

УДК 539.193/.194;535/33/34

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СПЕКТРОВ УРАЦИЛОВЫХ ОСНОВАНИЙ ДНК В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ**

*Эрман Евгений Анатольевич*, кандидат технических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

*Шагаутдинова Ильмира Тауфиковна*, магистрант, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

*Тестова Диана Мухамеджановна*, аспирант, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: dianet\_88@mail.ru

*Равчеева Наталья Александровна*, магистрант, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

*Лихтер Анатолий Михайлович*, доктор технических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

В данной статье на основании модельных квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала мономеров и димеров гидроксисурацилов построены структурно-динамические модели соединений, выявлен характер поведения полос, интерпретированных как колебания фрагментов ОН и NH, по которым можно осуществить их спектральную идентификацию. Расчеты выполнены в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний, причем выбор базиса принципиального значения не имеет. Смещение полос не превышает величины  $\sim 20 \text{ см}^{-1}$ , а качественный характер интенсивностей полос сохраняется.

Как следует из анализа приведенных в статье результатов модельных расчетов, надежным признаком спектральной идентификации мономеров моногидроксисурацилов являются сильные по интенсивности в ИК спектрах полосы в низкочастотном диапазоне спектра, интерпретированные как неплоские деформационные колебания связей NH ( $\rho_{\text{NH}}$ ) и ОН ( $\chi_{\text{OH}}$ ), в то время как конформеры мономеров дигидроксисурацила могут быть идентифицированы по наличию дублета в низкочастотном диапазоне спектра, интерпретированного как крутильные колебания гидроксильного фрагмента.

Результаты модельных расчетов мономеров и димеров гидроксисурацилов, их сопоставление с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам соединений дают основание привлекать метод функционала плотности для получения достоверных предсказательных оценок параметров адиабатического потенциала урациловых и цитозиновых оснований ДНК и выявления признаков спектральной идентификации для различных представителей данного класса соединений.

**Ключевые слова:** структурно-динамические модели, конденсированное состояние, колебательные спектры, адиабатический потенциал, ангармонизм колебаний

### **MODELING OF STRUCTURE AND SPECTRA OF DNA URACIL BASES IN CONDENSED STATE**

*Erman Yevgeniy A.*, Ph.D. (Engineering), Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

*Shagautdinova Ilmira T.*, undergraduate student, Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

*Testova Diana M.*, post-graduate student, Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: dianet\_88@mail.ru

*Ravcheeva Natalya A.*, undergraduate student, Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

**Likhter Anatoliy M.**, D.Sc. (Engineering), Assistant Professor, Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

In this article on the basis of model calculations of the quantum adiabatic potential parameters gidroksiuracil monomers and dimers was built structural-dynamic model compounds. Character of conduct bands, interpreted as fluctuations fragmentov OH and NH, which can be carried out their spectral identification was detected. Calculations made in anharmonic approximation theory molecular vibrations, and the choice of the basis is fundamentally irrelevant. Band shift does not exceed  $\sim 20 \text{ cm}^{-1}$ , and the qualitative nature of the band intensity remains.

As follows from the analysis presented in the paper the results of model calculations, a reliable indicator of the spectral identification of monohidroksiuracil monomers are strong in intensity in the IR spectra bands in the low-frequency range of the spectrum, interpreted as non-planar deformation oscillations bonds NH ( $\rho\text{NH}$ ) and OH ( $\chi\text{OH}$ ), whereas monomers digidroksiuratsila conformers can be identified by the presence of a doublet in the low-frequency range of the spectrum, interpreted as torsional vibrations of hydroxyl moiety.

The results of model calculations of the monomers and gidroksiuracil dimers, and compared with available experimental data on the vibrational spectra of compounds gives rise to attract the density functional theory to obtain reliable estimates of predictive parameters of the adiabatic potential uracil and cytosine bases of DNA and identification-tion to identify the spectral characteristics of various representatives of the class of compounds.

