



## **ГРУППА СИММЕТРИЙНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И МОДЕЛИРОВАНИЯ (БИО)ПОЛИМЕРОВ**

**Талис Александр Леонидович, к.ф.- м.н. , в.н.с. ИНЭОС РАН**

**talishome@mail. ru**

**(499)135-80-35**

### **СОТРУДНИЧЕСТВО (помимо ИНЭОС и МГУ)**

1. Отдел наноструктур и фотонных кристаллов ЦНИТИ “Техномаш”, Москва.
2. Лаборатория кристаллографии наноматериалов кафедры материаловедения ф-та машиностроительных технологий МГТУ им. Н.Э.Баумана, Москва .
3. Лаборатория экологической биохимии Института биологии Карельского научного центра РАН, Петрозаводск .

### **НАПРАВЛЕНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ**

**Определение симметричных закономерностей строения (био)полимеров и моделирование их симметрично-возможных структур.**

### **ТЕКУЩИЕ ТЕМЫ ИССЛЕДОВАНИЙ**

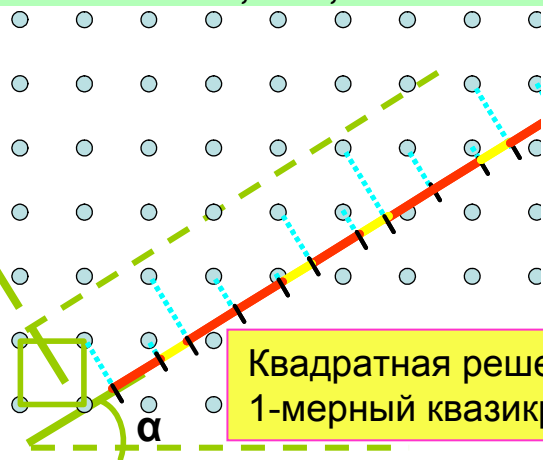
- 1) Определение структурных закономерностей строения  $\alpha$ -спирали и объединений  $\alpha$ -спиралей как реализаций конструкций алгебраической геометрии.
- 2) Выявление некристаллографической симметрии насыщенных углеводородных цепочек  $C_{2 \cdot (10-n)} H_{2 \cdot 2(10-n)}$ ,  $n=0,1,2,3$  в молекулах липидов, определяющей различия в свойствах “близких по  $n$ ” цепочек при одинаковых физических условиях.
- 3) Поиск “топологически устойчивых” геликоидально-подобных структур , способных отображать некоторые закономерности строения определенных форм ДНК.
- 4) Вывод неклассических симметрий геликоидов, реализующихся в полимерах. (например, единого геликоида с несколькими значениями углов вращения и т. п.)

# ОБЩАЯ ИДЕОЛОГИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ

Геометрия трехмерного евклидова пространства  $E^3$ , в значительной степени, определяет симметричные ограничения для реализующихся в нем упорядоченных структур. В общем случае, для априорного определения таких симметричных ограничений недостаточно «классической» кристаллографии, а необходим переход к структурным реализациям конструкций алгебраической геометрии и топологии.

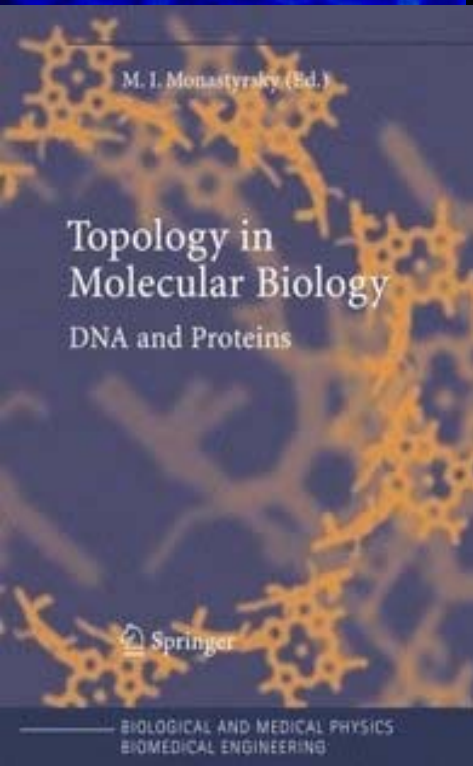
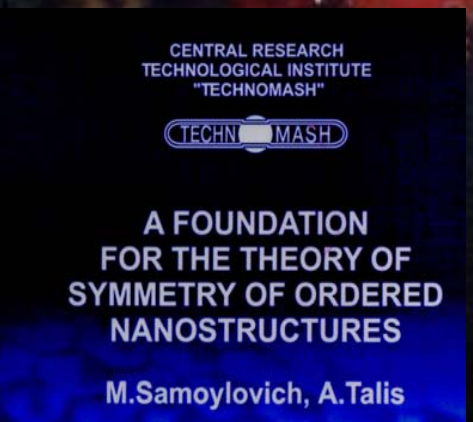
*Пример подобного подхода – **икосаэдрические квазикристаллы**, модели которых основаны на 3-мерных сечениях 6-мерных решеток.*

