СИММЕТРИЯ ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ И ТЕТРАКООРДИНИРОВАННЫХ СТРУКТУР И КОМБИНАТОРНЫЕ КОНСТРУКЦИИ

[1]Рабинович А.Л., [2]Талис А.Л.

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

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

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

Важное место в живой и неживой природе занимают молекулы цепного строения. Основу биологической мембраны образуют молекулы фосфолипидов, а их компоненты - жирнокислотные (углеводородные) цепи. Значительная часть каждой цепи является тетракоординированной структурой; строение цепей в фосфолипидах биомембран характеризуется рядом специфических особенностей. В настоящей работе существование этих особенностей связывается с симметрийными свойствами определенных структур; можно показать, что цепи разного строения по этим симметрийным свойствам неэквивалентны. Известно, что линейные стержни из правильных тетраэдров, объединенных друг с другом по граням, не обладают трансляционной симметрией, но таковой можно добиться, допуская искажения тетраэдров. Оказалось, что вносимые в тетраэдры искажения будут минимальными, если период достигается на длине в 8 тетраэдров [1, 2], поэтому стержень из 8 тетраэдров был использован при интерпретации экспериментальных данных реальных кристаллических структур [1].

Для прояснения причин появления таких закономерностей рассмотрим комбинаторную конструкцию, которая может наиболее адекватно отобразить симметрию правильного тетраэдра и линейных объединений по граням правильных тетраэдров (алмазоподобное объединение двух таких тетраэдрических цепей дает тетракоординированную структуру). Совокупность вершин тетраэдра, которым присвоены номера 1, 2, 3, 4, разбивается на 4 тройки чисел (грани): 1,2,3; 1,3,4; 1,2,4; 2,3,4. Номера любых двух вершин (т.е. ребро) входят только в две тройки чисел (т.е. принадлежат только 2-м граням). Комбинаторную структуру правильного тетраэдра можно рассматривать как частный случай общей t-(v,k,λ)-схемы [3, с.118]: это множество $v = 4$ элементов, разбитых на подмножества (блоки) из $k = 3$ элементов таким образом, что любое подмножество из $t = 2$ элементов содержится точно в $\lambda = 2$ блоках. Перечисленные параметры удовлетворяют условию $v = 1 + k(k\text{-}1)/2$. В этой терминологии тетраэдр определяется 2-(4,3,2)-схемой. Для решения поставленной задачи рассмотрим и другие t-(v,k,λ)-схемы при $t = \lambda = 2$, т.е. 2-(v,k,2)-схемы, поскольку они могут отвечать многогранникам и поэтому оказаться потенциально важными.

Вершины правильного тетраэдра ($v = 4$) принадлежат регулярному разбиению сферы на треугольники. В общем случае наиболее симметричная регулярная триангуляция некоторой поверхности эквивалентна треугольному вложению полного графа в “ориентируемую поверхность рода p” (т.е. сферу с p “ручками”) [4]. Это вложение, как известно [4; с.105], оказывается возможным осуществить лишь для количества вершин v = 0, 3, 4, 7 (mod 12). При этом 2-(v,k,2)-схемы могут быть реализованы только для количества вершин v = 4, 7, 11, … Совпадение по количеству вершин v, хотя и не по форме граней, имеется лишь при $v = 4$ и $v = 7$.

Осуществить при $v = 7$ регулярную триангуляцию поверхности можно в единственном случае [4; с.105]: если эта поверхность является тором (сферой с одной “ручкой”, $p = 1$); это разбиение содержит 14 треугольников, 21 ребро. Варианту $v = 7$ отвечает 2-(7,4,2)-схема. Симметрию комбинаторной конструкции можно отобразить таблицей инцидентности: в ней для каждого блока указано, какие элементы ему принадлежат (и не принадлежат). При этом оказывается, что для 2-(7,4,2)-схемы невозможно предложить “треугольную” геометрическую интерпретацию (необходимую для рассматриваемой задачи), поскольку подмножества (блоки) в этой схеме состоят не из 3-х, а из 4-х элементов. Вместе с тем можно перейти от 2-(7,4,2)-схемы к 2-(7,3,1)-схеме: таблица инцидентности 2-(7,3,1)-схемы комплементарна таблице инцидентности исходной 2-(7,4,2)-схемы, а ее блоки состоят из 3-х элементов, т.е. существует “треугольная” геометрическая интерпретация схемы. Это уже упомянутая 7-вершинная регулярная триангуляция тора [5], которая реализуется в “правом” и “левом” вариантах. Обоснованием для перехода от одной схемы к другой является тот факт, что для схем с комплементарными таблицами инцидентности группы симметрии совпадают. В случае 2-(7,4,2)- и 2-(7,3,1)-схем их группой симметрии является проективная специальная линейная группа PSL(2,7), порядок которой 168 [6].

Необходимым шагом для решения задачи является переход от триангулированного тора (2-мерной поверхности) к тетраэдрической структуре в 3-мерном евклидовом пространстве. Регулярной v-вершинной триангуляции тора можно, согласно [7, p.218], поставить в соответствие n-вершинную триангуляцию сферы, где $4 \le n \le v$. В случае 7-вершинной триангуляции сферы (для $v = 7$ она является нерегулярной) существует, согласно [4, с.84], такой 7-вершинный многогранник, все грани которого являются треугольниками. Известное соотношение Эйлера, связывающее количество вершин, ребер и граней многогранников (которые топологически эквивалентны сфере), позволяет для рассматриваемого случая определить количество его граней, - 10, и ребер, - 15. Многогранник, имеющий 7 вершин, 10 граней и 15 ребер, и являющийся, согласно условиям исходной задачи, линейным объединением правильных тетраэдров, может содержать только 4 тетраэдра. Этот многогранник назовем тетраблок; нами показано, что его группа симметрии изоморфна группе PSL(2,7) [8].

Линейное объединение по грани 2-х тетраблоков (11 вершин) отвечает стержню из 8 тетраэдров и обладает группой симметрии, изоморфной группе PSL(2,11) порядка 660 [6]. Резкое увеличение количества элементов симметрии именно для 8 тетраэдров в линейном их объединении является причиной наблюдающихся в эксперименте явлений, отмеченных выше [1, 2] (см. также [9, 10]).

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

Литература

1. *Nyman H., Carroll C.E., Hyde B.G.* Z. Kristallogr. 1991. V.196. P.39-46.
2. *Sadler G., Fang F., Kovacs J., Irwin K.* arXiv:1302.1174v1 [math.MG], 2013.
3. *Конвэй Дж., Слоэн Н.* Упаковки шаров, решетки и группы. Т.1. М.: Мир, 1990. 415 с.
4. *Рингель Г.* Теорема о раскраске карт. М.: Мир, 1977, 256 с.
5. *White A.T.* Proc. London Math. Soc. 1995. V.s3-70. No.1. P.33-55.
6. *Martin P., Singerman D.* Eur. J. Combinatorics. 2012. V.33. No.7. P.1619-1630.
7. *Altshuler A.* Discrete Mathematics. 1971. V.1. No.3. P.211-238.
8. *Talis A.L., Rabinovich A.L.* OP&PM Surveys Appl. Industr. Math. 2018. V.25. No.1. P.56-58.
9. *Talis A., Kraposhin V.* Acta Cryst. A. 2014. V.70. P.616-625.
10. *Rabinovich A.L., Talis A.L.* OP&PM Surveys Appl. Industr. Math. 2018. V.25. No.1. P.53-54.