**Keywords:** structural dynamic models, condensed state, vibrational spectra, adiabatic potential, anharmonic

**Введение.** Таутомеры урацила – известные основания нуклеиновых кислот. Спектральная идентификация соединений связана с предварительной теоретической интерпретацией их колебательных спектров, что реально возможно в рамках неэмпирических и гибридных методов квантовой механики молекулярных объектов. Для примера сошлемся на работы [1, 3–5], где предложены структурно-динамические модели базовой молекулы – мономера и димеров урацила. Предпочтение отдано методу функционала плотности DFT/B3LYP и базисам 6-311G\*\* и 6-311+G\*\* [4].

Таутомерные формы урацила – гидроксидурацилы (рис.) связаны с появлением гидроксильных фрагментов  $\text{COH}$  вместо связей  $\text{C}=\text{O}$  за счет атомов водорода связей  $\text{NH}$ .

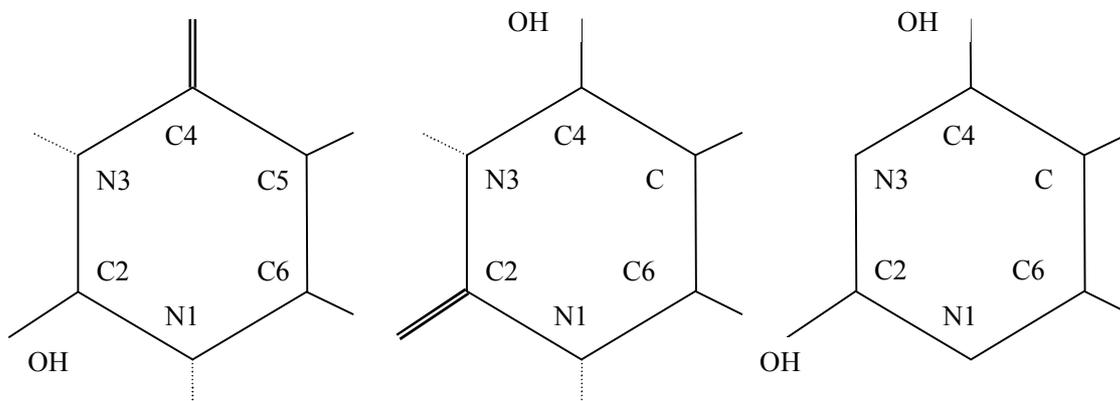


Рис. Молекулярные диаграммы 2-, 4-гидроксидурацилов и дигидроксидурацила

Интерпретация фундаментальных колебаний моногидроксиурацилов (МГДУ), основанная на результатах квантовых расчетов в рамках метода DFT/B3LYP/6-311+G\*\* [4], представлена, к примеру, в работе [8]. Авторы ограничились рассмотрением мономеров соединений в рамках гармонического приближения теории молекулярных колебаний, хотя в реальных условиях они образуют димеры и находятся в конденсированных состояниях.

В данной работе на основании модельных квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала мономеров и димеров гидроксиурацилов построены структурно-динамические модели соединений, выявлен характер поведения полос, интерпретированных как колебания фрагментов *ОН* и *NH*, по которым можно осуществлять их спектральную идентификацию. Расчеты выполнены в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний. Отметим, что выбор базиса расчета принципиального значения не имеет. Смещение полос не превышает величины  $\sim 20 \text{ см}^{-1}$ , качественный характер интенсивностей полос сохраняется.

