Линейные подструктры политопов, определяющие альфа-спирали

Талис А.Л., Кучериненко Я.В.

Институт элементоорганических соединений
им. А.Н. Несмеянова РАН

Геологический ф-т, МГУ им.М.В.Ломоносова

План доклада

1) Тетрагеликс и пентагеликс политопа {3,3,5}

2) Не имеющие адекватного определения структурные особенности α-спирали

3) Тетракоординированный пентагеликс политопа 240, спираль 40/11 и идеальный прототип одиночной α-спирали.

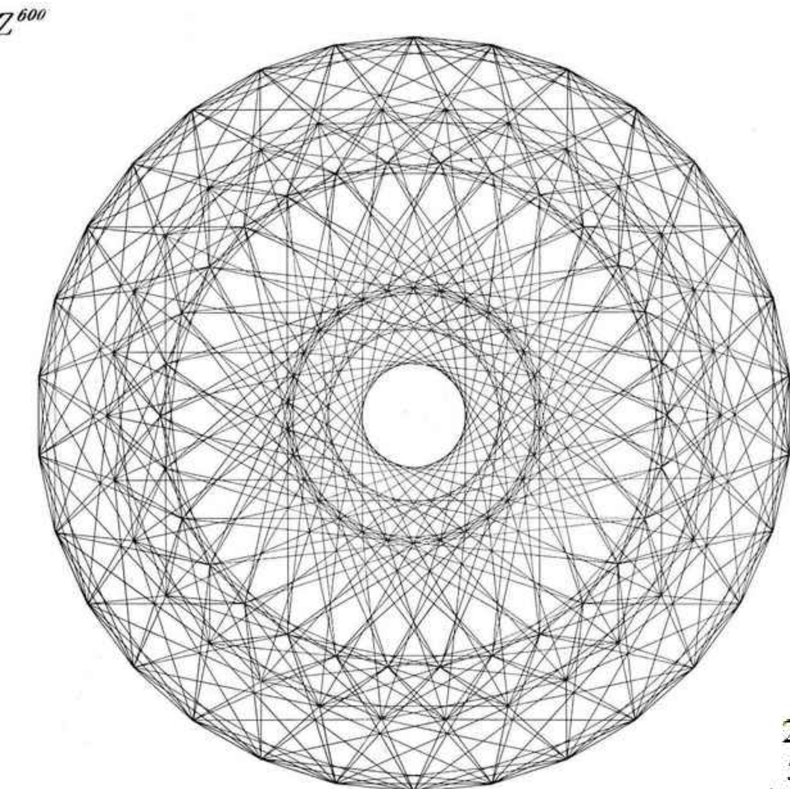
4) Оси α–спиралей в суперспиралях, определяемые семейством осей трубчатых политопов

5) Тетраблок – 7-вершинное объединение тетраэдров, определяемое разбиениями политопа {3,3,5}; спирали из тетраблоков в политопе {3,3,5}

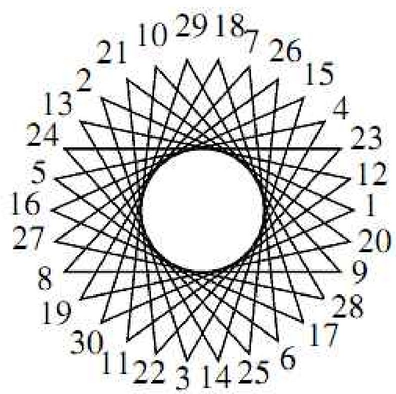
6) Возможная связь группы PSL(2,7) (изоморфной группе тетраблока), 40/11=3.(63) и $1+\sqrt{7}$ =3.646.

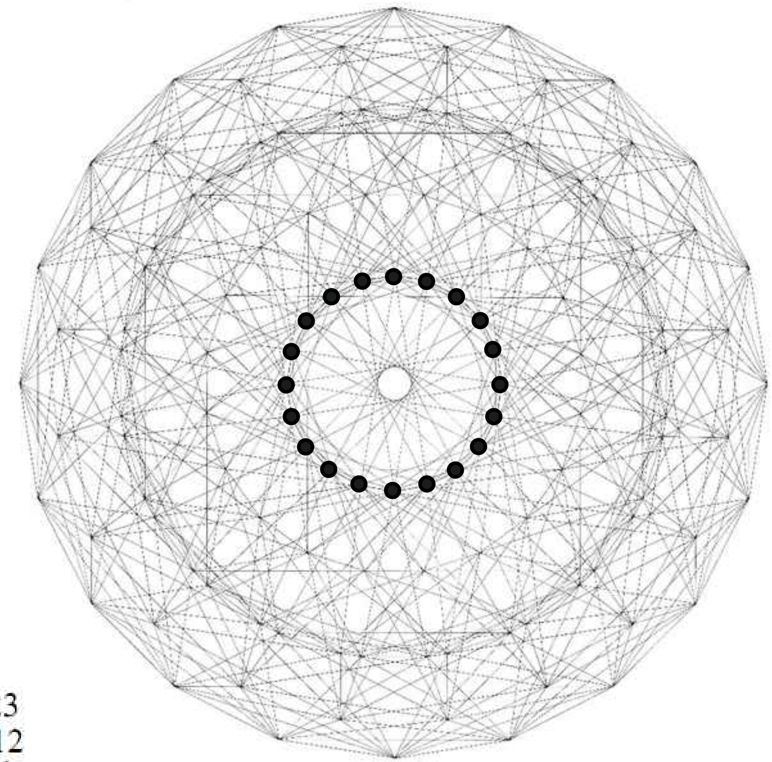
3

Oss, S. L. van (1899). Das fege1mässige Sechshundeftzell und seine Se1bstdeckenden Bewegungen. Amsterdam: Müller



30/11





20/9

$360^0 : 30/11 = 132^0$

$360^0 : 20/9 = 162^0$

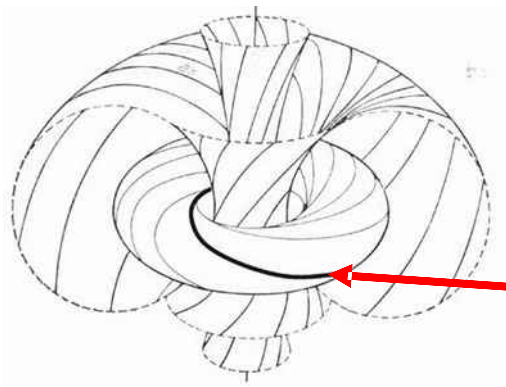
Проекции политопа {3,3,5} на плоскость вдоль осей 30/11 и 20/9

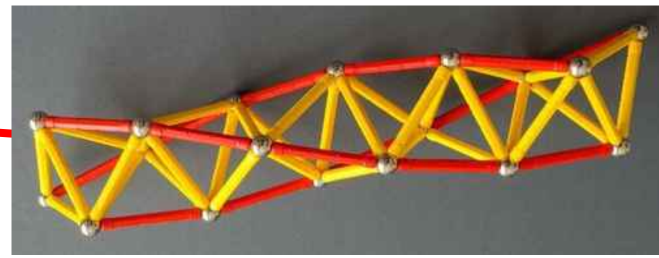
Тетрагеликс из дискретного расслоения Хопфа для политопа {3,3,5}

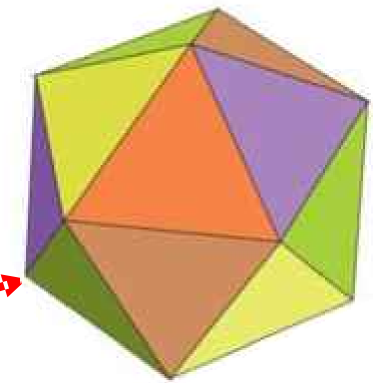
Расслоение Хопфа позволяет представить структуру “произведением” базы и слоя

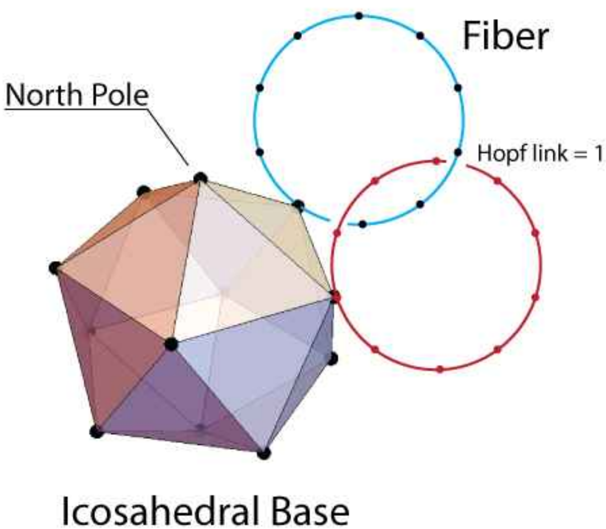
$$S^3 \rightarrow (\text{база})\ \ S^2 (\text{слой } S^1).$$

$$\{3,3,5\} \rightarrow \{3,5\}(\text{слой } \{10\}),$$









Все вершины икосаэдра {3,5}- базы расслоения Хопфа для политопа {3,3,5}, охватываются 4-мя (например, зелеными) непересекающимися треугольниками. Зеленому треугольнику базы соответствует объединение в тетрагеликс ь 3-х соседних 10-вершинных цепей-слоев в расслоении Хопфа для политопа {3,3,5}

The Discrete Hopf fibration of the 600-cell. The base space is an icosahedron, and the bers are non-intersecting decagons.

5

Y. Zhu et al. Chiral Gold Nanowires with Boerdijk−Coxeter−Bernal Structure // J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 12746−12752

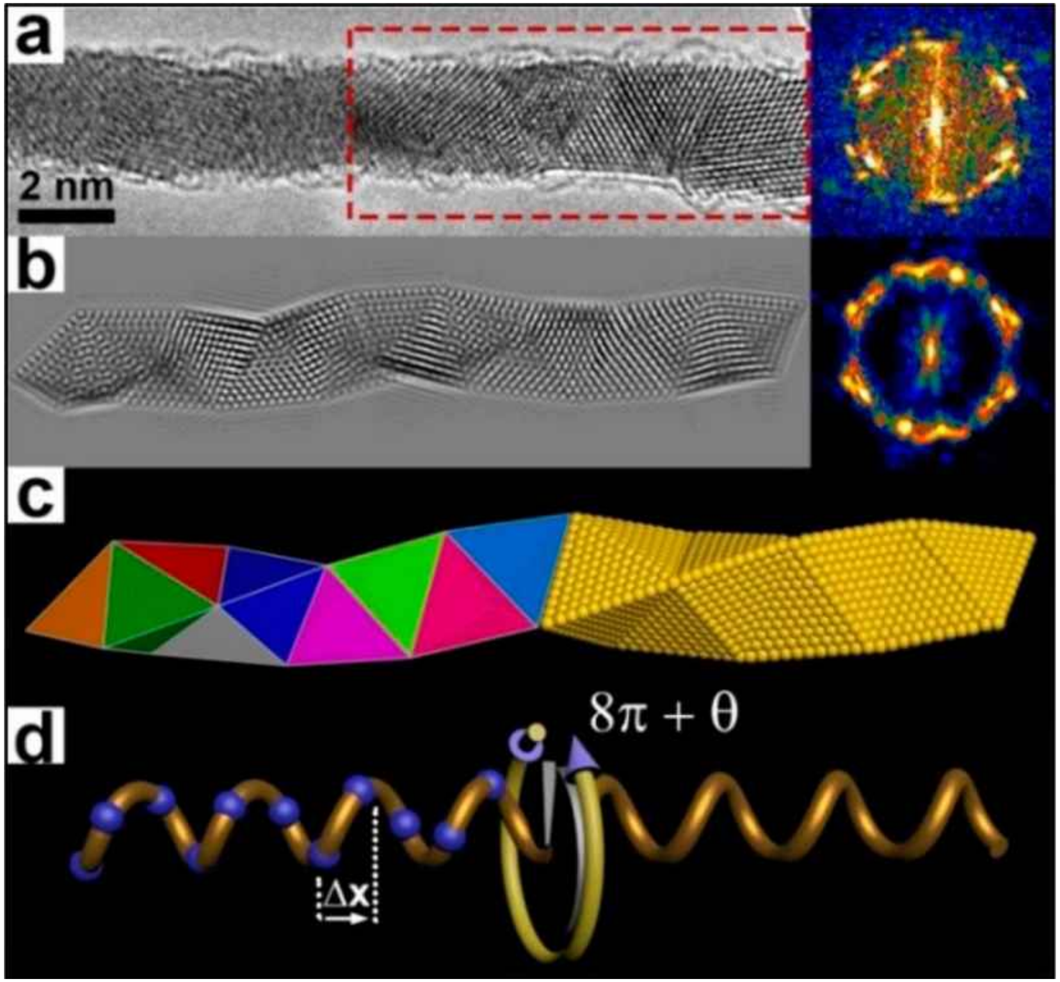
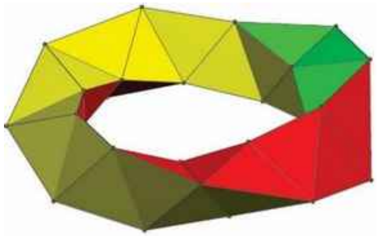
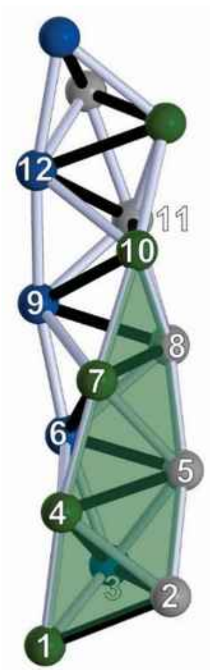


Figure 1. (a) Experimental and (b) simulated HRTEM image of a single BCB-structured Au NW (Δf = −35 nm). The corresponding FFTs are shown in the right. (c) Topological (left) and atomic (right) models of a BCB tetrahelix. (d) Schematic illustration of the pseudoperiodicity in BCB tetrahelix, where the blue dots represent the mass centers of the tetrahedral units.

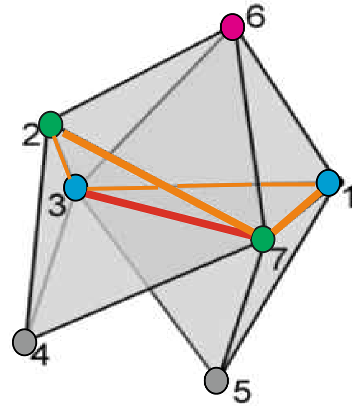
It means that a BCB helix is aperiodic, though a periodic approximant of BCB helix (tetrahelix) can be extracted from the polytope {3,3,5}.

