

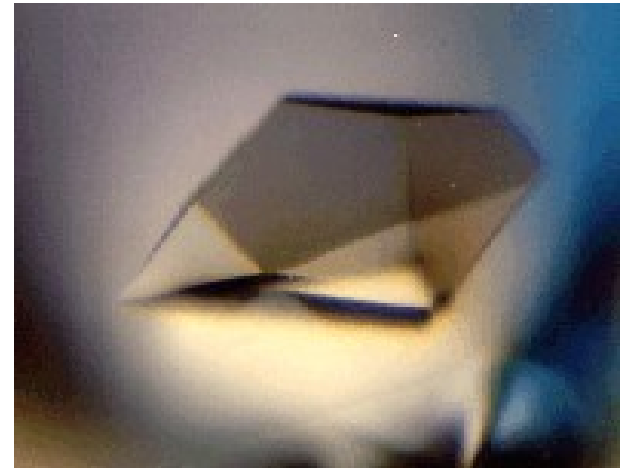
# Bioinformatika III

## Trimačių struktūrų analizė ir spėjimas

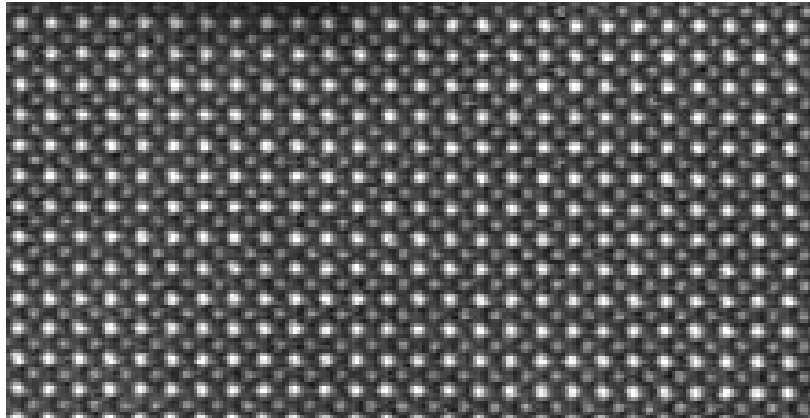
Paskaita 8 – simetrija ir jos aprašymas

Saulius Gražulis  
2021 m.

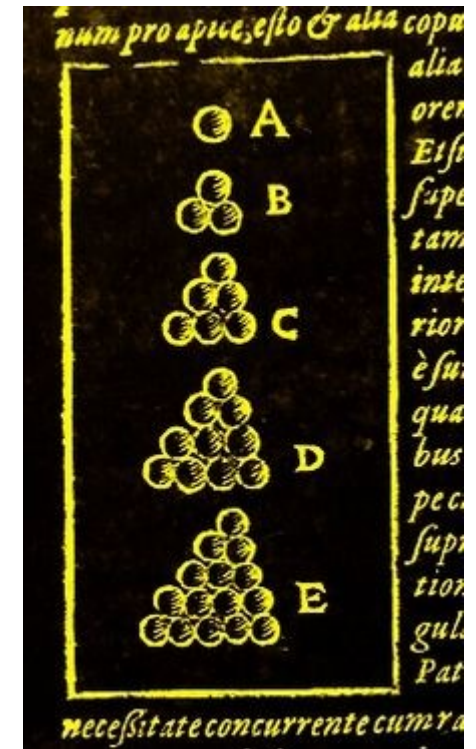
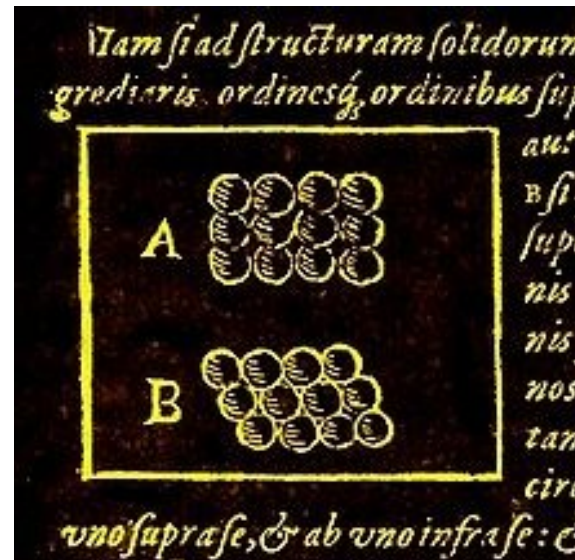
# Kristalai