**Анализ результатов модельных расчетов.** Оценка положения полос осуществлялась по известному соотношению:

$$E^V = \nu_s \left(n_s + \frac{1}{2}\right) + \chi_{sr} \left(n_s + \frac{1}{2}\right) \left(n_r + \frac{1}{2}\right). \quad (1)$$

Для ангармонических констант  $\chi_{sr}$  использовались выражения из работы [7]:

$$\chi_{ss} = \frac{1}{16} F_{ssss} - \frac{5}{48} \frac{(F_{sss})^2}{\nu_s} + \frac{1}{32} (F_{ssr})^2 (\Omega(s; s; -r) - \Omega(s; s; r) - 12\Omega(r; r; r)) \cdot (1 - \delta_{sr}), \quad (2)$$

$$\chi_{sr} = \frac{1}{16} F_{ssrr} - \frac{1}{8} (F_{ssr})^2 (\Omega(s; s; -r) + \Omega(s; s; r)) \cdot (1 - \delta_{sr}) + \frac{3}{8} (F_{srt})^2 \cdot (\Omega(s; r; t) - \Omega(s; r; -t) + \Omega(s; -r; t) - \Omega(s; -r; -t)) \cdot (1 - \delta_{sr}) \cdot (1 - \delta_{st}) \cdot (1 - \delta_{rt}) + L(\alpha; sr)^2 \cdot \frac{1}{2} (\Omega(s; r; 0) + \Omega(s; -r; 0)). \quad (3)$$

В формулах (1)–(3)  $P_\alpha = L(\alpha; sr) Q^s P_r$ ;  $L(\alpha; sr)$  – постоянные Кориолиса;  $\nu_s$  – частоты гармонических колебаний (в  $\text{см}^{-1}$ );  $Q^s$  – безразмерные нормальные колебательные координаты;  $F_{srt}$  и  $F_{srtu}$  – кубические и квартичные силовые постоянные;  $\Omega(s; \pm r; \pm t) = (\nu_s \pm \nu_r \pm \nu_t)^{-1}$  – резонансные функции;  $n_s$  – набор квантовых чисел колебательного состояния.

Модельные расчеты геометрических параметров и колебательных спектров таутомеров гидроксиурацилов для различных конформеров соединений определяются значениями двугранных углов D1(1,2,О,Н) и D2(3,4,О,Н). Значения D1 = 0 и D2 = 0 соответствуют конформерам K1, значения 180° – конформерам K2. Результаты модельных расчетов представлены в табл. 1–5.

Как следует из табл. 1, надежным признаком спектральной идентификации мономеров МГДУ являются сильные по интенсивности в ИК спектрах полосы в низкочастотном диапазоне спектра, интерпретированные как неплоские деформационные колебания связей *NH* ( $\rho_{NH}$ ) и *OH* ( $\chi_{OH}$ ).

Таблица 1

**Интерпретация колебаний связей *ОН* и *NH*  
в конформерах и таутомерах гидроксиурацилов**

Форма колеб.	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР									
	N1H_K1			N1H_K2			N3H_K1			N3H_K2		
<b>2-Гидроксиурацил</b>												
$\nu_{OH}$	3630	60	143	3587	108	89	3587	116	115	3638	85	90
$\nu_{NH}$	3448	59	110	3462	105	104	3412	62	93	3391	29	98
$\rho_{NH}$	389	102	3,9	494	154	1,3	662	60	2,0	604	102	3,2
$\chi_{OH}$	170	57	2,6	538	25	3,2	521	114	3,2	250	46	2,1

4-Гидроксиурацил												
$\nu_{OH}$	3557	83	109	3636	72	97	3620	81	125	3628	98	120
$\nu_{NH}$	3439	75	110	3437	74	109	3403	40	102	3418	72	92
$\rho_{NH}$	643	120	0,3	640	39	0,8	579	69	3,9	642	9,2	2,3
$\chi_{OH}$	590	46	5,2	389	35	3,8	256	77	2,4	380	127	2,5
Дигидроксиурацил												
	K1			K2			K3			K4		
$\nu_{OH}$	3595	95	98	3634	70	95	3595	89	90	3634	72	95
	3569	85	118	3597	96	94	3569	72	115	3597	94	88
$\beta_{OH}$	1214	22	2,7	1215	20	2,5	1199	211	3,3	1209	120	1,1
	1179	400	1,6	1176	19	4,0	1174	213	1,5	1174	127	5,5
$\chi_{OH}$	544	193	1,7	563	95	3,2	547	196	6,6	557	102	3,5
	552	8,4	6,0	420	90	2,6	527	3,2	1,0	419	90	2,6