Пентагеликс в политопе {3,3,5}





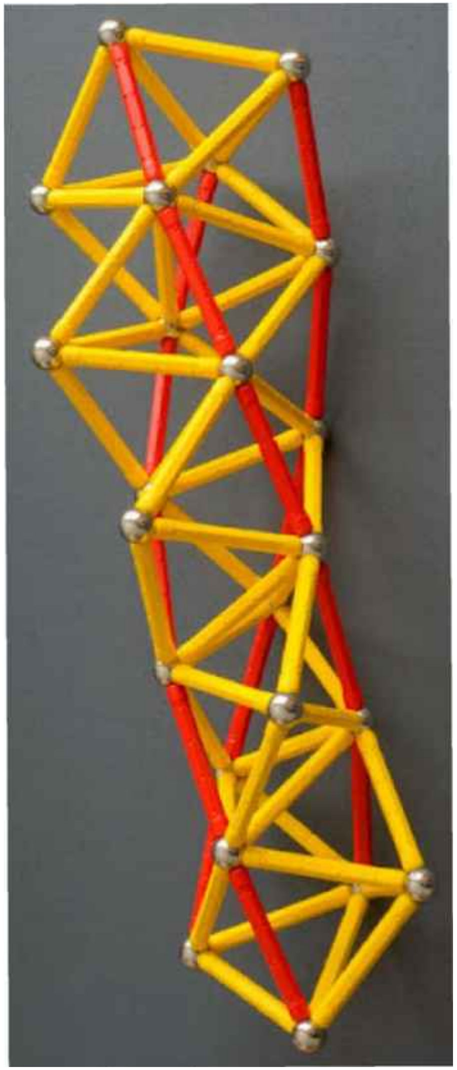
Развертка тетрагеликса в три ленты (красную, желтую и зеленую) из правильных треугольников.



В политопе 335 каждый треугольник - общее основание 2-х тетраэдров. Два соседних треугольника зеленой ленты определяют 4 тетраэдра у общего ребра.

Вся лента - орбита треугольников оси 20/9.

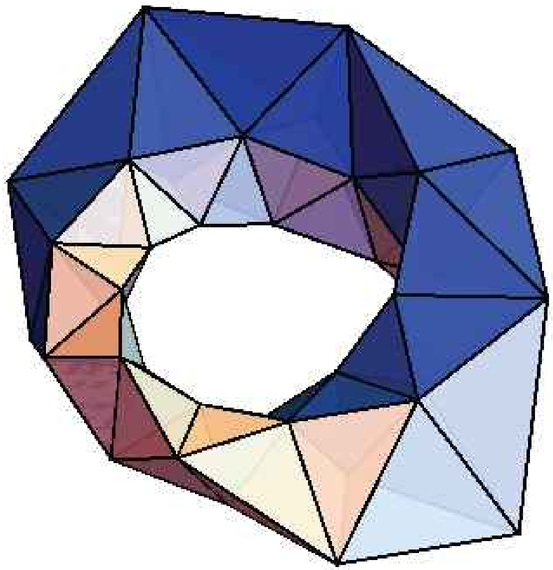
20 треугольников зеленой ленты определяют 40 тетраэдров, 40 вершин которых определяют пентагеликс.

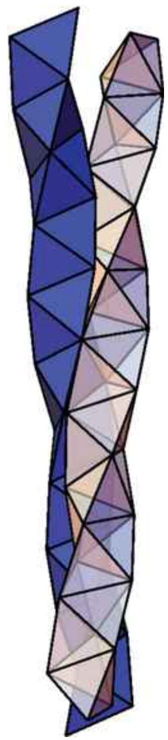


В {3,3,5} пентагеликс - объединение по граням 10 пентагональных бипирамид .

Пентагеликс – объединение двух тетрагеликсов в политопе {3,3,5}

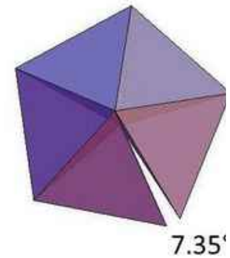
F. Seran, Jun Lu, N.Kotov, K. Sun,X. Mao
Frustrated Self-Assembly of Non-Euclidean Crystals of Nanoparticles //. arXiv:2010.03087v1 [cond-mat.soft] 2020

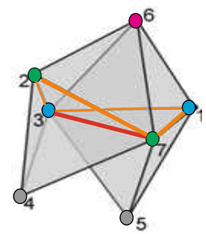


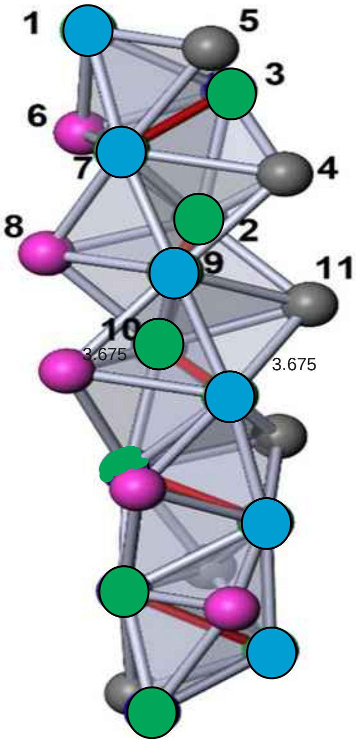


Two tetrahelices fitting perfectly together in S^3 (a stereographic projection).

In 3D Euclidean space two tetrahelices cannot fit side-to-side





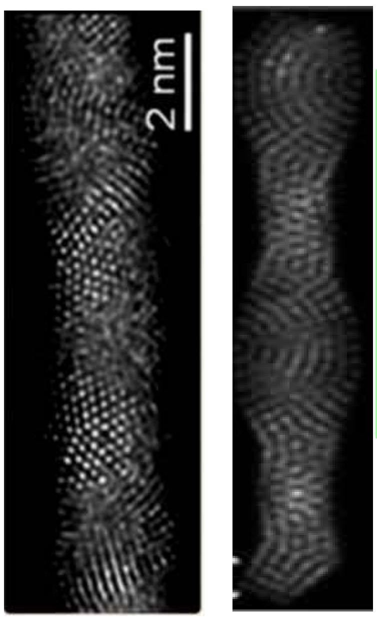


В политопе {3,3,5} синяя, зеленая, серая десятки – один тетрагеликс; синяя, зеленая , розовая – второй тетрагеликс. В E^3 ребер между вершинами серой и розовой десяток нет.

A. Talis, A. Everstov, V. Kraposhin. HELICAL SUBSTRUCTURES OF CLOSE-PACKED METALS DETERMINED BY A UNIVERSAL BUILDING UNIT (TETRABLOCK)// Metal Science and Heat Treatment, 2022,V. 64, N. 3 – 4, 183-188

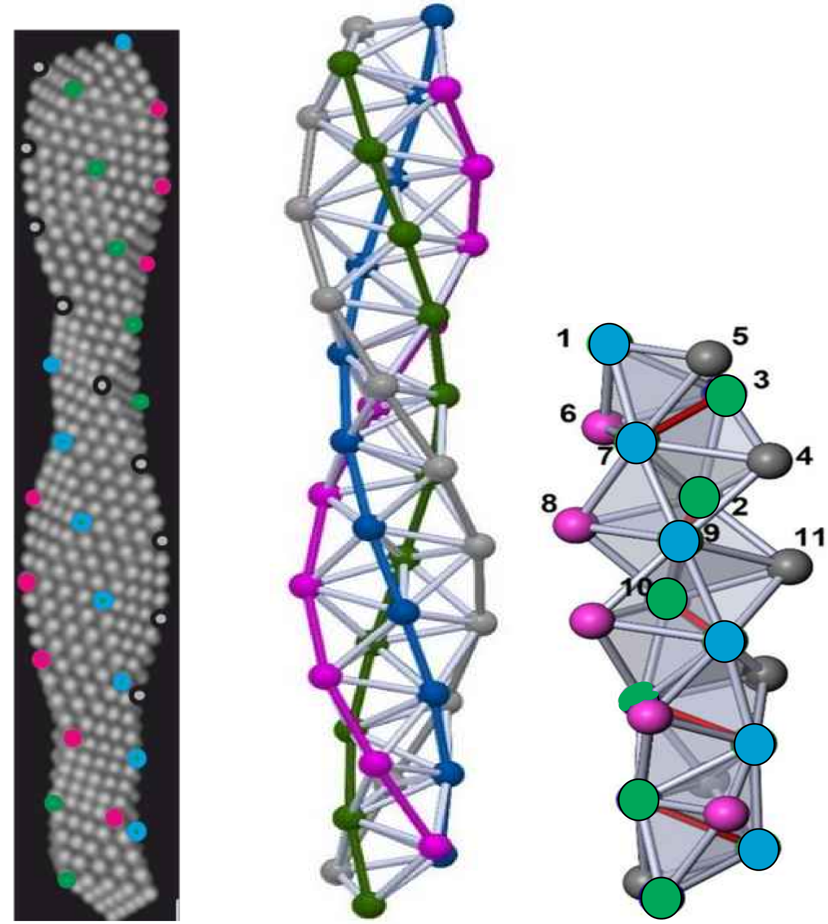
Реализация пентагеликсв в металлической нанопроволоке.

J. Velazquez-Salazar et al. Experimental Evidence of Icosahedral and Decahedral Packing in One-Dimensional Nano structures // AcsNano 2011,   V. 5, №8, 6272–6278.



а

а)Экспериментальное HRTEM-изображение металлической нанопроволоки со структурой объединения двух тетрагеликсов



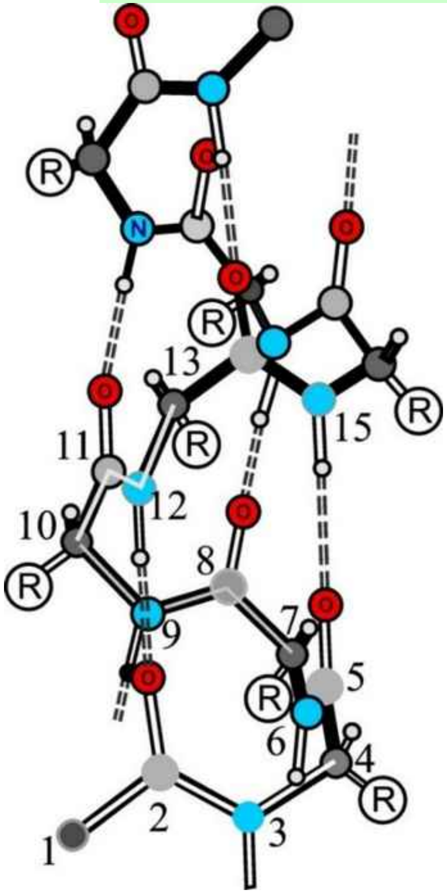
б

в

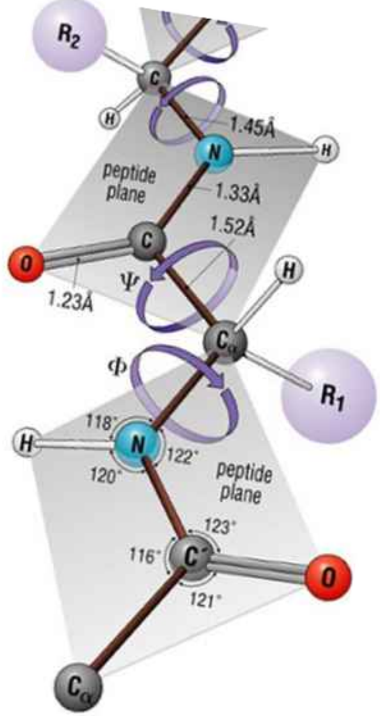
б) Модель объединения двух тетрагеликсов, для объяснения (а). Выделение 4-х спиралей: синей, зеленой, розовой и серой (для контраста серые шары обведены черным) проведено нами. в) Модель пентагеликса , полностью совпадающая с предложенной моделью (б).

A. Talis, V. Kraposhin.// Metal Science and Heat Treatment, 2024 V. 66, N. 5 – 6, 312-316.

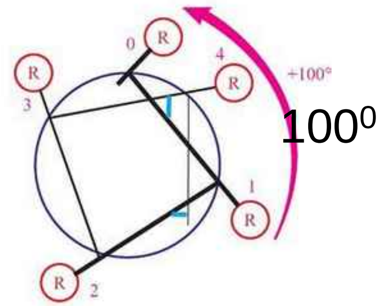
The right-handed α-helix.



Hydrogen bonds in the main chain are shown as light-blue lines.

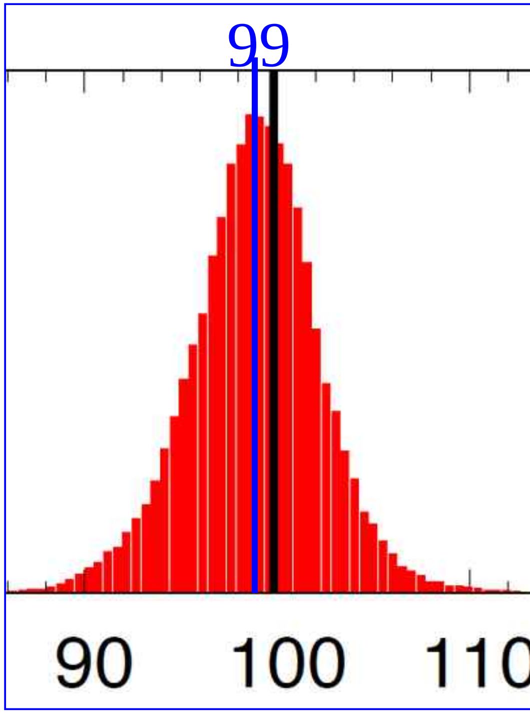


Mean unit twist for the 1131 α-helices ranges between 94° and 103°, with an average value of (99±1)°.



$360^0/(\mathbf{18/5})=100^0$

Axial view of one turn of this α-helix.