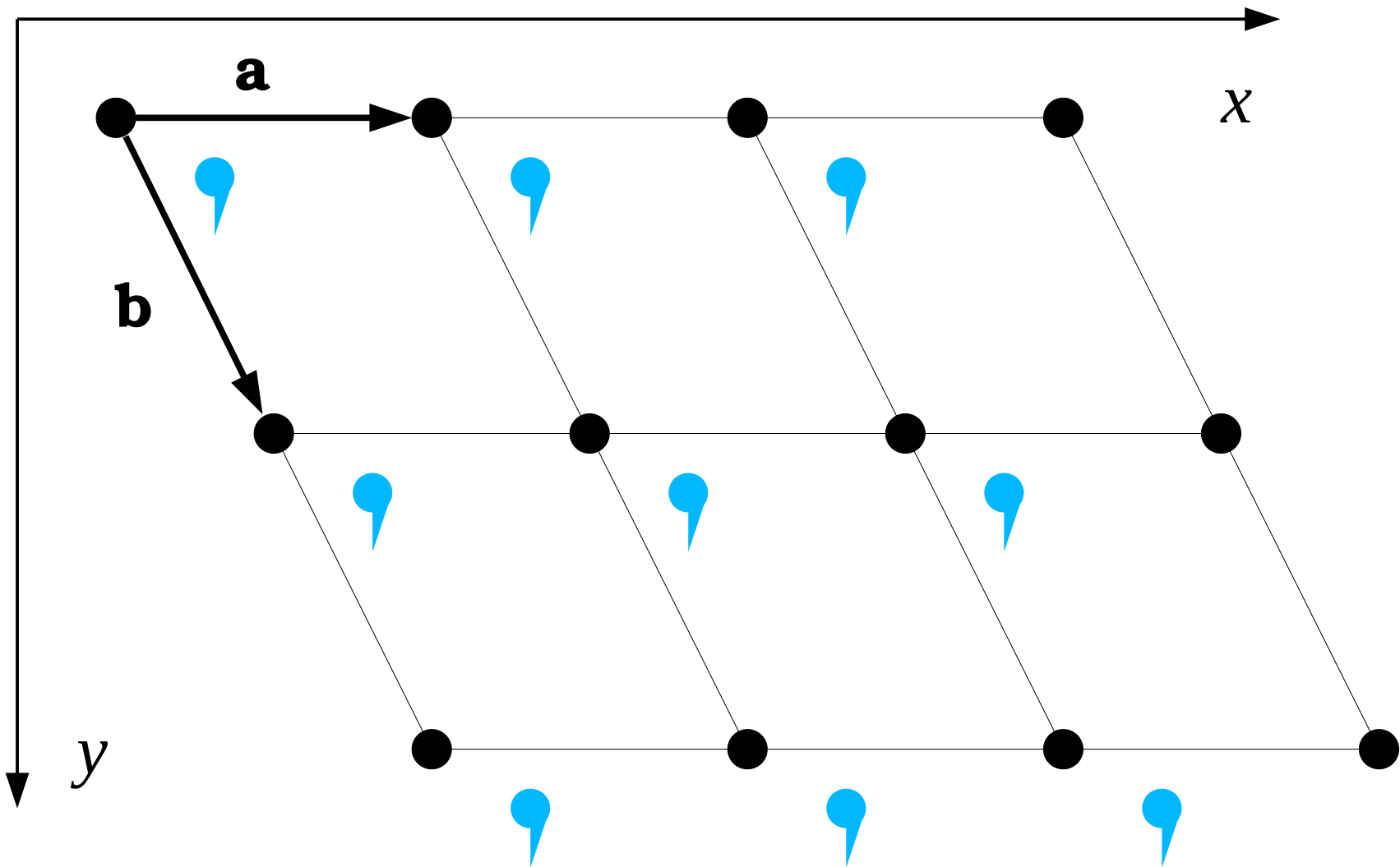
# Kristalo formos paaiškinimas



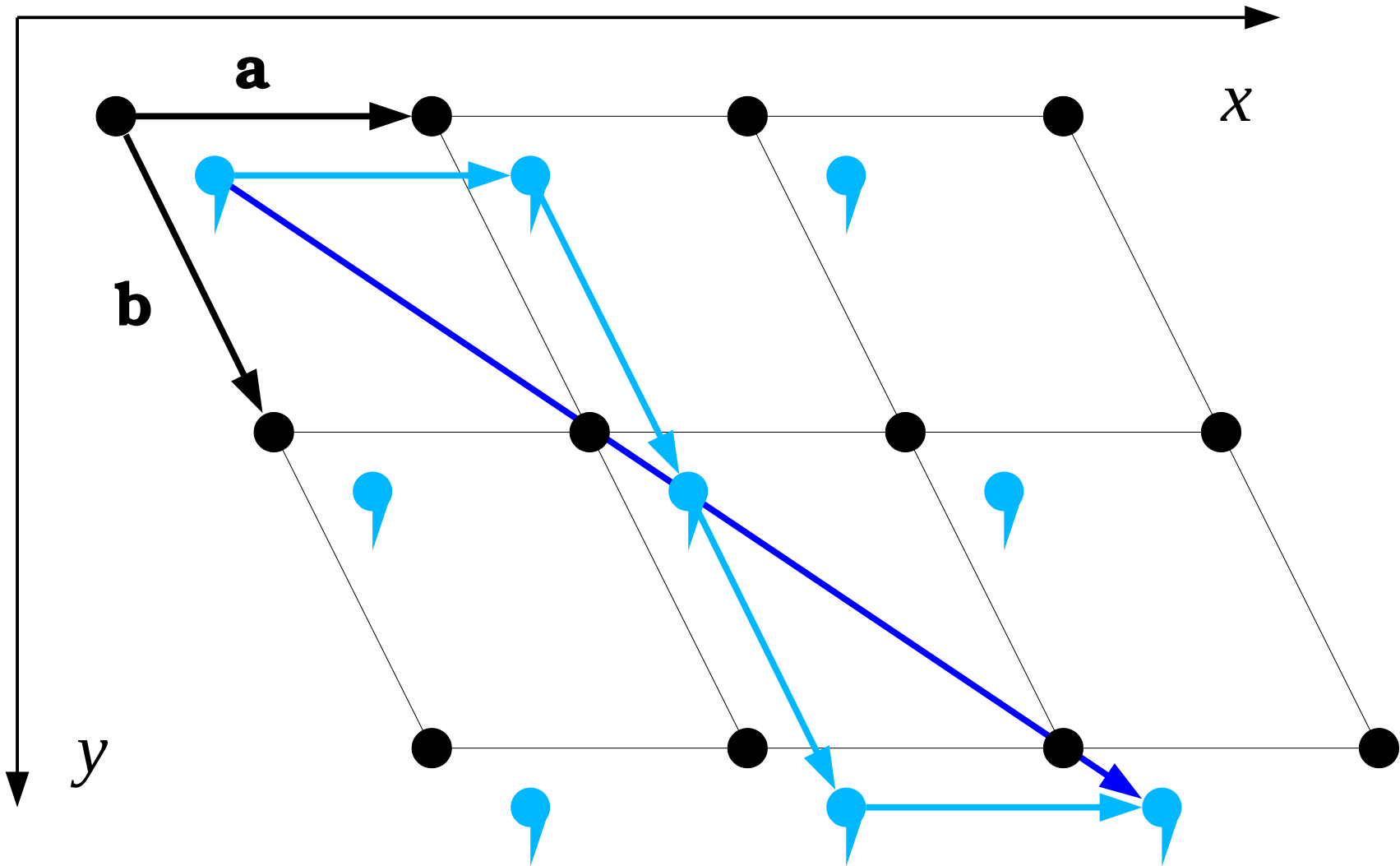
Johannes Kepler  
1611 m. „Strena Seu  
de Nive Sexangula“  
(A New Year's Gift of  
Hexagonal Snow)