**Примечание.** Частоты колебаний в  $\text{см}^{-1}$ , интенсивности в спектрах ИК в  $\text{км/моль}$ , в спектрах КР в  $\text{Å}^4 \cdot \text{a.e.m.}$

Отметим, что в мономере урацила [1, 3–5] к неплоским деформационным колебаниям связей N1H и N3H отнесены полосы 667 и 560  $\text{см}^{-1}$  соответственно (табл. 2).

Таблица 2

**Интерпретация колебаний связей NH в мономерах и димерах урацила**

Форма колеб.	$\nu_{\text{экс}} [^{\circ}]$	Мономер			N1H---O8C2			N3H9---O8C2			N3H9---O10C4		
		$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
$\nu_{N1H}$	3484	3479	99	95	3424	0	149	3462	0	170	3463	0	248
$\nu_{N3H}$	3437	3435	60	77	3424	118	0	3462	194	0	3463	200	0,0
$\nu_{NH---}$		-	-	-	3127	3142	0	3203	1737	0	3149	2243	0
$\nu_{NH---}$		-	-	-	3094	0	279	3176	0,0	533	3114	0,0	609
$\rho_{NH---}$		-	-	-	861	188	0,0	884	198	0	911	182	0,0
$\rho_{NH---}$		-	-	-	816	0,0	2,1	861	0,0	0,1	882	0	0,2
$\rho_{N3H}$	662	666	72	2,3	672	89	466	-	-	-	-	-	-
$\rho_{N1H}$	551	565	44	1,0	-	-	-	565	122	1,7	570	119	1,7

Конформеры мономеров дигидроксиурацила (ДГДУ) могут быть идентифицированы по наличию дублета в низкочастотном диапазоне спектра, интерпретированного как крутильные колебания гидроксильного фрагмента (табл. 1). Для конформеров K2 ( $D1 = 0^{\circ}$ ;  $D2 = 180^{\circ}$ ) и K4 ( $D1 = 180^{\circ}$ ;  $D2 = 180^{\circ}$ ) щель между ними достигает величины  $\sim 150 \text{ см}^{-1}$ , а полосы сравнимы по интенсивности в ИК спектрах. Для конформеров K1 и K3 интенсивна лишь одна из полос, а щель сужается до величины порядка точности расчетов ( $\sim 20 \text{ см}^{-1}$ ). Для идентификации ДГДУ следует также использовать интенсивность дублета, интерпретированного как проявление колебания валентного угла СОН ( $\beta_{OH}$ ).

Результаты модельных расчетов колебательных состояний димеров МГДУ с сильной и слабой водородной связью представлены соответственно в табл. 3 и 4.