Distribution of α-helix characteristics the rotation angle

T.Škrbić et al. Building blocks of protein structures – Physics meets Biology. bioRxiv 2021 preprint doi: https://doi.org/10.1101/2020.11.10.375105;

A. Finkelstein, O. Ptitsyn. Protein Physics. Second, Updated and Extended Edition. 2016, Elsevier Academic Press

Оси α–спиралей в суперспиралях

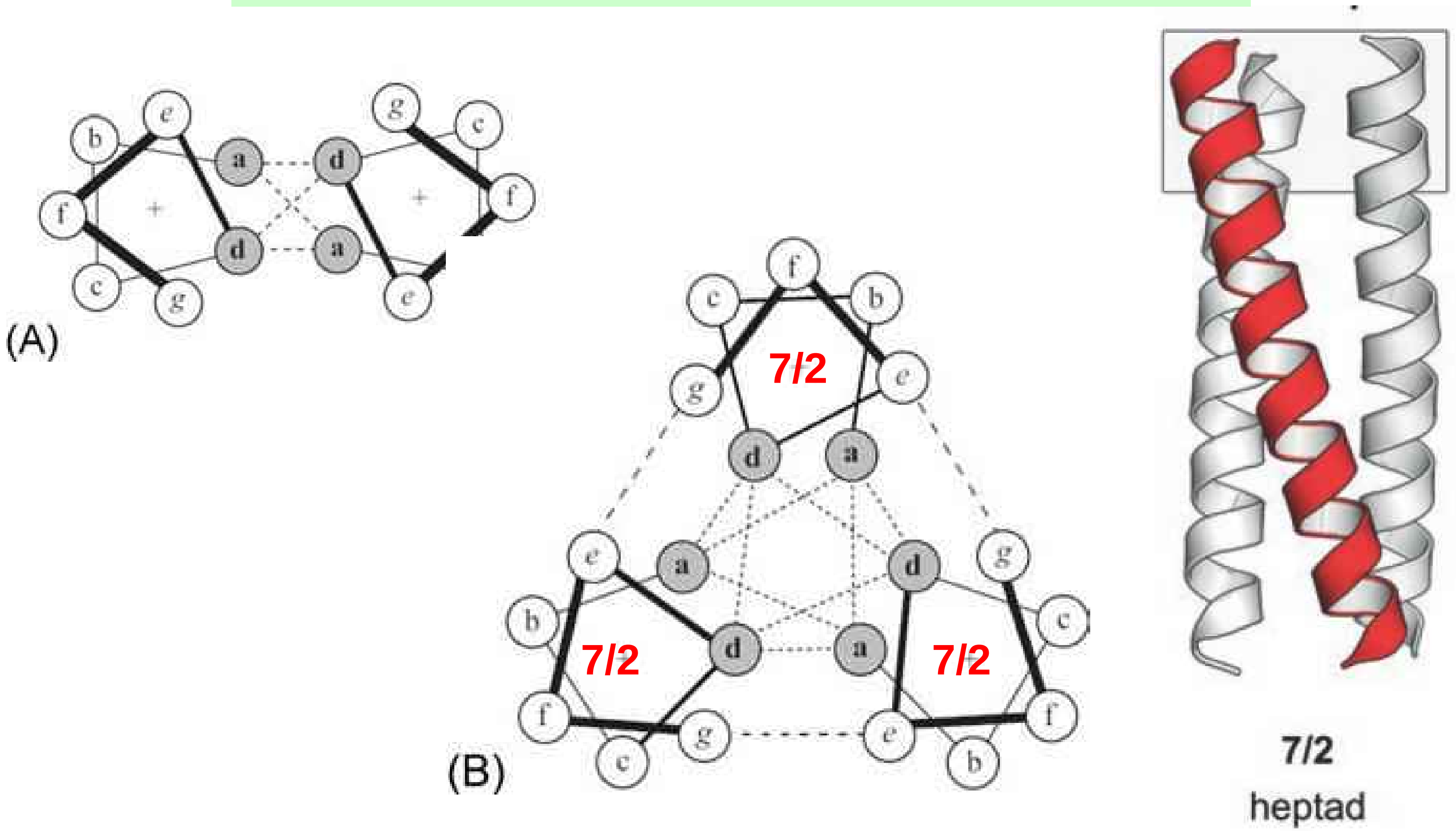
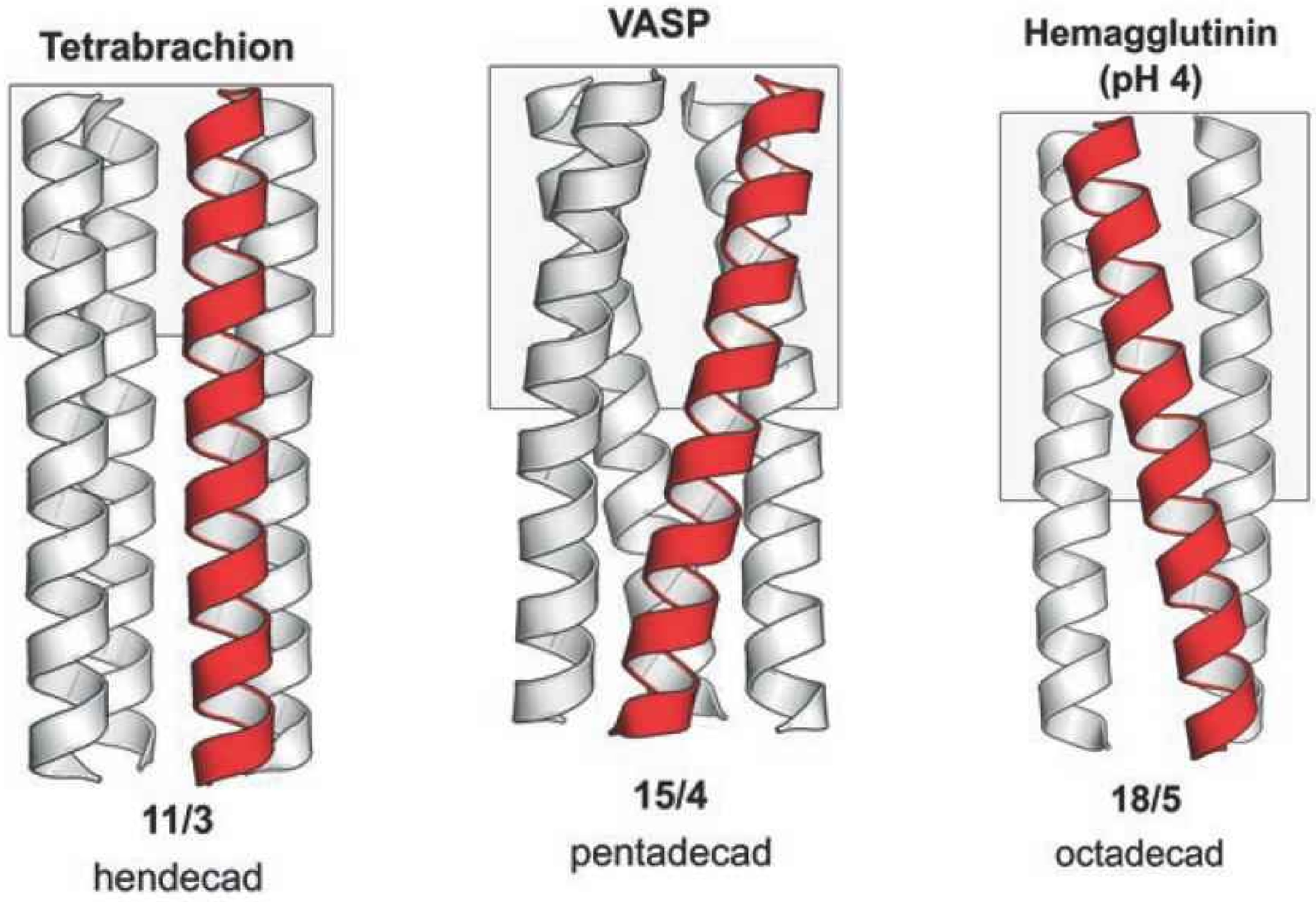
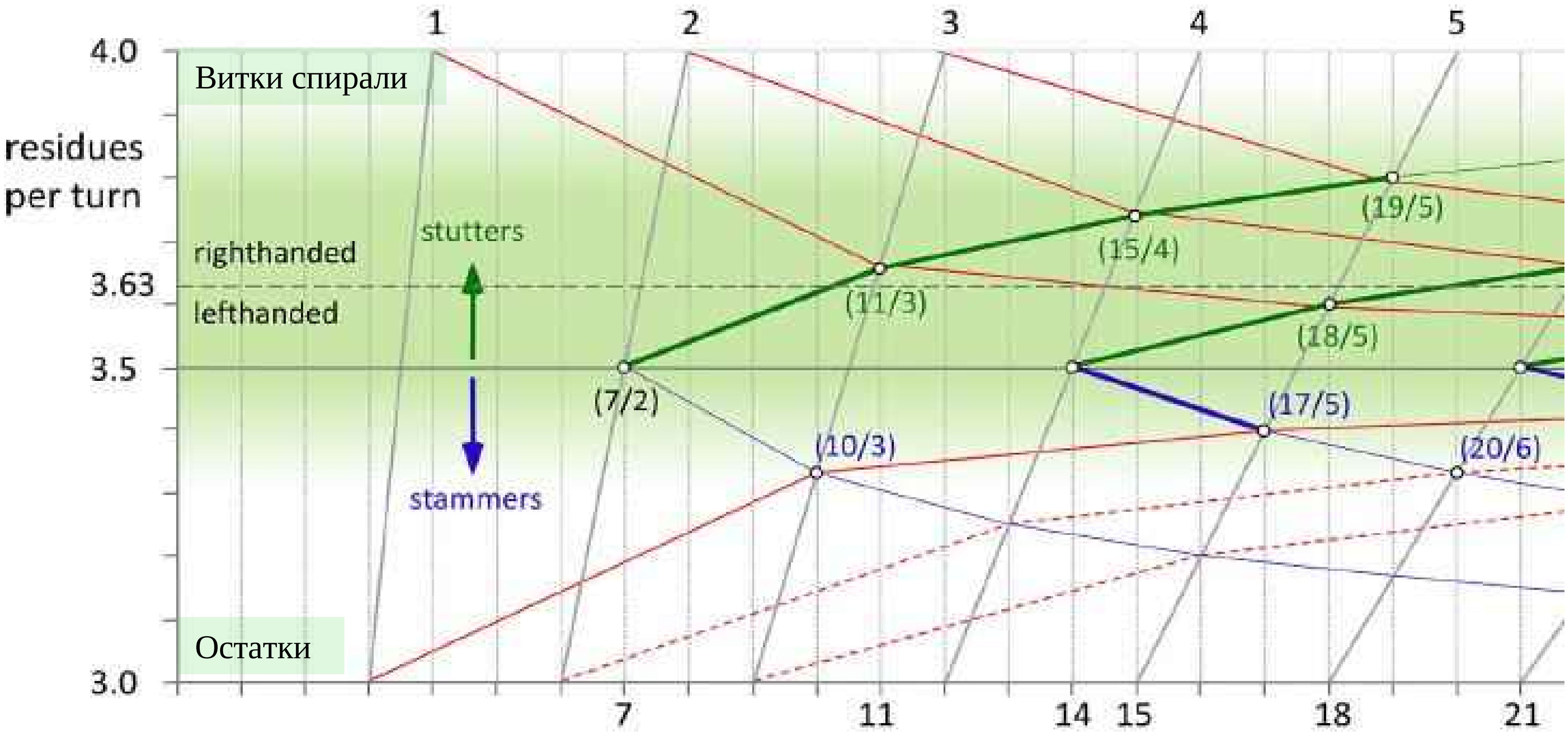


FIG. 11.3 Interactions of α-helices in double (A) and triple (B) superhelices (as viewed along the helix axis). In the double helix, only residues a and d are in immediate contact with another helix, while in the triple helix e and g residues are also involved in contacts (although to a lesser extent).
(Adapted from Creighton, T.E., 1993. Proteins: Structures and Molecular Properties, second ed. W.H. Freeman & Co., New York (Chapter 5).)

Оси α – спиралей в суперспиралях



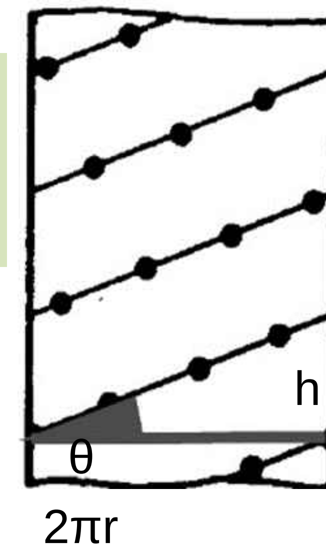
Hartmann M. D. et al. α/β coiled coils // eLife. **2016.** V.5. Art.e11861.



As an ideal, straight a-helix has a periodicity of about **3.63** residues per turn. The best understood discontinuities are insertions of 3 or 4 residues, which are close to the periodicity of **3.63** of a-helices (Lupas and Gruber, 2005).

“Фактически, спустя почти пятьдесят лет после статьи Полинга об α-спирали, мы все еще не знаем, почему α-спираль является почти универсальной в качестве спиральной структуры в белках Sadoc, J. F. & Rivier, N. *Eur. Phys. J.* 1999. **B12**, 309-318.

Какая конструкция определяет идеальную прямую-спираль с винтовой осью 3.63 и при каком шаговом угле Θ ?



Существует ли единое соотношение, связывающее ось 3.63 с осями а – спирали 7/2, 11/3, 15/4 , 18/5 в суперспиралях?

Плотная упаковка аминокислот аппроксимируется в полиэдральном представлении упаковкой тетраэдров, поэтому решение задачи было начато с поиска высокосимметричных плотноупакованных спиралей, определяемых подструктурами политопа {3,3,5}.

14

J.F. Sadoc and N. Rivier **Boerdijk-Coxeter helix and biological helices //** Eur. Phys. J. B 1999,12, 309 - 318

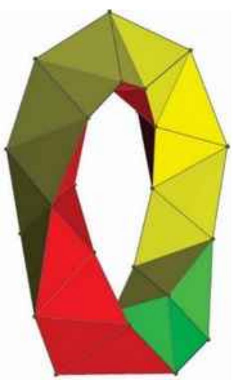


Fig. 2. A flat strip leading to the Boerdijk-Coxeter helix by identication of the two long sides of the rectangle.

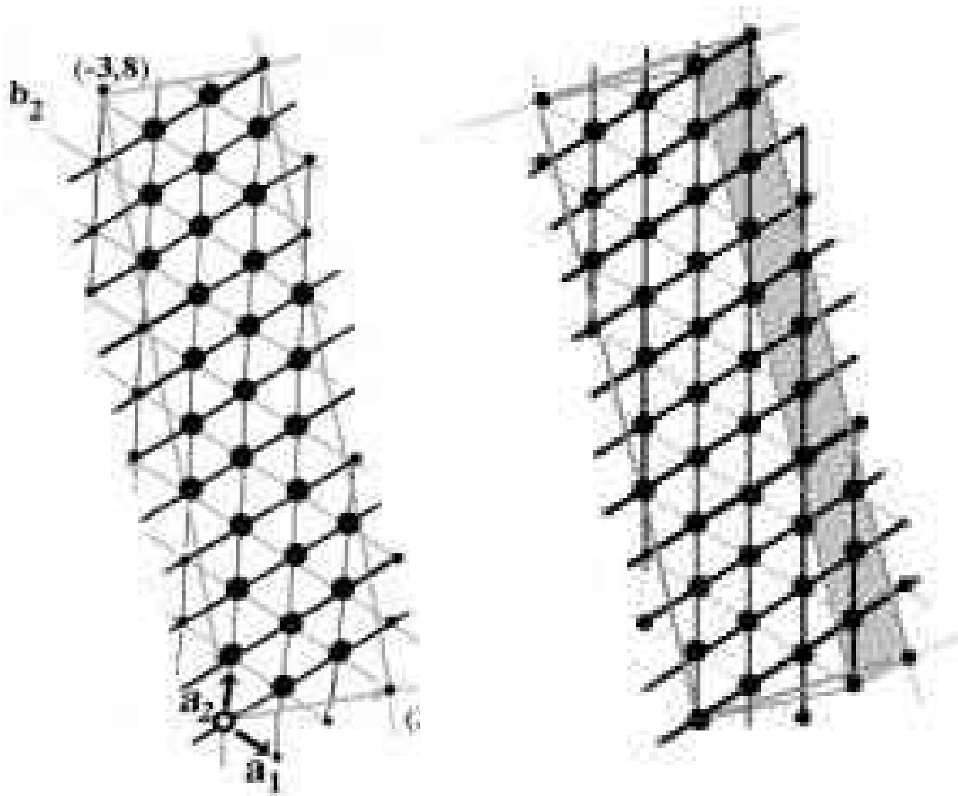


Fig. 3. The strip for an a-helix, by identication of the longer sides. The resulting cylinder is obtained by disclinating the cylinder supporting the B-C helix. It has one additional row of triangles (shaded).