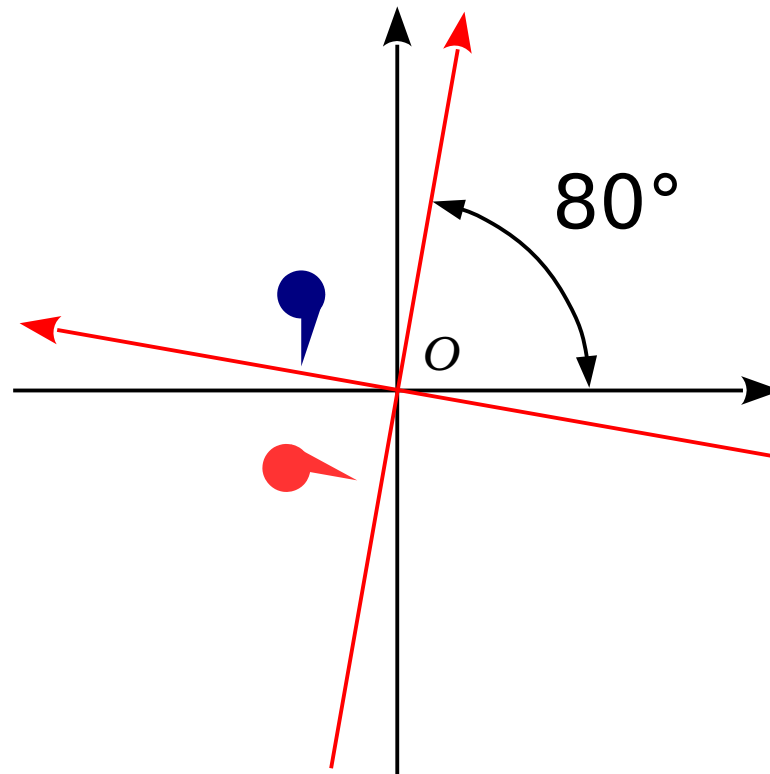
# Periodiškumas ir postūmiai



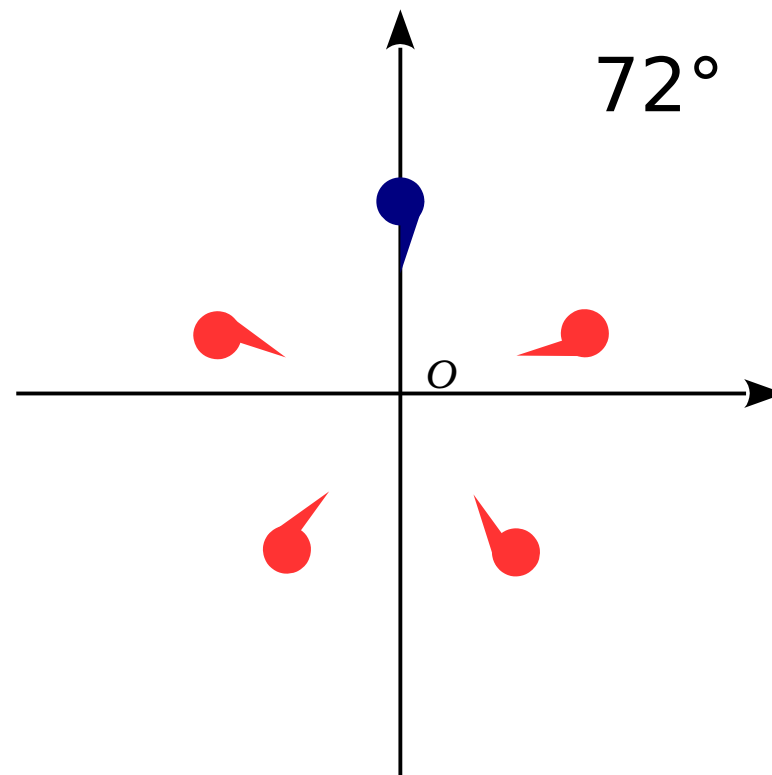
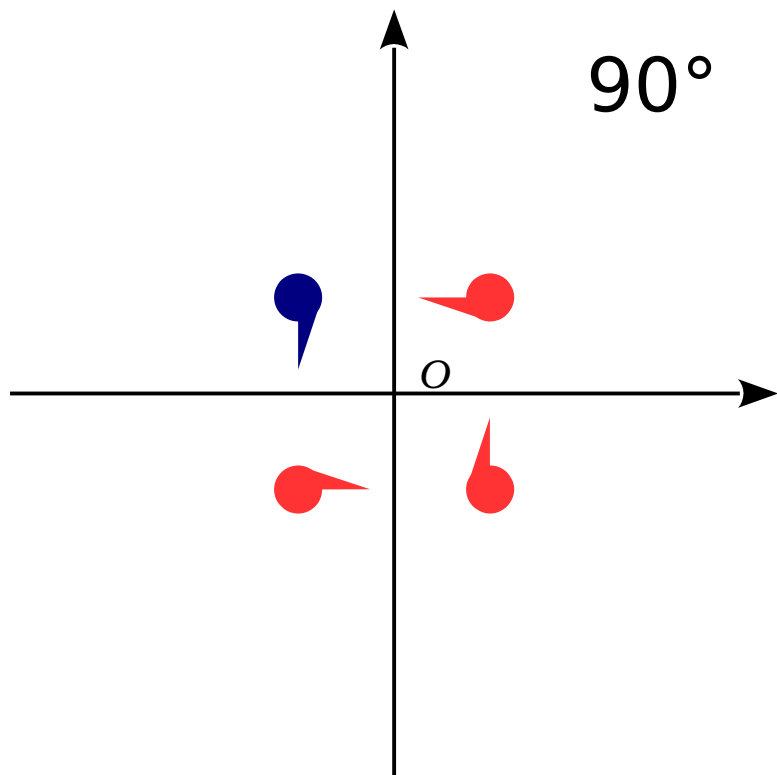
# Postūmių grupė



# Taškiniai simetrijos elementai



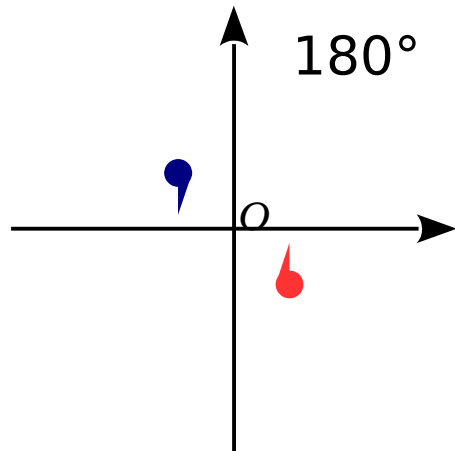
# Taškinės grupės



# Simetrijos operatoriaus aprašymas

„Bendros padėties“  
koordinatėmis:

$$-x, -y, z + \frac{1}{2}$$



Posūkio matrica ir  
postūmiu:

$$\vec{x}' = R \vec{x} + \vec{T}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} t_x \\ t_y \\ t_z \end{bmatrix}$$



# Simetrijos operatorių kombinavimas

$$\vec{x}' = R \vec{x} + \vec{T}$$

$$\begin{aligned} \vec{x}'' &= R' (R \vec{x} + \vec{T}) + \vec{T}' = \\ &= R' R \vec{x} + R' \vec{T} + \vec{T}' \end{aligned}$$

$$S = R + \vec{T} ; S' = R' + \vec{T}'$$

$$S' S = R' R + (R' \vec{T} + \vec{T}')$$

$$R' R = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$-x, -y, z$

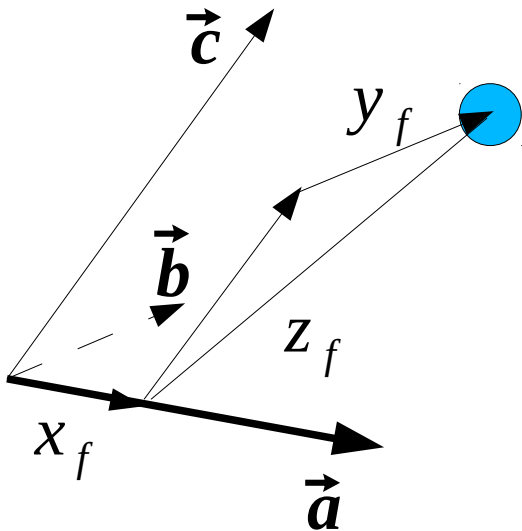
$-x, y, -z$

$x, -y, -z$

# Koordinatės

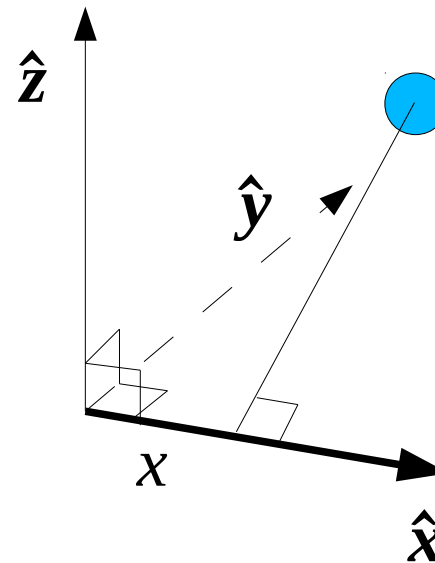
Frakcinės  
(trupmeninės):