Таблица 3

**Интерпретация колебаний связей *OH* и *NH* –  
в конформерах димеров МГДУ с сильной водородной связью**

Форма колеб.	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
	N1H_K1			N1H_K1,2						N1H_K2		
4-гидроксиурацил ( $R_{(C=O\cdots HN1)} = 1,73; 1,72; 1,72 \text{ \AA}$ )												
$q_{OH}$	3560	166	257	3635	79	132	3561	82	128	3636	157	265
$q_{NH}$	3000	3951		2986	4068	0,2	-	-	-	2973	4182	0
$q_{NH}$	2940	-	859	-	-	-	2924	0,2	858	2909	0	855
$\rho_{NH}$	930	77	-	929	69	-	900	0,5	3,0	962	113	0
$\chi_{OH}$	591	194	10	591	96	5,0	409	60	3,6	408	125	7,3
N3H_K1			N3H_K1,2						N3H_K2			
2-гидроксиурацил ( $R_{(C=O\cdots HN3)} = 1,75; 1,69; 1,70 \text{ \AA}$ )												
$q_{OH}$	3590	244	257	3590	129	122	3584	178	83	3564	433	156
$q_{NH}$	3004	3297	-	2959	3110	67	-	-	-	2919	3395	-
$q_{NH}$	2949	-	675	-	-	-	2877	343	595	2847	-	603
$\rho_{NH}$	952	124	-	962	105	0,1	889	40	0,1	934	163	-
$\chi_{OH}$	529	202	7,4	530	104	3,6	449	72	0,5	472	191	1,8
4-гидроксиурацил ( $R_{(C=O\cdots HN3)} = 1,66; 1,64; 1,72 \text{ \AA}$ )												
$q_{OH}$	3529	520	168	3633	112	125	3555	203	90	3634	204	259
$q_{NH}$	2842	3896	0	2892	3610	60	-	-	-	2954	3787	-
$q_{NH}$	2757	0	554	-	-	-	2795	395	597	2892	-	705
$\rho_{NH}$	952	164	0	982	72	0,1	898	36	0,3	962	113	0
$\chi_{OH}$	501	221	3,3	463	117	1,7	399	103	2,6	395	210	5,4

Таблица 4

**Интерпретация колебаний в димерах МГДУ со слабой водородной связью (*HO---H*)**

$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
$q_{OH}$			$q_{NH}$			$\rho_{NH}$			$\chi_{OH}$		
4-ГДУ(N3H)---2-ГДУ(N1H), $R_{(HO\cdots HN1)} = 2,17 \text{ \AA}$ ; $R_{(HO\cdots HN3)} = 1,95 \text{ \AA}$											
3624	91	103	3397	496	220	715	11	0,2	518	161	2,3
3577	124	66	3311	620	319	569	20	0,7	355	81	2,6
4-ГДУ(N3H)---4-ГДУ(N3H), $R_{(HO\cdots HN3)} = 2,04$											
3628	231	179	3352	938	460	748	112	-	378	217	4,1
2-ГДУ(N1H)---2-ГДУ(N1H), $R_{(HO\cdots HN3)} = 2,01$											
3568	206	150	3348	1455	655	636	154	-	515	201	7,1
2-ГДУ(N3H)---2-ГДУ(N3H), $R_{(HO\cdots HN3)} = 2,03$											
3580	252	172	3329	949	463	778	89	1,3	507	199	4,7
4-ГДУ(N1H)---4-ГДУ(N1H), $R_{(HO\cdots HC5)} = 2,46$											
3552	160	188	3439	163	258	648	218	0,5	559	100	9,6
4-ГДУ(N3H)---4-ГДУ(N3H), $R_{(HO\cdots HC5)} = 2,64$											
3620	161	222	3402	84	201	573	141	7,6	235	137	4,3

Образование димеров с сильной водородной связью ( $RO\cdots H = 1,66\text{--}1,75 \text{ \AA}$ ) приводит к существенному сдвигу ( $\sim 400\text{--}500 \text{ см}^{-1}$ ) полос валентных колебаний связей *NH* ( $q_{NH}$ ) в длинноволновый диапазон колебательного спектра. Дублетное расщепление полос достигает величины  $\sim 60\text{--}70 \text{ см}^{-1}$ . Полосы, интерпретированные как неплоские деформационные коле-