The new parallelogram is defined by vectors $\mathbf{b}_1$ and $\mathbf{b}_2$: $\mathbf{b}_1 = 4\mathbf{a}_1+3\,\mathbf{a}_2$ and $\mathbf{b}_2 = -3\mathbf{a}_1+8\mathbf{a}_2$ (unchanged). The type-1 helix running along edges parallel to $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$ consists of **41** edges; it turns **11** times around one axis of the torus and once around the other, leading to a number of edges per turns **φ= 41/11=3,(72)**

Угол вращения спирали 96.6^0

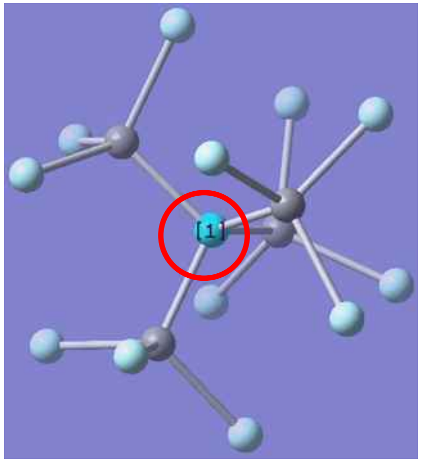
M. Samoylovich and A. Talis. Symmetry of helicoidal biopolymers in the frameworks of algebraic geometry: a-helix and DNA structures // Acta Cryst. (2014). A70, 186–198

These points represent cluster vertices, whose helicoid joining determines the topology and structural parameters of linear biopolymers. In particular, structural parameters of the α-helix are determined by the seven-vertex face-to-face joining of tetrahedral with the E_8 non-integer helical axis 40/11=3.63 having a rotation angle of 99^0, and the development of its surface coincides with the cylindrical development of the α-helix.

$$\mathbf{(30/11)^3 = (40/11)^4 = (-40/9)^4 = 10/1}$$

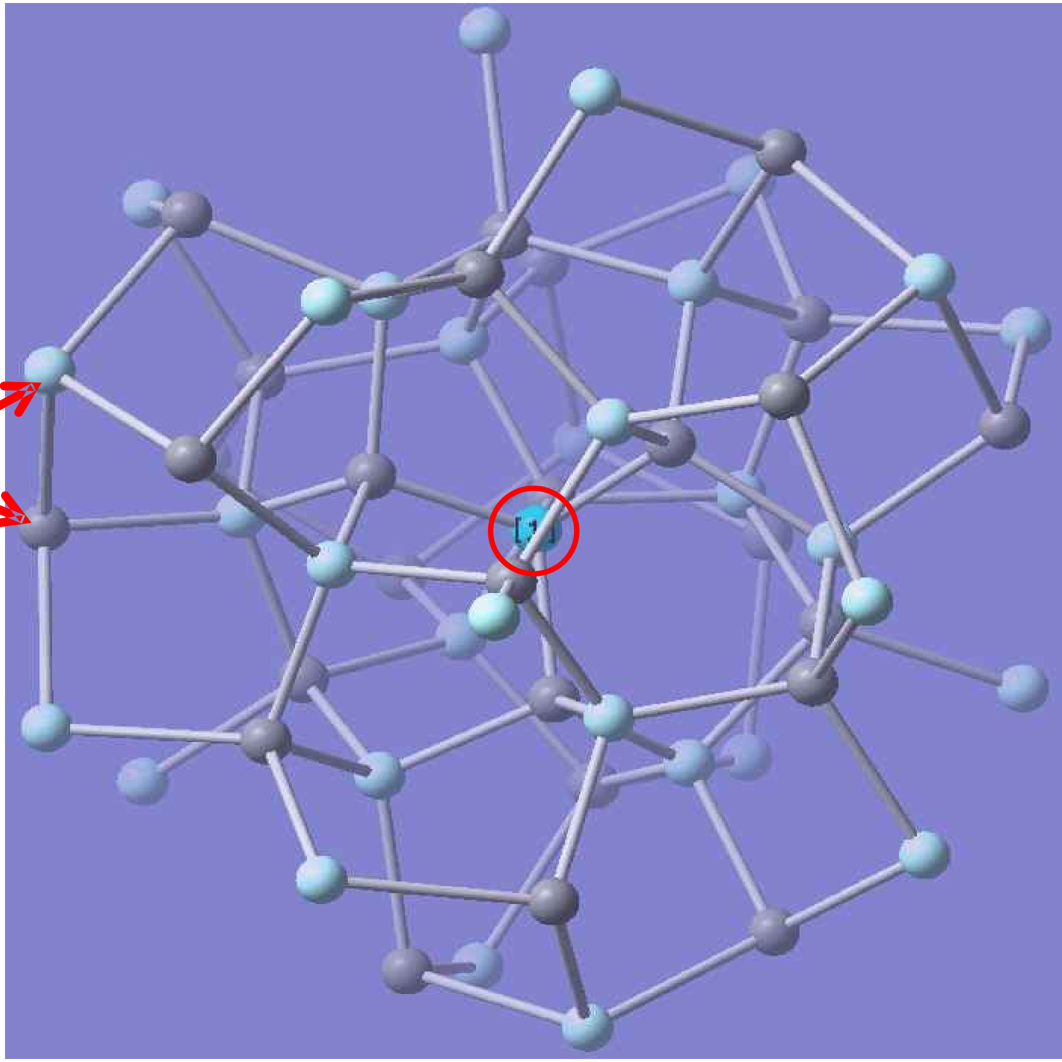
Политоп {240} –алмазоподобное объединение 2 политопов {3,3,5}

16 Отображение политопа {240} из сферы S^3 в 3-мерное евклидово пространство является набором тетракоординированных вершин и ребер.



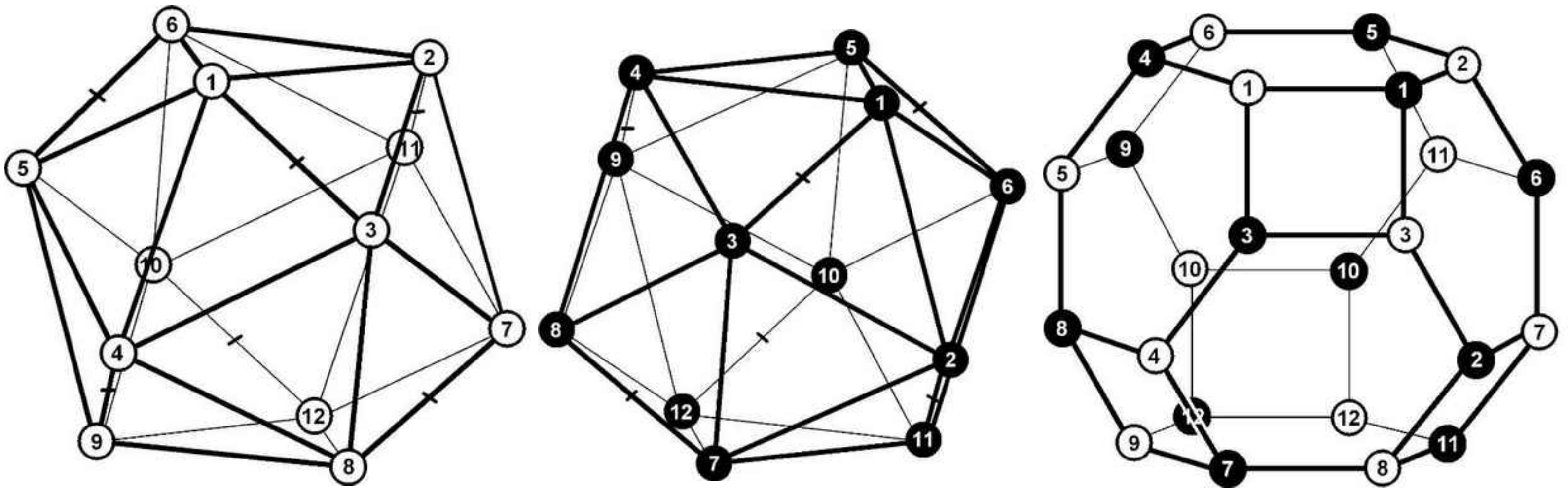
Ближайшие **58** соседей вершины **1**

Отображения вершин двух политопов {120}



Ближайшие **16** соседей вершины **1**

M. Samoylovich, A. Talis // Acta Cryst. (2014). A70, 186–198

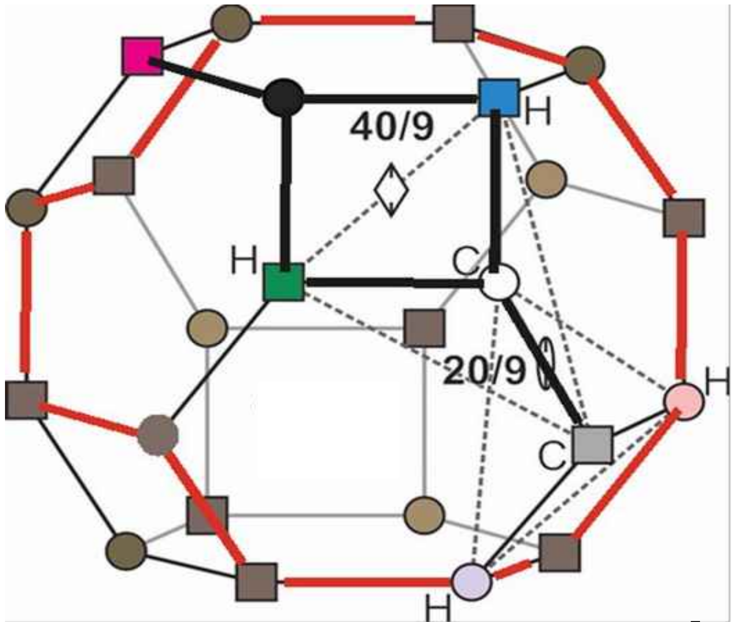


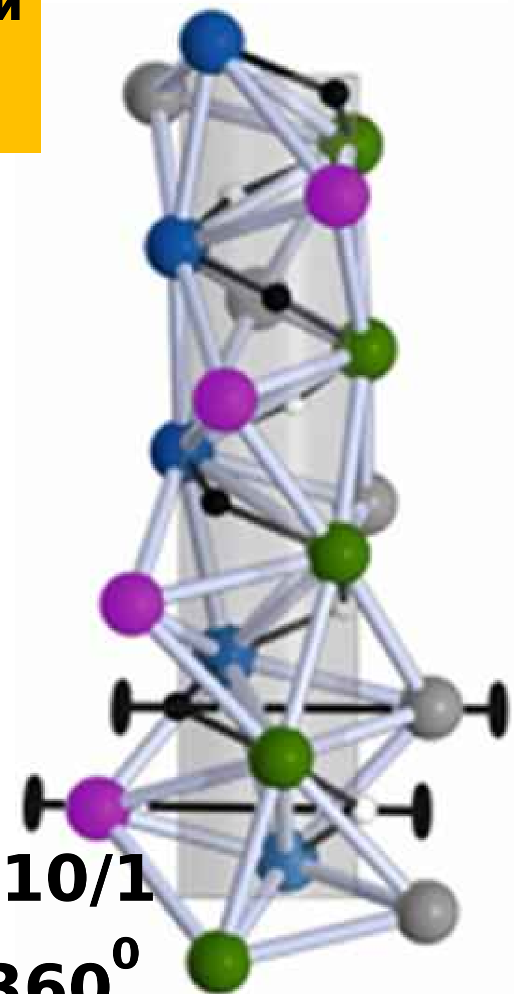
Для “алмазоподобного политопа” {240} построено расслоение Хопфа:

$$\{240\} = \text{база}\ ([4^6, 6^8])\cdot\text{слой}\{10\},$$

где в слое 10 вершин, $[4^6, 6^8]$ – символ 24-вершинного усеченного октаэдра, имеющего 6 квадратных и 8 гексагональных граней.

Расслоение Хопфа и тетракоординированный пентагеликс в политопе {240}



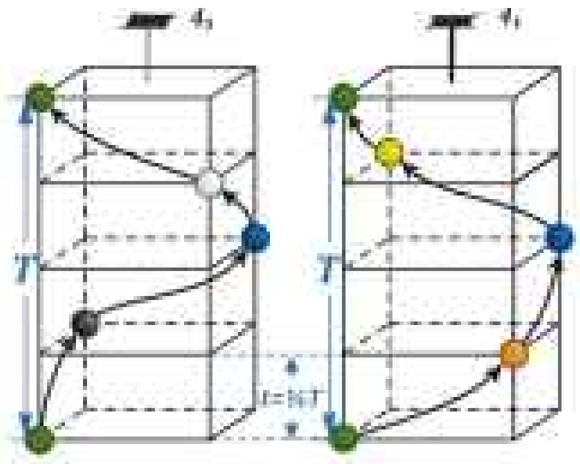


$$(30/11)^3 = (40/11)^4 = (-40/9)^4 = (-20/9)^2 = 10/1$$

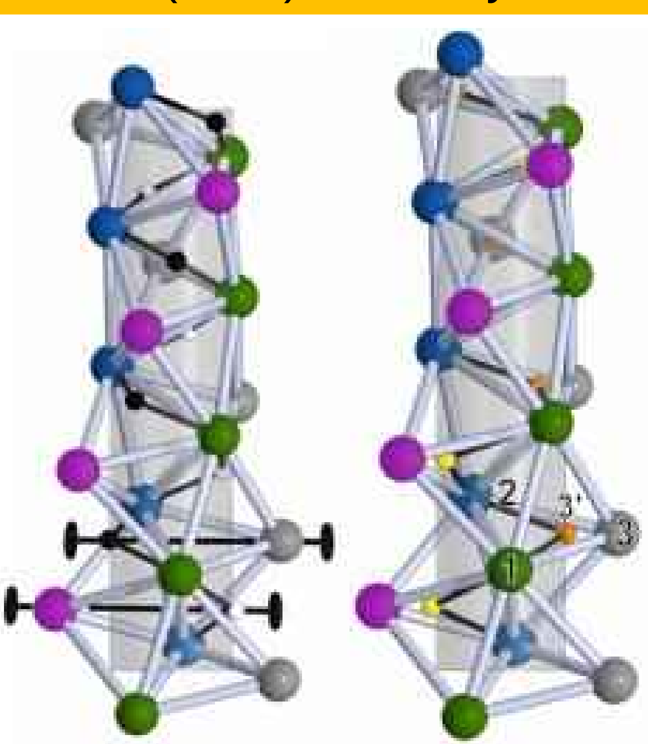
$$396^0 = 396^0 = -324^0 = -324^0 = 36^0 + 360^0$$

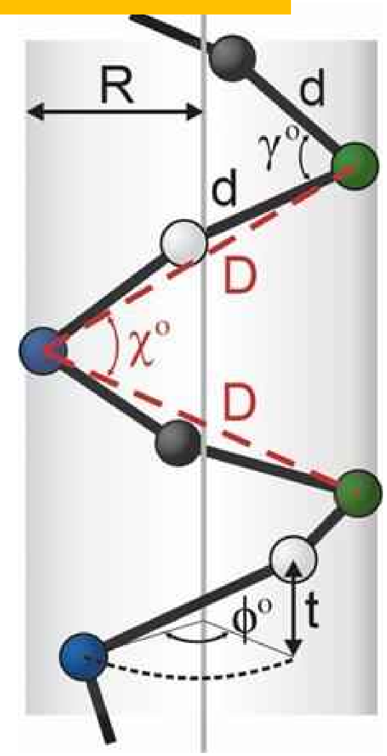
Многоугольник Петри усеченного октаэдра (красная цепь из ребер) разбивает его 24 вершины на 6+12+6. В расслоении Хопфа тетракоординированному пентагеликсу соотвествует квадрат с двумя висящими ребрами. Цвета этих 6 вершин – цвета десяток.

