

УДК 548.1

СТРУКТУРНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ГЕЛИКОИДАЛЬНО-ПОДОБНЫХ
БИОПОЛИМЕРОВ В РАМКАХ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ТОПОЛОГИИ.
II. α -СПИРАЛЬ И ДНК-СТРУКТУРЫ

© 2013 г. М. И. Самойлович, А. Л. Талис*

Центральный научно-исследовательский технологический институт “Техномаш”, Москва

E-mail: samoylovich@technomash.ru

* Институт элементоорганических соединений РАН, Москва

Поступила в редакцию 07.02.2013 г.

Развиваемый аппарат “структурного приложения” алгебраической геометрии и топологии позволил определить топологически устойчивые геликоидально-подобные упаковки полиэдров (кластеров). Найденную упаковку ограничивает минимальная поверхность с нулевым индексом неустойчивости, которая задается представлением Вейерштрасса и соответствует точке бифуркации. Симметрии рассматриваемых упаковок определяются четырехмерными полиэдрами (политопами) из замкнутой последовательности, которую начинает алмазоподобный политоп {240}. В частности, такой является упаковка из тетраэдров, возникающая при размножении особого стартового объединения тетраэдров нецелочисленной осью 40/11 с углом спирального вращения 99° . Размещение атомов в особых позициях этого стартового объединения позволяет получить модель α -спирали. Применяемый аппарат позволил априори определить симметричные параметры двойных спиралей ДНК-структур.

DOI: 10.7868/S0023476113050093

ВВЕДЕНИЕ

Необходимым (но недостаточным) условием устойчивости и воспроизводимости биологических структур является их соответствие определенной системе конструкций алгебраической геометрии и топологии. Такая система определяет сборку данных структур в соответствии с топологическими свойствами трехмерного евклидова пространства E^3 и вложимостью в него конечных дискретных упорядоченных множеств точек. При данном подходе появляется возможность априори определить топологически устойчивые конструкции, которые могут быть ответственны за устойчивость соответствующих биологических структур. К подобным конструкциям относятся симплициальные комплексы, соответствующие как объединению тетраэдров (симплексов), так и особой триангулированной минимальной поверхности, ограничивающей данное объединение тетраэдров. При этом линия, соединяющая вершины симплексов, в общем случае не принадлежит рассматриваемой минимальной поверхности. В работе [1], содержащей необходимые определения, показано, что минимальные поверхности, которые могут быть заданы представлением Вейерштрасса, соответствуют точке бифуркаций для поверхностей геликоидально-подобного типа и поэтому имеют нулевой индекс неустойчивости поверхности [2].

Настоящая работа посвящена применению аппарата [1] для априорного построения структур, определяющих симметричные параметры биополимеров, в частности α -спирали и некоторых форм ДНК-структур.

СТРУКТУРНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ
 α -СПИРАЛИ В РАМКАХ АППАРАТА
АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ГЕОМЕТРИИ

Наиболее часто встречающейся в белках вторичной структурой является α -спираль, в которой на виток приходится 3.6 аминокислотного остатка, что соответствует углу спирального вращения на $100^\circ = 360^\circ/3.6$. Водородные связи между пептидными амидной i -й и карбонильной $(i + 4)$ -й группами остатков стабилизируют α -спираль, образуя систему последовательных водородных связей между, как сказано в [3] на стр. 86, “близко отстоящими элементами цепи” (рис. 1а).

Возникновение α -спирали, рассматриваемое как результат образования периодических скоплений неполярных групп в случайном сополимере (при одинаковой доле полярных и неполярных групп), дает 11 ± 2 остатка на 3 ± 0.5 полных периода [4], что определяет нецелочисленные оси 18/5, 11/3 и 26/7. Согласно [3], средняя длина наблюдаемых длин α -спиралей в глобулярных белках составляет около 17 Å, что отвечает 11 остаткам на три витка спирали. Отмечается “сомни-

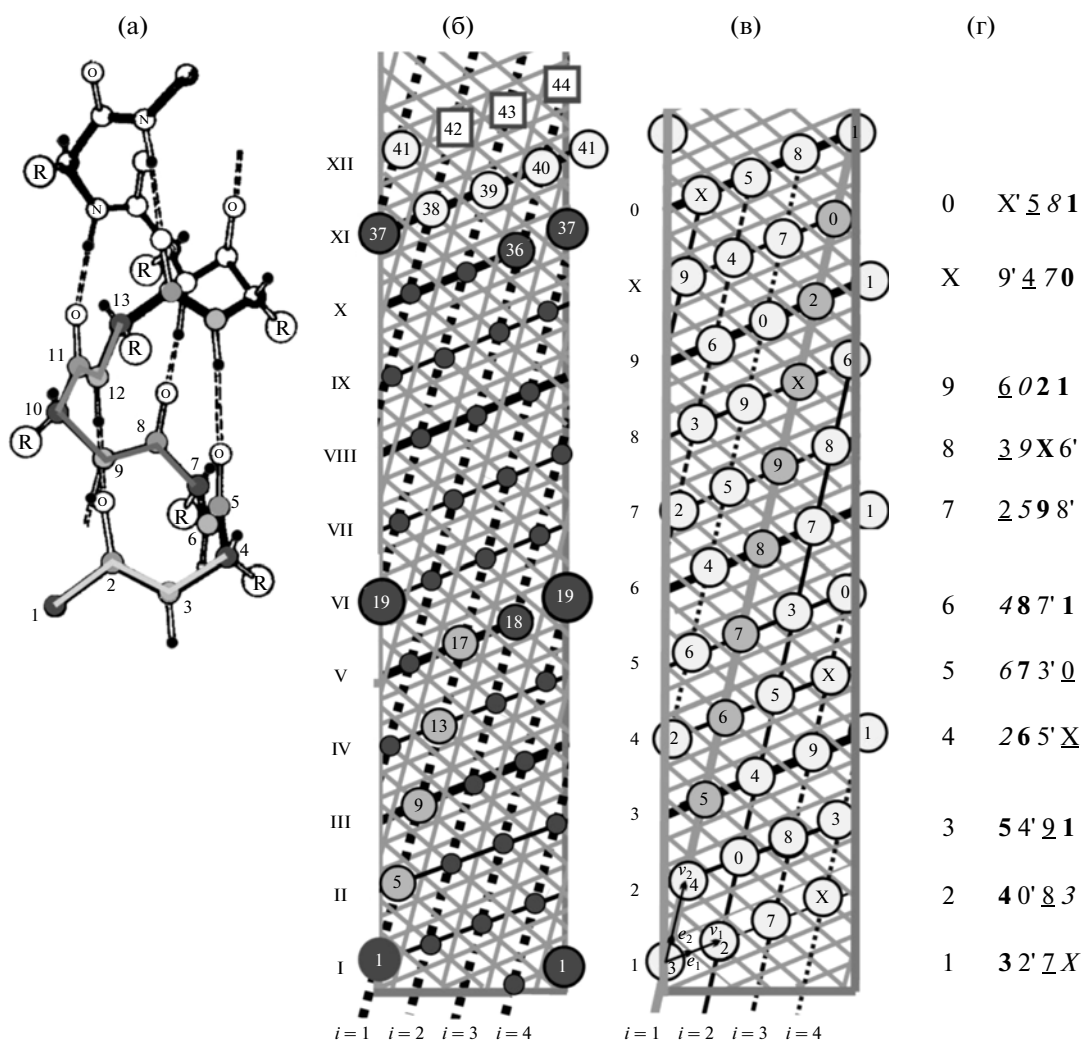


Рис. 1. Структура α -спирали; R – радикалы, пунктир – водородная связь (рис. 7-5 в [4]). Большие темно-серые, серые, светло-серые, белые и черные шары – атомы C_α , C' , N , O и H (а). Развертка цилиндрической аппроксимации α -спирали с осью $36/10$, изображенной на рис. 1а. На двенадцати отмеченных римскими цифрами витках расположены 44 атома C_α , атомы с одинаковыми номерами отождествляются. На выделенных жирными линиями витках расположено по три атома, на остальных – по четыре. Атомы i и $i + 4$ принадлежат (с учетом отождествления вертикальных границ полосы) одной из четырех пунктирных i -прямых, $i = 1, 2, 3, 4$ (б). Развертка цилиндрической аппроксимации α -спирали с осью $40/11$. Развертка вкладывается в решетку с базисными векторами e_1 и e_2 , которая содержит подрешетку на базисных векторах V_1 и V_2 (в). Биплоскость $2-(11, 5, 2)$ как матрица из 11 строк по пять чисел в каждой. Первый столбец нумерует витки на развертке рис. 1в. Отбрасывание 1 в матрице соответствует распределению атомов C_α по виткам и i -прямым, показанным на рис. 1в жирной и тонкой сплошными линиями и штриховым и точечным пунктиром. Соответствующие i -прямым с $i = 1, 2, 3, 4$ числа выделены жирным, штрихом, подчеркиванием и наклонным соответственно (г).

тельный” максимум в распределении длин, соответствующий 15 остаткам на четыре витка спирали. Добавив четыре остатка на виток, от оси $26/7$ можно перейти к близкой к ней по параметрам оси $(26 + 4)/(7 + 1) = 15/4$, которая будет соответствовать этому максимуму. Изложенное указывает на необходимость симметричного определения структуры α -спирали, аналогичного, например, определению кристалла как объединения орбит федоровской группы.

