. B*, 1990, vol. 41, no. 11, pp. 7835–7838.
- [3] Campbell D. K., Peyrard M. Chaos and order in non-integrable model field theories // *Chaos: Soviet-American perspectives on nonlinear science* / D. K. Campbell (Ed.). New York: AIP, 1990. P. 305–334.
- [4] Flach S., Willis C. R. Localized excitations in a discrete Klein–Gordon system // *Phys. Lett. A*, 1993, vol. 181, no. 3, pp. 232–238.
- [5] Flach S., Willis C. R., Olbrich E. Integrability and localized excitations in nonlinear discrete systems // *Phys. Rev. E*, 1994, vol. 49, no. 1, pp. 836–850.
- [6] Flach S. Conditions on the existence of localized excitations in nonlinear discrete systems // *Phys. Rev. E*, 1994, vol. 50, no. 4, pp. 3134–3142.
- [7] Hennig D., Rasmussen K. Ø., Tsironis G. P., Gabriel H. Breatherlike impurity modes in discrete nonlinear lattices // *Phys. Rev. E*, 1995, vol. 52, no. 5, R4628–R4631.
- [8] Cai D., Bishop A. R., Grønbech-Jensen N. Spatially localized, temporally quasiperiodic, discrete nonlinear excitations // *Phys. Rev. E*, 1995, vol. 52, no. 6, R5784–R5787.
- [9] Попов С. П. О формах двумерных солитонных возмущений в простейших решетках // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2009, т. 49, № 2, с. 323–331.
- [10] Flach S., Gorbach A. Computational studies of discrete breathers — from basics to competing length scales // *Internat. J. Bifur. Chaos Appl. Sci. Engrg.*, 2006, vol. 16, no. 6, pp. 1645–1669.

- [11] Shimada T., Shirasaki D., Kitamura T. Stone–Wales transformations triggered by intrinsic localized modes in carbon nanotubes // *Phys. Rev. B*, 2010, vol. 81, no. 3, 035401, 4 pp.
- [12] Vaimova J. A., Dmitriev S. V., Zhou K. Discrete breather clusters in strained graphene // *Europhys. Lett.*, 2012, vol. 100, no. 3, 36005, 6 pp.
- [13] Хадеева Л. З., Дмитриев С. В., Кившарь Ю. С. Дискретные бризеры в деформированном графене // *Письма в ЖЭТФ*, 2011, т. 94, № 7, с. 580–584.
- [14] Korznikova E. A., Vaimova J. A., Dmitriev S. V. Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons // *Europhys. Lett.*, 2013, vol. 102, no. 6, 60004, 5 pp.
- [15] Корзникова Е. А., Савин А. В., Баимова Ю. А., Дмитриев С. В., Мулюков Р. Р. Дискретный бризер на краю листа графена ориентации «кресло» // *Письма в ЖЭТФ*, 2012, т. 96, № 4, с. 238–242.
- [16] Liu B., Vaimova Ju. A., Dmitriev S. V., Wang X., Zhu H., Zhou K. Discrete breathers in hydrogenated graphene // *J. Phys. D*, 2013, vol. 46, no. 30, 305302, 9 pp.
- [17] Chechin G. M., Dmitriev S. V., Lobzenko I. P., Ryabov D. S. Properties of discrete breathers in graphene from ab initio simulations // *Phys. Rev. B*, 2014, vol. 90, no. 4, 045432, 6 pp.
- [18] MacKay R. S., Aubry S. Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators // *Nonlinearity*, 1994, vol. 7, no. 6, pp. 1623–1643.
- [19] Aubry S. Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization // *Phys. D*, 1997, vol. 103, nos. 1–4, pp. 201–250.
- [20] Peyrard M., Bishop A. R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation // *Phys. Rev. Lett.*, 1989, vol. 62, no. 23, pp. 2755–2758.
- [21] Шигаев А. С., Пономарёв О. А., Лахно В. Д. Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК // *Матем. биология и биоинформ.*, 2013, т. 8, № 2, с. 553–664.
- [22] Фахретдинов М. И., Закирьянов Ф. К. Дискретные бризеры в модели ДНК Пейрара–Бишона // *ЖТФ*, 2013, т. 83, № 7, с. 1–5.
- [23] Dauxois T. Dynamics of breather modes in a nonlinear «helical» model of DNA // *Phys. Lett. A*, 1991, vol. 159, nos. 8–9, pp. 390–395.
- [24] Zdravković S., Satarić M. V. Stacking interaction in DNA molecule // *J. Comput. Theor. Nanosci.*, 2010, vol. 7, no. 10, pp. 2031–2035.

## Discrete breathers and multibreathers in the Peyrard – Bishop DNA model

Marat I. Fakhretdinov<sup>1</sup>, Farit K. Zakirianov<sup>2</sup>, Evgenii G. Ekomasov<sup>3</sup>

<sup>1,2,3</sup>Bashkir State University  
450076, Ufa, Zaki Validi Street, 32

<sup>1</sup>fmi106tf@gmail.com, <sup>2</sup>farni@rambler.ru, <sup>3</sup>ekomasoveg@gmail.com

Discrete breathers and multibreathers are investigated within the Peyrard – Bishop model. Region of existence of discrete breathers and multibreathers is defined. One, two and three site discrete breathers solutions are obtained. Their properties and stability are investigated.

MSC 2010: 34C15, 70K75

Keywords: discrete breathers, multibreathers, Peyrard – Bishop DNA model

Received October 07, 2014, accepted November 20, 2014

Citation: *Rus. J. Nonlin. Dyn.*, 2015, vol. 11, no. 1, pp. 77–87 (Russian)

