МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СТРУКТУРЫ, АППРОКСИМИРУЕМЫЕ ЦЕПЯМИ ПРАВИЛЬНЫХ ТЕТРАЭДРОВ: БАЗОВАЯ СТРУКТУРНАЯ ЕДИНИЦА

[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»

Известно, что отображение риманова [1] пространства на соприкасающееся евклидово пространство сохраняет все расстояния, измеренные в соседстве с заданной кривой с точностью до бесконечно малых второго порядка [1, p.99]. Переходя к реальной подструктуре упорядоченной кристаллической (или некристаллической) структуры в 3-мерном евклидовом пространстве E^3, разумно полагать, что если она является *линейной*, то симметрия расположения атомов в ней (на определенной ее *протяженности*) может определяться симметриями неевклидовых математических конструкций; последние, подобно федоровским группам для кристаллов, не предполагают существования атомов. Минимальное число точек, которые могут не лежать в E^3 в одной плоскости, равно 4, и эти точки образуют тетраэдр.

Рассмотрим упорядоченные структуры, которые можно свести к комбинации структур, допускающих аппроксимацию цепями *одинаковых* (конгруэнтных) *правильных* тетраэдров. Пусть неевклидово пространство имеет положительную кривизну. Для соотнесения с цепями *одинаковых* правильных тетраэдров в E^3 кривизна пространства должна быть постоянной. Таковой является 3-мерная сфера S^3 [2]. Рассмотрим ее разбиения на правильные тетраэдры; это 4-мерные многогранники - “политопы” {3,3,3}, {3,3,4} и {3,3,5} [2]. Упомянутую выше *протяженность* подструктуры измерим количеством входящих в подструктуру тетраэдров - она составит базовую структурную единицу, с помощью которой могут быть построены более длинные цепи; ее определение состоит в следующем. Рассмотрим в E^3 только такие линейные объединения правильных тетраэдров по граням, в которых количество тетраэдров и количество вершин равно таковым в аналогичных объединениях тетраэдров из регулярных разбиений пространства S^3 (т.е. при переходе из S^3 в E^3 они сохраняются). То объединение из перечисленных, в котором количество тетраэдров окажется максимальным, и при этом триангулированная поверхность объединения – максимально симметричной, и назовем базовой структурной единицей цепи тетраэдров.

Цепи из правильных тетраэдров могут принимать разные “конформации”, в том числе содержать участки максимально плотных объединений правильных тетраэдров, а идеально плотные упаковки достигаются именно в “политопах” {3,3,3}, {3,3,4} и {3,3,5}. Анализ и сравнение этих упаковок позволили установить, что сформулированным выше условиям для базовой структурной единицы цепи удовлетворяет в пространствах S^3 и E^3 лишь линейное объединение по граням 4-х правильных тетраэдров (оно имеет 7 вершин), – тетраблок. Он реализуется в трех вариантах: правом и левом (энантиоморфных) и плоском (неэнантиоморфном).

Группа симметрии тетраблока определяется [3] проективной специальной линейной группой $PSL(2,7) \equiv {}^7O$, которая имеет порядок 168. Строение группы ${}^7O$ – расширения группы вращений октаэдра O циклической группой 7-го порядка, определяет наличие энантиоморфных (левого и правого) вариантов тетраблока, которые взаимно трансформируются друг в друга (дробно-линейными преобразованиями) через неэнантиоморфный (плоский) вариант тетраблока. “Правой” и “левой” орбитам группы ${}^7O$ из 7 элементов соответствует ее разложение на смежные классы, соответственно, по несопряженным подгруппам O' и O'' (являющимся группами вращений октаэдра) группы ${}^7O$. Правый и левый тетраблоки обладают точечной группой симметрии C_2, поэтому они определяются разложениями ${}^7O$ на двойные смежные классы по подгруппам C_2 и O' (O''). Эти разложения задают группы цветной [4] W-симметрии $({}^7O')^w$ и $({}^7O'')^w$, изоморфные группе ${}^7O$, в которых все элементы группы ${}^7O$, кроме группы C_2, нагружены

дополнительными преобразованиями. Группа симметрии плоского варианта тетраблока аналогично определяется [3] разложением проективной общей линейной группой PGL(2,7).

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. *Coxeter H.S.M*. Regular Polytopes. N.Y.: Dover Publ., 1973.
3. *Talis A.L., Rabinovich A.L.* OP&PM Surveys Appl. Industr. Math. 2018. V.25. No.1. P.56-58.
4. *Копцик В.А., Коцев И.Н.* К теории и классификации групп цветной симметрии. II. W –симметрия. Сообщения ОИЯИ, Дубна, 1974, Р4 – 8068.