При построении дискретных многообразий с применением пространственных кривых исполь-

зуется разложение абелевых групп (с конечным числом образующих) на прямую сумму конечного числа примарных (или силовских) и бесконечных циклических групп. Если используются экспоненциальные представления, соотносящиеся с поворотной частью элементов, описывающих движение точки по кривой, тогда берутся исходные инварианты и их разложения на примарные [1, 5]. В дальнейшем вместо обозначения $\exp(2\pi im/p)$ используем обозначение m/p , соответствующее (параметрически) нецелочисленной оси.

В [1] изложены условия построения топологически устойчивой геликоидально-подобной поверхности, ограничивающей упаковку конгруэнтных “усредненных” кластеров, центрами которых являются особые точки поверхности, соединяемые пространственной кривой. Используя локальную цилиндричность данной поверхности и однородность параметрического описания кривой, можно перейти к цилиндрической аппроксимации рассматриваемых конструкций. В данном случае центры условных элементов упаковки образуют систему точек на спирали, которой может соответствовать двумерная решетка на развертке цилиндра, определяемая одной из осей геликоидов Госсета L/d . Все нецелочисленные оси являются и осями геликоидов Госсета [1, 6–10].

Конформация α -спирали является стабильной [3, 4], поэтому все изложенное выше с определенными ограничениями можно использовать для ее цилиндрической аппроксимации, в которой центры конгруэнтных элементов упаковки совпадают с атомами S_α . Приведенные данные о структуре α -спирали позволяют считать, что L остатков равномерно распределены по d виткам основной спирали, и по четырем спиральям, которые назовем i -спиральями, $i = 1, 2, 3, 4$. Каждая из i -спиралей соответствует линейной подструктуре из водородных связей, поэтому цилиндрическую аппроксимацию α -спирали (рис. 1б, 1в) можно рассматривать как результат размножения винтовой осью L/d стартовой i -спирали из $L/4$ остатков.

Нецелочисленной осью, дающей экспериментальные 3.6 остатка на виток, является ось $L/d = 18/5$. Поскольку 18 не делится на 4, для возникновения при указанном угле вращения четырех i -спиралей необходимо перейти к составной спирали $36/10$, представляющей собой две спирали $18/5$ (рис. 1б). Ближайшей к $36/10$ несоставной осью L/d , которая может быть получена добавлением четырех остатков на виток, является ось $40/11 = (36 + 4)/(10 + 1)$, которая спиральными вращениями на угол 99° отображает друг в друга четыре i -спирали, содержащие каждая по 10 остатков (рис. 1в). В отличие от $36/10$ оси $40/11$ соответствует симметрия политопа $\{q(2 \times 24)\}$ (рис. 3д, 5в в [1]), условно определяемая соотношением

$$(40/11)^4 \rightarrow 10_1, \quad (1)$$

которое является соотношением между осями цилиндрической аппроксимации α -спирали. Соотношение (1) означает, что орбита оси $40/11$ представляет собой объединение четырех орбит оси 10_1 . Следующей за спиралью $40/11$, обеспечивающей существование четырех i -спиралей, является спираль $44/12 = (40 + 4)/(11 + 1)$, представляющая собой учетверенную спираль $11/3$ (рис. 1б). Именно $11/3$ соответствует средней

длине наблюдаемых длин α -спиралей в глобулярных белках. Ближайшей к $44/12$ является спираль $45/12$, представляющая собой утроенную спираль $15/4$ с вращением на угол 96° . По степени возрастания числа остатков на виток (от 3.6 до 3.75) рассмотренные оси (рис. 1б, 1в) можно расположить в последовательности

$$18/5 \subset 40/11 \subset 11/3 \subset 15/4 = -(30/11)^2, \quad (2)$$

где $30/11$ – симметрия политопа $\{3, 3, 5\}$, определяющая геликоид Коксетера–Бордийка [6, 7, 11], знак минус указывает на ось противоположной хиральности.

Размещение остатков в α -спирали по 11 виткам и вложение политопа $\{q(2 \times 24)\}$ в решетку E_8 позволяют предположить наличие симметричной конструкции, определяющей эти условия. Такой конструкцией оказалась схема блокового дизайна 2-(11, 5, 2) или биплоскость [12, 13], представляющая собой особое объединение 11 блоков (по 5 чисел в каждом), выделяемых из множества целых чисел от 0 до 10 (число 10 обозначается X). Блоки выделяются так, что каждое из чисел принадлежит пяти блокам, каждая пара чисел – двум, а каждая четверка чисел – только одному блоку. Группой автоморфизмов (порядка 660) биплоскости является группа $PSL_2(11)$ – предельная из четырех особых групп, определенных Галуа [12–14].

Расположим 11 блоков биплоскости так, чтобы 55 входящих в них чисел образовали матрицу B из 11 строчек и пяти столбцов, представленную на рис. 1г. Первый столбец, в котором упорядочены 11 чисел 1, ..., 9, X, 0, нумерует 11 строк, при его отбрасывании остается матрица W размером 11×4 . В строках 3, 6, 9 и 0 матрицы W находятся единицы $\mathbf{1}$, отбрасывание которых оставляет в этих строках по три числа и распределяет 40 элементов $W(a,b)$ матрицы по 11 строкам. Данные 40 элементов $W(a,b)$ ($a = 1, \dots, X, 0; b = 1, 2, 3, 4$) распределяются по десять по четырем W_i -подмножествам матрицы

$$W_i = \sum_{n,m} W((n + 3m - \delta_{m3}), (i + m)(\text{mod } 4)), \quad (3)$$

где $(n + 3m - \delta_{m3})$ – номер строки, $(i + m)(\text{mod } 4)$ – номер столбца в матрице W , $i = 1, 2, 3, 4$, $n = 1, 2, 3$, $m = 0, 1, 2, 3$, $\delta_{m3} = 1$ при $m = 3$ и $\delta_{m3} = 0$ при $m \neq 3$ (рис. 1г). Строки матрицы W соответствуют виткам цилиндрической развертки спирали $40/11$, а W_i -множества (3) – i -спиральям, $i = 1, 2, 3, 4$ (рис. 1в, 1г); поэтому на комбинаторном уровне (без метрики) подструктуру W биплоскости B можно отождествить с рассматриваемой разверткой цилиндрической аппроксимации α -спирали.

Действительно, в биплоскости любые 4 или 3 числа принадлежат только данному блоку, следовательно, наличие 3 или 4 чисел в каждой строке матрицы 11×4 , а значит, и число атомов S_α в

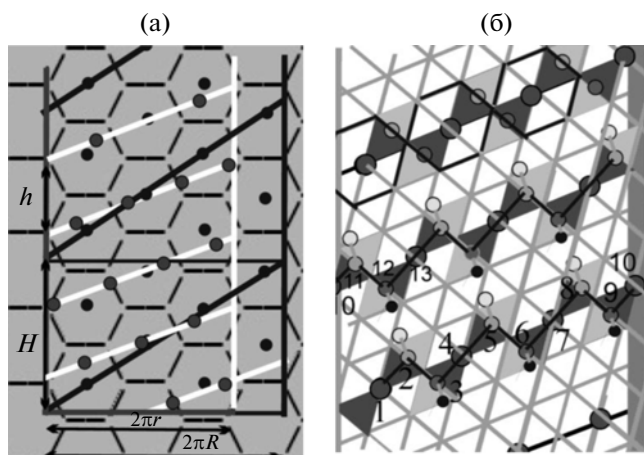


Рис. 2. Гексагональная сетка, в которой выделена полоска шириной в шесть единичных ребер гексагона, черные кружки — центры правильных гексагонов. Черные прямые, на которых расположены центры гексагонов, — развертка спирали с шагом $H \cong 2\sqrt{3}$ (две высоты гексагона) и радиусом $R = 3/\pi$. Белые прямые в пределах полоски шириной $2\pi r \approx 4.5$ — развертка спирали с шагом $h = H/2$. На каждый виток спирали приходится 40/11 серых кружков (а). Большие темно-серые кружки — центры гексагонов, между которыми расположены светло-серые треугольники. Они являются и общими вершинами пар темно-серых треугольников, на серединах оснований которых размещены серые и светло-серые кружки. На прямых, которые соединяют серые и светло-серые кружки соседних цепочек, расположены белые и черные кружки. Объединение ближайших друг к другу кружков определяет развертку α -спирали, 13 последовательных вершин которой пронумерованы как на рис. 1а (б).

витке являются комбинаторно устойчивыми. Отбрасываемые единицы **1** разбивают 11 строк матрицы W на суперблоки: $11 = 3 + 3 + 3 + 2$, при этом в суперблоке из трех строк будет 11 чисел (11 остатков на три витка), что соответствует средней длине 17 \AA для наблюдаемых длин α -спиралей в глобулярных белках. Без трех верхних на восемь оставшихся строк матрицы W приходятся 30 чисел, что соответствует указанной в (2) оси $30/8 = 15/4$. В пределах суперблока нет пересечения строк по двум числам, что обеспечивает его комбинаторную устойчивость. В то же время строчки из разных суперблоков пересекаются по двум числам, что позволяет рассматривать возможность сворачивания (склейки) α -спирали по атомам, соответствующим общим парам чисел.

ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ α -СПИРАЛИ

Наряду с углом спирального вращения важнейшими характеристиками цилиндрической аппроксимации α -спирали являются межвитковое расстояние $h = 5.4 \text{ \AA}$ и радиус $r = 2.25 \text{ \AA}$ [3]. Соотношение между h и r , равное ~ 2.4 , удовлетворяет условию топологической устойчивости для геликоидально-подобных подструктур и позволяет

рассматривать α -спираль в рамках используемого аппарата [1]. Удовлетворяющая (1) спираль 40/11 с шагом h_0 определяется каналом $\{40/11\}$ политопа $\{q(2 \times 24)\}$, которому соответствует объединение четырех цепочек с боковыми гексациклами (рис. 5в в [1]). Как пространственно однородные многообразия политопа позволяют выделить подмногообразия — замкнутые каналы в виде торов, характеризующихся параметром, который после выпрямления подсистемы в E^3 определяет нецелочисленную ось. Канал $\{40/11\}$ можно рассматривать как “скрученный” канал $\{40/10\}$. При введении метрики канала $\{40/10\}$ аппроксимируется спиралеобразной лентой, построенной из граничащих по ребрам правильных гексагонов (с ребром, равным единице) и включающей в себя половину гексагонов развертки цилиндра (рис. 2а). Центры гексагонов вкладывающейся в гексагональную решетку A_2 ленты лежат на спирали, определяющейся соотношением (11) из [1] при $L/d = 4$, $\lambda = 1$, шаге $H = 2\sqrt{3}$ и радиусе цилиндра $R = 3/\pi$. Развертка данной ленты показана на рис. 2а черными линиями.

Соотношение H/R для такой спирали не равно 2.4, следовательно, возможно ее скручивание в удовлетворяющую (11) [1] спираль 40/11. Лента 40/10 содержит половину гексагонов развертки цилиндра, что означает потерю части векторов вторых координационных сфер для вершин гексагональной решетки A_2 . Вторая координационная сфера A_2 определяет систему векторов G_2 , поэтому для использования алгебраических свойств группы G_2 величину H для искомой спирали 40/11 следует уменьшить вдвое. В этом случае спираль с $L/d = 40/11$ реализуется, согласно (11) [1], при $\lambda = 2$ и уменьшении радиуса до величины $r = 0.72$, что обеспечивает значение $h = \sqrt{3} \approx 2.4 \times 0.72$. На рис. 2а данная спираль показана белыми линиями.

Поместим начало координат $(0, 0)$ в точку 1 плоской развертки цилиндрической аппроксимации α -спирали (рис. 1в). В соответствии с (1) точку 1 с точкой 2 соединяет вектор V_1 с координатами $2\pi r/(40/11)$, $h/(40/11)$, а точку 1 с точкой 5 — вектор V_2 с координатами $2\pi r/10$, $4(h/(40/11))$. Угол χ между указанными векторами определяется соотношением

$$\cos \chi = (1 + (10C/(11 + C^2))^{-1/2}), \quad (4)$$

где $C = 2\pi/c$, $c = h/r$. При $c \approx 2.46$ получаем для длин векторов соотношение $V_2 = (3/2)V_1$, которое позволяет определить равные по длине векторы $e_1 = 1/2V_1$ и $e_2 = 1/3V_2$ с углом $\chi \approx 55^\circ$ между ними. Рассматривая векторы e_1 и e_2 как базовые, можно построить решетку $\{e_1, e_2\}$, содержащую подрешетку $\{V_1, V_2\}$ с базовыми векторами V_1 и V_2 . При $h = 5.4 \text{ \AA}$ полоска $\{V_1, V_2\}_\alpha$ решетки $\{V_1, V_2\}$ прак-

тически совпадает с разверткой цилиндрической аппроксимации α -спирали для атомов C_α (рис. 1в). Векторы (в частности, вектор Дарбу), задающие кривизну и кручение кривой [15], которая аппроксимируется спиралью C_α , соотносятся с элементами алгебры g_2 , но не принадлежат базису ее решетки. Используя аппарат [1], можно показать, что полоска $\{e_1, e_2\}_\alpha$ соответствует системе векторов, которая определяется группой Шевалле типа G_2 , представляющей собой обобщение группы типа G_2 над локальными и коммутативными кольцами [15, 16]. Таким образом, канал 40/11 политопа позволяет получить ленту из гексагонов, вкладывающуюся в решетку A_2 , а затем построить полоску подрешетки $\{e_1, e_2\}_\alpha$, содержащую подрешетку $\{V_1, V_2\}_\alpha$, соответствующую развертке цилиндрической аппроксимации α -спирали для атомов C_α .

Согласно [1, 15, 16], векторам, характеризующим положение условных центров кластеров упаковки, можно сопоставить элементы алгебры g_2 , соотносящиеся с автоморфизмами решетки E_8 . Операция сшивки (склейки) по плоскому тору задает закон объединения определяемых E_8 дисков и строение расслоенного пространства из симплицальных комплексов, центры которых расположены на спирали. В [1] рассмотрен переход от сферы S^3 (на поверхности которой размещены вершины политопа) к универсальному накрытию $\sum_j S_j^2$ над букетом $S^1 \cup S^2$, в котором окружность S^1 играет роль базы, а сфера S_j^2 — j -го слоя (рис. 2б в [1]). Сфера S_j^2 является универсальной накрывающей для проективной плоскости, поэтому соответствующий j -му слою (дискретный) симплицальный комплекс σ_j может определяться конструкцией конечной проективной геометрии $PG(2, n)$. Графом инцидентности $PG(2, n)$ является регулярная карта на торе $\{6, 3\}_{q,1}$, которой дуальна карта на торе $\{3, 6\}_{q,1}$. В частности, карта $\{3, 6\}_{2,1}$ содержит семь вершин, 21 ребро и 14 треугольных граней; отбрасывание в ней шести ребер и четырех треугольников приводит к нерегулярной карте $\{3, 6\}_{q,1}^6$ на сфере, которая может быть вложена в решетку A_2 [6]. Десять правильных треугольников карты $\{3, 6\}_{2,1}^6$ позволяют получить все векторы системы G_2 , поэтому в качестве $PG(2, n)$ достаточно взять минимальную конечную проективную геометрию $PG(2, 2)$.

Таким образом, определяемая аппаратом [1] спираль из симплицальных комплексов может быть получена при переходе в накрытии над букетом от базы S^1 к дискретной системе точек на спирали 40/11 и от слоя S_j^2 к симплицальному комплексу σ_j :

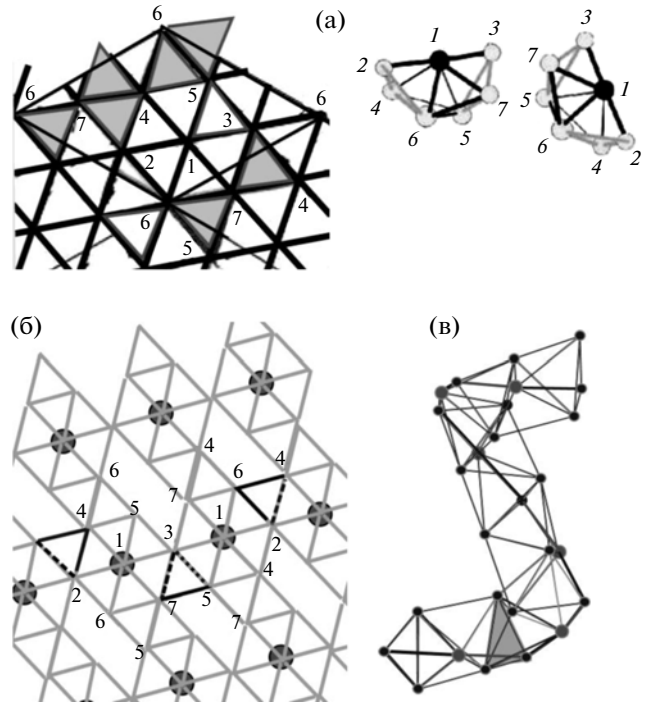


Рис. 3. Карта $\{3, 6\}_{2,1}$, в которой выделены 10 треугольников (6 центральных белых и 4 прилегающих к ним серых) нерегулярной карты $\{3, 6\}_{2,1}^6$. Отождествление вершин с одинаковыми номерами определяет 7-вершинное объединение (по граням) 4 правильных тетраэдров с общей вершиной 1. Два таких 7-вершинника могут быть объединены по общей грани 3-5-7, которой соответствуют светло-серые треугольники на рис. 2б (а). Развертка объединения 7-вершинников (а), в которой каждый большой черный кружок является вершиной 1 в объединении 10 треугольников карты $\{3, 6\}_{2,1}^6$ (б). Отождествление одинаковых вершин развертки (б) определяет объединение 7-вершинных четверок тетраэдров. Общая грань 3-5-7 двух 7-вершинников показана серым. Жирными линиями показана спираль 40/11 из ребер, соединяющих центры 7-вершинников (в).

$$S^1 \rightarrow \{40/11|11h/40\} \leftrightarrow \{V_1, V_2\}_\alpha, \tag{5}$$

$$S_j^2 \rightarrow \sigma_j \rightarrow PG(2, 2) \rightarrow \{3', 6\}_{2,1}^6 \leftarrow \{e_1, e_2\},$$

