ОТОБРАЖЕНИЕ СИММЕТРИИ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ЦЕПЕЙ: ТЕТРАБЛОК – УНИВЕРСАЛЬНАЯ СТРУКТУРНАЯ ЕДИНИЦА

[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

Для данного риманова [1] пространства существует пространство евклидово, соприкасающееся с ним вдоль любой заданной кривой [1, p.99]. Можно предположить, что этот результат может быть “адаптирован” к реальным линейным молекулярным структурам (молекулам цепного строения), на определенной их длине, и использовать для рассмотрения вопроса об их симметрийных свойствах: изучая симметрии линейных подструктур в 3-мерных римановых пространствах, выявить “скрытую” симметрию этих молекулярных структур в 3-мерном евклидовом пространстве E^3.

Рассмотрим углеводородные цепи; различные цепи этого класса имеют широкое распространение в природе; в частности, они играют принципиальную роль как компоненты молекул фосфолипидов биомембран. Насыщенные цепи (или фрагменты цепей) - это тетракоординированные структуры, аппроксимацию которых можно провести определенной комбинацией цепей, которые состоят из объединений по граням одинаковых правильных тетраэдров. Поиск подходящих структур для выявления симметрии этих цепей можно вести среди тетраэдрических структур в 3-мерных римановых пространствах. Последние могут иметь лишь *постоянную* кривизну, - либо положительную, т.е. структуры - принадлежать разбиениям сферы S^3 (в частности, разбиению {3,3,5} на 600 тетраэдров) [2], либо отрицательную, т.е. структуры - принадлежать гиперболическим сотам {3,3,6} пространства H^3 [3, 4]. Для выявления максимальной длины своеобразного “квантования” симметрии (т.е. выявления максимально-возможной единицы, измеренной количеством содержащихся в ней тетраэдров) нами проведен анализ идеально плотных упаковок правильных тетраэдров в упомянутах разбиениях.

Для цепей в {3,3,5} (цепи могут иметь не более 30 вершин [2]) такой единицей оказалось линейное объединение по граням 4-х правильных тетраэдров – тетраблок (7 вершин, 10 граней, 15 ребер). К этому же результату, как оказалось, приводит рассмотрение комбинаторной конструкции, связанной с линейным объединением правильных тетраэдров по граням: она позволяет перейти [3] к 7-вершинной триангуляции тора $\{3,6\}_{2,1}$ (в каждой вершине сходятся 6 треугольников), а от нее - к тетраблоку [5].

Триангулированная поверхность тора $\{3,6\}_{2,1}$ вкладывается в открытую [3, 4] квартику Клейна - компактную риманову поверхность, для которой можно задать метрику плоскости Лобачевского H^2 постоянной отрицательной кривизны [3]. Открытая квартика Клейна определяет в гиперболических сотах {3,3,6} в H^3, у каждого ребра которых сходятся 6 тетраэдров, многообразие $M(\{3,6\}_{2,1})$, имеющее конечный объем, – одно из 8 таких многообразий [4]. Максимальное многообразие, имеющее конечный объем в бесконечных сотах {3,3,6}, содержит 672 гиперболических тетраэдра [4], что накладывает ограничение на возможное количество вершин цепи из тетраэдров.

Между $M(\{3,6\}_{2,1})$ и многообразием в S^3 существует взаимно-однозначное соответствие [3], которое приводит к существованию взаимно-однозначного соответствия тетраблоков в регулярных тетраэдрических разбиениях {3,3,5} пространства S^3 и {3,3,6} пространства H^3. Это взаимно-однозначное соответствие тетраблоков распространяется и на пространство E^3; его наличие позволяет вести речь об *универсальности* тетраблока в 3-мерных римановых [1] пространствах постоянной кривизны. Элементы группы PSL(2,7) - группы симметрии квартики Клейна [3, 4], в зависимости от локализации тетраблока - в пространствах S^3, E^3 или H^3, нагружаются дополнительными преобразованиями, образуя группу симметрии тетраблока, изоморфную группе PSL(2,7).

Таким образом, тетраблок – это *универсальная* максимально-возможная “единица”, позволяющая отобразить “некристаллографическую” (“скрытую”) симметрию тех линейных цепей правильных тетраэдров в пространстве E^3, для которых возможно вложение в конечные объединения правильных тетраэдров по граням в пространствах S^3 и H^3.

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. *Cartan E.* Geometry of Riemannian spaces. Math Sci. Press, Brookline, 1983.
2. *Coxeter H.S.M.* Regular Polytopes. N.Y.: Dover Publ., 1973.
3. *Agol I.* Thurston's congruence link. http://www.math.uic.edu/~agol/conglink.pdf
4. *Görner M.* arXiv:1406.2827v3 [math.GT] 2016.
5. *Talis A.L.*, *Rabinovich A.L.* OP&PM Surveys Appl. Industr. Math. 2018. V.25. No.1. P.56-58.