Nurodomos gardelės  
ašių ilgių dalimis



Ortogonaliosios  
(Dekarto):

Nurodomos  
ortonormuotoje bazėje



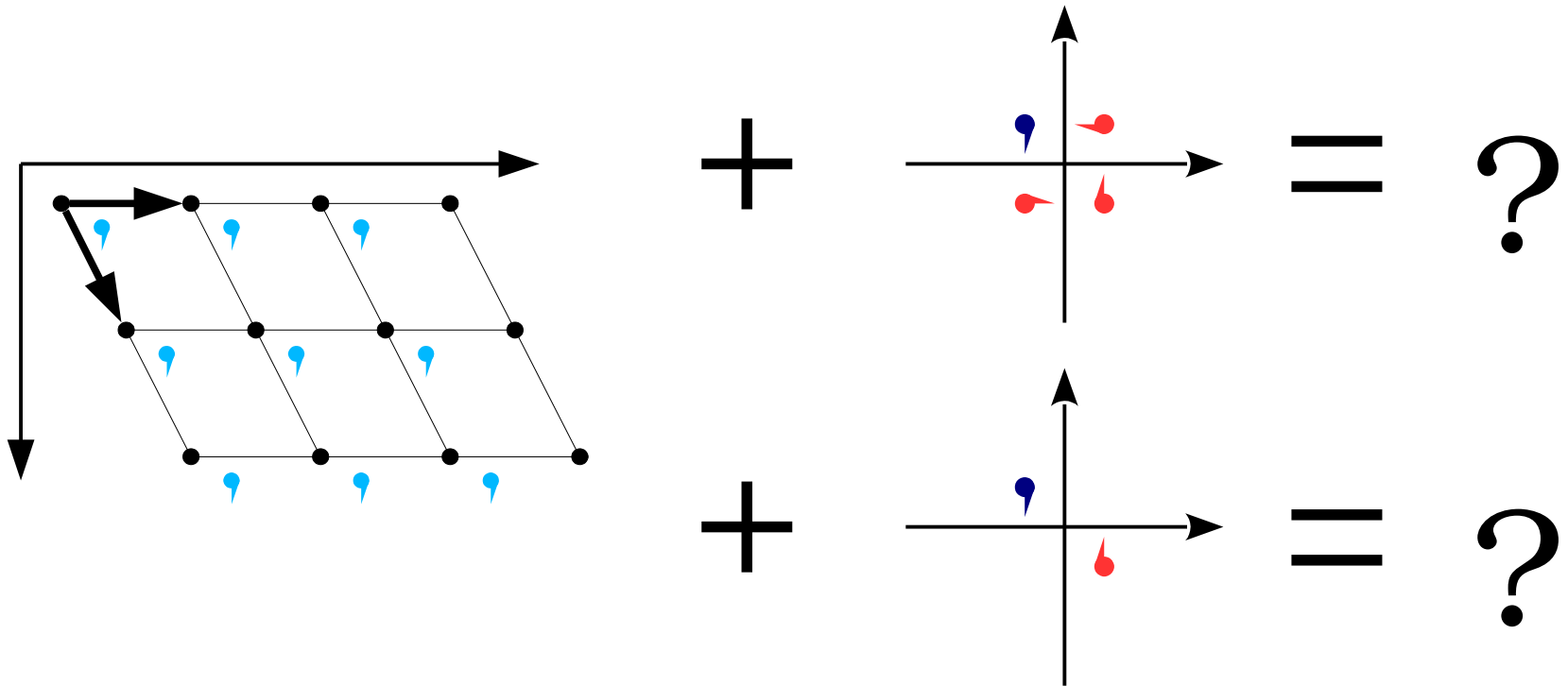
# Koordinacijų transformacijos

$$\vec{x}' = R\vec{x} + \vec{T}_o$$

```
sub symop_ortho_from_fract
{
  my @cell = @_;
  my ($a, $b, $c) = @cell[0..2];
  my ($alpha, $beta, $gamma) = map {$Pi * $_ / 180} @cell[3..5];
  my ($ca, $cb, $cg) = map {cos} ($alpha, $beta, $gamma);
  my $sg = sin($gamma);

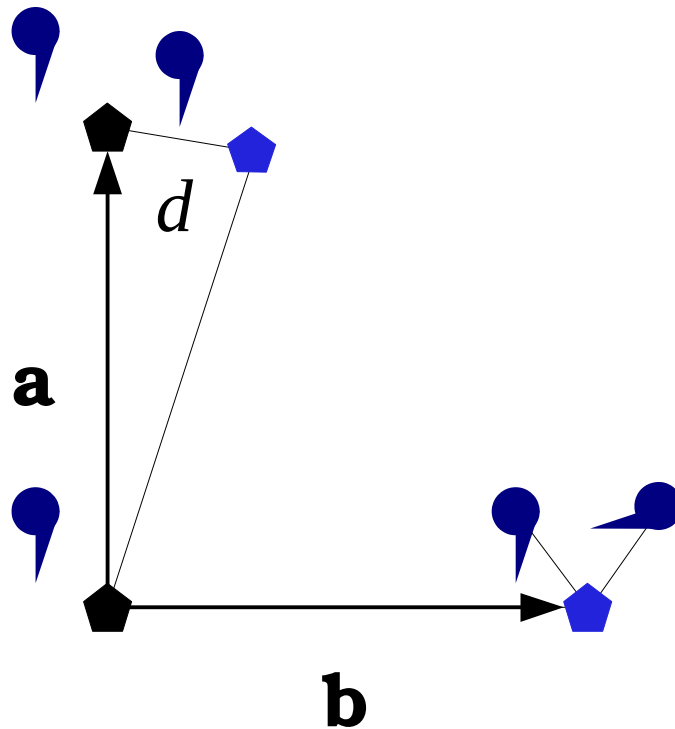
  return [
    [ $a, $b*$cg, $c*$cb ],
    [ 0, $b*$sg, $c*($ca-$cb*$cg)/$sg ],
    [ 0, 0,
      $c*sqrt($sg*$sg-$ca*$ca-$cb*$cb+2*$ca*$cb*$cg)/$sg ]
  ];
}
```

