СИММЕТРИЯ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ЦЕПЕЙ ФОСФОЛИПИДОВ И ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЕ СОТЫ

[1]Талис А.Л., [2]Рабинович А.Л.

[1]Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова Российской академии наук, г. Москва

[2]Институт биологии - обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Карельский научный центр Российской академии наук», г. Петрозаводск

[1]Талис А.Л.
[2]Рабинович А.Л.
[1]Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова Российской академии наук
[2]Институт биологии - обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Карельский научный центр Российской академии наук»

Молекулы фосфолипидов биологических мембран образуют их “матрикс”; они состоят из полярных (гидрофильных) головных частей и углеводородных (жирнокислотных) цепей. Как правило, эти цепи линейные, и они могут быть аппроксимированы цепями правильных тетраэдров (комбинация которых позволяет получить тетракоординированные структуры). Актуальным является вопрос об адекватном описании симметрийных свойств подобных линейных цепных молекул. Несмотря на то, что речь идет о молекулах в 3-мерном *евклидовом* пространстве E^3, важную роль в решении данного вопроса может сыграть симметрия их аналогов в 3-мерных *римановых* [1] пространствах.

Действительно, существует евклидово пространство, соприкасающееся с заданным римановым пространством [1, p.99] вдоль любой данной кривой. Можно поставить задачу отыскания границ применимости подобной теоремы, если этой кривой (линией) будет являться остов реальной линейной цепной молекулы, допускающей в E^3 аппроксимацию цепями одинаковых *правильных* тетраэдров. В этом случае

– (*а*) линейную подструктуру следует искать в 3-мерных римановых пространствах лишь *постоянной* кривизны, и

– (*б*) следует выявить, какие ограничения накладываются на длину такой подструктуры, т.е. какова максимальная “структурная единица”, которую в дальнейшем можно использовать для образования цепей большей протяженности и исследования их симметрии (назовем эту единицу “базовой”, если ее триангулированная поверхность окажется при этом еще и максимально симметричной).

Пусть римановым пространством является пространство постоянной отрицательной кривизны H^3, разделенное на правильные гиперболические тетраэдры. Это гиперболические соты {3,3,6}, у каждого ребра которых сходятся 6 гиперболических тетраэдров [2, 3]. Искомая базовая структурная единица является объединением по граням правильных тетраэдров, и количество ее вершин не должно меняться при ее отображении из H^3 в E^3. Содержать больше 5 тетраэдров подобная единица не может в силу невозможности объединить 6 правильных тетраэдров у одного ребра в пространстве E^3 (можно только 5). Однако она не может содержать и 5 правильных тетраэдров, поскольку такое объединение имеет $v = 8$ вершин, тогда как возможность наиболее симметричной триангуляции поверхности достигается лишь при количестве вершин $v = 0, 3, 4, 7 \pmod{12}$ [4, с.105]. Таким образом, базовой структурной единицей может быть лишь 7-вершинное линейное объединение, это 4 правильных тетраэдра (15 ребер и 10 граней), - тетраблок, имеющий три конформационных варианта: два энантиоморфных (правый и левый) и один неэнантиоморфный (плоский) [5, 6].

Правый (левый) тетраблок представляет собой реализацию 7-вершинной триангуляции сферы в виде многогранника. В свою очередь, эта триангуляция сферы определяется правой (левой) 7-вершинной триангуляцией тора $T_{2+\zeta}$ ($T_{2+\bar{\zeta}}$), где $\zeta = (1+\sqrt{-3})/2$, $\bar{\zeta} = (1-\sqrt{-3})/2$, $(2+\zeta)(2+\bar{\zeta}) = 7$ [2, 7]. Согласно работе [8], “правое” разбиение $M(T_{2+\zeta})$ на тетраэдры в сотах {3,3,6} содержит 28 гиперболических тетраэдров, обладает группой симметрии проективной специальной линейной группы PSL(2,7) порядка 168 и является одним из 8 объединений тетраэдров, которые имеют конечный объем [2] в сотах {3,3,6}.

Показано, что все множества, рассматриваемые в [8], можно определить разложениями на смежные классы группы $PSL(2,7) \equiv {}^7O$ [9] – группы симметрии

квартики Клейна. Неэнантиоморфный тетраблок определяется разложением проективной общей линейной группы PGL(2,7). Группы PGL(2,7) и PSL(2,7) связаны с симметрической группой S_8 [10, p.22; 11, p.29]. Симметрии S_8 отображают симметрии цепей, которые можно образовать из тетраблоков; это позволяет в итоге отобразить (описать) и симметрии углеводородных цепей, входящих в состав молекул фосфолипидов.

Для возникновения реальных структур в компонентах фосфолипидов, возникновения структур с некристаллографической (скрытой) симметрией в реальных цепях тетраэдров существование симметрии тетраблока является необходимым, но не достаточным условием (подобно тому, как существование федоровской группы, определяющей возможность кристаллического упорядочения, еще не гарантирует возникновения соответствующего реального кристалла при данных физических условиях) [12].

Работа выполнена по темам №0085-2019-0004 (№ г.р. АААА-А18-118012590359-8) и №0221-2017-0050 (№ г.р. АААА-А17-117031710039-3).

Литература

1. *Cartan E.* Geometry of Riemannian spaces. Math Sci. Press, Brookline, 1983.
2. *Görner M.*, arXiv:1406.2827v3 [math.GT] 2016.
3. *Thurston W.P.*, Classical Quantum Gravity. 1998. V.15. No.9. P.2545-2571.
4. *Рингель Г.* Теорема о раскраске карт. М.: Мир, 1977. 256 с.
5. *Samoylovich M., Talis A.* Acta Cryst. 2014. V. A70. P.186-198.
6. *Samoylovich M., Talis A.* Arxiv1606.01237.
7. *Altshuler A.* Discrete Mathematics. 1971. V.1. No.3. P.211-238.
8. *Agol I.*, Thurston's congruence link. http://www.math.uic.edu/~agol/conglink.pdf.
9. *Ceulemans A., King R.B., Bovin S.A., Rogers K.M., Troisi A., Fowler P.W.* // J. Math. Chem. 1999. V.26. Nos.1-3. P.101-123.
10. *Conway J.H., Curtis R T., Norton S.P., Parker R.A., Wilson, R.A.* Atlas of Finite Groups. Oxford: Clarendon Press. 1985.
11. *Li C.H., Xia B.* // arXiv:1408.0350v3 [math.GR].
12. *Talis A.L., Rabinovich A.L.* OP&PM Surveys Appl. Industr. Math. 2018. V.25. No.1. P.56-58.