УДК 548.0;548.1

ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ СФЕРИЧЕСКИХ "МОЛЕКУЛ" ФУЛЛЕРЕНОВ И КАПСУЛ ВИРУСОВ

В. П. Мартовицкий

Предложен новый способ образования сферических "молекул" не хорошо известным путем дисклинационного преобразования плоской поверхности, а самосборкой из гексациклов, изначально повернутых друг относительно друга вокруг общего ребра на 36°. Сами гексациклы составлены из стержней при взаимопроникающем объединении некристаллографических T-узлов вдоль направления $[\tau 01]$. *Предложенным способом построены сферические кластеры с 80 вершинами и симметрией* I_h *и* D_{5h}.

Регулярные структуры на сферических поверхностях с постоянной положительной гауссовой кривизной характерны для фуллеренов [1, 2] и икосаэдрических капсул вирусов [3, 4]. Основным материалом для получения фуллеренов с помощью дугового разряда является графит, кристаллическая структура которого состоит из плоских гексагональных слоев с межатомным расстоянием 1.42 $\mathring{A}$, связанных между собой слабыми ван-дерваальсовыми связями с расстоянием 3.40 $\mathring{A}$ между слоями [5]. Хорошо известен механизм преобразования плоских гексагональных слоев в сферическую поверхность за счет введения положительных +60° клиновых дисклинаций [6]. Введение такой дисклинации означает удаление одного из шести секторов гексагона (рис. 1а, 1б) с последующим объединением разомкнутых сторон. После введения положительной дисклинации оставшиеся пять секторов гексагона становятся симметричными относительно дисклинационной линии и образуется фрагмент поверхности положительной гауссовой кривизны (рис. 1в, 1г).

Если сферическая "молекула" состоит только из гексациклов и пентациклов, то согласно теореме Эйлера числа ее вершин (V), ребер (E) и граней (F) связаны соотношением $V - E + F = 2$ [7]. Так как в каждой вершине сходится ровно три цикла,

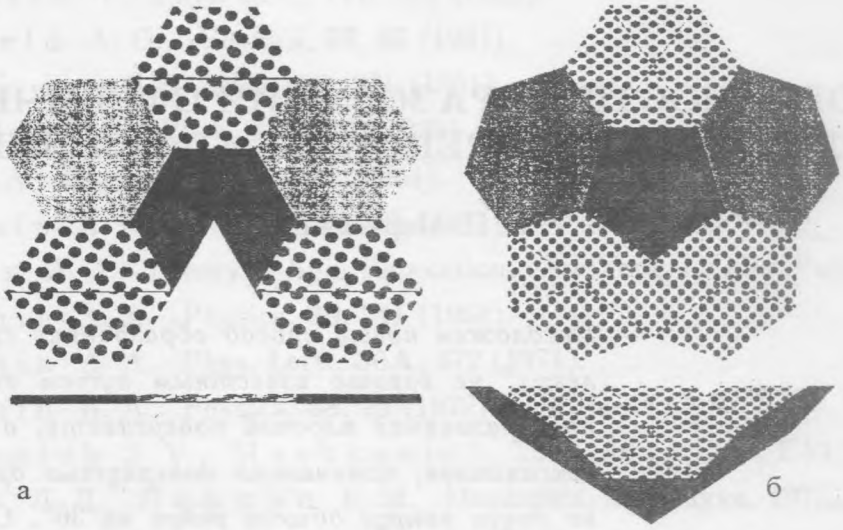

Рис. 1. *Преобразование плоского слоя (а) в фрагмент поверхности положительной гауссовой кривизны (б) за счет введения +60° клиновой дисклинации.*

а ребро принадлежит двум циклам, то если число пентациклов принять равным p, а гексациклов – h, то получаем

$$\frac{5p+6h}{3} - \frac{5p+6h}{2} + p + h = 2,$$

откуда $p = 12$, а h может быть любым. Правда, устойчивые молекулы фуллеренов подчиняются еще и правилу изолированных пентагонов [8], которое впервые выполняется для C_{60}. Следующая "молекула", в которой выполняется это правило, – C_{70} и поэтому между ними не наблюдается промежуточных составов. Таким образом, введение 12 положительных 60° дисклинаций с общим углом поворота в 720° преобразует плоский гексагональный слой в замкнутую сферическую поверхность. Такой механизм образования был предложен как для фуллеренов [1, 2], так и для икосаэдрических капсул вирусов [9].