# Postūmių ir taškinės grupės kombinacijos = erdvinės grupės



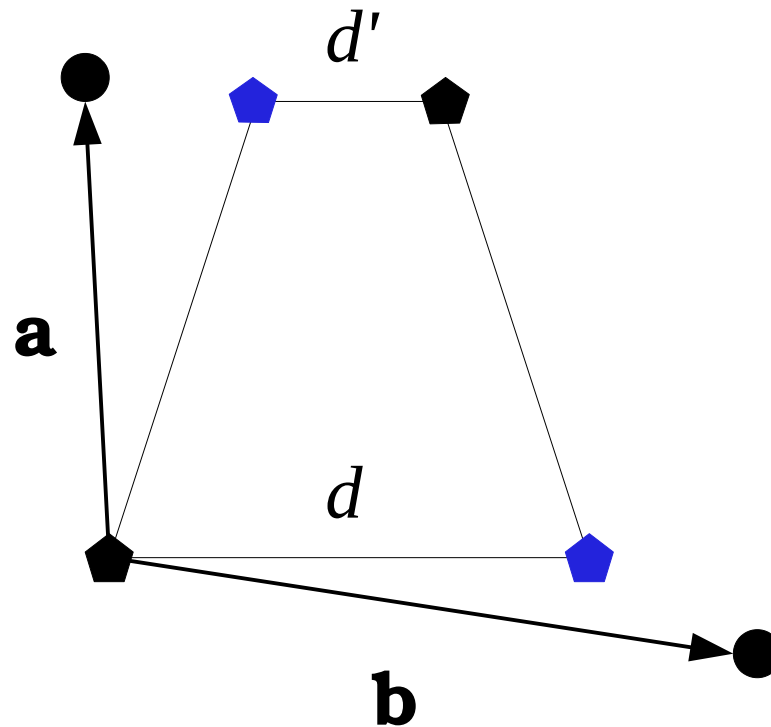
# Su translācija saderinami simetrijas elementai

*Kodēl nebūna penkiakampju snaigi?*

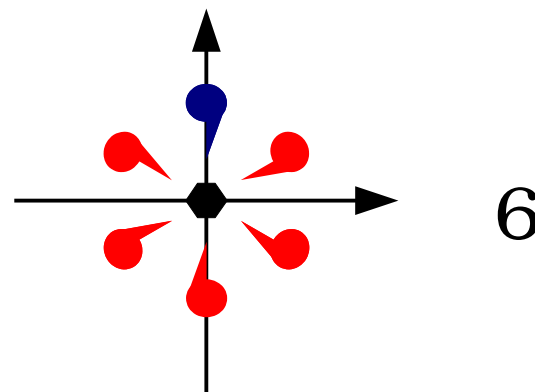
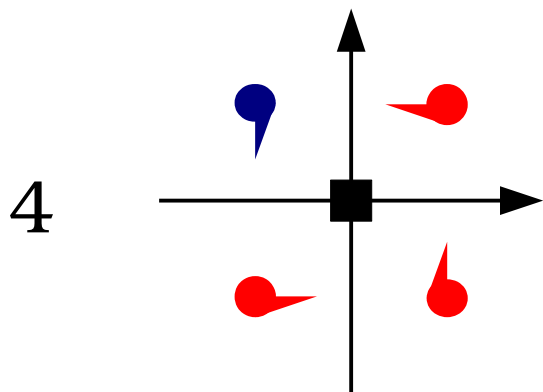
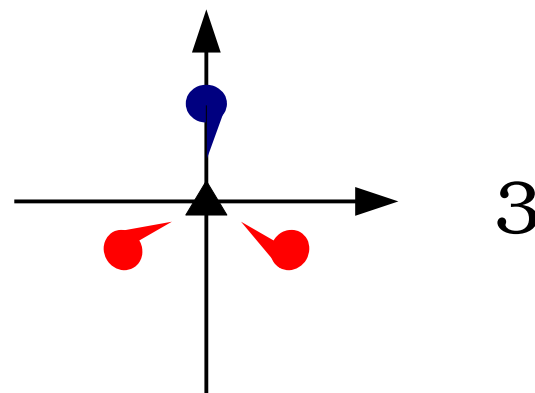
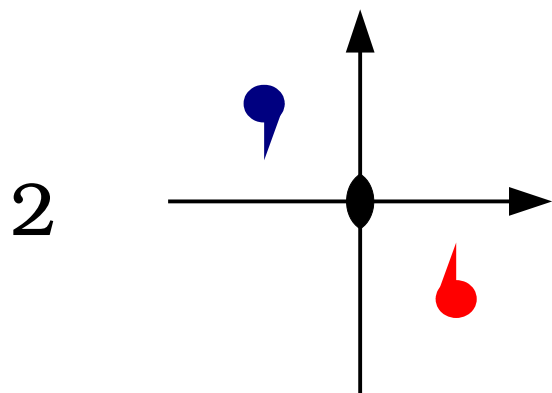


