病毒学杂志 2，1988
Virologica Sinica

壳粒在正二十面体病毒衣壳中的排列及其数学推算

王 继 科

（中国农业科学院哈尔滨兽医研究所，哈尔滨）

提 要

壳粒是病毒的一个形态亚单位，它有规律地排列在二十面体衣壳内。壳粒的数目(N)是由三角形剖分数(T)规定的：$N=10T+2$，$T=pf^2$，这里f是整数，p是级数，$p=h^2+hk+k^2$（h和k是没有公因数的任意一对整数）。如果已知h，k和f，就可以推算出壳粒数N。

自从Crick和Watson (1956)提出：许多小病毒可能是由同样的蛋白亚单位有规律地组合而成以后，Casper和Klug (1962)进一步提出了“准等价”的概念[1]，从而为病毒构形，解离和装配的研究开创了一个新时期。使病毒分子生物学取得了长足的进展，有关基础理论也日趋完善[2][3]。特别是高分辨率电镜和X—光衍射实验技术的应用，不仅把病毒粒子的微细结构奇迹般地展现出来，而且为运用数学模型进行推算成为可能。

目前，壳粒作为病毒的形态亚单位（morphological subunit）已为人们所瞩目，这不仅因为它是只能在高分辨率电镜下才能分辨得出的最基本的单位，而更重要的是为进一步研究病毒的原子结构（atomic structure）提供了前提[4]。由于它在病毒体上有规律地排列和组合，给病毒学研究增添了光彩。甚至，建筑师们也为之惊叹，正二十面体病毒竟然同现代足球极其相似。

那么，壳粒在正二十面体上是如何排列的呢？为此，我们先用一张等边三角形的坐标纸（如图1所示）来加以说明。设任一交点为0点，从0点出发的两条边，分别为h坐标和k坐标。当$h=1$，$k=0$时，可以看出：所形成的三角形恰好是构成二十面体的一个三角形面，如果在坐标纸上适当地取出二十个这样的三角形（如图1 A—1.1所示），那么，经过裁剪和折叠就很容易做成一个正二十面体模型来，即病毒模型。而且，正二十面体上的每个点跟坐标纸上的诸点是一一对应的。这就将平面坐标同立体的正二十面体病毒联系起来了。

二十面体是一个伯拉图体（platonic solid），它是由20个等边三角形面，12个顶点和30条边所构成的，它具有5:3:2重对称轴[5]。壳粒（Capsomeres）就是分布在这样一个二十面体病毒衣壳（Capsids）中，或者说衣壳是由壳粒构成的。