где $\{40/11|11h/40\}$ — спиральное вращение на угол $99^\circ = 11 \times 360^\circ/40$ со сдвигом вдоль оси на $11h/40$. При отображении (5) точка базы j , к которой прикрепляется комплекс σ_j , отображается в узел V_j полоски $\{V_1, V_2\}_\alpha$, являющийся центром развертки карты $\{3', 6\}_{2,1}^6$ из 10 равнобедренных треугольников (рис. 3а, 3б). Соответственно цилиндрическая аппроксимация α -спирали с шагом $h = 5.4 \text{ \AA}$ и радиусом $r = 2.25 \text{ \AA}$ определяется соотношением

$$(\{40/11|11h/40\})^i (\{3', 6\}_{2,1}^6)_1 \cong (\{3', 6\}_{2,1}^6)_i, \tag{6}$$

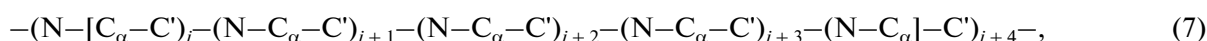
где центром карты $(\{3', 6\}_{2,1}^6)_j$ является совпадающий с j -м атомом C_α узел V_j полоски $\{V_1, V_2\}_\alpha$. Тре-

угольник $\{3'\}$ образуют векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 с углом $\chi \approx 55^\circ$ между ними.

Карта $(\{3', 6\}_{2,1}^6)_j$ представляет собой развертку объединения (по граням) четырех тетраэдров с общей вершиной V_j (рис. 3а), которые представляют собой симплициальный комплекс σ_j из соотношения (5). Данный комплекс является особым, так как вкладывается (при незначительных деформациях) как в икосаэдр, так и в геликоид Коксетера–Бордийка из правильных тетраэдров [6, 7, 11]. Таким образом, соотношение (5) определяет развертку упаковки симплициальных ком-

плексов, удовлетворяющей требованиям топологической устойчивости [1] и экспериментальным данным о строении α -спирали [3, 4].

Находящийся в общей вершине объединения четырех тетраэдров атом C_α тетракоординирован, что определяет размещение атомов N и C' внутри наружных тетраэдров объединения, слева и справа от C_α (рис. 3в). Такое декорирование симплициального комплекса приводит к образованию i -го звена $(N-C_\alpha-C')_i$ полипептидной цепи и, в соответствии с (6), обеспечивает сборку α -спирали



в которой атом C_α из i -го комплекса связан с C_α из $(i+4)$ -го комплекса преобразованием $10_1 \rightarrow (40/11)^4$. Образующийся цикл между указанными C_α содержит 13 атомов и выделен квадратными скобками. Заменяя в цикле первый C_α на O, а последний на N, получим характеризующий α -спираль цикл 4_{13} . Число 13 (в определении цикла по [3, 4]) действительно задает число атомов в цикле, а 4 необходимо определить как степень оси 40/11, отображающей i -й C_α в $(i+4)$ -й C_α .

Отображение полипептидной цепи (7) разверткой упаковки тетраэдров представляет собой цепочку граничащих по вершинам равнобедренных треугольников, общим вершинам которых соответствуют C_α (рис. 2б). При этом атомы C' и N размещаются на серединах оснований треугольников (или в иных выделенных по симметрии позициях в треугольниках). На каждой из прямых, соединяющих C'_i и N_{i+4} , $i = 1, 2, \dots$, расположены две особые по симметрии позиции решетки $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$, соответствующие положениям атомов O_i и N_{i+4} . Заменяя $(C_\alpha)_i$ и $(C_\alpha)_{i+4}$ на O_i и N_{i+4} , получим характеризующий α -спираль цикл 4_{13} — последовательность из 13 вершин, которая пронумерована на рис. 7-3 в [4].

В развиваемом подходе α -спираль соответствует подструктуре рассмотренного в [1] политопа, которая отображается в октагональную грань усеченного кубооктаэдра. Таким образом, объединению его трех ближайших октагонов (рис. 4а) должна соответствовать суперспираль из трех α -спиралей, симметрия которой определяется симметрией политопа, задаваемого определяющими соотношениями для осей

$$(30/11)^3 \rightarrow (40/11)^4 \rightarrow -(40/9)^4 \rightarrow 10_1. \quad (8)$$

Соотношения (8) обобщают условие (1), знак минус определяет хиральность оси 40/9 как противоположную всем остальным. Схема рассматриваемой суперспирали показана на рис. 4б,

представляющем собой рис. 11-3 из [4]. Внутри тройки α -спиралей, которые характеризуются осями 40/11 и соответствуют октагонам на рис. 4а, возникает канал 30/11, соответствующий гексагону на рис. 4а. При этом между парами каналов 40/11 возникают каналы 40/9, которым соответствуют квадраты (рис. 4а). Аналогичные соотношения в рамках развиваемого подхода могут быть получены и для других суперспиралей.

Общей для каналов 40/11 и 30/11 является определяемая по (8) спираль 10_1 , что возможно лишь при их определении по одному закону. Действительно, аналогично определению цилиндрической развертки 40/11 из биплоскости B развертка 30/11 может быть получена из B при отбрасывании двух первых столбцов и трех единиц $\mathbf{1}$ в оставшихся столбцах. При этом оставшиеся $30 = 55 - 2 \times 11 - 3$ чисел также могут быть распределены по трем 10-элементным подмножествам вида (3).

КОНСТРУКЦИИ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИ УСТОЙЧИВЫЕ ДУХСПИРАЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ

Наглядность предыдущего изложения достигнута за счет сведения к минимуму упоминания о фактически используемых конструкциях алгебраической геометрии и топологии. В данном разделе рассмотрим конструкции, определяющие как представленные структуры, так и необходимые условия для дальнейших построений.

Требование локальной решетчатости, а следовательно, и локальной аппроксимации системы векторов в E^3 подсистемами векторов решеток позволяет упростить применение дисков D_0^2 (как плоских торов), использование которых необходимо для построения топологически устойчивых дискретных трехмерных конструкций [1, 15]. Потребуется использовать свойства топологических сетей Штейнера [2], а именно связанных графов, все вершины которых имеют степень не более

трех. Минимальность такой сети, представленной кривыми (прямыми на плоскости), которые пересекаются только по концам, означает, что любой ее фрагмент имеет минимальную длину. Если на сфере S^2 можно задать только 10 неизометричных замкнутых минимальных сетей, то на плоском торе T^2 существует бесконечно много таких сетей с различной топологией. Однако в рассматриваемых локально решетчатых системах тип замкнутой кривой, минимальной на плоском торе, задаваемом определенными углами между соответствующими векторами и целочисленными значениями сторон треугольников при триангуляции, определяется типом решетки в E^2 , которая порождает данный тор. Малые деформации не разрушают минимальную сеть, что позволяет рассматривать подобные системы как условные срезы по плоскости витка спирали. Такой подход позволяет рассматривать объединение двух витков как аналог приклейки ручки к многообразию, что соответствует взятию связной суммы многообразия и тора T^2 .

Отображение симметрии для ДНК-структур требует трактовки двойной спирали как единого объекта. В рамках развиваемого подхода для этого необходимо использовать топологические свойства геликоида и катеноида [2] и алгебраические особенности мероморфных функций [15].

Во-первых, намотка геликоида на катеноид может быть реализована в классе минимальных поверхностей, следовательно, существует однопараметрическое семейство изометричных поверхностей Π_t , $0 \leq t < 1$, гладко зависящих от t , где Π_0 – геликоид, Π_1 – бесконечнолистная намотка катеноида. Поверхности Π_0 и Π_1 называются сопряженными, а все промежуточные – ассоциированными. Полный геликоид задается представлением Вейерштрасса вида $(-i \exp(-w), \exp w)$, где $w = u + iv$, тогда как намотка катеноида задается выражением $(\exp(-w), \exp w)$. Так, если (q, g) – представление Вейерштрасса, то ассоциированное семейство имеет вид $(\exp \theta q, g)$, а сопряженные поверхности – $(\pm i q, g)$. Само по себе семейство ассоциированных минимальных поверхностей состоит из локально изометричных минимальных поверхностей, как правило, попарно не конгруэнтных. Таким образом, имеется своеобразное конфигурационное вырождение, связанное с сопряженностью объединяемых конструкций.