# Su translācija saderinami simetrijas elementai

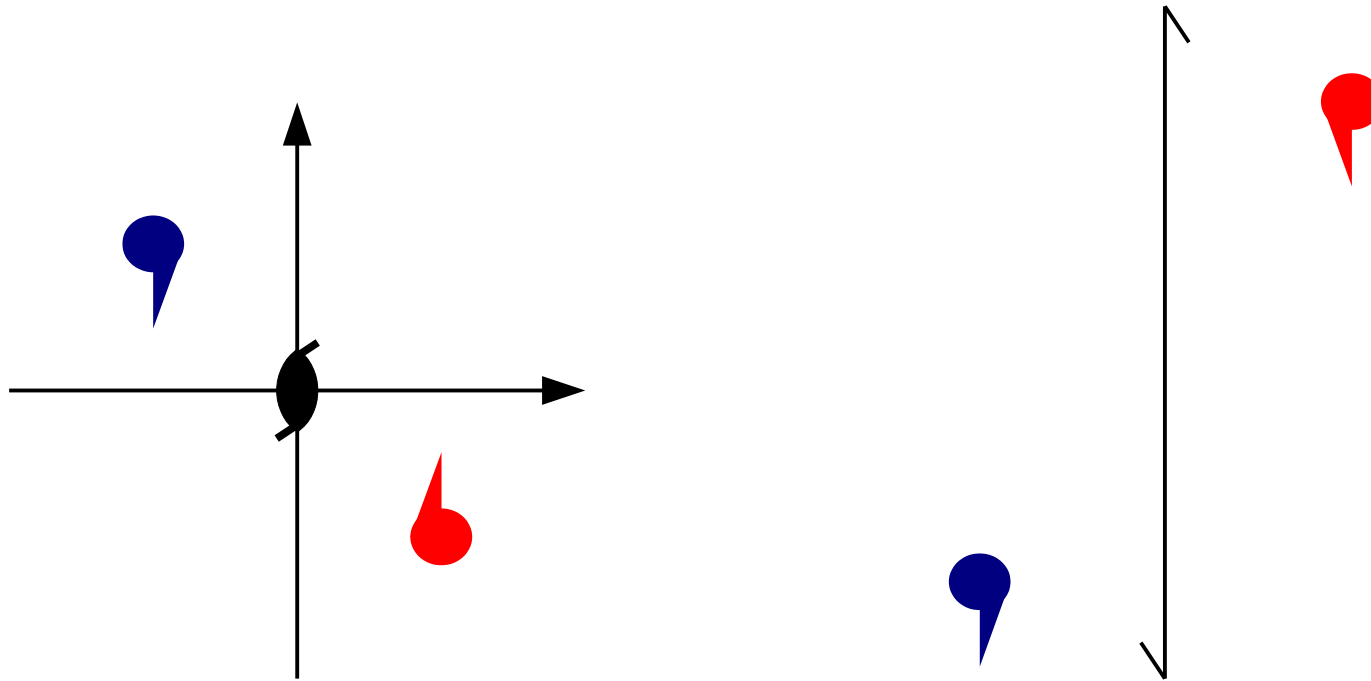
*Kodēl nebūna penkiakampju snaigi?*



# Simetrijas elementai: posūkio ašys



# Simetrijos elementai: sraigtinės ašys

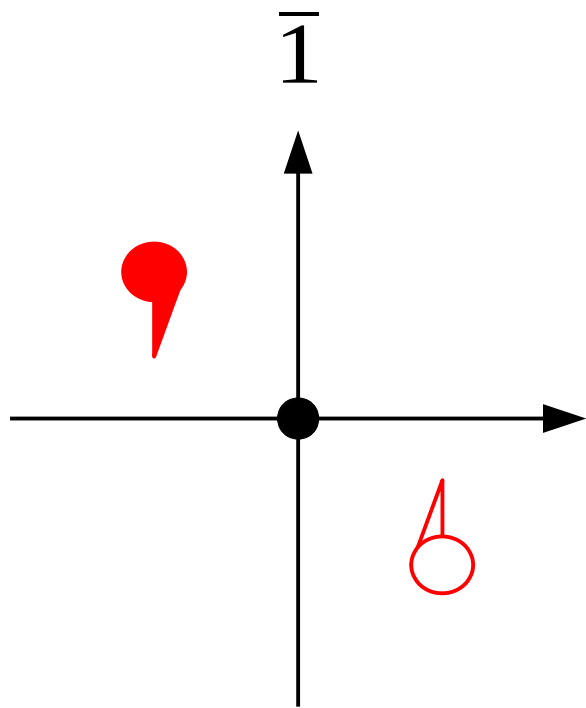


Sraigtinės ašys:  $2_1$

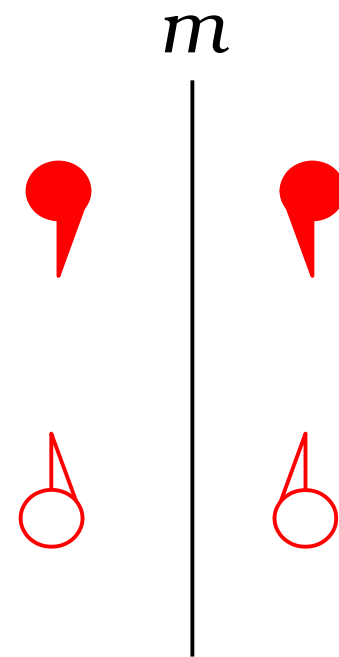
Kitos galimybės:  $3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$