Talis A. & Kucherinenko Ya. (2023). Acta Cryst. B79, P. 537—546.



а) Спираль с винтовой осью 4_1 (4_3) – объединение двух конгруэнтных спиралей 2_1 одинаковой (противоположной) хиральности.





б) Синие и зеленые шары образуют спираль {20/9}. Белые и черные шары в центрах тетраэдрических пустот образуют спираль {20/9}'. Синие, белые, зеленые и черные шары образуют спираль 40/9, показанную черной линией

в)желтые (оранжевые) шары расположены на биссектрисах треугольников из синих, зеленых и лиловых (серых) вершин.

г)Спираль, соответствующая спирали 40/9 (рис.3б), с углом вращения и сдвигом t вдоль оси цилиндра радиуса R. Углы между ребрами d спирали равны . Гипотетические ребра (красный пунктир) между четными (нечетными) вершинами спирали равны D, углы между ними равны χ

Talis A. & Kucherinenko Ya. (2023). Acta Cryst. B79, P. 537—546.

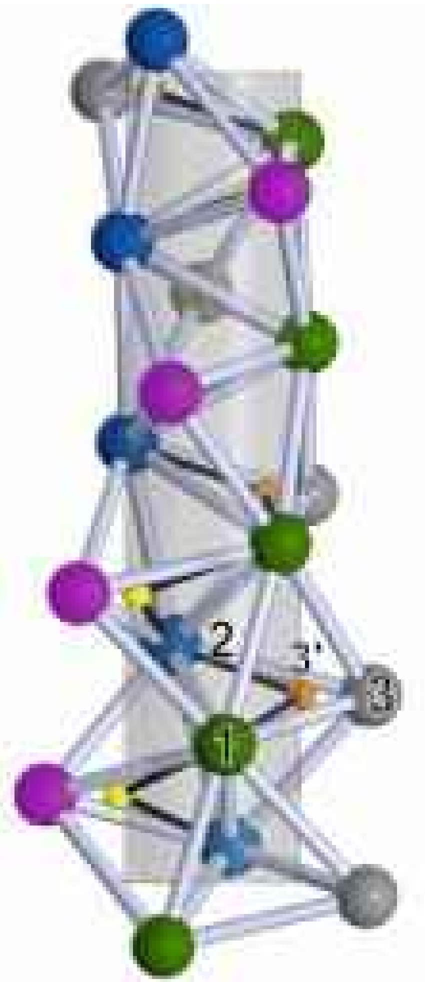
Helix	ϕ	R	t	d
20/9 in {3,3,5}	162°	15.859°	18°	36°
	$\frac{-\sqrt{\tau+2}}{2}$	$\frac{\tau}{\sqrt{\tau+2}}$ *	$\frac{\sqrt{\tau+2}}{2}$	$\frac{\tau}{2}$
$(20/9)_a$	160.812°	R	$2\times0.537R$	$2.245R$
	$-\frac{17}{18}$	R	$\frac{2\sqrt{210}}{27}R$	$\frac{25\sqrt{3}}{27}R$
$(20/9)_1$	162°	R	$2\times0.542R$	$2.253R$
$(20/9)_2$	162°	R	$2\times0.669R$	$2.386R$
40/9 in {240}	81°	15.859°	9°	22.239°
	$\frac{\tau-\sqrt{3-\tau}}{\sqrt{8}}$	$\frac{\tau}{\sqrt{\tau+2}}$ *	$\frac{\tau}{2}$ * *	$\frac{\tau^2}{\sqrt{8}}$
$(40/9)_a$	80.406°	R	$0.537R$	$1.398R$
	$\frac{1}{6}$	R	$\frac{\sqrt{210}}{27}R$	$\frac{5\sqrt{57}}{27}R$
$(40/9)_1$	81°	R	$0.542R$	$1.407R$
$(40/9)_2$	81°	R	$0.669R$	$1.461R$
40/11 in S^3	99°	15.859°	9°	25.544°
	$-\frac{\tau-\sqrt{3-\tau}}{\sqrt{8}}$	$\frac{\tau}{\sqrt{\tau+2}}$ *	$\frac{\tau}{2}$ * *	$\frac{3}{4}\frac{\tau\sqrt{2}}{\sqrt{\tau+2}}$
$(40/11)_a$	99.594°	R	$0.537R$	$1.619R$
	$-\frac{1}{6}$	R	$\frac{\sqrt{210}}{27}R$	$\frac{3\sqrt{39}}{27}R$
$(40/11)_1$	99°	R	$0.542R$	$1.614R$
$(40/11)_2$	99°	R	$0.669R$	$1.661R$

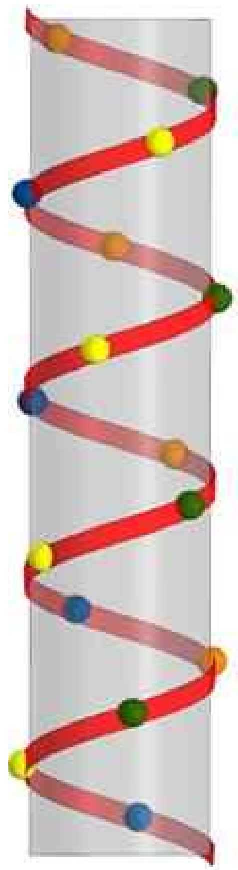
Talis A. & Kucherinenko Ya. (2023). Acta Cryst. B79, P. 537—546.

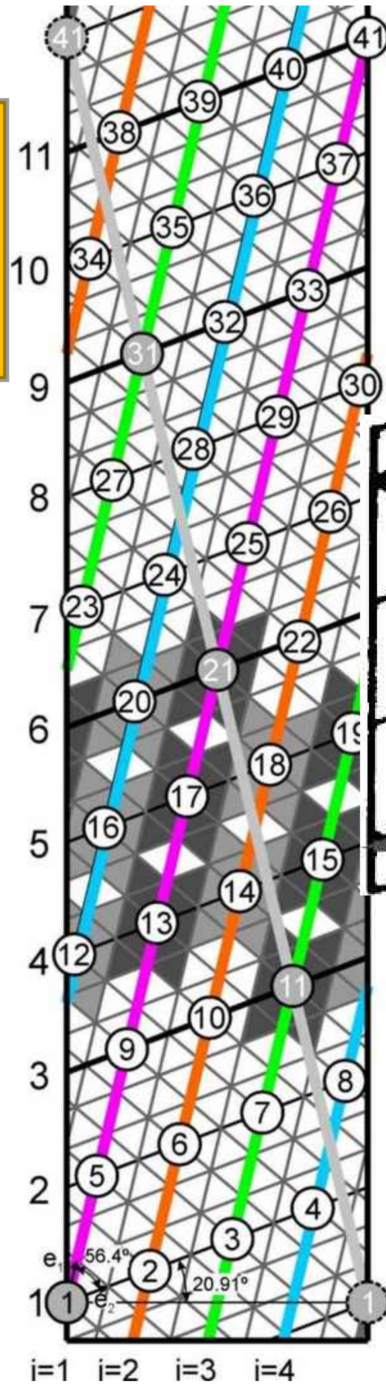
Helix	γ°	D	χ°	θ°
20/9 in {3,3,5}	63.435°	36°	180°	21.362°
	$\frac{\sqrt{5}}{5}$	$\frac{\tau}{2}$	-1	$\frac{\tau+\sqrt{\tau+2}}{9}$
$(20/9)_{hr}$	60°	$2.245R$	168.956°	20.930°
	60°	$\frac{35\sqrt{3}}{27}R$	$-\frac{53}{54}$	$\frac{\sqrt{210}}{270}$
$(20/9)_1$	60°	$2.253R$	170.274°	20.963°
$(20/9)_2$	70.285°	$2.747R$	172.026°	25.327°
40/9 in {240}	109.471°	36°	63.435°	21.362°
	$-\frac{1}{3}$	$\frac{\tau}{2}$	$\frac{\sqrt{5}}{5}$	$\frac{\tau+\sqrt{\tau+2}}{9}$
$(40/9)_{hr}$	106.826°	$2.245R$	60°	20.930°
	$-\frac{11}{38}$	$\frac{35\sqrt{3}}{27}R$	60°	$\frac{\sqrt{210}}{270}$
$(40/9)_1$	106.343°	$2.253R$	60°	20.963°
$(40/9)_2$	109.471°	$2.386R$	70.285°	25.327°
40/11 in S^3	91.553°	36°	63.435°	17.745°
	$\frac{8\sqrt{5}-19}{41}$	$\frac{\tau}{2}$	$\frac{\sqrt{5}}{5}$	$\frac{\tau+\sqrt{\tau+2}}{11}$
$(40/11)_{hr}$	87.796°	$2.245R$	60°	17.159°
	$\frac{1}{26}$	$\frac{35\sqrt{3}}{27}R$	60°	$\frac{\sqrt{210}}{27\tau-6}$
$(40/11)_1$	88.495°	$2.253R$	60°	17.404°
$(40/11)_2$	91.782°	$2.386R$	70.285°	21.168°

22

Спираль **{40/11}** с шаговым углом **21.168 ⁰** , **-** искомый прототип **одиночной прямой – спирали.**

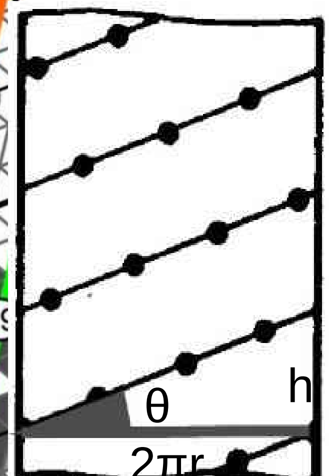






Соотношение i i+4 для водородной связи -спирали определяется соотношением $(40/11)^4 = 10_1$

$99^0 \;\; 4 = 36^0 + 360^0 = 396^0$



Спиральное вращение:

$360^0 : 40/11 = 99$

$360^0 : 18/5 = 100$

Отношение шага спирали к радиусу: 2.43 и 2.35,

расстояние C -C : 3.81 Å и 3.80 Å,

шаговый угол Θ : 21.168 и 20.5

Щульц Г., Ширмер Р. Принципы структурной организации белков. М. 1982.

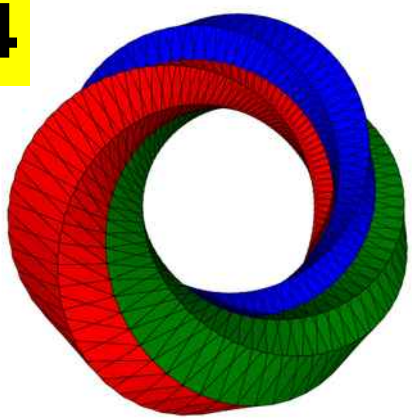
23

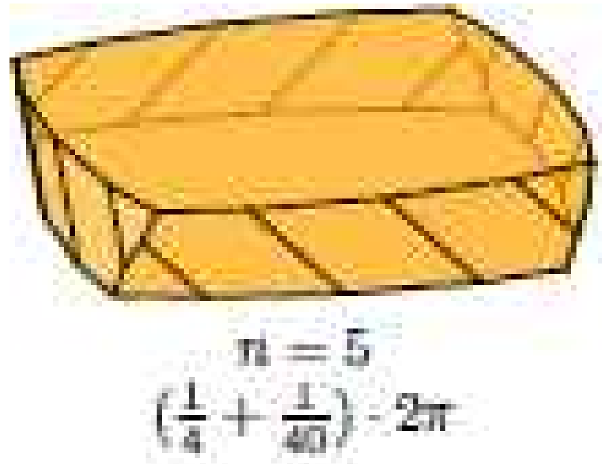
Du Val P. (1964) Homographies Quaternions and Rotations

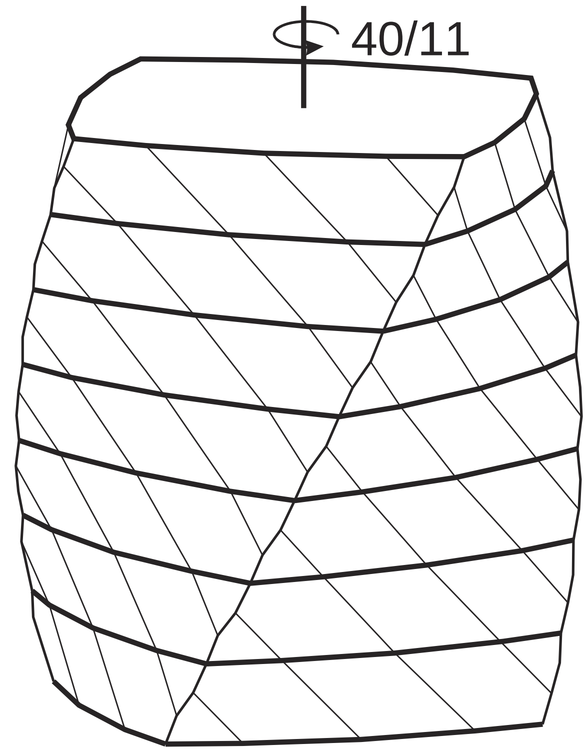
1.	$(\mathbf{C}_{2mr}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{C}_{2nr}/\mathbf{C}_{2n})_s$	$2mnr$	17.	$(\mathbf{D}_{2m}/\mathbf{D}_m; \mathbf{O}/\mathbf{T})$	$96m$
2.	$(\mathbf{C}_{2m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{D}_n/\mathbf{D}_n)$	$8mn$	18.	$(\mathbf{D}_{6m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{O}/\mathbf{V})$	$48m$
3.	$(\mathbf{C}_{4m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{D}_n/\mathbf{C}_{2n})$	$4mn$	19.	$(\mathbf{D}_m/\mathbf{D}_m; \mathbf{I}/\mathbf{I})$	$240m$
4.	$(\mathbf{C}_{4m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{D}_{2n}/\mathbf{D}_n)$	$8mn$	20.	$(\mathbf{T}/\mathbf{T}; \mathbf{T}/\mathbf{T})$	288
5.	$(\mathbf{C}_{2m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{T}/\mathbf{T})$	$24m$	21.	$(\mathbf{T}/\mathbf{C}_2; \mathbf{T}/\mathbf{C}_2)$	24
6.	$(\mathbf{C}_{6m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{T}/\mathbf{V})$	$24m$	22.	$(\mathbf{T}/\mathbf{V}; \mathbf{T}/\mathbf{V})$	96
7.	$(\mathbf{C}_{2m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{O}/\mathbf{O})$	$48m$	23.	$(\mathbf{T}/\mathbf{T}; \mathbf{O}/\mathbf{O})$	576
8.	$(\mathbf{C}_{4m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{O}/\mathbf{T})$	$48m$	24.	$(\mathbf{T}/\mathbf{T}; \mathbf{I}/\mathbf{I})$	1440
9.	$(\mathbf{C}_{2m}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{I}/\mathbf{I})$	$120m$	25.	$(\mathbf{O}/\mathbf{O}; \mathbf{O}/\mathbf{O})$	1152
10.	$(\mathbf{D}_m/\mathbf{D}_m; \mathbf{D}_n/\mathbf{D}_n)$	$8mn$	26.	$(\mathbf{O}/\mathbf{C}_2; \mathbf{O}/\mathbf{C}_2)$	48
11.	$(\mathbf{D}_{mr}/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{D}_{nr}/\mathbf{C}_{2n})_s$	$4mnr$	27.	$(\mathbf{O}/\mathbf{V}; \mathbf{O}/\mathbf{V})$	192
12.	$(\mathbf{D}_{2m}/\mathbf{D}_m; \mathbf{D}_{2n}/\mathbf{D}_n)$	$16mn$	28.	$(\mathbf{O}/\mathbf{T}; \mathbf{O}/\mathbf{T})$	576
13.	$\mathbf{D}_{2m}/\mathbf{D}_m; \mathbf{D}_n/\mathbf{C}_{2n})$	$8mn$	29.	$(\mathbf{O}/\mathbf{O}; \mathbf{I}/\mathbf{I})$	2880
14.	$(\mathbf{D}_m/\mathbf{D}_m; \mathbf{T}/\mathbf{T})$	$48m$	30.	$(\mathbf{I}/\mathbf{I}; \mathbf{I}/\mathbf{I})$	7200
15.	$(\mathbf{D}_m/\mathbf{D}_m; \mathbf{O}/\mathbf{O})$	$96m$	31.	$(\mathbf{I}/\mathbf{C}_2; \mathbf{I}/\mathbf{C}_2)$	120
16.	$(\mathbf{D}_m/\mathbf{C}_{2m}; \mathbf{O}/\mathbf{T})$	$48m$	32.	$(\mathbf{I}^\dagger/\mathbf{C}_2; \mathbf{I}/\mathbf{C}_2)^\dagger$	120

