

СИММЕТРИЯ СТРУКТУР, АППРОКСИМИРУЕМЫХ ЦЕПЯМИ
ПРАВИЛЬНЫХ ТЕТРАЭДРОВ© 2019 г. А. Л. Талис^{1,*}, А. Л. Рабинович²¹ Институт элементоорганических соединений РАН, Москва, Россия² Институт биологии КарНЦ РАН, Петрозаводск, Россия

* E-mail: talishome@mail.ru

Поступила в редакцию 17.09.2018 г.

После доработки 04.12.2018 г.

Принята к публикации 04.12.2018 г.

Некристаллографические симметрии цепей правильных тетраэдров определены отображением системы конструкций алгебраической геометрии и топологии на структурный уровень. Показано, что базовой структурной единицей такой цепи является тетраблок – семивершинное линейное объединение по граням четырех правильных тетраэдров, которое реализуется в линейных (правом и левом) и плоском вариантах. Группа симметрии линейного тетраблока изоморфна проективной специальной линейной группе $PSL(2, 7)$ порядка 168, плоского – проективной общей линейной группе $PGL(2, 7)$ порядка 336. Введен класс структур, образуемых сборкой тетраблоков, не имеющих общих тетраэдров. Приведены примеры сборки тетраблоков по общей грани, приводящие к спирали Бердийка–Коксетера, α -спирали и спирали, используемой в качестве одной из моделей коллагена.

DOI: 10.1134/S0023476119030287

ВВЕДЕНИЕ

Федоровская группа – это группа жестких дискретных движений трехмерного евклидова пространства E^3 . Поэтому инвариантность E^3 относительно федоровской группы приводит к стабильности структуры кристалла аналогично, например, тому, как инвариантность E^3 относительно трансляций приводит к закону сохранения импульса [1]. В общем случае симметричные закономерности строения дискретной, в том числе кристаллической, структуры могут быть определены из требования ее соответствия определенным свойствам пространства E^3 , не сводящимся только к инвариантности пространства относительно федоровской группы.

Имеются и другие (помимо федоровских групп) следствия из нулевой кривизны пространства E^3 , позволяющие определять возможные симметрии его дискретных подструктур. Согласно [2, р. 99] “существует евклидова метрика, соприкасающаяся с данной (римановой [2]) метрикой вдоль всей данной кривой”. Одно из следствий этой теоремы состоит в том, что [2, р. 101] “наблюдатель, который перемещается только вдоль данной кривой и ограничивается производством измерений лишь в непосредственной близости от этой кривой, ... не сможет установить, что он находится не в евклидовом пространстве, если только он будет пренебрегать бесконечно

малыми выше первого порядка”. Пусть эта кривая (линия) совпадает с остовом реальной линейной цепной молекулы. Если сформулировать для такой цепи теорему, подобную [2, р. 99], то ее применимость будет ограничена рамками некоторой подструктуры, которую потребуется выявить; тогда можно полагать, что при отображении этой подструктуры (упорядоченной, кристаллической или некристаллической структуры) из неевклидова пространства в пространство E^3 можно определить ее симметрию. Очевидно, эта симметрия может определяться симметриями неевклидовых (римановых [2]) пространств.

Минимальное число точек, которые могут не лежать в E^3 в одной плоскости, равно 4, и эти точки образуют тетраэдр. Любой многогранник можно разбить на тетраэдры, поэтому дискретная структура сводится к комбинации структур, допускающих аппроксимацию цепями объединяемых по граням тетраэдров. Рассмотрим структуры, допускающие аппроксимацию цепями лишь правильных тетраэдров. Для поиска симметрий таких цепей в E^3 требуется рассмотреть линейные подструктуры трехмерных римановых пространств лишь постоянной кривизны: линейные подструктуры в регулярных разбиениях на тетраэдры сферы S^3 (постоянной положительной кривизны) и пространства H^3 (постоянной отрицательной кривизны). Пространство E^3 невозмож-