В настоящей работе показано, что возможен еще один способ образования сферических поверхностей.

Н. А. Бульенковым были построены 11 параметрических структур связанной воды по принципу "системы систем" с использованием триплета – кластера их 20 тетракоординированных атомов с бинарным параметром $\Theta \approx 38°$ на каждой связи [10, 11]. Эти структуры по симметрии, метрике и топологии оказались комплементарными

важнейшим структурам биополимеров. Однако, триплет с симметрией D_3 не является изометричным кластером, поэтому полученные структуры не удалось изобразить в полиэдрическом виде. Если же выбрать в качестве элементарного "кирпича" другой кластер из 27 атомов с тем же самым бинарным параметром – T-узел с симметрией T-23, то можно представить семь различных способов конденсации T-узла как объединение одинаковых или различных полиэдров двух его подрешеток – икосаэдра и искаженного тетрагексаэдра [12].

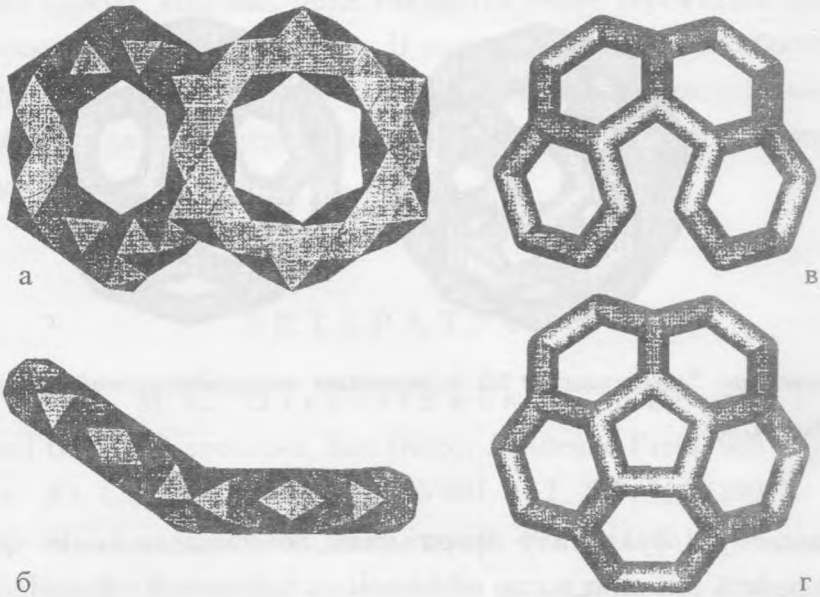

Рис. 2. *Два плоских гексацикла, построенные на одном общем стержне* [τ01], *с углом* 36° *между ними (а, б), и фрагмент сферической поверхности, образующийся при объединении четырех (в) и пяти таких гексациклов (г).*

При объединении T-узлов в виде взаимопроникающих икосаэдров вдоль [τ01] с ветвлением в эквивалентных направлениях образуются плоские замкнутые гексациклы. На каждом ребре такого гексацикла может быть построен точно такой же другой гексацикл, образующий с плоскостью первого гексацикла угол в 36° (рис. 2а, 2б). Объединение пяти таких гексациклов по непараллельным ребрам образует фрагмент сферической поверхности с центральным пентациклом (рис. 2г). На рис. 2в специально показаны только четыре гексацикла для того, чтобы подчеркнуть производный характер образующегося в центре пентацикла. Кстати, пять гексациклов с центральным пентациклом отвечают реально существующей молекуле коранулена C_{20} [1, 2].