бания связей  $NH$ , участвующие в образовании водородных связей, смещаются в коротковолновый диапазон на величину  $\sim 300 \text{ см}^{-1}$ . Дублеты указанных полос разнесены щелью от 30 до  $90 \text{ см}^{-1}$ , а их интенсивность в спектрах КР незначительна. Тип таутомера определяет смещение полос в спектрах ИК, которое может достигать величины  $\sim 50 \text{ см}^{-1}$ , и величину интенсивностей полос. На наш взгляд, идентификация конформеров и таутомеров МГДУ по указанным характеристикам полос затруднительна. Следует отметить, что такой же характер поведения полос валентных и неплоских деформационных колебаний связей  $NH$ , участвующих в образовании водородных связей, имеет место и в димере урацила (табл. 2), однако значения частот различаются на величину  $\sim 100 \text{ см}^{-1}$ . Для валентных колебаний ( $q_{NH}$ ) это дублеты в диапазоне  $\sim 3100\text{--}3170 \text{ см}^{-1}$ , для деформационных колебаний ( $\rho_{NH}$ ) –  $\sim 820\text{--}890 \text{ см}^{-1}$ .

Как и в мономерах, для целей идентификации следует использовать полосы, интерпретированные как крутильные колебания связей  $OH$ .

Образование слабой водородной связи между атомами кислорода гидроксильной группы и атомами водорода связей  $NH$  приводит к смещению полос валентных колебаний связей  $NH$  в длинноволновый диапазон на величину  $\sim 50\text{--}100 \text{ см}^{-1}$  (табл. 4). Однако использование этого факта для спектральной идентификации таутомеров МГДУ может встретить затруднение, поскольку в реальном эксперименте контур соответствующих полос нередко имеет уширение такого же порядка. Здесь надежным признаком идентификации следует признать характер поведения полос, интерпретированных как неплоские деформационные колебания связей  $NH$  и  $OH$ .

Характер поведения полос валентных и деформационных колебаний связей  $NH$  в димерах урацил – МГДУ по сравнению с соответствующими мономерами наглядно иллюстрируют данные, представленные в табл. 5.

Таблица 5

**Интерпретация колебаний в димерах урацил---гидроксиурацил**

$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
$q_{OH}, \chi_{OH}$			$q_{NH}, \rho_{NH}$			$q_{NH\cdots}$			$\rho_{NH\cdots}$		
Урацил---2-ГДУ(N1H), $R_{(C=O\cdots HN1)} = 1,82 \text{ \AA}$ ; $R_{(N1H\cdots OH)} = 1,99 \text{ \AA}$											
3568	95	76	3421	63	72	3331	834	240	782	100	1,1
513	97	4,1	689	31	1,2	3136	1420	502	651	1,3	1,1
Урацил---2-ГДУ(N1H), $R_{(C=O\cdots HN1)} = 1,84 \text{ \AA}$ ; $R_{(N3H\cdots OH)} = 2,01 \text{ \AA}$											
3577	104	69	3462	105	89	3307	685	168	792	23	1,3
521	107	3,4	563	58	0,9	3198	1178	452	719	49	1,9
Урацил---2-ГДУ(N3H), $R_{(C=O\cdots HN3)} = 1,90 \text{ \AA}$ ; $R_{(N3H\cdots OH)} = 2,03 \text{ \AA}$											
3577	109	84	3459	106	84	3340	495	163	858	103	0,1
519	92	2,6	569	55	0,9	3193	861	335	775	36	0,6
Урацил---4-ГДУ(N3H), $R_{(C=O\cdots HN3)} = 1,88 \text{ \AA}$ ; $R_{(N3H\cdots OH)} = 2,09 \text{ \AA}$											
3623	78	99	3419	65	69	3387	524	213	846	117	0,1
360	77	2,3	681	76	1,8	3189	1034	365	625	14	0,7
Урацил---4-ГДУ(N3H), $R_{(C=O\cdots HN3)} = 1,91 \text{ \AA}$ ; $R_{(N1H\cdots OH)} = 2,04 \text{ \AA}$											
3626	88	88	3459	108	114	3353	474	158	853	130	0,1
368	84	1,9	572	56	0,8	3188	987	369	729	0,1	1,0

Щель между положением полос валентных колебаний связей  $NH$  ( $q_{NH}$ ), участвующих в образовании слабых и сильных водородных связей, достигает величины  $\sim 200 \text{ см}^{-1}$ , что можно использовать в качестве признака спектральной идентификации димеров урацил –

МГДУ. Для этих же целей следует использовать и характеристики полос, интерпретированных как неплоские деформационные колебания связей  $OH$  ( $\chi_{OH}$ ) и  $NH$  ( $\rho_{NH}$ ).