но разбить на правильные тетраэдры: одно общее ребро могут иметь максимум пять тетраэдров, между первым и пятым тетраэдрами остается угловой зазор, равный 7.35° . По этой причине нельзя замкнуть в кольцо цепь правильных тетраэдров, объединенных по граням [3], и триангулированная поверхность такой цепи в E^3 всегда является односвязной, т.е. топологически эквивалентной сфере. Вершины правильного тетраэдра принадлежат регулярному разбиению сферы на треугольники. Если триангуляция некоторой поверхности обладает наибольшей симметрией, то она является не только регулярной (в каждой ее вершине сходится одинаковое количество треугольников), но эквивалентной треугольному вложению полного графа в “ориентируемую поверхность рода p ” (т.е. в сферу с p “ручками”) [4]. Полным графом для v точек называется набор v точек, в котором каждая пара точек соединена ребром. Это оказывается возможным лишь для $v = 0, 3, 4, 7 \pmod{12}$ вершин [4, с. 105] на сфере с p “ручками”. Разбить на идеальные тетраэдры, однако, можно пространство S^3 , существуют три разбивающих его четырехмерных многогранника [5, р. 292] – политопа $\{3, 3, 3\}$, $\{3, 3, 4\}$ и $\{3, 3, 5\}$. Количество идеальных тетраэдров в них равно 5, 16 и 600 соответственно, а у каждого ребра сходятся 3, 4 и 5 тетраэдров, что отражено в условном символе соответствующего политопа [5]. Пространство H^3 также можно разбить на идеальные тетраэдры, что дает гиперболические соты $\{3, 3, 6\}$; в них у каждого ребра сходятся шесть идеальных гиперболических тетраэдров [6, 7].

В цепи, образованной правильными тетраэдрами в E^3 , можно выделить такие линейные объединения тетраэдров по граням, в которых количество тетраэдров и вершин равно таковым в аналогичных объединениях тетраэдров из регулярных разбиений пространств S^3 и H^3 . **Базовой структурной единицей** цепи тетраэдров будем называть то из упомянутых выше объединений тетраэдров, в котором количество тетраэдров оказалось максимальным, а триангулированная поверхность объединения – максимально симметричной (отметим, что, согласно [6–8], существует взаимно однозначное соответствие между определенными дискретными подструктурами пространств S^3 и H^3). Базовая структурная единица может отобразить в E^3 из S^3 и/или H^3 не только фрагмент абстрактной линии с ее окружением (что коррелирует с [2, р. 99]), но и скрытую (некристаллографическую) симметрию конкретной линейной неевклидовой тетраэдрической подструктуры (что согласуется с [6–8]). Можно ожидать, что некристаллографической симметрией будут обладать в E^3 и те цепи из базовых единиц, закон сборки которых определяется симмет-

риями регулярных тетраэдрических разбиений S^3 и H^3 .

Цель настоящей работы – показать, что конструкции алгебраической геометрии, соответствующие регулярным тетраэдрическим разбиениям пространств постоянной кривизны S^3 и H^3 , определяют в пространстве E^3 скрытую (некристаллографическую) симметрию ряда цепей из базовых структурных единиц. Такая симметрия реализуется, например, в строении α -спирали [9]. Необходимость снятия ограничений классической кристаллографии была подчеркнута еще в [10].

БАЗОВАЯ СТРУКТУРНАЯ ЕДИНИЦА ЦЕПИ ПРАВИЛЬНЫХ ТЕТРАЭДРОВ

При отображении тетраэдрической цепи из политопа $\{3, 3, 3\}$, $\{3, 3, 4\}$ и $\{3, 3, 5\}$ в E^3 число вершин объединения тетраэдров, составляющих искомую базовую единицу, не должно меняться в любой “конформации” тетраэдрической цепи. С ростом числа тетраэдров в цепи возникают ограничения. Невозможно без изменения числа вершин отобразить в E^3 три тетраэдра, расположенных у общего ребра из политопа $\{3, 3, 3\}$, четыре тетраэдра из политопа $\{3, 3, 4\}$ или пять тетраэдров из политопа $\{3, 3, 5\}$. Поэтому максимально возможная тетраэдрическая единица, которая при таких условиях может быть отображена в E^3 из политопа $\{3, 3, 3\}$ – это линейное объединение по граням двух правильных тетраэдров, из политопа $\{3, 3, 4\}$ – объединение трех тетраэдров, из политопа $\{3, 3, 5\}$ – объединение четырех тетраэдров. Объединения по граням двух и трех правильных тетраэдров содержат пять и шесть вершин соответственно, но триангуляции поверхностей с таким количеством вершин обладать наибольшей симметрией не могут [4, с. 105]. Линейное объединение четырех правильных тетраэдров содержит семь вершин, что уже отвечает возможности наиболее симметричной триангуляции поверхности ($v = 0, 3, 4, 7 \pmod{12}$) [4, с. 105]).