# Simetrijos elementai: inversijos centrai ir plokštumos

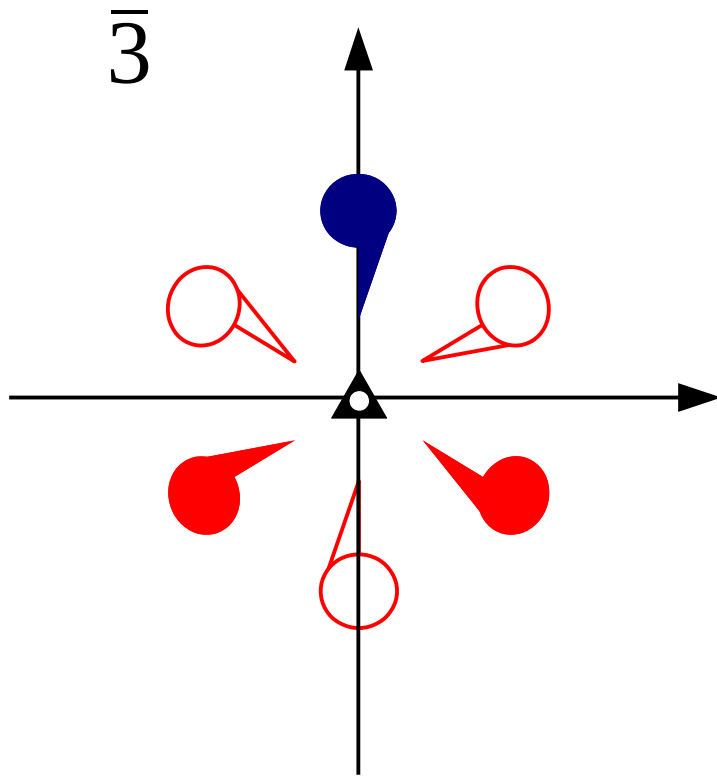


Inversijos (atspindžio)  
centras

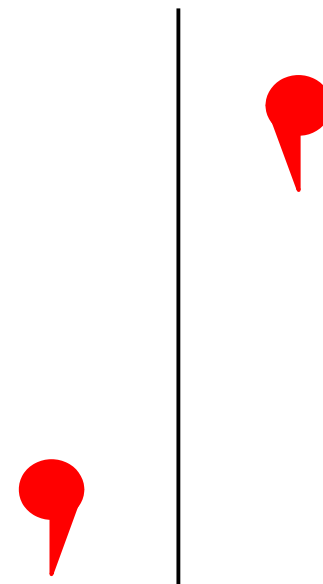


Inversijos (atspindžio)  
plokštuma

# Simetrijos elementai: rotoinversinės ašys ir slydimo plokštumos



Rotoinversinė ašis



Slydimo plokštuma

# Erdvinės simetrijos grupės ir jų nomenklatūra

Hermano-Mogeno (Hermann–Mauguin) simboliai

pvz.:  $P2_12_12_1$  C2 F432

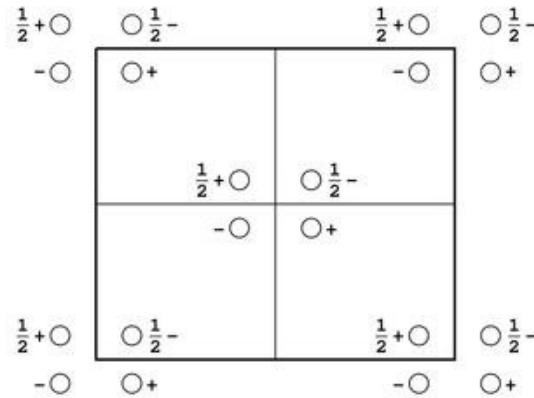
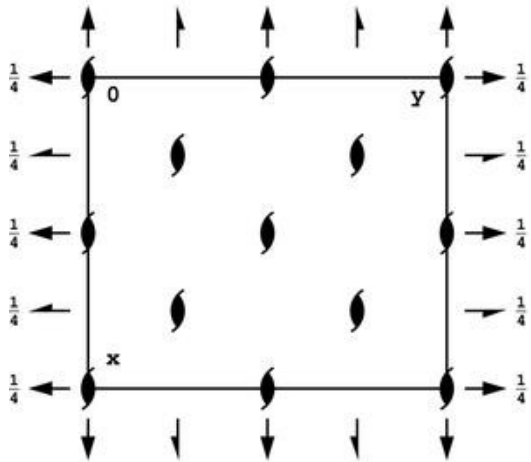
- 230 erdvinių grupių
- 65 baltymuose sutinkamos erdvinės grupės

Kitos nomenklatūros:

Šionfliso (Schönflies) simboliai, Holo (Hall) simboliai

# Tarptautinės kristalografinės lentelės

$C222_1$



- (1)  $x, y, z$       (2)  $\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$       (3)  $\bar{x}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$       (4)  $x, \bar{y}, \bar{z}$   
 (5)  $x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z$       (6)  $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$       (7)  $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$       (8)  $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z}$

Space group  $C222_1$ :

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

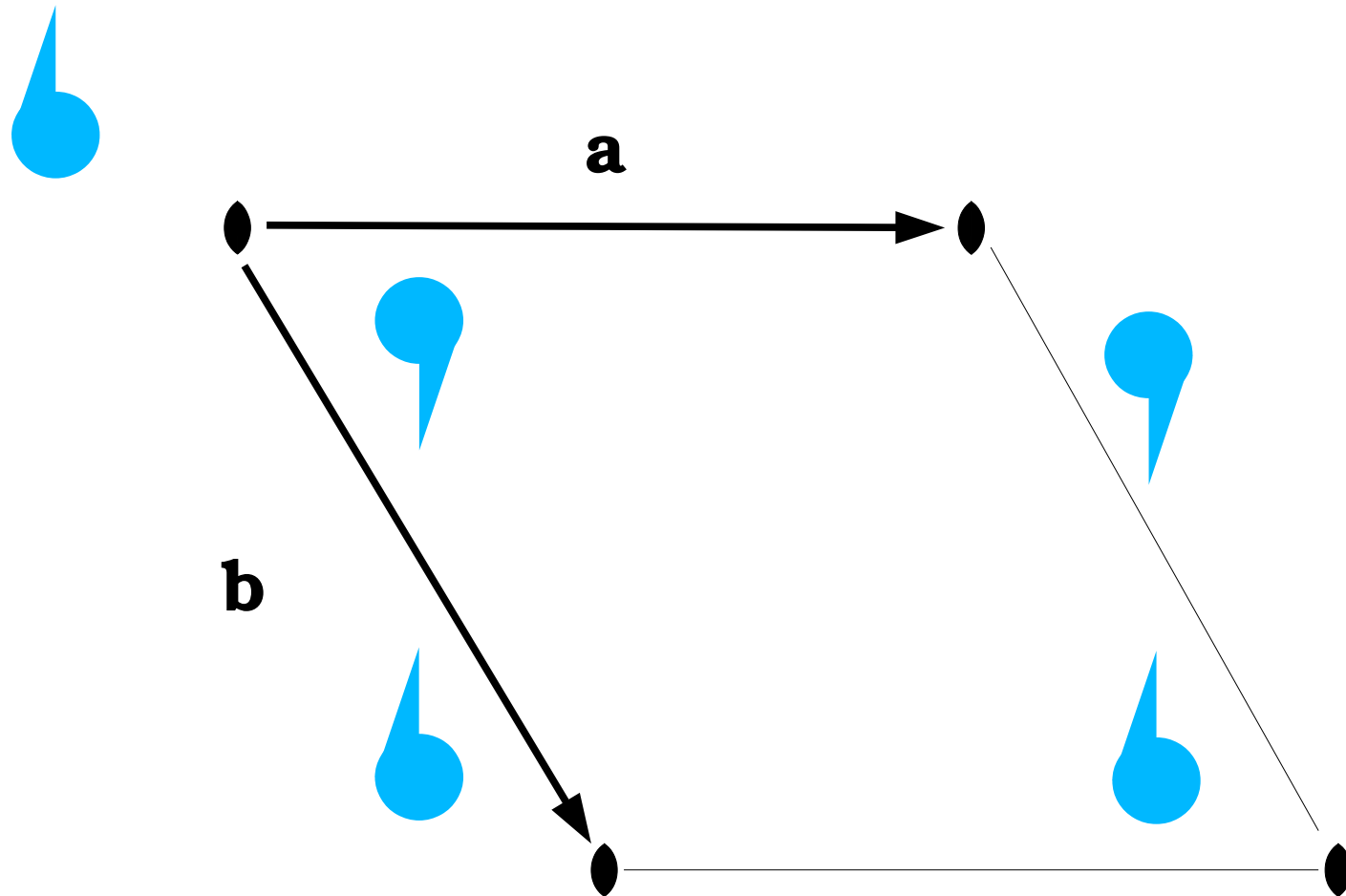
Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates
8 $c$ 1	(1) $x, y, z$ (2) $\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$ (3) $\bar{x}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (4) $x, \bar{y}, \bar{z}$
4 $b$ .2.	$0, y, \frac{1}{4}$ $0, \bar{y}, \frac{3}{4}$
4 $a$ 2..	$x, 0, 0$ $\bar{x}, 0, \frac{1}{2}$

Zbigniew Dauter; Mariusz Jaskolski *How to read (and understand) Volume A of International Tables for Crystallography...*, JAC 43(5) 2010