*Danzer L. Talis A.L. A new decoration of the Socolar-Steinhart tilings; an initial model for quasicrystals //Symposia Gaussiana Conf.A. Berlin- New York, 1995, P. 377-387.*



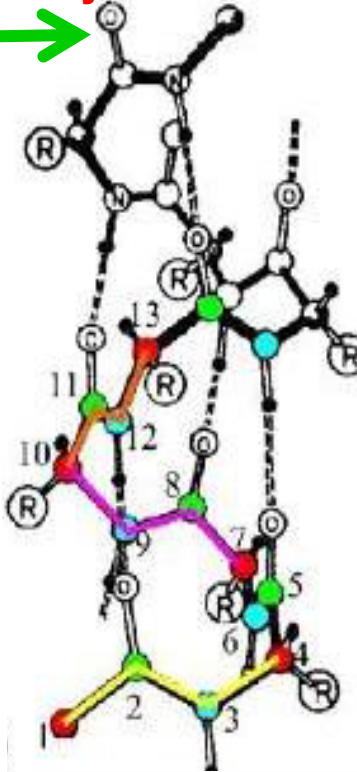
Квадратная решетка и 1-мерный квазикристалл

$$\alpha = \arctg\left(\frac{1}{\tau}\right); \quad \tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$$

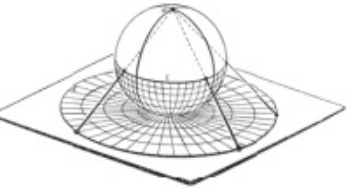
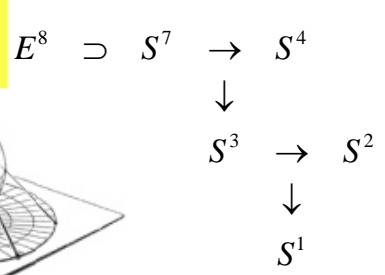


**Пример применения развиваемого подхода для определения возможных углов вращения геликоидов (био)полимеров, в частности, α-спирали.**

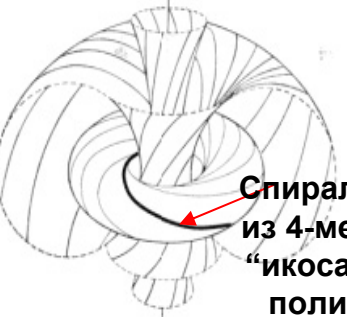
Порядок оси  $8/c_1c_2^*I_n/I_s^*(m_{js}+1)/m_{js}$  геликоида определяется только инвариантами  $I_n, I_s = 2, 8, 12, 14, 18, 20, 24, 30$  решетки  $E_8$ , в которой определен политоп (8-мерный полиэдр)  $\{4_{21}\}$ . Геликоиды с такими осями (среди которых кристаллографические, квазикристаллографические и особые нецелочисленные) составляют класс “топологически устойчивых” геликоидов, частично представленный на схеме.



**Расслоения Хопфа**



Стереографическая проекция сферы  $S^2$  на плоскость  $E^2$



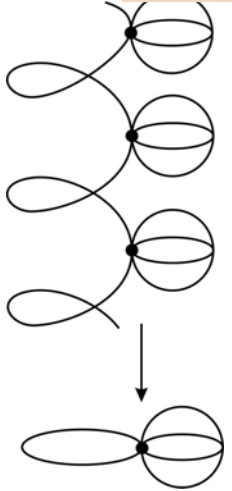
Спираль 10/1 из 4-мерного “икосаэдра” политопа  $\{3,3,5\}$

Стереографическая проекция расположенной в  $E^4$  сферы  $S^3$  на наше пространство-«плоскость»  $E^3$

Накрытие над букетом окружности и сферы  $S^3 \supset S^1 \vee S^2$   
 $\leftarrow \Sigma S_i^2$   
 определяет топологически устойчивый геликоид в  $E^3$

$\{4_{21}\}/2$

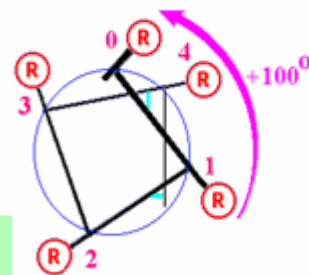
2	3	5	15
4	6	10	30
8	12	9	
8/3	12/5	18	5/2 15/2
16/3	24/5	9/2	10/3 15/4
16/5	24/7	9/4	20/3 15/7
16/7	24/11	18/5	20/7 30/7
			40/9 30/11
			40/11