Симметрия искомой базовой структурной единицы должна быть как можно более высокой: это позволит выявить в E^3 класс максимально симметричных тетраэдрических цепей, образованных с ее помощью, поэтому в дальнейшем следует использовать только результат для политопа $\{3, 3, 5\}$. Таким образом, базовой структурной единицей цепи тетраэдров для S^3 и E^3 является семивершинное линейное объединение по граням четырех правильных тетраэдров; которое будем называть **тетраблок**.

Рассмотрим случай пространства постоянной отрицательной кривизны H^3 , разделенного на идеальные тетраэдры (это гиперболические соты

{3, 3, 6} [6, 7]), и выявим максимальную базовую структурную единицу, которая является объединением по граням правильных тетраэдров. Число вершин в ней не должно меняться при отображении из H^3 в E^3 . Содержать больше пяти тетраэдров подобная единица не может, так как невозможно в пространстве E^3 объединить шесть правильных тетраэдров у одного общего ребра; с другой стороны, объединение пяти правильных тетраэдров по граням тоже не подходит, так как содержит восемь вершин, а триангуляция поверхности с количеством $v = 8$ вершин не может обладать наибольшей симметрией [4, с. 105]. Поэтому, как и в предыдущем случае, остается только объединение четырех тетраэдров – тетраблок, который в итоге обретает смысл **универсальной** базовой структурной единицы. Пространственно тетраблок, очевидно, может реализоваться в трех вариантах: двух энантиоморфных (правом и левом) и одном неэнантиоморфном (плоском) – рис. 1, тогда как два и/или три объединенных по граням тетраэдра образуют только один вариант.

Отдельные аспекты затронутых вопросов упоминались в литературе. В частности, в [11, 12] отмечено существование объединений четырех тетраэдров по граням, которые названы в [12] “тетраэдрическими единицами”. Любая тетраэдрическая цепь строилась в [12] совмещением трех тетраэдров соседних тетраэдрических единиц. Однако задача определения какой-либо базовой совокупности тетраэдров для пространств E^3 , S^3 и H^3 в [11, 12] не ставилась. Семивершинное объединение по граням четырех тетраэдров вводилось в [9, 13], с его помощью была построена спираль, параметры которой оказались близки (с точностью до 2%) экспериментальным параметрам α -спирали. В [13] также рассмотрены некоторые аспекты симметрии такого объединения. Ряд вопросов, связанных с тетраблоком, затронут авторами в кратких сообщениях [14–18].

КОМБИНАТОРНЫЕ КОНСТРУКЦИИ И НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ СИММЕТРИЯ

Рассмотрим комбинаторную конструкцию, которая наиболее полно отображает симметрию правильного тетраэдра и линейных объединений по граням правильных тетраэдров. Совокупность 1234 четырех вершин 1, 2, 3, 4 тетраэдра (номера внутри белых кружков на рис. 2а) разбивается на четыре тройки чисел (грани) 123, 134, 124, 234 таким образом, что любая пара вершин (т.е. ребро) принадлежит только двум тройкам (т.е. граням). Комбинаторную структуру правильного тетраэдра можно рассматривать как частный случай t -(v, k, λ)-схемы [19, с. 118]: это множество $v = 4$ элементов, разбитых на подмножества (блоки) из

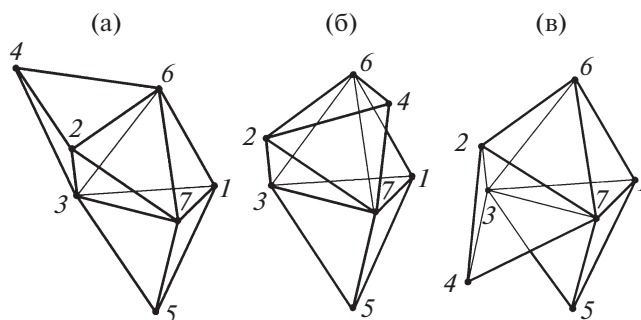


Рис. 1. Тетраблоки: правый (а) и левый (б) энантиоморфные варианты и неэнантиоморфный (плоский) вариант (в).