Во-вторых, мероморфные функции задают комплексно-аналитическое отображение вида $f: M \rightarrow CP^1 \cong C \cup \{\infty\}$ многообразия $M \subset CP^n$. Компактность M и аналитичность $f \neq \text{const}$ позволяют задать конечное число особых точек $(z_1 \dots z_m)$ и определить область $U_f = S^2 \cong CP^1 \cong C \cup \{\infty\} \setminus (f(z_1) \dots f(z_m))$, где $f(z_i)$ – значение f в точке z_i [2, 15]. Тем самым задается расслоение, для кото-

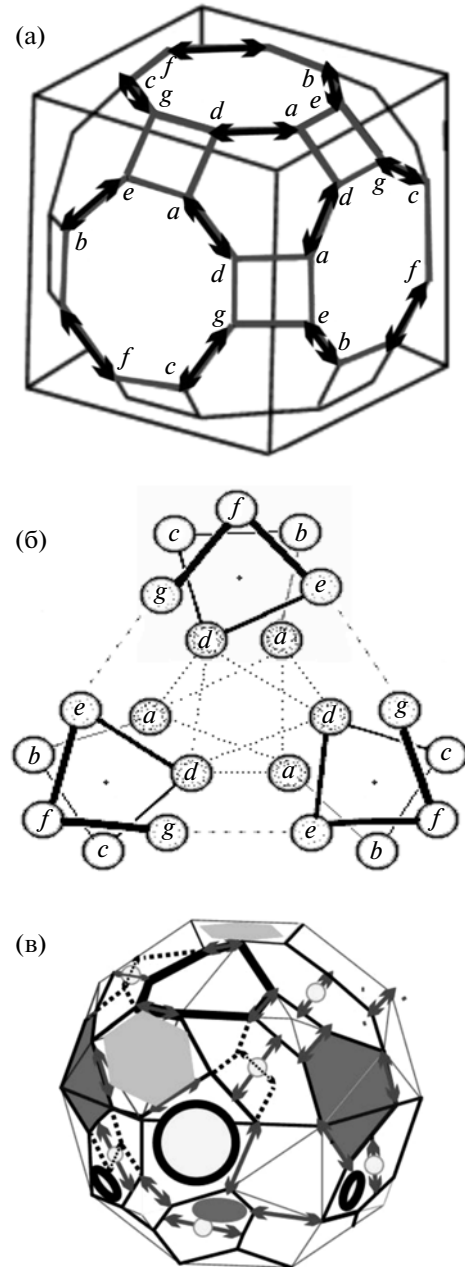


Рис. 4. Усеченный кубооктаэдр; буквами выделены по семь вершин трех ближайших друг к другу октагональных граней (а). Схема суперспирали из трех α -спиралей (рис. 11-3 в [4]), показанных спиралью а–b–...–g и соответствующих октагональным граням на рис. 4а. Внутри тройки и между парами α -спиралей возникают каналы, соответствующие гексагональной и квадратным граням на рис. 4а (б). Полиэдр с $(2^2 \times 24)$ вершинами, гранями которого являются 12 гептагонов, 24 пентагона, 8 и 6 гексагонов (двух типов). Тройка гептагонов вокруг серого гексагона возникает при трансформации тройки октагонов с рис. 4а, реализующейся поворотом пунктирных стрелок-ребер на 90° (в).

рого можно задать как не особый слой, так и особые слои, связанные с обходом особых точек. Несобые слои образуют многообразие K_8 , которое диффеоморфно многообразию линейных эле-

ментов. Можно показать [15], что обход вне невырожденных особых точек (2-форма невырождена) задает исчезающие циклы S^1_δ , так что имеем диффеоморфизм между особыми (K_0) и неособыми слоями вида $K_\delta \setminus S^1_\delta \cong K_0 \setminus \{0\}$. Оказывается, что многообразие K_0 состоит из двух кусков, задаваемых цилиндрически-подобными координатами вида $u = \rho \exp \theta$, $v = iu$ (первый кусок) и $u = \rho \exp \theta$, $v = -iu$ (второй кусок). В указанных координатах на слое K_δ для кривых при $\rho = \text{const}$

$$u = u \cos \theta + v \sin \theta, \quad v = -u \sin \theta + v \cos \theta. \quad (9)$$

При любом $\varepsilon > 0$ координата ρ , задаваемая на обоих кусках, определяется преобразованиями вида $K_{|\delta|} \rightarrow K_{|\delta|_{\text{exp}}}$, тождественными при $\rho > 2\varepsilon$ (значения $\rho = 0$ отвечает исчезающему циклу – минимальной длине на слое K_δ). При малых отклонениях t от нулевых значений координата θ “вращается” для разных кусков в противоположные стороны ($\theta \rightarrow \theta \pm t/2$), охватывая цилиндрически-подобную поверхность при значениях $-2\varepsilon \leq \rho^* \leq 2\varepsilon$, где ρ^* принимает значение ρ на первом и $-\rho$ на втором куске соответственно. Таким образом, двойную спираль можно упрощенно рассматривать как единый объект посредством обхода вокруг поверхности, для которой параметр θ играет роль, аналогичную приведенному параметру для ассоциированной минимальной поверхности Π . Отметим, что подобное явление возможно только в точке бифуркации, когда независимые параметры h , r и θ фактически сводятся к одному.

Для описания объединения двух полувитков (как многообразий) каждой спирали с образованием единой геликоидально-подобной системы (многообразия M) необходимо использовать стандартную топологическую операцию взятия связной суммы, включая такие ее разновидности, как приклейка ручки или пленки Мёбиуса (подробнее об указанных операциях как структурных топологических элементах в [15, 17]). В частности, если в α -спирали сборка идет посредством приклейки ручек, то в рассматриваемых ДНК-структурах сборку невозможно описать без операции связной суммы. Применение указанной операции играет особую роль для рассматриваемых стержневых конструкций, поскольку обеспечивает экспериментально установленную возможность их изгиба под определенными углами [18].

Рассмотрим конструкции, обеспечивающие совместимость особой минимальной поверхности с дискретной структурой, которую она ограничивает, и пространственными кривыми, соединяющими вершины данной структуры – особые точки поверхности. Группы преобразований для поверхностей или объемов в E^3 можно рассматривать как многообразия, при этом переход от ис-

пользования указанных групп к использованию порядковых автоморфизмов рассматриваемых систем не меняет ситуацию. Пространство (многообразиие) CP^1 может быть получено из сферы S^3 при отображении каждой ее окружности $S^1 = \{\exp i\varphi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ в точку CP^1 .

Если для геликоидальных систем использовать глобальные изотермические координаты (u, v) , то декартовы координаты точек выражаются через гиперболические функции: $x = \text{sh} u \text{ch} v$, $y = \text{sh} u \text{sh} v$, $z = v$ [2]. В этом случае преобразования координат относятся к конформным, а любое конформное преобразование на сфере, близкое к тождественному как в E^3 , так и на $S^3(S^2)$, может быть представлено как однопараметрическое преобразование вида $\exp tA$. Если измеряющий искажения расстояний тензор деформации равен нулю (что означает использование внешней метрики), то от векторных полей, задающих конформные преобразования, можно перейти к использованию соответствующих им алгебр (подалгебр), задающих движения. Для ориентированных поверхностей функции перехода (преобразования координат) задают комплексную структуру, поэтому пара u, v заменяется комплексной координатой $z = u + iv$.

Соответственно только при определенных условиях [15] можно ввести единую для всей римановой поверхности или ее отдельной области голоморфную 1-форму. Поэтому в первом приближении можно использовать свойства пространственных кривых, которые соединяют особые точки, лежащие на минимальной поверхности. Для задания пространственных кривых можно использовать натуральный параметр $r(d)$, такой что длина участка при изменении от d' до d'' равна $(d'' - d')$. Тогда для любых двух пространственных кривых $r_1(d)$ и $r_2(d)$, которые характеризуются одинаковыми значениями коэффициентов кривизны и кручения, всегда найдется движение ψ , такое что $\psi r_1(d) = r_2(d)$ [15]. Таким образом, введение внешней метрики и задание однородных однопараметрических систем обеспечивают необходимые условия для существования движений ψ .

Для рассматриваемых кривых коэффициент зацепления должен быть целым числом, которое не меняется при деформациях [1], что позволяет соотносить две кривые с границами диска D^2 , который при отображении $D^3 \rightarrow D^1 \times D^2$ отображается в S^2 . Отображение $D^3 \rightarrow D^1 \times D^2$ определяется отображением $S^3 \rightarrow S^1 \cup S^2$, которое в [1] позволило отобразить в E^3 подструктуры заданного на S^3 политопа. В частности, рассмотренный в [1] канал 40/11 политопа позволяет определить в E^3 топологически устойчивую поверхность. Эта поверхность должна удовлетворять тому требова-

нию, чтобы две пространственные кривые, соединяющие центры лежащих на ней элементов упаковки, переводились друг в друга преобразованием ψ . В соответствии с (1) определяющая α -спираль орбита оси 40/11 представляет собой объединение четырех спиралей 10_1 (рис. 1в), отображаемых друг в друга преобразованием ψ , которое аппроксимируется (по соотношению (6)) поворотом 40/11.

При гомотопическом отображении $D^1 \times D^2$ в многообразии можно использовать отображения вида $\partial D^3 \rightarrow S^2 \rightarrow 1$ ($\partial D^2 \rightarrow S^1 \rightarrow s'_0$), при котором отображающееся в 1 ядро гомоморфизма порождает редуцированную группу [16]. Особенности строения централизаторов таких групп приводят к проективным группам вида $PSL(2, p)$, которые являются подгруппами соответствующих групп Матье. В частности, группа Матье M_{12} содержит группу автоморфизмов биплоскости $PSL(2, 11)$ и подгруппы M_{10} , M_{11} [12–14].

СИММЕТРИЙНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ДНК-СТРУКТУР, ПОЛУЧАЕМЫЕ АПРИОРИ В РАМКАХ ИСПОЛЬЗУЕМОГО АППАРАТА

В структурах ДНК элементы повторяемости в упаковках молекул проявляются в особенностях кодирования [19]. В целом такие структуры определяются геликоидально-подобной масштабной инвариантной упорядоченной упаковкой крупных молекул, поэтому для их описания должна использоваться локально решетчатая упаковка, способная обеспечить повторяемость центров молекул (кластеров) и на каждом витке, и в каждом подобном (7) цикле. В дополнение к структурным особенностям α -спирали конструкция, отображающая топологию ДНК, должна учитывать и ее двуспиральность. Рассмотрим возможность построения ДНК на основе комбинаторно (симметрично) и топологически устойчивой конструкции, в которой реализовалась α -спираль. В силу изложенного выше такая конструкция должна соотноситься с углом спирального вращения 40/11, последовательностью политопов $\{q(2^n \times 24)\}$ ($n = 0, 1, 2$), группой $PSL(2, 11)$, группой Шевалле типа G_2 и соотношением $h/r \approx 2.4$ шага спирали к радиусу.

Ось 40/11 отображает друг в друга тройки из атомов C_α , C' и N , при этом данные атомы друг в друга не отображаются. Таким образом, по отношению к преобразованию 40/11 тройка C_α , C' и N представляет собой трехэлементное импримитивное множество, и один виток α -спирали содержит 4 или 3 импримитивных множества. Выше было показано, что исходной для определения α -спирали необходимо считать группу $PSL(2, 11)$. Она является подгруппой группы Матье M_{12} , которая действует на двух 12-элементных множествах, каждое из которых может быть соотнесено

с витком одной из двух взаимосвязанных спиралей или с одним из двух витков одной спирали. Подгруппа M_9S_3 группы M_{12} [10] действует на двух орбитах [3⁴, 3, 9], одна из которых представляет собой четыре импримитивных транзитивных трехэлементных множества, а вторая – три транзитивных множества из 3 + 1 элементов. Транзитивность означает существование элементов группы, переводящих импримитивные множества друг в друга. В множестве из 3 + 1 элементов отличный от остальных элемент (неподвижная точка) можно считать центром тройки элементов, поэтому множество [3⁴, 3, 9] можно сопоставить с четверьмя и тремя тройками атомов C_α , C' и N на двух витках α -спирали.

Предположим, что все атомы C' и N спроецированы на спираль, содержащую центры атомов C_α , и центры двух любых соседних атомов переводятся друг в друга одним и тем же с точностью до сопряжения преобразованием. Такая однородная спираль будет отображаться на себя нецелочисленной осью 120/11 $\rightarrow (40 \times 3)/11$, осуществляющей поворот на 33°. Отображениям друг в друга центров (спроецированных на спираль) атомов C_α и C' , C' и N , N и C_α соответствуют три неединичные инволюции в группе Шевалле типа G_2 . Нецелочисленная ось 120/11 практически совпадает с винтовой осью 11 = 121/11, в которой на виток приходится 11 транзитивных элементов. Для α -спирали соотношение $h/r \approx 2.4$ определялось для точки бифуркации катеноида, что после ряда шагов позволяет определить геликоид и связанную с ним двойную спираль [2]. Возможность удвоения спирали фактически присутствует в рассмотренных ранее конструкциях для α -спирали. В частности, подгруппа $PSL(2, 11)$ группы Матье M_{11} действует на двух орбитах [1, 11; 1, 11], которые можно соотнести с двумя витками двойной спирали при равномерном размещении на каждом витке по 11 элементов и одной неподвижной точке. Конструкцией, удовлетворяющей всем этим условиям, является A -форма ДНК, для которой соотношение шага спирали $h = 28.6 \text{ \AA}$ к радиусу $r = 11.5 \text{ \AA}$ составляет 2.487 [19].

Существенным отличием A -формы от других форм ДНК является сдвиг пар оснований на 4–5 Å от оси спирали к периферии, что предположительно связано с различными конфигурациями сахарного кольца дезоксирибозы [20]. Хотя двуспиральные формы РНК-структур образует именно A -форма ДНК, данная конформация относится к топологически менее устойчивым по сравнению с B -формой [19, 20]. Действительно, в определенном смысле A -форма топологически локально ближе к неполной поверхности Шерка, задаваемой соответствующим представлением Вейерштрасса, описывающим локальную структуру минимальной поверхности. Данная поверх-

ность также характеризуется нулевым индексом неустойчивости, но ее образование связано с дополнительными требованиями. В частности, нарушаются условия введения внешней метрики и возникает необходимость использования функций, представимых в виде суммы функций от каждой переменной [2]. Таким образом, из-за отсутствующей центральной части поверхности, A -форма не относится к самым топологически устойчивым формам ДНК-структур, хотя соотношение $h/r \approx 2.4$ (критерий топологической устойчивости для одиночной спирали!) для нее и выполняется.

Подгруппа S_5 группы M_{11} действует на множестве элементов $[1, 5, 6; 2, 10]$, которое сопоставимо с 5 и 6 элементами на двух полувитках одной спирали (при одной неподвижной точке) и двумя пятерками элементов (с двумя неподвижными точками) на двух полувитках второй спирали. В этом случае возникает возможность объединения $[1, 5, 6; 2, 10] \cup [2, 10; 1, 5, 6]$ полувитков спиралей, которое приводит к образованию двойной спирали, содержащей в двух соседних витках каждой спирали 10 и 11 элементов. В данном случае на два витка приходится 21 элемент, что составляет 10.5 элементов на виток, характерные для B -формы ДНК-структуры [19]. Переходы между подгруппами M_{12} : $S_5 \rightarrow M_{10} \cdot 2 \rightarrow 2 \times S_5$, определяют переходы между соответствующими подмножествами элементов, на которых действуют эти подгруппы: $[1, 5, 6; 2, 10] \rightarrow [6^2; 2, 10] \rightarrow [6 \times 2, 6 \times 2]$. Последнее из подмножеств характеризует двойную спираль, в которой каждый из витков каждой спирали состоит из двух шестерок элементов, не переводящихся друг в друга элементами симметрии. Данное строение спирали характерно для Z -формы ДНК-структуры [21].

Если не привлекать экспериментальные данные, то существование отличных от A -формы ДНК-структур можно предположить, например, в связи с наличием неиспользованных при выводе A -формы симметрий из рассмотренной в [1] последовательности политопов $\{q(2^n \times 24)\}$, $n = 0, 1, 2$. Иными словами могут существовать конструкции, удовлетворяющие полностью или частично как рассмотренным выше условиям, так и симметриям из определенных решеток. В частности, при задании локально решетчатых структур решетка (в алгебраическом понимании) не обязательно определяется как подгруппа n -мерного вещественного пространства, порождаемого n линейно независимыми (обычными) векторами. Можно использовать комплексные и кватернионные векторы, поскольку кроме целых вещественных чисел имеются три кольца целых: гауссовых $\{(a + ib), a, b \in \mathbb{Z}\}$, эйзенштейновых $\{(a + i\omega), a, b \in \mathbb{Z}, \omega = (-1 + i/\sqrt{3})/2\}$ и гурвицевых кватернионных.

Действительно, решетка E_8 может быть описана как реальная часть $\Lambda_{real} = E_8$ гурвицевой решетки в \mathbb{H}^2 , при этом для гурвицевой в \mathbb{H} решетки $\Lambda_{real} = D_4$. Для двумерной гауссовой решетки $\Lambda_{real} = \mathbb{Z}^2$ – квадратная решетка, для эйзенштейновой решетки $\Lambda_{real} = A_2$ – гексагональная решетка. Подобные соотношения упрощают переход от использования векторных многообразий и автоморфизмов решетки E_8 к соответствующим элементам политопов и далее к разбиениям двумерной сферы или тора. Использование 24-элементных групп, представленных, как правило, двумя различающимися только знаками наборами по 12 элементов, позволяет применять группы Матье M_{24} и M_{12} , что и реализовано в настоящей работе.

Решетка над кольцом циклотомических целых вида $\mathbb{Z}[\zeta]$, где $\zeta = \exp(i\pi/4)$, $\zeta^2 = i$ и $\zeta^4 = -1$, является вариантом вещественной решетки D_4 , поэтому 24 вершины проекции многогранника $\{3, 4, 3\}$ можно представить элементами из $\mathbb{Z}[\zeta]$ (рис. 5а). Последние могут быть отождествлены с 24 минимальными векторами D_4 (нормы [2] или [4]) для первой или второй координационной сферы. Данные два набора классов из 24 векторов входят в фактор-многообразие $D_4/3D_4$, которое помимо нулевого класса содержит 32 класса с тремя векторами нормы [6] в каждом [14]. Всего в указанных классах содержатся $24 + 24 + 96 = 144$ вектора, которые могут быть сопоставлены вершинам полиэдров $\{2^n \times 24\}$, $n = 0, 1, 2$. При этом вершинам полиэдра $\{24\}$, стартового в данной последовательности полиэдров, будут соответствовать 24 вектора первой координационной сферы D_4 , а 96 вершинам полиэдра $\{2^2 \times 24\}$ – 96 векторов третьей координационной сферы.