**Заключение.** Результаты модельных расчетов мономеров и димеров гидроксипуринов, их сопоставление с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам соединений дает основание привлечь метод функционала плотности для получения достоверных предсказательных оценок параметров адиабатического потенциала урациловых и цитозиновых оснований ДНК и выявления признаков спектральной идентификации для различных представителей данного класса соединений.

#### Список литературы

1. Элькин М. Д. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью / М. Д. Элькин, Л. М. Бабков // Известия Саратовского государственного университета. Сер. Физика. – 2011. – Т. 11, вып. 1. – С. 20–25.
2. Элькин М. Д. Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия Саратовского государственного университета. Сер. Физика. – 2008. – Т. 8, вып. 2. – С. 24–30.
3. Элькин П. М. Моделирование колебательных состояний 5- и 6- азаурацилов / П. М. Элькин, А. М. Лихтер, О. Н. Гречухина // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2009. – № 1 (5). – С. 48–52.
4. Элькин П. М. Математическое моделирование и динамика димеров урацила и азаурацилов / П. М. Элькин, Е. А. Эрман // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2012. – № 10 (44). – С. 55–62.
5. Эрман Е. А. Системный анализ структурно-динамических моделей димеров азаурацилов в конденсированном состоянии / Е. А. Эрман, Г. П. Стефанова, Н. А. Равчеева, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина, О. М. Алыкова // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2012. – № 3 (19). – С. 96–102.
6. Colarusso P. The infrared spectra of uracil, thymine, and adenine in gas phase / P. Colarusso, K. Zhang, B. Guo, P. F. Bernath // Chemical Physics Letters. – 1997. – Vol. 269. – P. 39–48.
7. Frisch M. J. Gaussian 03, Revision B.03 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. Pittsburgh PA. : Gaussian Inc., 2003.
8. Ten G. N. Calculation and analysis of the structure and vibrational spectra of uracil tautomers / G. N. Ten, V. V. Nechev, R. S. Sherbakov, V. I. Baranov // J. Structural Chemistry. – 2010. – Vol. 51, № 1. – P. 32–39.

#### References

1. Elkin M. D., Babkov L. M. Uchet angarnonicheskogo smeshcheniya polos v modelnykh raschetakh kolebatelnykh spektrov dimerov s vodorodnoy svyazyu [The accounting of anharmonic band shift in model calculations of vibrational spectra of dimers with hydrogen bond]. *Izvestiya Saratovskogo gosudarstvennogo universiteta. Ser. Fizika* [News of Saratov State University. Series Physics], 2011, vol. 11, no. 1, pp. 20–25.
2. Elkin M. D., Dzhalmukhambetova Ye. A., Grechukhina O. N. Proyavlenie mezhmolekulyarnogo vzaimodeystviya v dimerakh uratsila [The manifestation of intermolecular interaction in uracil dimers]. *Izvestiya Saratovskogo gosudarstvennogo universiteta. Ser. Fizika* [News of Saratov State University. Series Physics], 2011, vol. 8, no. 2, pp. 24–30.
3. Elkin P. M., Likhter A. M., Grechukhina O. N. Modelirovanie kolebatelnykh sostoyaniy 5- i 6- azauratsilov [Modeling of vibrational states of 5- and 6-azauracils]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2009, no. 1 (5), pp. 48–52.
4. Elkin P. M., Erman Ye. A. Matematicheskoe modelirovanie i dinamika dimerov uratsila i azauratsilov [Mathematical modeling and dynamics of uracil and azauracil dimers]. *Izvestiya Volgogradskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [News of Volgograd State Technical University], 2012, no. 10 (44), pp. 55–62.
5. Erman Ye. A., Stefanova G. P., Ravcheeva N. A., Dzhalmukhambetova Ye. A., Grechukhina O. N., Alykova O. M. Sistemnyy analiz strukturno-dinamicheskikh modeley dimerov azauratsilov v kondensirovan-