$k = 3$ элементов так, что любое подмножество из $t = 2$ элементов содержится в точности в $\lambda = 2$ блоках. Параметры удовлетворяют условию $v = 1 + k(k - 1)/2$. Симметрия комбинаторной конструкции отображается таблицей инцидентности (ТИ), в которой указаны элементы, принадлежащие каждому блоку. Если каждой тройке чисел (грани) присвоить номер 1, 2, 3 или 4 (номера внутри черных кружков над гранями на рис. 2а), то ТИ для тетраэдра можно представить таблицей 4×4 (рис. 2б). Она состоит из серых квадратов, которые являются знаками инцидентности (принадлежности), и пустых клеток. Номера столбцов $j = 1, 2, 3, 4$ в белых кружках – номера вершин, номера строк $i = 1, 2, 3, 4$ в черных кружках – номера граней тетраэдра (рис. 2б). Принадлежность вершины тетраэдра j грани i определяется серым квадратом в клетке на пересечении i и j в ТИ, тогда как пустая клетка означает отсутствие инцидентности. По этой таблице видно, например, что вершина 1 принадлежит граням 2, 3 и 4 (в столбце 1 есть три серых квадрата – в строках 2, 3 и 4). Любые две строки содержат два знака инцидентности, принадлежащие двум общим столбцам (т.е. любые две грани в пересечении содержат две вершины – ребро), и наоборот (рис. 2б). Любые три строки содержат один знак инцидентности,

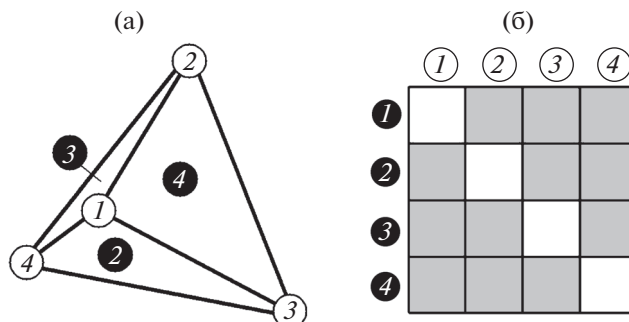


Рис. 2. Тетраэдр (а) и его таблица инцидентности (б).

принадлежащий одному общему столбцу, поскольку каждая вершина принадлежит трем граням. Таблица инцидентности допускает перестановку любых двух столбцов и/или двух строк между собой: эти перестановки оставляют тетраэдр инвариантным и потому являются элементами его группы симметрии.

Поскольку тетраэдр определяется $2-(4, 3, 2)$ -схемой, рассмотрим и другие $2-(v, k, 2)$ -схемы, так как они могут отвечать многогранникам и поэтому оказаться потенциально важными. Вершины правильного тетраэдра ($v = 4$) принадлежат регулярному разбиению сферы на треугольники. Как уже отмечалось, в общем случае наиболее симметричная (регулярная) триангуляция некоторой поверхности эквивалентна треугольному вложению полного графа в “ориентируемую поверхность рода p ” (т.е. в сферу с p “ручками”) [4], и возможно это лишь для числа вершин $v = 0, 3, 4, 7 \pmod{12}$ [4, с. 105]. Рассматриваемые $2-(v, k, 2)$ -схемы могут быть реализованы только при $v = 4, 7, 11, \dots$. Совпадение по числу v вершин с условием $v = 0, 3, 4, 7 \pmod{12}$ для регулярной триангуляции некоторой поверхности имеется лишь при $v = 4$ и $v = 7$. Осуществить регулярную триангуляцию поверхности при $v = 7$ можно в единственном случае [4, с. 105], если эта поверхность – тор (т.е. сфера с одной “ручкой”, $p = 1$); разбиение содержит 14 треугольников, 21 ребро.