Политоп $\{3, 4, 3\}$ является ячейкой сот $\{3, 4, 3, 3\}$, которые в соответствии с изложенным выше могут быть спроецированы на плоскость (развертку $\{2^2 \times 24\}$ -вершинного полиэдра). Согласно [9], подобная развертка может быть получена из разбиения на 5-, 6- и 7-вершинники развертки куба (рис. 5б, 5в). Для этого развертка куба вкладывается в мозаику $\{4, 4\}$ с ребром $2(a + b)$ таким образом, что один из многоугольников Петри куба становится частью многоугольника Петри мозаики $\{4, 4\}$. Грани куба могут быть разбиты на квадраты, принадлежащие орбите федоровской группы $\{a + b, a - b\}4mm$. Нормализатором данной группы является федоровская группа $\{a, b\}4mm$, отображающая на себя мозаику $\{4, 4\}_a$ (с ребром a), в вершины которой попадают $2^2 \times 24 = 96$ вершин разбиения развертки куба на 5-, 6- и 7-вершинники.

Полоска данного разбиения, содержащая все шесть ребер многоугольника Петри куба (рис. 5в), позволяет выделить 81-вершинное подмножество, которому соответствуют 80 векторов из ука-

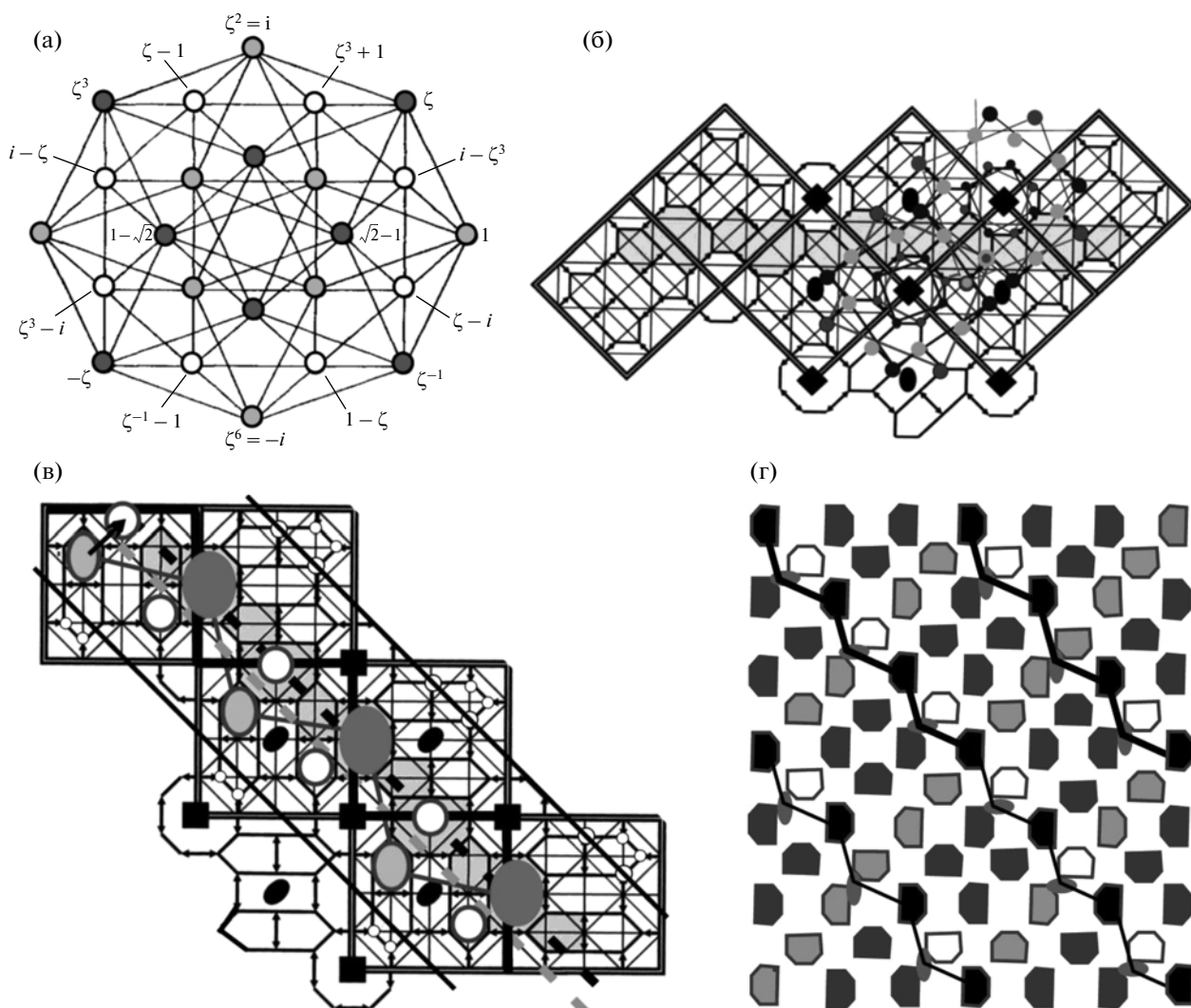


Рис. 5. Проекция политопа $\{3, 4, 3\}$, его вершины представлены как элементы неглавной решетки (рис. 8.1 в [14]). Окраска показывает разбиение 24 вершин на три орбиты восьмерной циклической группы и на шесть орбит ее четверной циклической подгруппы (а). Равноресберное трехкоординированное разбиение развертки куба, вершины которой определяются объединением проекций рис. 5а. Две соседние проекции пересекаются по четырем вершинам; на каждую из граней куба попадают по 16 вершин разбиения. На серединах ребер, составляющих многоугольник Петри куба, находятся семивершинники (б). В разбиении развертки куба с рис. 5б серыми овалами выделена зигзагообразная цепочка, состоящая из трех пар пентагонов и гептагонов. Такая же цепочка выделена белыми кружками. Данные цепочки соответствуют экваториальным цепочкам полиэдра с рис. 4в. Пунктир — плоскости скользящего отражения (в). Развертка с рис. 5б вкладывается в кристаллографическое разбиение плоскости, в котором выделены зигзагообразные цепочки, представленные на рис. 5в. При трактовке разбиения как развертки цилиндра зигзагообразные линии определяют две левые (по отношению к рис. 1б, 1в) спирали, содержащие шесть пар неконгруэнтных элементов на виток. Полувитки спиралей показаны тонкой и толстой линиями (г).

занных 96. Можно показать [1], что данные 80 векторов позволяют перейти к политопу $\{160\}$ и получить параметрическую ось $40/11$. Утроение ячейки $3D_4$ по сравнению с D_4 позволяет в конечном итоге перейти к оси $120/11$, утроенной относительно оси $40/11$ по числу элементов (120 — инвариант второй координационной сферы E_8).

Через середины ребер многоугольника Петри проходит плоскость скользящего отражения $\{m|2a\}_{1/2}$, совмещающая шесть гептагонов, кото-

рые на них находятся. Если параллельно данной плоскости провести плоскость скользящего отражения $\{m|2a\}_{1/4}$, проходящую через четверти ребер многоугольника Петри, то она будет совмещать центры трех пентагонов и трех гептагонов. Объединение ближайших друг к другу полигонов образует зигзагообразную линию из чередующихся пентагонов и гептагонов (серая цепочка на рис. 5в) — пару из пентагона и гептагона, размножаемую удвоенной трансляционной компонен-

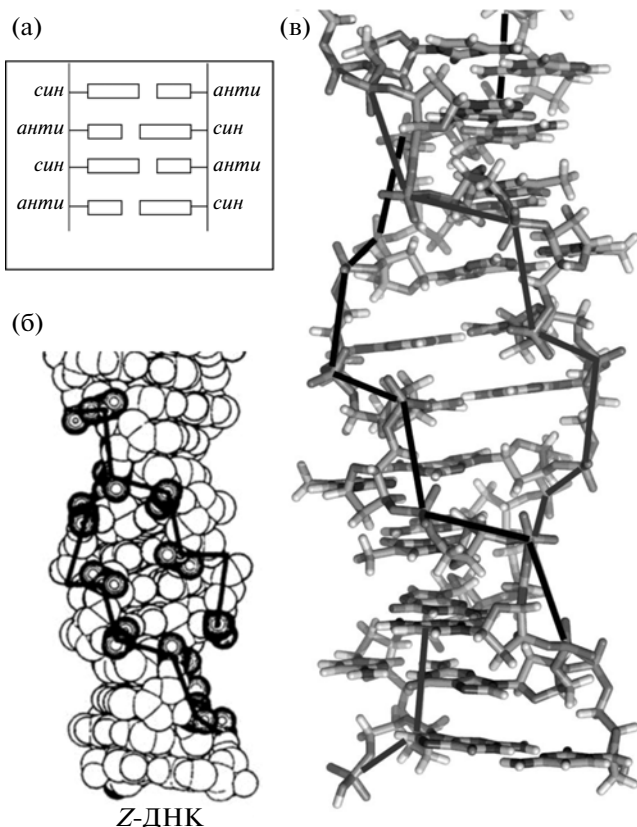


Рис. 6. В каждой из комплементарных нитей Z-формы ДНК-структуры происходит чередование син- и антиконформаций нуклеотидных звеньев, а в каждой паре оснований одно всегда находится в син-конформации относительно геликоидально-подобной связи, другое – в антиконформации [21] (а). Повторяющаяся единица спирали – двойка соседних пар нуклеотидов. Угол спирального вращения для левоспиральной Z-формы равен -9° или -51° в зависимости от того, какой из контактов – анти–син или син–анти – реализуется в данном месте [21] (б). Модель Z-формы ДНК, (рисунок из статьи Z-DNA с web-сайта <http://en.wikipedia.org/>, загружен Ричардом Вилером (Zephyris)); зигзагообразная двойная спираль показана толстыми черными линиями (в).

