

А. Л. Талис, А. Л. Рабинович (Москва, ИНЭОС РАН; Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН). **Некристаллографическая симметрия тетраблочных спиралей.**

Симметрию линейной цепи из одинаковых правильных, объединенных по граням, тетраэдров можно отобразить с помощью тетраблока (объединения 4-х тетраэдров) [1, 2].

Тетраблоки можно объединять по торцевым граням 3 способами, различающимися углами поворота φ (по часовой стрелке в плоскости общей грани) одного тетраблока относительно другого ($\varphi = 0^\circ, 120^\circ, 240^\circ$); если энантиоморфные тетраблоки одинаковой хиральности объединять единообразно, то можно получить 3 варианта «тетраблочных» спиралей (различающихся углами вращения θ).

При $\varphi = 0^\circ$ возникает (правая или левая) **спираль Бердийка–Коксетера** [3, с. 89] с иррациональным значением угла $\theta = 131,81\dots^\circ$. Линейное объединение по торцевым граням при $\varphi = 0^\circ$ двух таких тетраблоков (имеющее 11 вершин) обладает группой симметрии, изоморфной проективной специальной линейной группе $PSL(2,11)$ порядка 660 [4, 5]. В итоге спираль Бердийка–Коксетера является «тетраблочной» спиралью, которая может быть получена объединением по торцевым граням при $\varphi = 0^\circ$ разных «идеальных» прототипов: либо тетраблоков (по 4 тетраэдра), либо пар тетраблоков (по 8 тетраэдров).

Спираль Бердийка–Коксетера из правильных тетраэдров не обладает трансляционной симметрией [3], но таковая возникает при искажениях тетраэдров, и минимальные искажения отвечают периоду в 8 тетраэдров [6, 7] (т.е. паре тетраблоков).

Подобный стержень из 8 слабо искаженных тетраэдров применяется при описании некоторых кристаллических структур [6] и полиморфных превращений в металлах [5].

При $\varphi = 120^\circ$ образуется **второй вариант** «тетраблочной» спирали. Если в каждом правильном тетраэдре этой тетраблочной спирали несколько изменить длины 2-х ребер из 6-ти (так, что разница со средним значением для каждого ребра составит величину $\sim 2\%$), то центры таких тетраблоков (вершины, в которых сходятся 6 ребер [1,2]) образуют спираль с осью 40/11 (угол $\theta = 99^\circ$) [8, 9].

Существует реальная макромолекулярная структура, обладающая близкими параметрами (ось вращения, отношение шага к радиусу): это α -спираль, являющаяся одним из самых общих элементов вторичной структуры в белках [10,11]. Экспериментальные структурные данные α -спирали [10] отвечают теоретической спирали с винтовой осью 40/11 [8, 9]. Число вершин на виток в идеальной спирали 40/11 равно 3,63(63); вершинам спирали 40/11 следует сопоставить в α -спирали атомы C_α , с которыми связаны аминокислотные остатки.

Ось α -спирали аппроксимировали в литературе осями: 18/5 (3,6 ост/виток), 11/3 (3,67 ост/виток), 15/4 (3,75 ост/виток) [12]; 7/2 (3,5 ост/виток) [13]; 41/11 (3,73 ост/виток) [14,15] и др. (см., например, [16]). Преимущества идеальной оси 40/11: она количественно воспроизводит экспериментальные характеристики α -спиралей [10,16] и «топологически согласована» с соседними спиральями [8, fig.7(b)], связана с симметриями «идеальных» спиралей 30/11 и 10/1 из политопа $\{3, 3, 5\}$: 4 последователь-

ных оборота вокруг оси 40/11 совпадают с 3 последовательными оборотами вокруг оси 30/11 и с одним оборотом вокруг оси 10/1, т.е. $(40/11)^4 = (30/11)^3 = (10/1)^1$ [8].

Тетраблочную спираль с искажениями ребер $\sim 2\%$ при $\varphi = 120^\circ$ можно рассматривать как приближение идеального высокосимметричного образца α -спирали с осью 40/11.

При $\varphi = 240^\circ$ образуется **третий вариант** «тетраблочной» спирали. Если уменьшить длины 3-х ребер из 6 в каждом правильном тетраэдре до 0,951 от исходной длины ребра, то искажения ребер, как и в предыдущих случаях, оказываются незначительными, в среднем $\sim 2.5\%$, но данная тетраблочная спираль становится при этом частью известной структуры — «башни из пентагональных антипризм» [17, fig. 2]. Такая «башня» представляет собой объединение взаимопроникающих правильных икосаэдров с общей осью 5-го порядка. Центры двух соседних тетраблоков — это вершины пентагональной антипризмы, которые совмещаются при вращении на угол $\theta = (72^\circ + 72^\circ/2) = 108^\circ$ и трансляции вдоль оси башни. Угол $\theta = 108^\circ$ означает, что центры таких тетраблоков образуют спираль 10/3 [9]. Башня из пентагональных антипризм реализуется в кластерах Au-Ag, структуры которых основаны на 13-атомных центрированных икосаэдрах, объединенных по вершинам [18].

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (гос. задание КарНЦ РАН № 0218-2019-0076, № г.р. АААА-А17-117031710039-3 — для А.Л.Р.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Обозрение прикл. и промышл. матем., 2018, т. 25, в. 2, с. 186–187.
2. Талис А. Л., Рабинович А. Л. Кристаллография, 2019, 64, 3, с. 341–350.
3. Лорд Э., Маккей А., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. М.: Физматлит, 2010, 264 с.
4. Martin P., Singerman D. The geometry behind Galois' final theorem. — European J. Combin., 2012, v. 33, is. 7, p. 1619–1630.
5. Talis A., Kraposhin V. Acta Cryst. A., 2014, 70, p. 616–625.
6. Nyman H., Carroll C. E., Hyde B. G. Z. Kristallogr., 1991, 196, 1-4, p. 39–46.
7. Sadler G., Fang F., Kovacs J., Irwin K. arXiv:1302.1174v1 [math.MG], 2013.
8. Samoylovich M., Talis A. Acta Cryst. A., 2014, 70, p. 186–198.
9. Samoylovich M., Talis A. arXiv:1606.01237., 2016.
10. Kumar S., Bansal M. Biophys. J., 1998, 75, 10, p. 1935–1944.
11. Nelson D. L., Cox M. M. Lehninger Principles of Biochemistry. Freeman W.H. and Co.: N.Y., 2013.
12. Pauling L., Corey R. B., Branson H. R. Proc. Natl. Acad. Sci. USA., 1951, 37, 4, p. 205–211.
13. Crick F. H. C. Nature, 1952, 170, 4334, p. 882–883.
14. Sadoc J. F., Rivier N. Eur. Phys. J. B., 1999, 12, p. 309–318.
15. Sadoc J. F. Eur. Phys. J. E., 2001, 5, p. 575–582.
16. Hartmann M. D. et al. eLife, 2016, 5, e11861.
17. Lord E. A., Ranganathan S. Eur. Phys. J. D., 2001, 15, p. 335–343.
18. Teo B. K., Shi X., Zhang H. J. Am. Chem. Soc., 1991, 113, 11, p. 4329–4331.