**Реализация α-спирали по углу вращения**

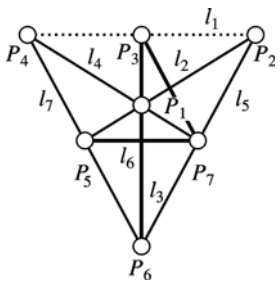
**Необходимые условия**  
 $40/11 = 8/2 * 20/24 * 12/11 = 11 * 360^\circ / 40 = 99^\circ$   
 $18/5 = 8/2 * 18/24 * 6/5 = 5 * 360^\circ / 18 = 100^\circ$

**Достаточные условия**  
 Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. М.Книжный Дом Университет. 2005. с.209. Образование α-спирали с углом вращения  $100^\circ$  при случайной сополимеризации.

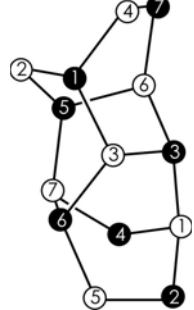


# Пример применения развиваемого подхода для определения симметрично-допустимых законов сборки (био)полимеров.

Геликоид собирается из весьма ограниченного числа "порождающих кластеров" по весьма ограниченному числу правил.



	1	2	3	4	5	6	7
1		●	●	●			
2	●	○			●		
3	●		●			●	
4	●			○			●
5		●				●	●
6			●		●		●
7				●	○	●	



Конфигурация Фано (7 точек, 7 прямых, через каждую точку проходят 3 прямые, на каждой прямой - 3 точки), подтаблица таблицы инцидентности которой задает **граф порождающего кластера**. Белые вершины – строки, черные вершины – столбцы, знаки инцидентности- ребра.

Топологически устойчивое объединение геликоидально-подобных структур определяет специальная минимальная поверхность, особые точки которой связаны преобразованиями симметрии **политоп**.



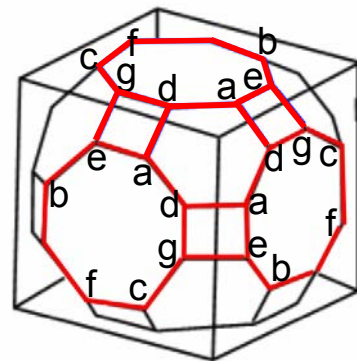
Торцы геликоидов (на переднем и заднем планах) образуют двойную спираль.

**Политоп** задается подсистемой решетки (октав)  $E_8$ , замыкающей ряд возможных чисел: действительные- комплексные-кватернионы- октавы.

**Политоп**, определяемый соотношениями для осей

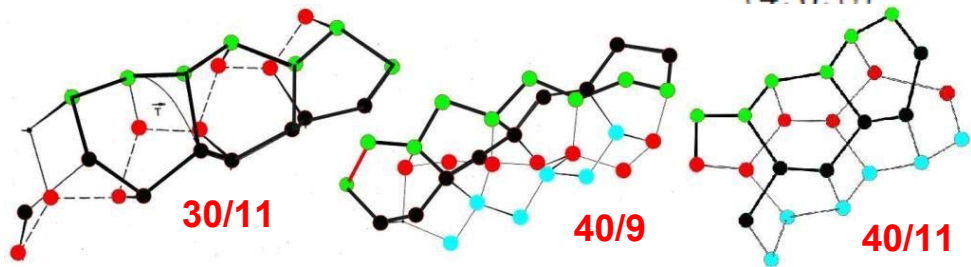
$$(30/11)^3 = - (40/9)^4 = (40/11)^4 = (10)^1$$

отображается в усеченный кубоктаэдр (4,6,8).



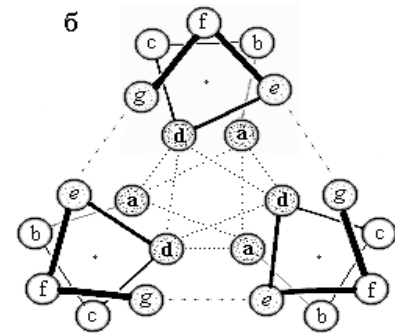
(4.6.8)

Гексагональным, квадратным и октагональным граням (4,6,8) соответствуют каналы **политоп** 30/11, 40/9 и 40/11, который соответствует  $\alpha$ -спирали.



Объединению трех  $\alpha$ -спиралей в суперспираль соответствует взаимное расположение подструктур в **политопе**, отображаемом в (4,6,8).

Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. **Рис.11-3.6** Взаимодействие  $\alpha$ -спиралей в тройной суперспирали (вид с торца спирали)



- **Гранты РФФИ:**
- Построение обобщенной кристаллографии плотноупакованных тетраэдрических металлических структур как структурного приложения алгебраической геометрии **2003-2005**
- Теоретическое моделирование и расчет энергии фазового перехода “газогидрат-лед” **2005-2007**
- Фундаментальные основы получения и применения некристаллических пространственно неоднородных материалов с модуляцией (дисперсией) электрических и диэлектрических параметров в диапазоне 150-300 нм и размером активных областей 5-50 нм для разработки элементной базы нового поколения твердотельной СВЧ-электроники **2009-2010**
- Построение теории и моделирование структурного механизма фазового превращения газогидрата в лёд **2009-2011**
- Теоретическое исследование атомных неоднородностей (кластеров) в твердых и жидких металлических растворах в рамках теории функционала плотности **2011-2013**
- **Гранты Отделения химии и наук о материалах РАН :**
- ОХНМ-7 Динамика образования и изучение строения клатратных гидратов **2003-2005**
- ОХНМ-7 Теоретическое и экспериментальное исследование фазового перехода “газогидрат – лед” **2006-2008**
- ОХНМ-6 Построение теории и моделирование фазового перехода «газогидрат-лед» ,реализуемого переброской минимального числа водородных связей **2009-2011**
- **Гранты Президиума РАН:**
- ПРАН-«Поддержка инноваций» Моделирование процессов входа и выхода молекул гостей в газогидратах, осуществляемое теоретическими и экспериментальными методами **2006-2008**
- ПРАН «Создание и совершенствование методов химического анализа и исследования структуры веществ и материалов» Совершенствование приборной базы микроскопии для исследования объектов нанометрового уровня **2009**

## ОТДЕЛЬНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПОСЛЕДНИХ 5 ЛЕТ

1. **А.Л. Талис**. Симметричные закономерности строения упорядоченных тетракоординированных структур. В сб. "Исследование углерода - успехи и проблемы" М. Наука, 2007, С. 189-205
2. V.S. Kraposhin, **A.L. Talis**, V.G. Koshukin, A.A. Ogneva, L.I. Zinober. Structure of the cubic and rhombohedral high-pressure modifications of silicon as packing of the rod-like substructures determined by the algebraic geometry//**Acta Cryst. B64**. 2008, p. 26-33.
3. V.S. Kraposhin, **A.L. Talis**, Ha Thanm Lam. The structure model of a cubic aperiodic phase ('quasicrystal without forbidden symmetry axes')// **J. Phys.: Cond. Mat.** 2008, v.20, 114115.
4. V.S. Kraposhin, **A.L. Talis**, Ha Thanm Lam, J-M.Dubois. Model for the transformation of an icosahedral phase into a B2 crystalline phase // **J. Phys. Cond. Mat.** 2008, v.20, 235215
5. Samoylovich M.I, **Talis A.L.** Symmetrical features and local phase transitions of ordered solid structures: tetravalent structures of gas hydrates //**Cryst. Rep.** 2009. V.54, №7. P.1101-11165.
6. Samoylovich M.I., **Talis A.L.** Gosset helicoids: II. Second coordination sphere of eight – dimensional lattice  $E_8$  and ordered noncrystalline tetravalent structures //**Cryst. Rep.** 2009. V.54, №7 P.1117- 1127
7. Samoylovich M.I, **Talis A.L.** A special class of simple 24-vertex polyhedra and tetrahedrally coordinated structures of gas hydrates. //**Acta Cryst. A**, 2010. V.66, P. 616-625.
8. V. Kraposhin, I. Jakovleva, L. Karkina, G. Nuzhny, T. Zubkova, **A. Talis**. Microtwinning as a common mechanism for the martensitic and pearlitic transformations// **J. of Alloys and Compounds**. DOI:10.1016 , 2011
9. М.И Самойлович ,**А.Л. Талис**. Кристаллические мультиферроики и симметричные особенности их магнитных подсистем//**Нано и микросистемная техника**. 2012 №1.С.31-36
10. М.И Самойлович, **А.Л Талис**. Структурные закономерности геликоидально - подобных биополимеров в рамках алгебраической топологии. I. Особый класс устойчивых линейных структур, определяемых последовательностью алгебраических политопов // **Кристаллография**, в печати.
11. М.И Самойлович., **А.Л .Талис**. Структурные закономерности геликоидально - подобных биополимеров в рамках алгебраической топологии II. а-спираль и ДНК. // **Кристаллография**, в печати.