从图1 A—1中可以看出：壳粒在二十面体上的位置，恰好落在坐标的交点上。在

本文在1987年6月20日收到

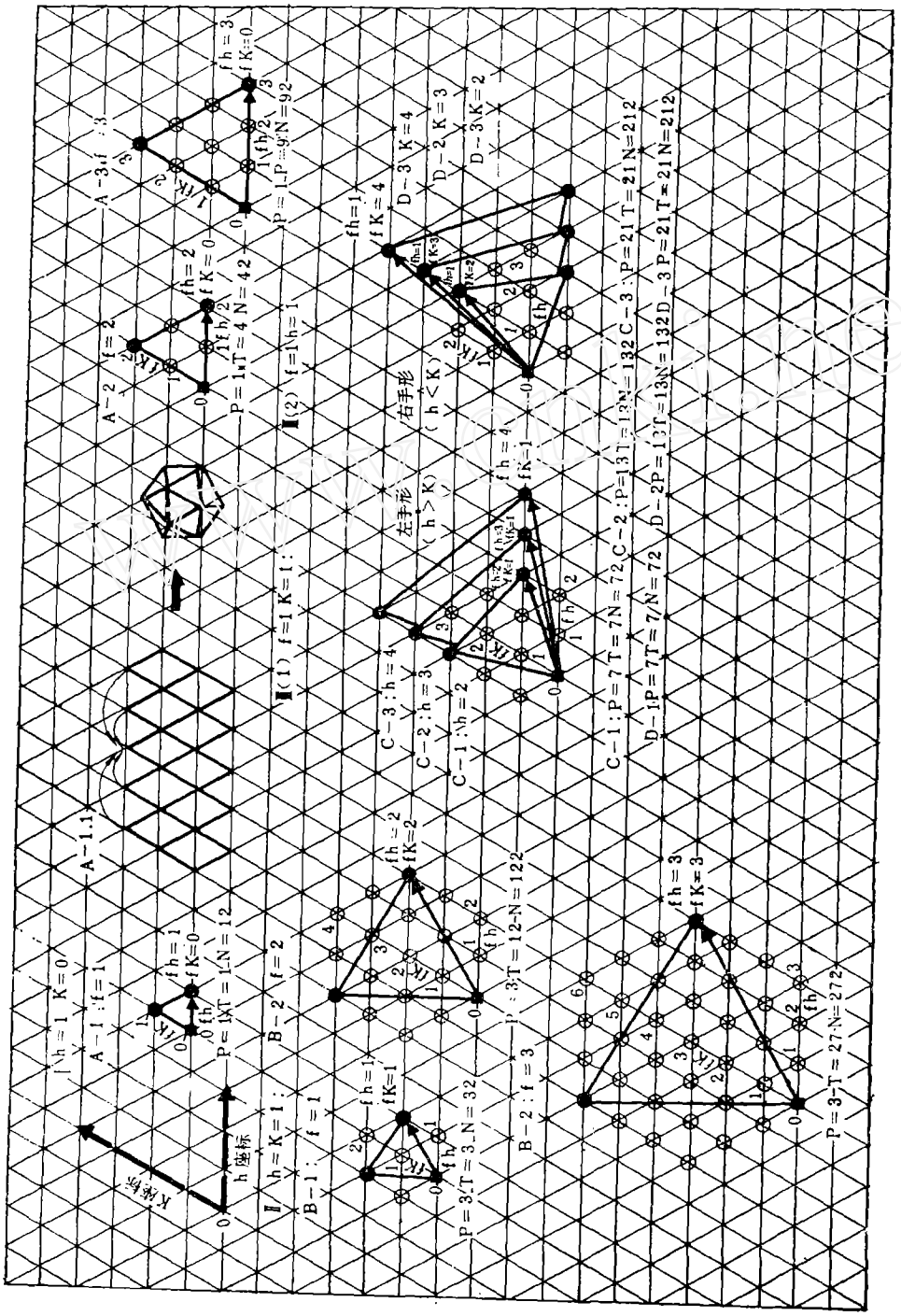

图1.正二十面体衣壳的各种形式及其参数（说明见下一页）

Fig 1 Various forms of icosahedral capsids and their parameters, a detailed account in next page

（图1）说明

三角形剖分T数可通过在一张等边三角形坐标纸（细线）上画出的二十面体的三角形（粗线）获得。壳粒位于坐标的交点上。实心黑圆点是五邻粒；空心白圆点是六邻粒。选择二十面体三角形面的一边（箭头）作为从一起点（方点）到另一五邻粒的矢量。则终点至相对于起点的矢量之坐标就决定了衣壳的参数。h和k是基本矢量；f是测量这种基本矢量穿过坐标交点多少次；p是级数；T是测得的二十面体三角形面内的单位三角形数。

根据参数h、k和f，我们把正二十面体衣壳分成三种类型：Ⅰ.h=1 k=0（或h=0 k=1）；Ⅱ.h=k=1；Ⅲ.f=1；k=1（f=1 h=1）。

The triangulation number T is obtained by drawing the basic triangular face of the icosahedron (heavy lines) on a sheet of coordinates (thin lines) forming equilateral unit triangles. Capsomers are located at the intersection of the coordinates; the black circles are pentons, the white ones are hexons. One of the sides of the triangular face of the icosahedron (arrow) is chosen as the vector going from an origin (square) to another penton. The coordinates of the end to the vector with respect to the origin determine the parameters of the capsid, h and k are the basic vector; f measures how many times the basic vector crosses an intersection of the coordinates; P is the class number; T measures the number of unit triangles within the triangular face of the icosahedron.