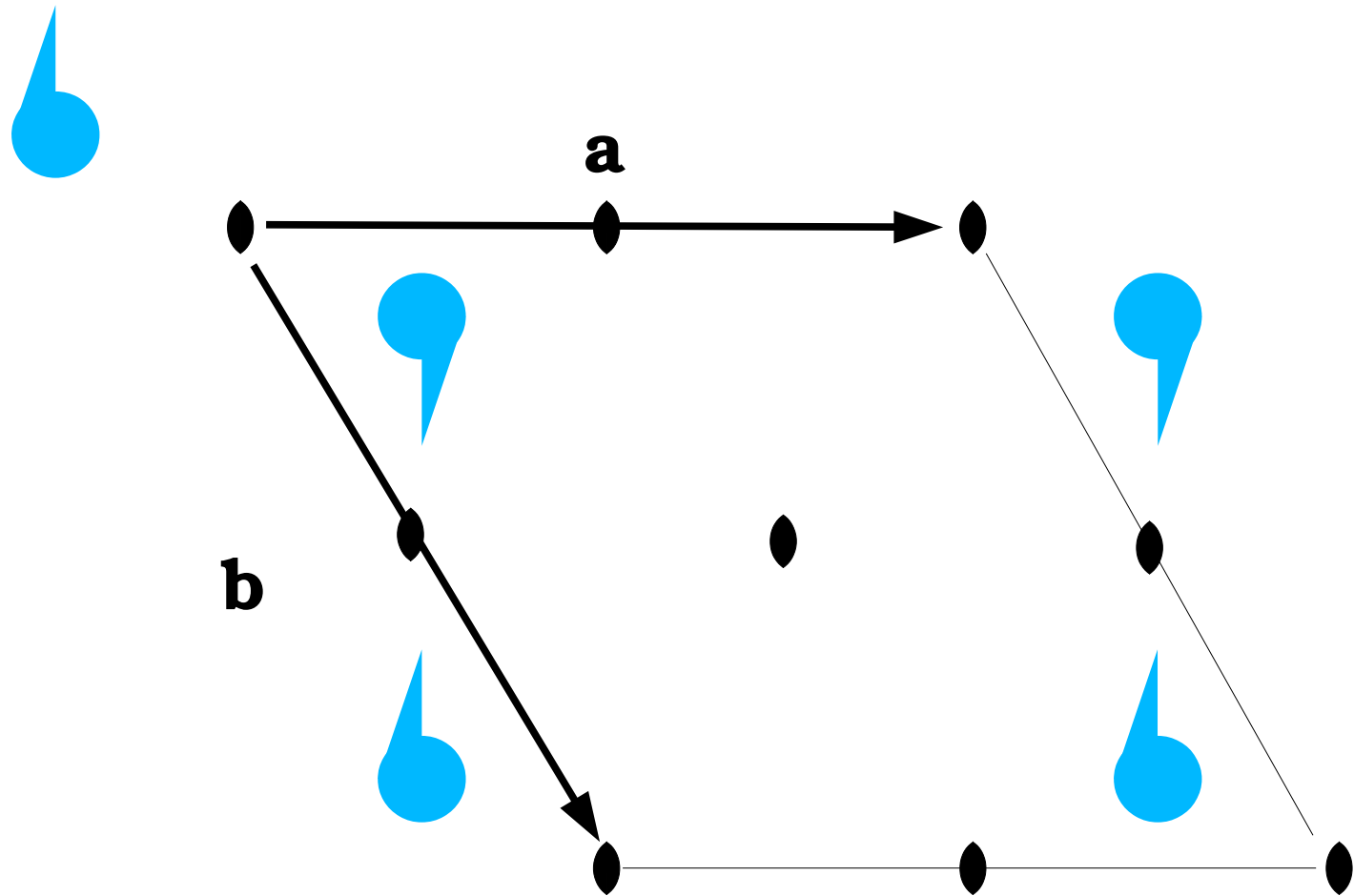
<http://journals.iucr.org/j/issues/2010/05/02/kk5061/index.html>

<http://journals.iucr.org/j/issues/2010/05/02/isscontsbdy.html>

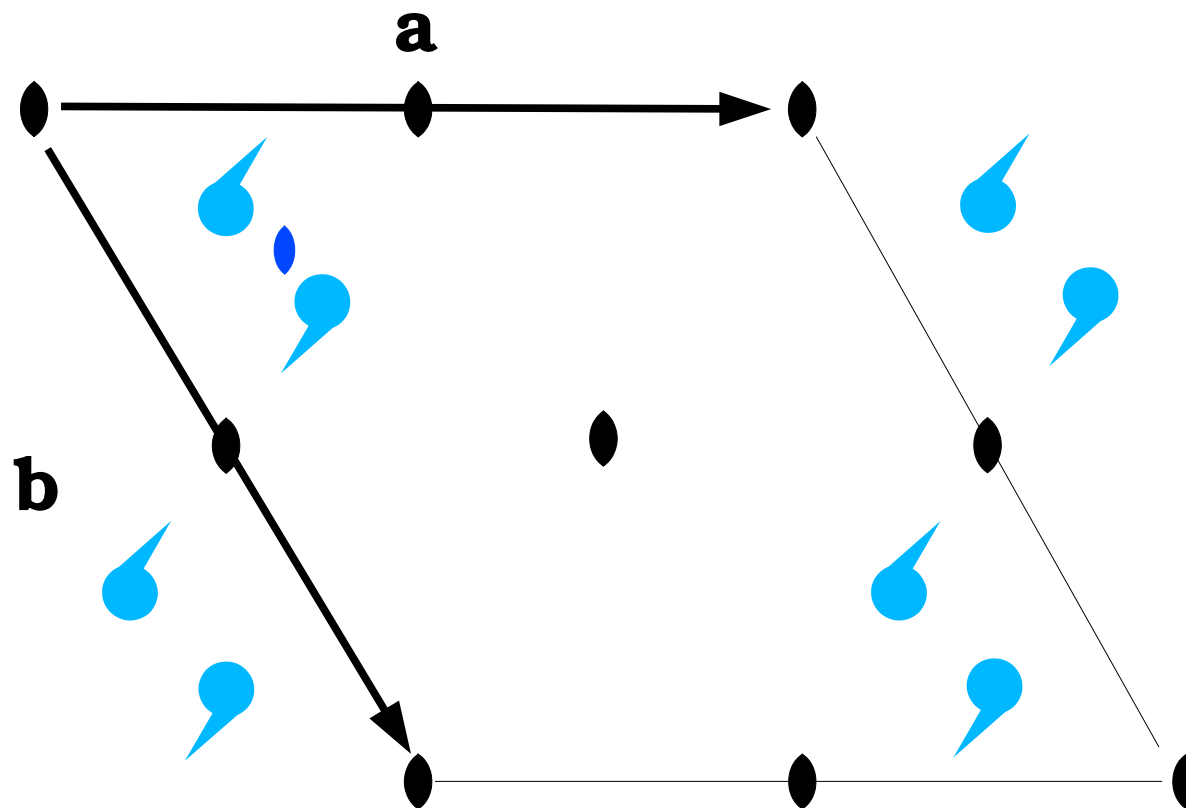
# Gardelēs užpildymas



# Asimetrinis vienetas



# Nekristalografinè simetrija



# Asimetrinio vieneto ir biologinio multimeru ryšys

- Asimetriniame vienete paprastai būna viena arba kelios baltymo grandinės
- Biologinis multimeras gali sutapti su asimetriniu vienetu, bet gali būti mažesnis arba didesnis ( $1/2$ ,  $2$ ,  $1\ 1/2$ , ir t.t.)