Rastanawi L & Rote G. On 4-Dimensional Point Groups and on Realization Spaces of Polytopes // arXiV: 2205.04965V1 [math.MG], 2022

Rastanawi L & Rote G. On 4-Dimensional Point Groups and on Realization Spaces of Polytopes // arXiV: 2205.04965V1 [math.MG], 2022







Каждый tube в политопе со стартовой группой **±1/2[O×C_{2n}]** и выборе оси 4 в группе O определяет спираль из призматических ячеек с углом вращения

$$2\pi\cdot m/L=2\pi\cdot(1/4+\text{НОД}(n-2,\ 4)/8n).$$

Т.о, в политопах этого семейства допустима серия винтовых осей, $(L/m)_n$:

$$(L/m)_n=\{4/(1+\text{НОД}\ (n-2,4)/2n))|n=14,\ 18,\ \mathit{5,\ 22,\ 12,\ 7}\}$$

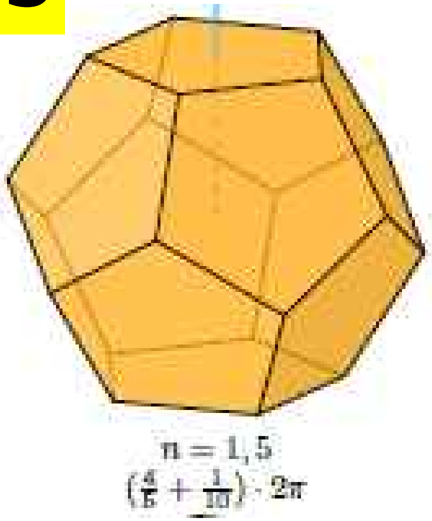
$$(L/m)_n=\{\mathbf{7/2,\ 18/5,\ 40/11,\ 11/3},\ 48/13,\ 56/15\}$$

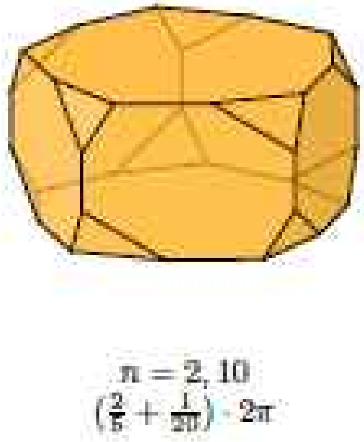
$$(L/m)_{n=5}=\{4/(1+\text{НОД}(3,4)/2\cdot 5))=4/(1+1/10)=4/(11/10)=\mathbf{40/11}$$

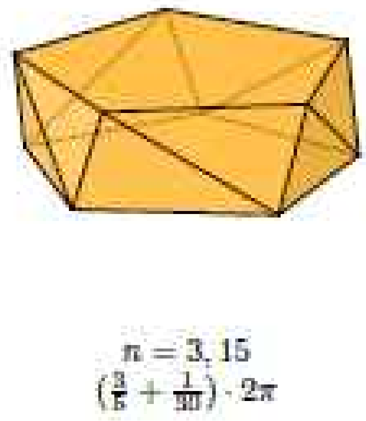
$$(L/m)_{n=14}=\{4/(1+\text{НОД}(12,4)/2\cdot 14))=4/(1+4/28)=4/(1+1/7)=4/(8/7)=7/2$$

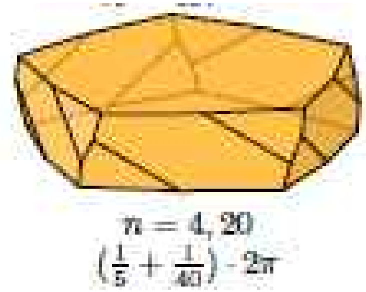
Rastanawi L & Rote G. On 4-Dimensional Point Groups and on Realization Spaces of Polytopes // arXiV: 2205.04965V1 [math.MG], 2022

При выборе в группе I оси 5 в политопе $\pm[I \times C_n]$ существуют оси



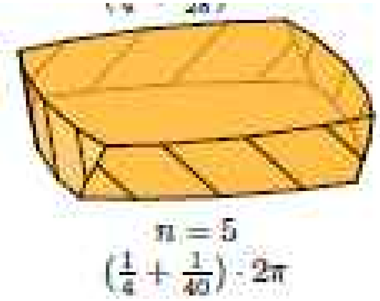


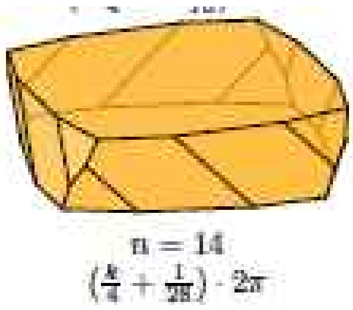


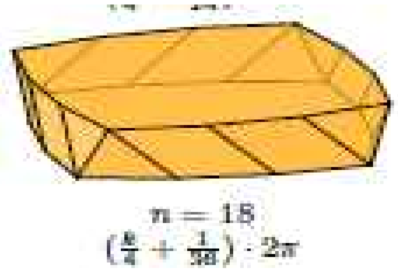


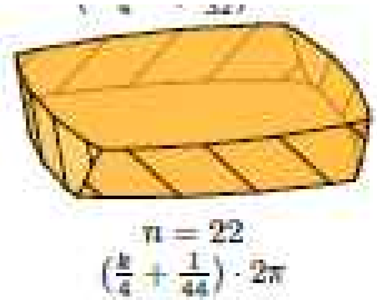
10/1 **20/9** **30/11** **40/9**

При выборе в группе O оси 4 в политопе $\pm 1/2[O \times C_{2n}]$ существуют оси





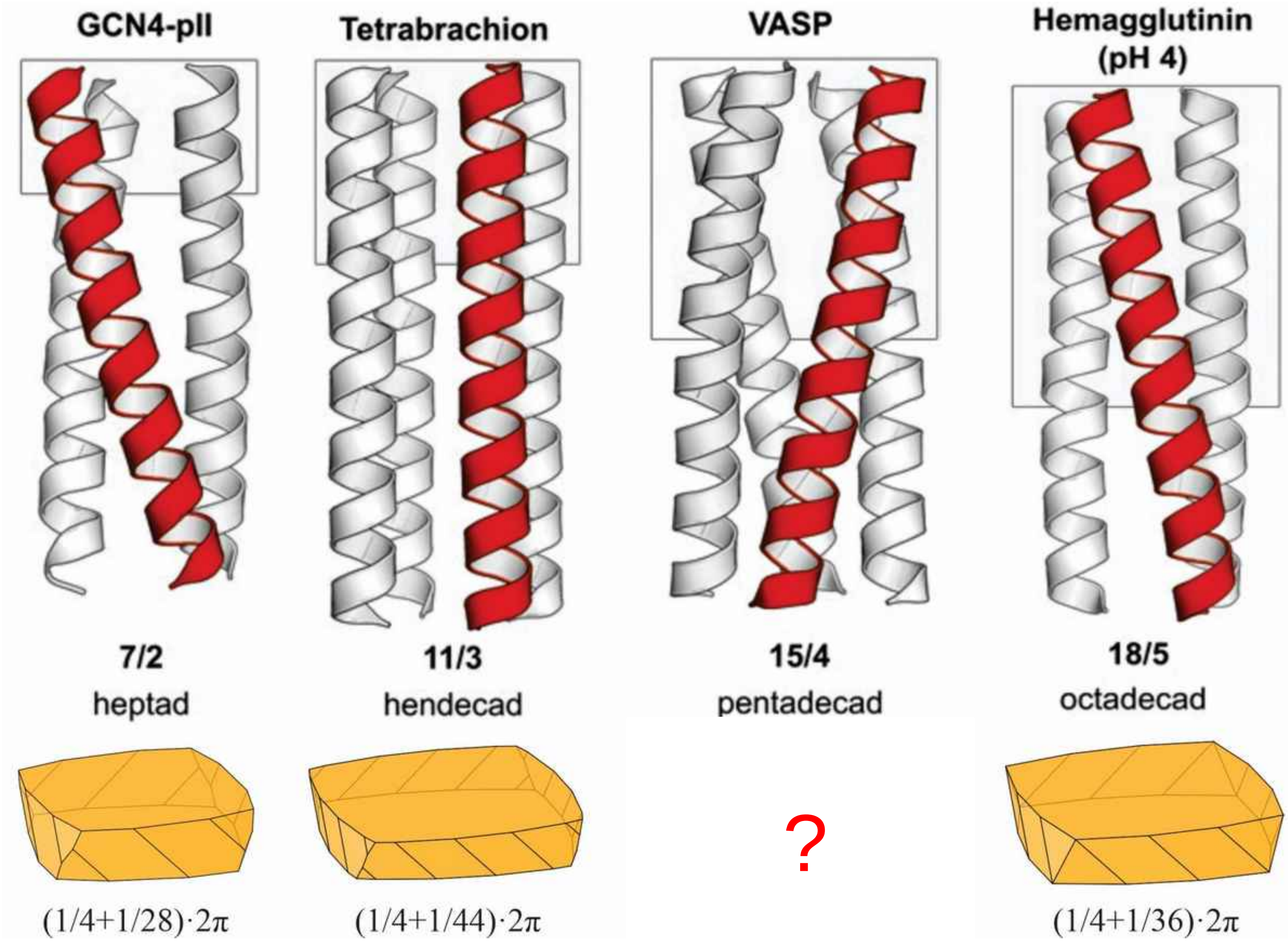




40/11 **7/2** **18/5** **11/3**

26

Оси α – спиралей в суперспиралях определяются осями семейства политопов $\pm 1/2[O \times C_{2n}]$ при оси C_4 из группы O и n=14, 22, 18.



Конструкция Госсета – разбиение политопа {3,3,5} на 24 центрированных икосаэдра и 24 тетраэдрических звезды.

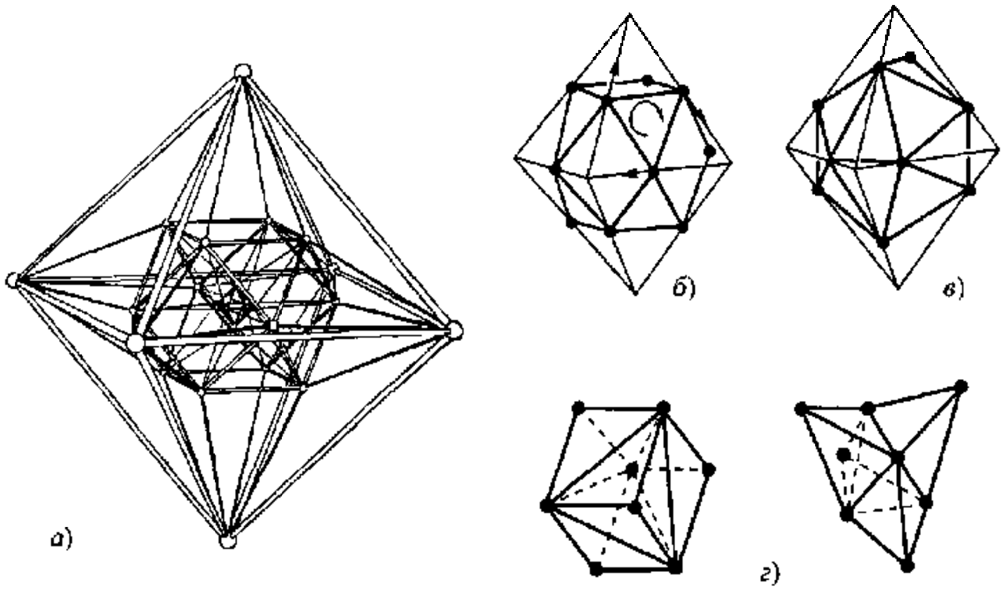


Рис. 20. Конструкция Госсета. *а*) Проекция политопа {3, 4, 3} в E^3 [47]. *б*) Центры ребер октаэдра образуют кубооктаэдр. Показанные стрелками сдвиги вершин кубооктаэдра вдоль ребер октаэдра обеспечивают вращение треугольной грани кубооктаэдра по часовой стрелке. *в*) Икосаэдр, в который трансформируется кубооктаэдр (*б*) при синхронном вращении его четырех треугольных граней. *г*) Трансформация куба в объединение 5 тетраэдров — центральный тетраэдр с тетраэдрами на каждой грани [19]