nom sostoyanii [System analysis of structural and dynamic models of azauracil dimers in condensed state]. *Pri-kaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2012, no. 3 (19), pp. 96–102.

6. Colarusso P., Zhang K., Guo B., Bernath P. F. The infrared spectra of uracil, thymine, and adenine in gas phase. *Chemical Physics Letters*, 1997, vol. 269, pp. 39–48.

7. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. *Gaussian 03, Revision B.03*. Pittsburgh PA., Gaussian Inc., 2003.

8. Ten G. N., Nechev V. V., Sherbakov R. S., Baranov V. I. Calculation and analysis of the structure and vibrational spectra of uracil tautomers. *J. Structural Chemistry*, 2010, Vol. 51, no. 1, pp. 32–39.

УДК 615.471:616-073.97:616.831:681.3.06

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МОЗГЕ ЧЕЛОВЕКА МЕТОДАМИ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ**

**Старченко Ирина Борисовна**, доктор технических наук, профессор, Южный федеральный университет, 347922, Российская Федерация, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2, e-mail: star@sfedu.ru

**Резниченко Александр Анатольевич**, аспирант, Южный федеральный университет, 347922, Российская Федерация, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2, e-mail: naos\_88@mail.ru

**Будко Раиса Юрьевна**, студент, Южный федеральный университет, 347922, Российская Федерация, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2, e-mail: raisa-budko@yandex.ru

С использованием методов нелинейной динамики проведено численное исследование мезоскопической модели мозговой активности. Смоделированы три пограничных состояния: условно здоровое –  $\alpha$ -ритм электроэнцефалограммы (до приступа), эпилептический приступ и состояние после приступа. Определены модельные параметры: подкорковый потенциал возбуждения и влияние возбудительных токов на значение мембранного потенциала сомы возбудительных и тормозных клеток, которые вносят основной вклад в изменение состояний головного мозга. Проанализированы осциллограммы электроэнцефалографических сигналов и аттракторы системы нейронов головного мозга для различных состояний при вариации параметров. В норме аттрактор имеет вид «запутанного клубка». Во время приступа состояние системы упорядочивается, и аттрактор приобретает вид набора одиночных петель. После приступа аттрактор имеет вид спирали, соответствующий затухающему колебательному процессу.

**Ключевые слова:** электроэнцефалограмма, мезоскопическая модель, приступ, аттрактор, фазовый портрет, нейрон, поляризация, кортекс, потенциал покоя, коэффициент нейронпередачи

### **SIMULATION OF THE ELECTRICAL PROCESSES IN THE BRAIN BY NONLINEAR DYNAMICS METHODS**

**Starchenko Irina B.**, D.Sc. (Engineering), Professor, Southern Federal University, 2 Shevchenko St., Taganrog, 347922, Russian Federation, e-mail: star@sfedu.ru

**Reznichenko Alexandr A.**, post-graduate student, Southern Federal University, 2 Shevchenko St., Taganrog, 347922, Russian Federation, e-mail: naos\_88@mail.ru

**Budko Raisa Yu.**, student, Southern Federal University, 2 Shevchenko St., Taganrog, 347922, Russian Federation, e-mail: raisa-budko@yandex.ru

A numerical study of mesoscopic model of brain activity by non-linear dynamics methods was done. Three border states has been simulated: relatively healthy -  $\alpha$ -rhythm (before attack), an epileptic attack and after attack. Model parameters are defined: the subcortical excitation potential and excitatory effects of cur-