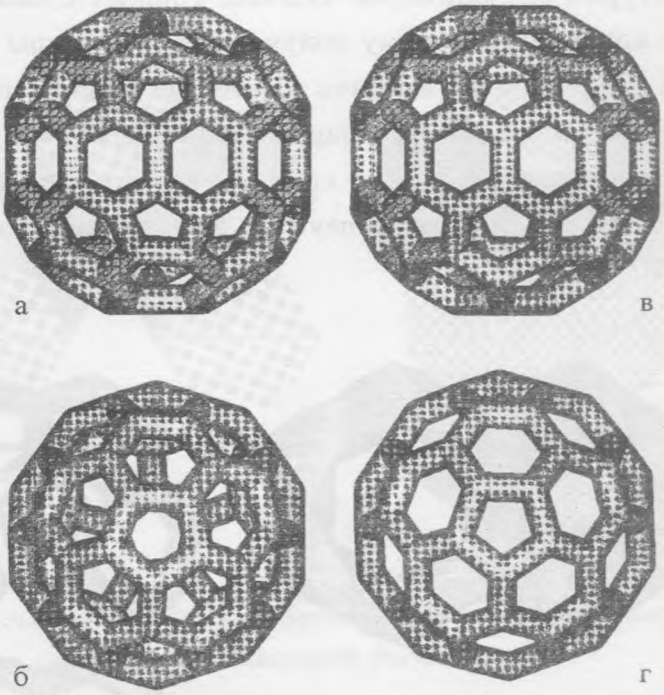

Рис. 3. *Сферические "молекулы" с 80 вершинами икосаэдрической симметрии (а, б) и с симметрией D_{5h} (в, г).*

К образовавшемуся фрагменту сферической поверхности точно таким же образом можно присоединять гексациклы до образования замкнутой сферической "молекулы". Число вершин такой "молекулы" будет определяться углом φ между смежными гексациклами. Когда угол φ равен 41.8°, то число вершин сферической "молекулы" будет равно 60, а для рассматриваемого в настоящей работе случая $\varphi = 36°$ образующийся икосаэдрический кластер будет иметь 80 вершин (рис. 3а, 3б). Для кластера с 80 вершинами возможны семь изомеров с симметрией I_h, D_{5h}, D_{5d}, D_3, D_2, C_{2h}, C_{2v} с выполнением правила изолированных пентациклов [1]. На рис. 3в, 3г приведено изображение еще одного кластера с 80 вершинами и симметрией D_{5h}. Поскольку в нем имеется горизонтальная плоскость симметрии, перпендикулярная к вертикальной оси пятого порядка на рис. 3в, то изображение нижней части сферического кластера в точности накладывается на изображение его верхней части на рис. 3г, в отличие от кластера с икосаэдрической симметрией, в котором две части кластера вдоль оси пятого порядка развернуты на 36° (рис. 3б). Другой отличительной особенностью в структурах этих изомеров является наличие всего одного "пояса" из 10 примыкающих друг к другу гексациклов в кластере

с симметрией D_{5h} (зона этого "пояса" расположена вертикально на рис. 3в), тогда как в икосаэдрическом кластере на рис. 3а, 3б таких "поясов" шесть.

Таким образом, результаты настоящей работы позволяют утверждать, что возможны два способа образования сферических "молекул". Если хорошо известный "классический" способ можно представить как активное дисклинационное введение 12 пентациклов в плоский гексагональный слой, то предложенный в настоящей работе способ можно назвать пассивным образованием тех же 12 пентациклов при объединении гексациклов с изначально существующим определенным углом между смежными гексациклами. Классический способ, конечно, представляется более вероятным при образовании фуллеренов из плоских графитовых слоев. В то же время, при самосборке капсул вирусов более вероятным может быть способ, предложенный в настоящей работе, поскольку для него не требуется затрат энергии на преобразование в сферу предварительно созданного плоского слоя.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes, San Diego, Academic Press, 965 p. (1996).

[2] Лозовик Ю. Е., Попов А. М. УФН, **167**, N 7, 751 (1997).

[3] Страйер Л., Биохимия, М., Мир, том 3, 400 с. (1985).

[4] Olson N. H., Baker T. S., Willingmann P., and Incardona N. L. J. Structural Biology, **108**, 168 (1992).

[5] Вайнштейн Б. К., Фридкин В. М., Инденбом В. Л. Современная кристаллография, том 2, М., Наука, 360 с. (1979).

[6] Harris W. F. Disclinations, Scientif. Amer., N 12, 130 (1977).

[7] Гилберт Д., Кон-Фоссен С. Наглядная геометрия, М., Наука, 344 с. (1981).

[8] Kroto H. W. Nature (London), **329**, 529 (1987).

[9] Бульенков Н. А. Кристаллография, **35**, 155 (1990).

[10] Бульенков Н. А. Кристаллография, **33**, 424 (1988).

[11] Бульенков Н. А. Биофизика, **36**, N 2, 181 (1991).

[12] Мартовицкий В. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, в печати.

Поступила в редакцию 22 сентября 2000 г.