той $2a$ плоскости скользящего отражения. Трансляция на a серой цепочки определяет конгруэнтное (с точностью до разворота пентагонов и гептагонов вокруг центров) объединение трех пар пентагонов и гептагонов, которое представлено белой цепочкой на рис. 5в, и не имеет никакого преимущества перед серой цепочкой.

Определенная ранее A-форма ДНК-структуры получена утроением α -спирали посредством перехода от оси 40/11 к оси 120/11. Суперспирали из трех α -спиралей в полиэдре $\{2 \times 24\}$ соответствует объединение из трех соответствующих каналам 40/11 октагонов вокруг соответствующего 30/11 гексагона, вершины которого принадлежат данным октагонам (рис. 4а, 4б). В полиэдре $\{2^2 \times 24\}$ такому объединению соответствует объединение

из трех гептагонов вокруг серого гексагона. Гексагон, находящийся на “северном” (“южном”) полюсе полиэдра $\{2^2 \times 24\}$, находится в центре зигзагообразного экваториального объединения трех гептагонов (и трех пентагонов между ними), которые не имеют с ним общих вершин (рис. 4в). Два зигзагообразных объединения вокруг оси, соединяющей северный и южный гексагоны, возникают на экваторе полиэдра $\{2^2 \times 24\}$ из белой и серой зигзагообразных цепочек (рис. 4в) при склейке куба из развертки (рис. 5в).

При выделении из сферы “северного” и “южного” дисков (вокруг северного и южного гексагонов) и дальнейшей сшивке дисков, допускающей локально цилиндрическую аппроксимацию рассматриваемых минимальных поверхностей, двум зигзагообразным цепочкам могут быть сопоставлены полувитки двух спиралей, образующих двойную спираль (рис. 5г). При отображении политопа на полиэдр двум точкам политопа соответствует одна точка полиэдра, поэтому снятию вырождения в E^3 должно соответствовать появление еще двух полувитков двух спиралей. Таким образом, получаем двойную спираль, в которой на каждый виток приходится зигзагообразное объединение шести пар неконгруэнтных друг другу элементов (рис. 5г). Отметим, что при выводе A-формы без использования политопов вторая спираль была введена лишь комбинаторно посредством действия подгруппы $PSL(2, 11)$ группы Матье M_{11} на двух орбитах $[1, 11; 1, 11]$.

В зигзагообразной цепочке – одном полувитке спирали – каждый гептагон соединен с пентагоном и наоборот. Аналогичный тип соединения может быть сохранен для связи пентагонов с гептагонами из разных полувитков двойной спирали. При сопоставлении пентагонам и гептагонам двух конформаций оснований (рис. 6а) развертка двойной спирали (рис. 5г) может рассматриваться как развертка двойной спирали, характеризующей Z-форму ДНК-структуры (рис. 6б, 6в).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные с использованием довольно простых математических конструкций результаты показывают, что α -спираль и различные формы ДНК-структур описываются в рамках алгебраической топологии как особые локально решетчатые упаковки, ограниченные поверхностями геликоидально-подобного типа. Такие поверхности отвечают точке бифуркаций для минимальных поверхностей, которые задаются представлением Вейерштрасса и удовлетворяют условию равенства нулю индекса неустойчивости поверхности. Таким образом, развиваемый подход показывает, что необходимым условием устойчивости и воспроизводимости рассматриваемых биологических структур является их соот-

ветствие единственной системе конструкций алгебраической топологии [22]. Иными словами данное условие определяет возможность сборки атомов (молекул) в соответствии с топологическими свойствами реального физического мира и условиями существования (вложимости в него) конечных дискретных упорядоченных структур. Как предсказывает теория катастроф [23], формирование подобных структур соотносится с процессами снятия конфигурационного вырождения, а устойчивость состояния — с наличием точки бифуркации. Более того, в случае ДНК-структур, видимо, имеет место двойная подстраховка природы от возможных эффектов кристаллизации: локальная решетчатость используется для решеток, задаваемых над кольцами алгебраических целых, а не только над привычным кольцом целых чисел.

Игнорирование локальной периодичности приводит к формальным нарушениям основной парадигмы о биологическом редукционизме [24], поскольку экспериментально обнаружены случаи, когда разные белки (или один и тот же белок с разными функциями) кодируются одинаковым геном с определенной последовательностью оснований. На такую особенность можно было бы не обращать внимания, если бы не характерное разбиение исходной ДНК-спирали на отдельные подсистемы, например, при считывании информации. Таким образом, можно надеяться, что дальнейшие биофизические исследования подтвердят априори определенные в настоящей работе особенности строения спирали.

ДНК-структуры не только содержат необходимый функциональный код (четырёхбуквенный с трёхбуквенными словами, что соотносится с требованием нецелого числа элементов на виток), но и реализуют очень важную операцию перехода от локально решетчатых атомно порожденных структур к локально решетчатым упаковкам молекул. Масштабная инвариантность системы — наиболее общий тип фрактальных преобразований — запускается своеобразным локальным превращением, когда повторяемость (локальная атомно порожденная решетчатость) в цепочках и числе элементов преобразуется в характеристику оси геликоидально-подобного стержня.

В настоящее время структурная классификация белков основана на биоинформатике, которая использует возможности компьютерного перебора и позволяет непосредственно сопоставлять белки [4], а не указывать определяющие симметрию конструкции алгебраической геометрии и топологии. Изучение строения биополимеров различного уровня организации требует определения симметрии соответствующего типа структурного порядка, которая не может быть отображена в рамках классической кристаллографии. Примененный в данной работе аппарат, ма-

тематическое обоснование которого приведено в [25, 26], позволяет до реальных или компьютерных экспериментов выявлять симметричные закономерности строения некоторых классов биополимеров, что определяет возможность априорного отбора топологически устойчивых структур и симметричной классификации биополимеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Самойлович М.И., Талис А.Л.* // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 4. С. 519.
2. *Тужилин А.А., Фоменко А.Т.* Элементы геометрии и топологии минимальных поверхностей. М.: Наука, 1991. 175 с.
3. *Шульц Г., Ширмер Р.* Принципы структурной организации белков. М.: Мир, 1982. 242 с.
4. *Финкельштейн А.В., Птицын О.Б.* Физика белка. М.: Книжный дом “Университет”, 2005. 376 с.
5. *Курош А.Г.* Теория групп. М.: Гостехиздат, 1953. 544 с.
6. *Samoylovich M.I., Talis A.L.* A foundation for the theory of symmetry of ordered nanostructures. М.: CNITI “Technomash”, 2007. 198 p.
7. *Самойлович М.И., Талис А.Л.* // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 4. С. 599.
8. *Самойлович М.И., Талис А.Л.* // Докл. РАН. 2008. Т. 420. С. 472.
9. *Samoylovich M.I., Talis A.L.* // Cryst. Rep. 2009. V. 54. P. 1117.
10. *Samoylovich M.I., Talis A.L.* // Acta Cryst. A. 2010. V. 66. P. 616.
11. *Sadoc F.J., Rivier N.* // Eur. Phys. J. B. 1999. V. 12. P. 309.
12. *Kostant B.* // Notices Am. Mater. Soc. 1995. V. 42. P. 959.
13. *Brown E.* // Math. Mag. 2004. V. 77. P. 87.
14. *Конвей Дж., Слоэн Н.* Упаковки шаров, решетки и группы. Т. 1. М.: Мир, 1990. 414 с.
15. *Дубровин Б.Л., Новиков С.П., Фоменко А.Т.* Современная геометрия. М.: Эдиториал, 2001. Т. 1. 336 с.; Т. 2. 296 с.; Т. 3. 288 с.
16. *Хамфри Дж.* Линейные алгебраические группы. М.: Наука, 1980. 400 с.
17. *Самойлович М.И., Талис А.Л.* // Матер. XVIII междунар. конф. “Высокие технологии в промышленности России”. М.: ЦНИТИ “Техномаш”, 2012. С. 394.
18. *Morozov A.V., Fortney K., Gaykalova D.A. et al.* // Nucleic Acids Res. 2009. V. 37. P. 4707.
19. *Nelson D.L., Cox M.M.* Lehninger Principles of Biochemistry. 4th edition. New York: W.H. Freeman, 2004. 1119 p.
20. *Иванов В.И., Минченкова Л.Е.* // Молекулярная биология. 1994. Т. 28. С. 1258.
21. *Зенгер В.* Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. М.: Мир, 1987. 584 с.
22. *Новиков С.П.* Алгебраическая топология // Совр. пробл. матем. 2004. Т. 4. 46 с.
23. *Арнольд В.И.* Теория катастроф. М.: УРСС, 2004. 128 с.
24. *Свердлов Е.Д.* // Вестн. РАН. 2006. Т. 76. С. 707.
25. *Samoylovich M.I., Talis A.L.* // ArXiv:1211.3686. 2012.
26. *Samoylovich M.I., Talis A.L.* // ArXiv:1211.6560. 2012.