Icosahedral capsids are divided into three groups based on parameters h, k and f. Ⅰ.h=1 k=0 (or h=0 k=1); Ⅱ.h=k=1; Ⅲ.f=1 k=1 (or f=1 h=1).

图A—1中只见有三个壳粒。可想而知，这个二十面体病毒应含有12个壳粒，并且皆为五邻粒（penton）。这只是最简单，最小病毒壳粒的基本安排。更大更复杂病毒壳粒又是如何排列的呢？为增大病毒体积，有两种办法：一是增大构成壳粒的生物化学亚单位，即蛋白质的大小，但是蛋白质通常在30,000～70,000道尔顿（dalton）范围之间，所以单凭增大蛋白质的大小来增大病毒体积是有限的；二是增加壳粒的数目。为了说明这一过程，通常采用把大三角形划分成若干个小三角形的办法来分析各个参数间的关系。由大三角形分成若干个小三角形叫三角形剖分（triangulation），新分成的三角形数叫三角形剖分数，用T来表示。按结晶学原则，在一种二十面体病毒衣壳中只能容纳一定数量的壳粒。壳粒数目(N)可以由

$$N = 10T + 2 \qquad (1)$$

给出[3]。而T值又可以由公式

$$T = pf^2 \qquad (2)$$

求得[6]。这里p是级数，f是整数。p值可以从坐标纸上算出[3]：

$$p = h^2 + hk + k^2 \qquad (3)$$

这里h和k是无公因数的任意一对整数。把公式（3）代入（2）得：

$$T = (h^2 + hk + k^2)f^2 = (fh)^2 + (fh)(fk) + (fk)^2 \qquad (4)$$

这样在坐标纸上，根据所给出的h，k和f值，就可以算出p，T值和壳粒数(N)。同时，还可以在坐标纸上绘制出壳粒的各种不同的排列方式。下面分三种情况予以计算：

Ⅰ.当h=1，k=0（或h=0，k=1）时：

若f=1（见图1，A—1），

则 $P = h^2 + hk + k^2 = 1$，$T = pf^2 = 1$，

$N = 10T + 2 = 12$(壳粒)；

若f = 2（见图1，A—2），

则 $P = 1$，$T = pf^2 = 4$，

$N = 10T + 2 = 42$(壳粒)；

若f = 3（见图1，A—3）

则 $P = 1$，$T = pf^2 = 9$，

$N = 10T + 2 = 92$(壳粒)。

以此类推，可以算出$N = 162$，252，362，…

Ⅱ.当h = k = 1时：若f = 1（见图1，B—1），

则 $P = h^2 + hk + k^2 = 3$，$T = pf^2 = 3$，

$N = 10T + 2 = 32$(壳粒)；

若 f = 2（见图1，B—2），

则 $P = 3$，$T = pf^2 = 12$，

$N = 10T + 2 = 122$(壳粒)；

若 f = 3（见图1，B—3），

则 $P = 3$，$T = pf^2 = 27$，

$N = 10T + 2 = 272$(壳粒)。

以此类推，可以算出：N = 482，752，…

Ⅲ.当h≠k，h或k不等于0，k = 1，f = 1时：若h = 2（见图1，C—1），

则 $P = h^2 + hk + k^2 = 7$，

$T = pf^2 = 7$，

$N = 10T + 2 = 72$(壳粒) 呈左手形；

若h = 3（见图1，C—2），

则 $P = 13$，$T = pf^2 = 13$，

$N = 10T + 2 = 132$(壳粒) 呈左手形；

若 h = 4（见图1，C—3），

则 $P = 21$，$T = pf^2 = 21$，

$N = 10T + 2 = 212$(壳粒) 呈左手形。

以此类推，可以算出：N = 312，432，…

反之，h 换成 k，则 P，T 和 N 值不变与上述相等，但是呈右手形(见图1，D—1，D—2，D—3）。

有关病毒壳粒的计算及其与其它参数之间的关系，已经被一些已知病毒所证实。例如，细小病毒壳粒数为32，其中有12五邻粒和20六邻粒（hexon）。疱疹病毒为162，腺病毒为252等（详见表1）。有些病毒壳粒正在确立之中，例如，有人认为爱滋病病毒（HIV）T = 7[7]。还有一些新病毒的壳粒的排列及其推算在等待人们去发现和研究。