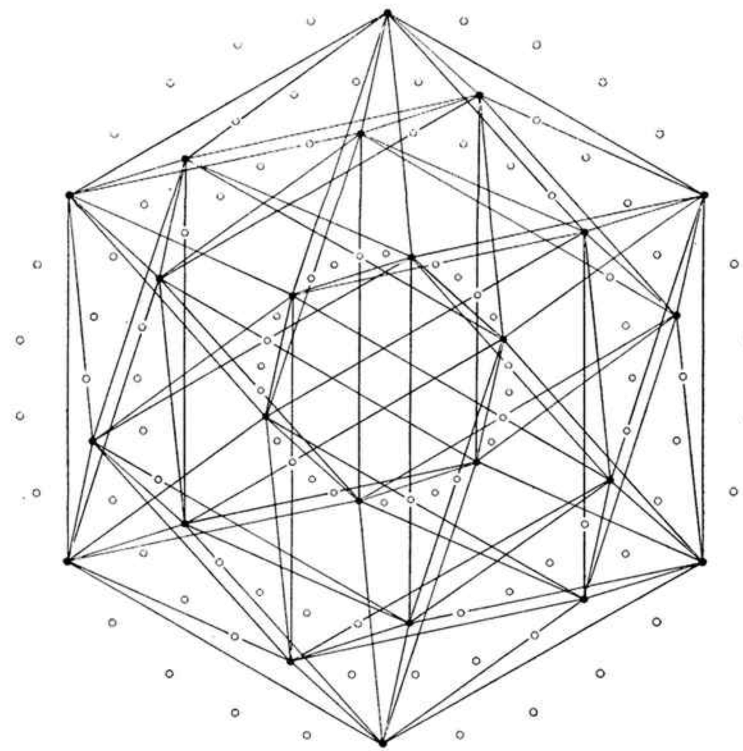


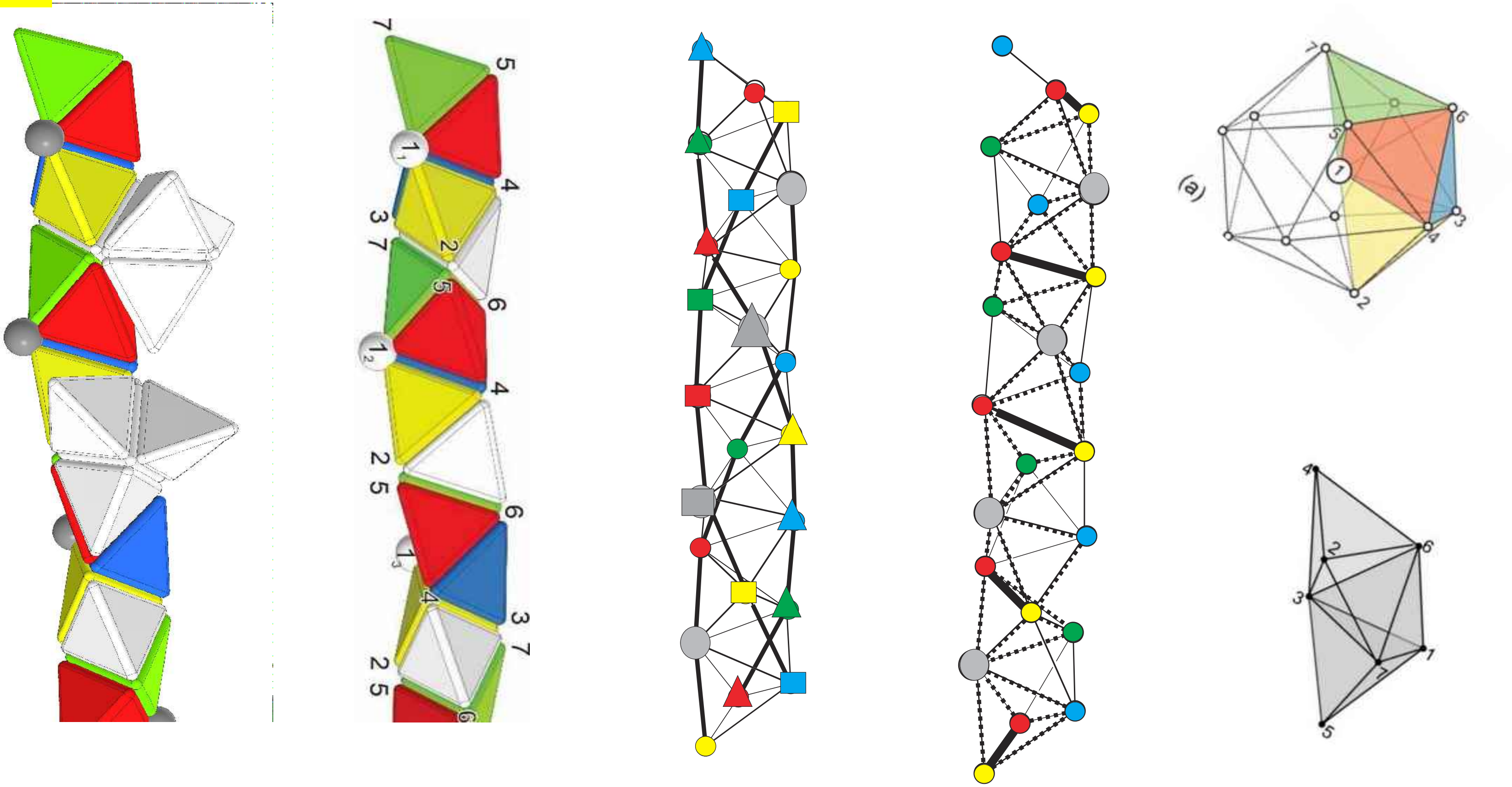
Fig. 14·3c

One {3, 4, 3} of {3, 3, 5}[5{3, 4, 3}]{5, 3, 3}

трансформируется кубооктаэдр при синхронном вращении его 4-х треугольных граней. пересекаются по двум столбцам. г) Трансформация куба в тетраэдрическую звезду из 5 тетраэдров.

Политоп {3,3,5} – компаунд {3,3,5}[5{3,4,3}]{5,3,3} из 5 политопов {3,4,3}

Разбиение политопа {335} и по Госсету, и на 5 политопов {3,4,3} приводит к разбиению тетрагеликса на объединение тетраблоков по ребрам



Политоп {3,3,5} – компаунд {3,3,5}[5{3,4,3}]{5,3,3} из 5 политопов {3,4,3}: синего, желтого, серого, красного, зеленого цветов. Десятка разбивается на 2 пятерки этих цветов. Эта пятерка вершин в реализуется в тетраблоках при их объединении в тетрагеликсе по ребрам: 2x1/2(красная и желтая)   + синяя, серая, зеленая.

29 H. Babiker and S. Janeczko. Combinatorial representation of tetrahedral chains // Communications in Information and Systems 2015 Volume 15, Number 3, 331-359

Any tetrahedral chain consists of three types of simplest configurations of four consecutive tetrahedra called *tetrahedral units*. Two of these types are left and right tetrahedral short spirals, U, D, and the third type, F, is a flat configuration of four tetrahedra (Figure 2). The structure of a tetrahedral chain in D, F, U elementary units is written as a word like $UUDFUD\cdots$.

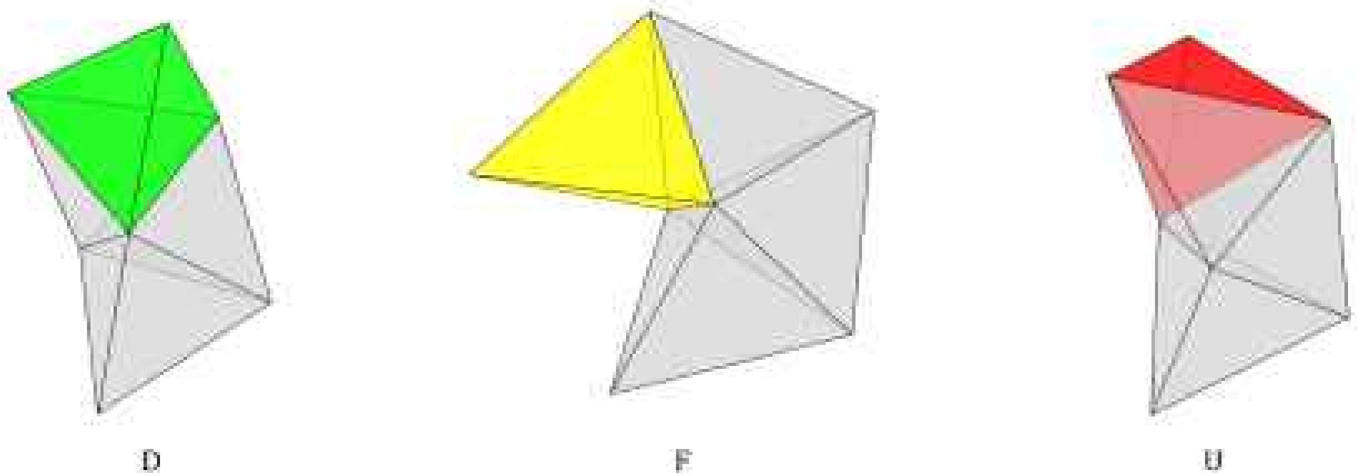
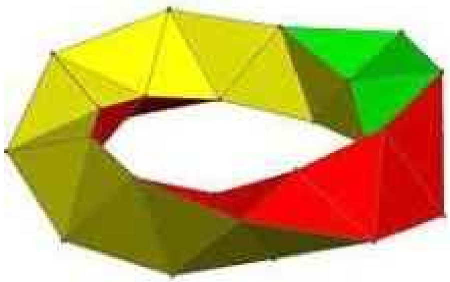
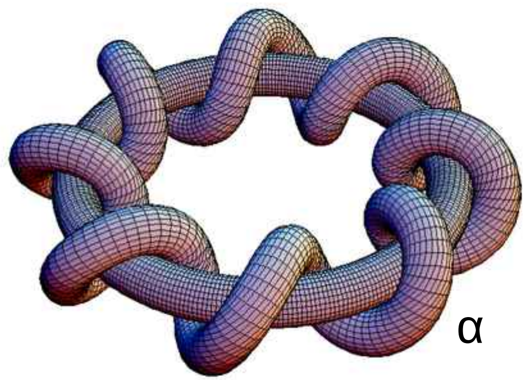


Figure 2: Tetrahedral units.

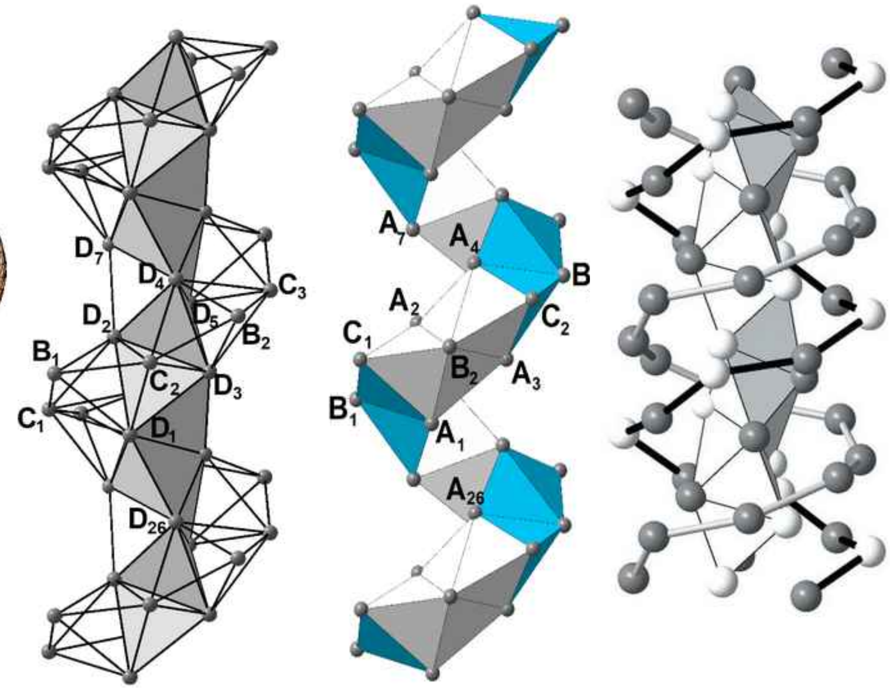
30 СПИРАЛИ, ОХВАТЫВАЮЩИЕ ВСЕ ВЕРШИНЫ ПОЛИТОПА

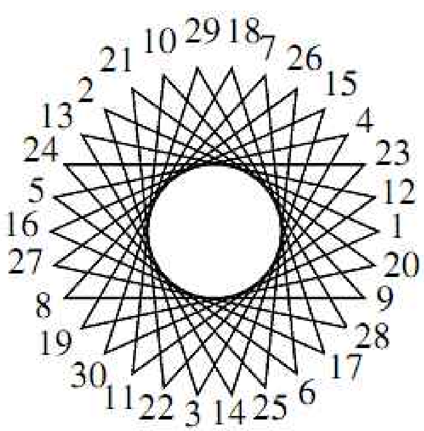
120 вершин политопа {3,3,5} отображаются на поверхности четырех 30-вершинных торов с симметрией 30/11 или двух обвивающих их 60-вершинных тороидальных спиралей из тетраблоков с симметрией 15/4





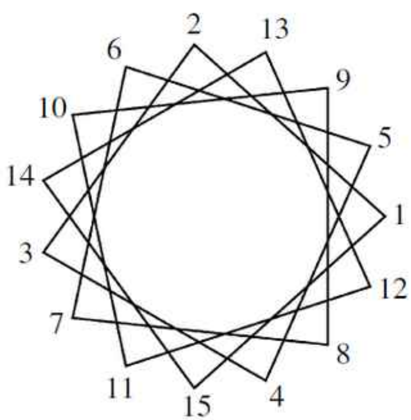
α





360^0: 30/11=132^0

30/11



360^0: 15/4=96^0

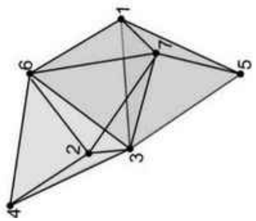
15/4

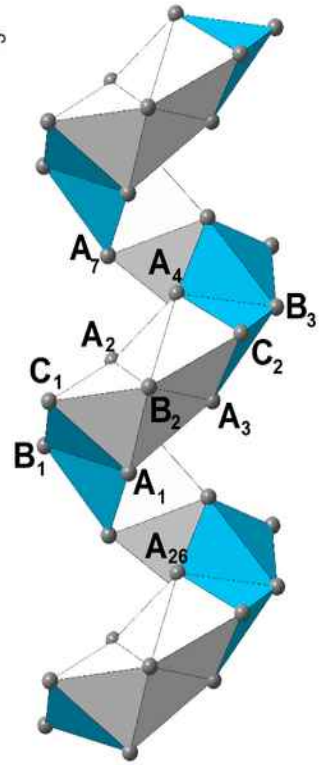
Спираль 15/4 из тетраблоков обвивает тетрагеликс. При искажении тетраэдров реализуется в кристалле β- Mn.

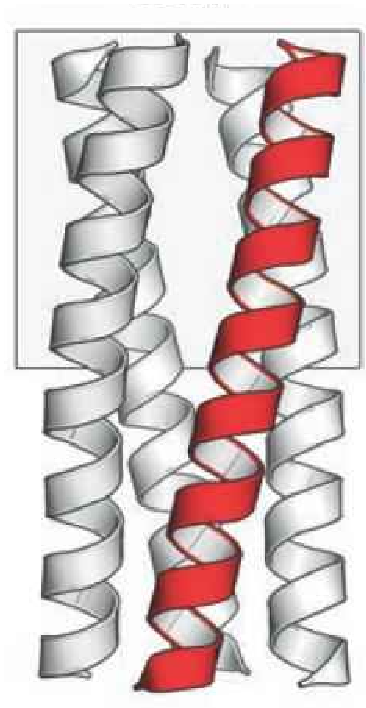
Talis, A., Everstov, A. & Kraposhin, V. (2021). Acta Cryst. A77, 7–18.