总而言之，壳粒在二十面体病毒衣壳中的排列与分布不是杂乱无章的，而是对称地有规律地排列组合。因此，能使整个病毒容积最大，所处的能级最低，结构更坚固，进而适应病毒生存及其代谢的需要。

表1 正二十面体病毒及其壳粒数的计算

Table 1 Icosahedral viruses and the calculation of capsomer number

级数 P	整数 f	坐标 h, k	△数 $T=pf^2$	壳粒数 $N=10T+2$	病毒名称	图号	参考文献
1	1	1, 0	1	12	噬细体φ174,	A—1	〔3〕
	2	1, 0	4	42	Nuolaurelia capensis	A—2	〔10〕
	3	1, 0	9	92	呼肠孤病毒	A—3	〔1〕
	4	1, 0	16	162	疱疹病毒		〔8〕
	5	1, 0	25	250	腺病毒		〔8〕
	…	1, 0	…	…			
3	1	1, 1	3	32	细小病毒，小RNA病毒 环状病毒	B—1	〔8〕
	2	1, 1	12	122	呼肠孤病毒	B—2	*
	3	1, 1	27	272		B—3	
	…	1, 1	…	…			
7	1	2, 1/1, 2	7	72	乳多空病毒	C—1/D—1	〔8〕
13	1	3, 1/1, 3	13	132	呼肠孤病毒	C—2/D—2	〔9〕
21	1	4, 1/1, 4	21	212	λ噬菌体	C—3/D—3	〔3〕
…	1	…	…				

*Suffing等人认为

壳粒的这种排列不仅被实验所证实，而且，可以用数学对其壳粒数进行计算。无疑采用数学表达方式，更具有普遍性和预见性，对预测未知病毒及其壳粒排列状态，是十分有益的。同时，为进一步研究病毒结构及其生物学特性等也提供了理论依据。

参 考 文 献

〔1〕 Martin, S. J., 1978, The Biochemistry of Viruses 40—73, Cambridge University Prees

〔2〕 Kaper, J. M., 1975, The chemical Basis of Virus Structure, Dissociation and Reassembly, 15—90, North—Holland Publishing Company、Amsterdam. Oxford. American Elsevier Publishing Campany, INC—New York.

〔3〕 Nayak, D. P., 1977. The Molecular Biology of Animal Viruses. 1—39. Marcel Dekker, INC. New York and Easel.

〔4〕 Luo, M, et al, 1987, *Science*, Vol. 235. No.4785, 182—190

〔5〕 Fenner, F. J.and White, D. O., 1970, Medical Virology. 5—9. Academic press, New york and London.

〔6〕 Dulbecco, R. et al., 1980. *Virology*. 854—884、Harper and Row, publishers, INC.

〔7〕 Gelderblom, H. R. et.al, 1987. *Virology*. 156, 171—176.

〔8〕 Matthews, R. E. F., 1982. *Intervirolo*ɔ*y*, 17, N01—3.

〔9〕 Metcalf, P., 1982, *J Ultrastruct Res* 3: 292—301.

〔10〕 Horne, W. R., 1978, The Structure and Function of Viruses, 4—9, Edward Arnold publishers Led.

The Arrangment of Capsomers in an Icosahedral Capsid and Its Mathematical Calculation

Wang Ji-ke

(*Harbin Veterinary Research Institute of Chinese Academy of Agricultural Sciences, Harbin*)

Capsomer is a morphological subunit of virus. It was regularly arranged in an icosahedral capsid. The numbers of capsomers(N) are defined by the triangulation numbers (T). $N = 10T + 2$, $T = pf^2$, $p = h^2 + hk + k^2$, where f is an integer and p is the class number, h and K are any pairs of integers without common factors. If h, k and f are known, N can be calculated.