31

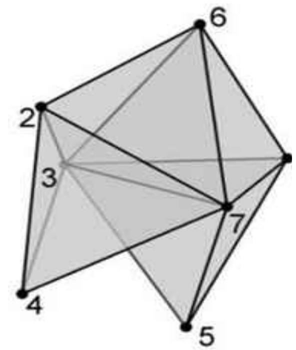
Спирали из тетраблоков в политопе {3,3,5}

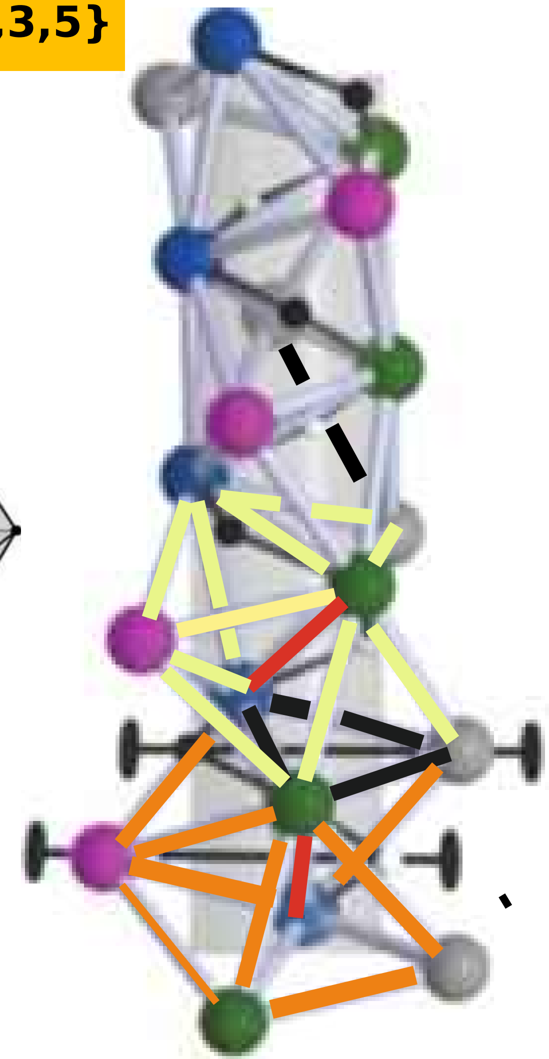






15/4





Спираль 15/4 из объединяемых по граням линейных тетраблоков. Центры тетраблоков - атомы C

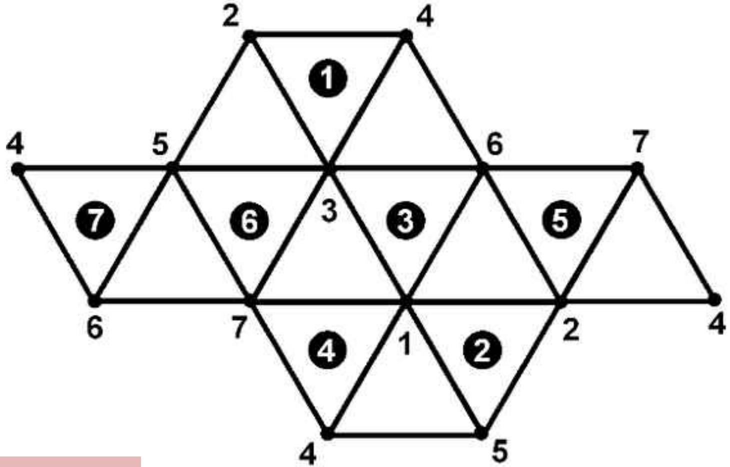
M. Samoylovich, A. Talis // Acta Cryst. (2014). A70, 186–198

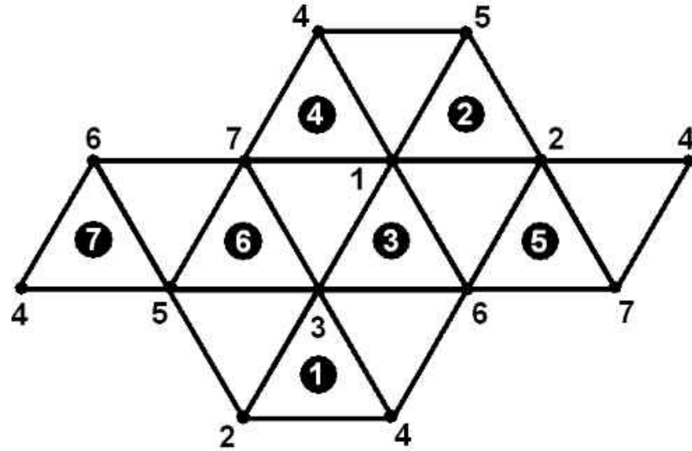
Пентагеликс - спираль 10/1 из объединяемых по граням плоских тетрпаблоков или спираль 20/9 из пересекающихся плоских тетрпаблоков.

Перевод комбинаторной предгеометрии 2-(7,3,1) в геометрию

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

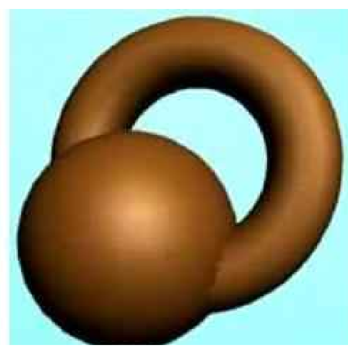
ТИ блок-схемы 2-(7,3,1)





Правая и левая развертки регулярно триангулированного тора определяются одной ТИ.

В ТИ **2-(7,3,1)** строка - блок из номеров 3-х столбцов, он соответствует треугольнику. Номер столбца –вершина треугольника, 2 строки пересекаются по 1 столбцу



Комбинаторная предгеометрия 2-(7,3,1) переводится в геометрию: регулярную 7-вершинную триангуляцию тора 21 ребром на 14 треугольников.

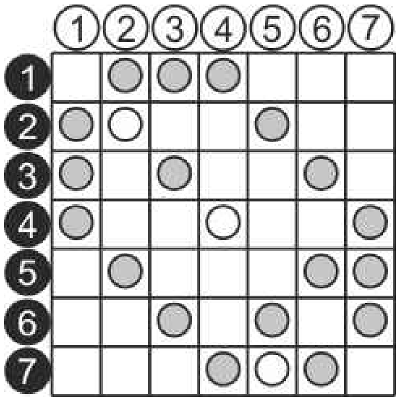
Характеристика Эйлера

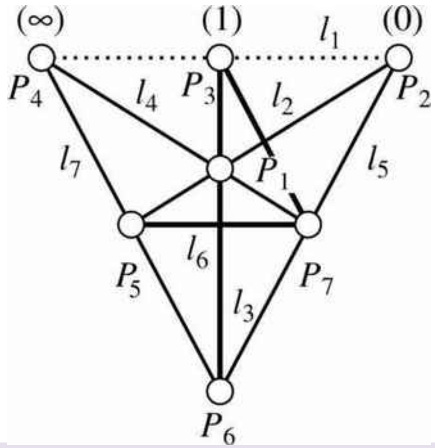
7-21+14=0

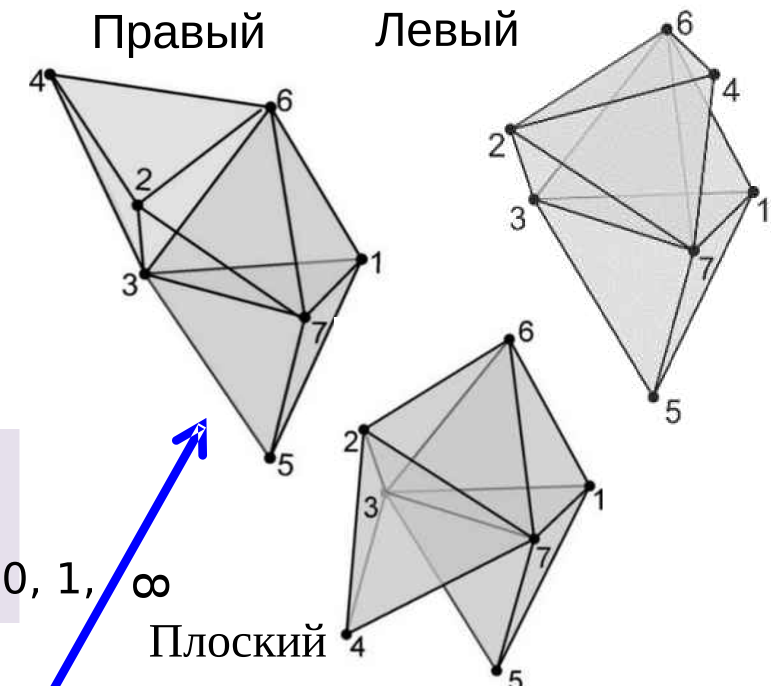
Наиболее симметричная триангуляция сферы с *g* “ручками” возможна для v вершин:v=0, 3 ,4 ,7 (mod 12), **g=(**v**-3)(** v **-4)/12.**

При v=7, g=1: тор - сфера с ручкой

От 7-вершинной триангуляции тора к тетраблоку





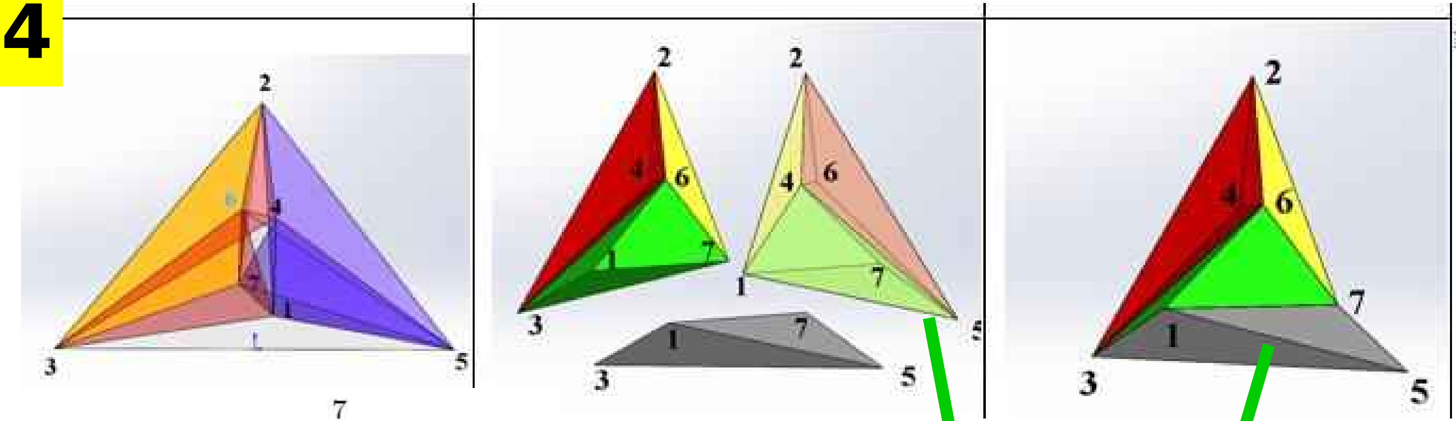


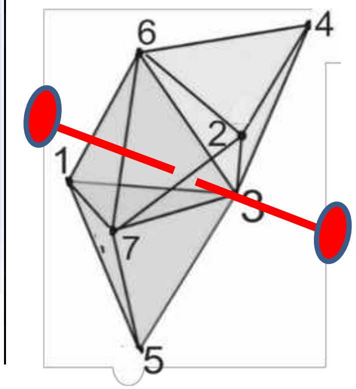
ТИ 2-(7,3,1) определяет конечную проективную геометрию PG(2,2). Параллельные прямые 2,5; 3,6;7,4 пересекаются в идеальных точках 0, 1, ∞

Отбрасывание отмеченных белыми кружками знаков инцидентности определяет подконфигурацию PG(2,2) и приводит к **переходу**(посредством удаления «ручки» в виде изогнутой трехгранной призмы) **от 7 вершиной регулярной триангуляции тора к 7 вершиной нерегулярной триангуляции сферы 15 ребрами на 10 треугольников**

Характеристика Эйлера 7-15+10=2

Тетраблок - базовая структурная единица цепи тетраэдров, при отображении которой в регулярные тетраэдрические разбиения пространств S^3 (H^3) **число тетраэдров и вершин максимально возможно, не меняется и имеет максимальную симметрию триангулированной поверхности**.





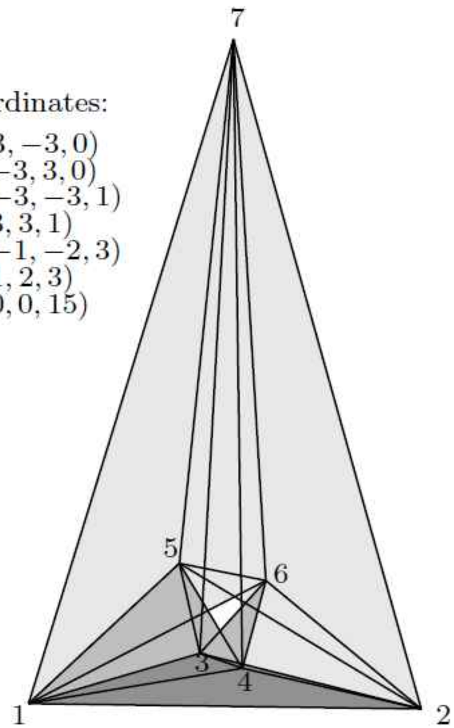
Раздельное представление 7 тетраэдров многогранника Часара

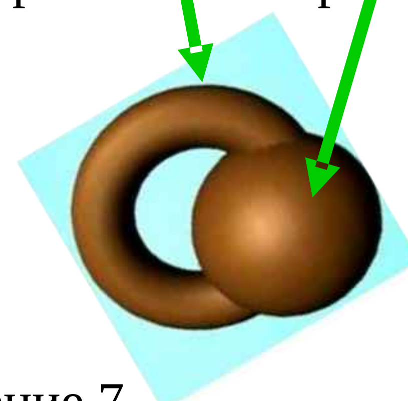
Объединение 4 тетраэдров из многогранника Часара, охватывающее все его 7 вершин.

Равнореберность этого объединения приводит к тетраблоку.

Coordinates:

1: $(3, -3, 0)$
2: $(-3, 3, 0)$
3: $(-3, -3, 1)$
4: $(3, 3, 1)$
5: $(-1, -2, 3)$
6: $(1, 2, 3)$
7: $(0, 0, 15)$





Объединение 7 неравнореберных тетраэдров в многогранник Часара

Triangles:

123	145	156	345	167	467	247
124	236	256	346	257	357	137

Комбинаторная предгеометрия 2-(7,3,1)

При *k* = 3, 4 и 5 биплоскости (из *v* = *1* + *k*(*k*-*1*)/*2* элементов) образуют особую серию с *v* = 4 (тетраэдр), 7 и 11

2-(4,3,2) **2-(7,4,2)** **2-(11,5,2)**

Тетраэдр соответствует первому члену 2-(4,3,2) этой серии биплоскостей

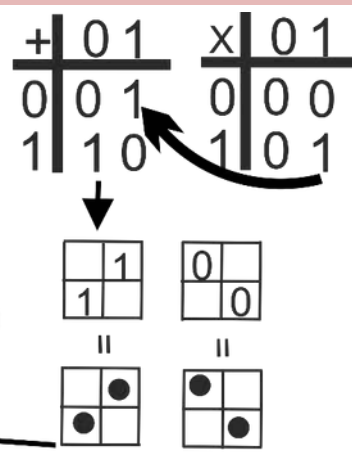
Таблица инцидентности **2-(7,4,2)**

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

Таблица инцидентности **2-(7,3,1), комплементарной к 2-(7,4,2)**

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

0 1



Минимальное поле Галуа, порядка p=2, состоит из 0 и 1. Позволяет построить комбинаторную предгеометрию 2-(7,3,1) из p^2+p+1 точки $7=2^2+2+1$

2-(7, 4, 2) и **2-(7,3,1)** обладают одной групой автоморфизмов - **проективной специальной линейной группой PSL(2,7) из 168 перестановок 7 чисел**.

Схема 2-(7,3,1) определяет разбиение **7** чисел 1234567 на **7** троек 234, 125, 136, 147, 267, 357, 456. Любая пара чисел только в одной тройке