Значение $v = 7$ определяет блок-схему $2-(7, 4, 2)$, ТИ которой образована пустыми клетками таблицы Fig. 3с в [13]. Группой симметрии $2-(7, 4, 2)$ -схемы является проективная специальная линейная группа $\text{PSL}(2, 7)$ [20, 21] порядка $2^3 \cdot 3 \cdot 7 = 168$. Однако “треугольной” геометрической интерпретации схема $2-(7, 4, 2)$ не имеет: блок состоит не из трех, а из четырех элементов (точек). Необходим вариант, обладающий той же группой симметрии и подходящей геометрической интерпретацией. Группа симметрии любой ТИ не меняется, если в ТИ заменить все пустые клетки на клетки с серыми квадратами и наоборот (количество перестановок любых пар столбцов и/или строк, оставляющих инвариантными обе ТИ, одинаково); итоговая ТИ называется “комплементарной”, дополнительной по отношению к исходной. Комплементарной ТИ для блок-схемы $2-(7, 4, 2)$ является ТИ блок-схемы $2-(7, 3, 1)$. Эта ТИ образована заполненными клетками таблицы Fig. 3с в [13]. Группой симметрии как $2-(7, 4, 2)$ -, так и $2-(7, 3, 1)$ -схемы является проективная специальная линейная группа $\text{PSL}(2, 7)$ [20]. Для блок-схемы $2-(7, 3, 1)$ имеется “треугольная” интерпретация: это множество семи чисел 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, разбитое на семь троек чисел 234, 125, 136, 147, 267, 357, 456 таким образом, что любая пара чисел (т.е. ребро) принадлежит только одной тройке (т.е. грани). Геометрической интерпретацией блок-схемы $2-(7, 3, 1)$ является семивер-

шинная регулярная триангуляция тора [22]. Она состоит из 14 треугольников, образованных 21 криволинейным ребром одинаковой длины, в каждой из семи вершин сходятся шесть ребер. На рис. 3а, 3б в виде прямоугольников (поэтому ребра треугольников в них изображены неодинаковыми) представлены правый (рис. 3а) и левый (рис. 3б) варианты развертки регулярно триангулированного тора. Эта интерпретация является единственной – так же, как единственной поверхностью, для которой возможно осуществить семивершинную регулярную триангуляцию, является тор [4, с. 105]. При этом существуют два энантиоморфных варианта (правый и левый) реализации данной триангуляции [6, 23]. Требуется перейти от триангуляции тора к триангулированной структуре в E^3 , которую можно соотнести с линейным объединением правильных тетраэдров в E^3 (оно всегда топологически эквивалентно сфере [3]).

Согласно [24, р. 218] из регулярной v -вершинной триангуляции тора можно получить n -вершинную триангуляцию сферы, где $4 \leq n \leq v$. Таким образом, от регулярной семивершинной триангуляции тора можно перейти к нерегулярной семивершинной триангуляции сферы (регулярная триангуляция с семью вершинами для односвязной поверхности невозможна [4, с. 105]). Согласно [4, с. 84, теорема 4.3] для семивершинной триангуляции сферы существует семивершинный многогранник, все грани которого являются треугольниками. Теорема Эйлера для многогранников, топологически эквивалентных сфере, утверждает, что $v - e + f = 2$, где v , e и f – число вершин, ребер и граней соответственно. Для многогранников с треугольными гранями $e/3 = f/2$, т.е. $v - e + 2e/3 = 2$, и для $v = 7$ имеем $e = 15, f = 10$. Таким образом, искомым семивершинным многогранником содержит 10 треугольных граней и 15 ребер. Есть несколько многогранников с треугольными гранями, имеющих такие значения v , e и f . Среди них нелинейное объединение по граням четырех правильных тетраэдров (правильный тетраэдр, на трех гранях которого стоят тетраэдры) и октаэдр, на грани которого стоит тетраэдр (“одношапочный октаэдр”). Однако эти варианты не отвечают задаче отображения симметрии линейных цепей правильных тетраэдров, объединяемых по граням. Линейное объединение m правильных тетраэдров содержит семь вершин, 10 граней и 15 ребер только в случае $m = 4$. Таким образом, $2-(7, 3, 1)$ -схема приводит к тетраблоку; это **единственное** решение, удовлетворяющее всем упомянутым условиям.

Отметим, что такой вывод можно получить и другим путем. В [24, р. 220] получено условие достаточности для того, чтобы для триангуляции тора существовала ее реализация в пространстве

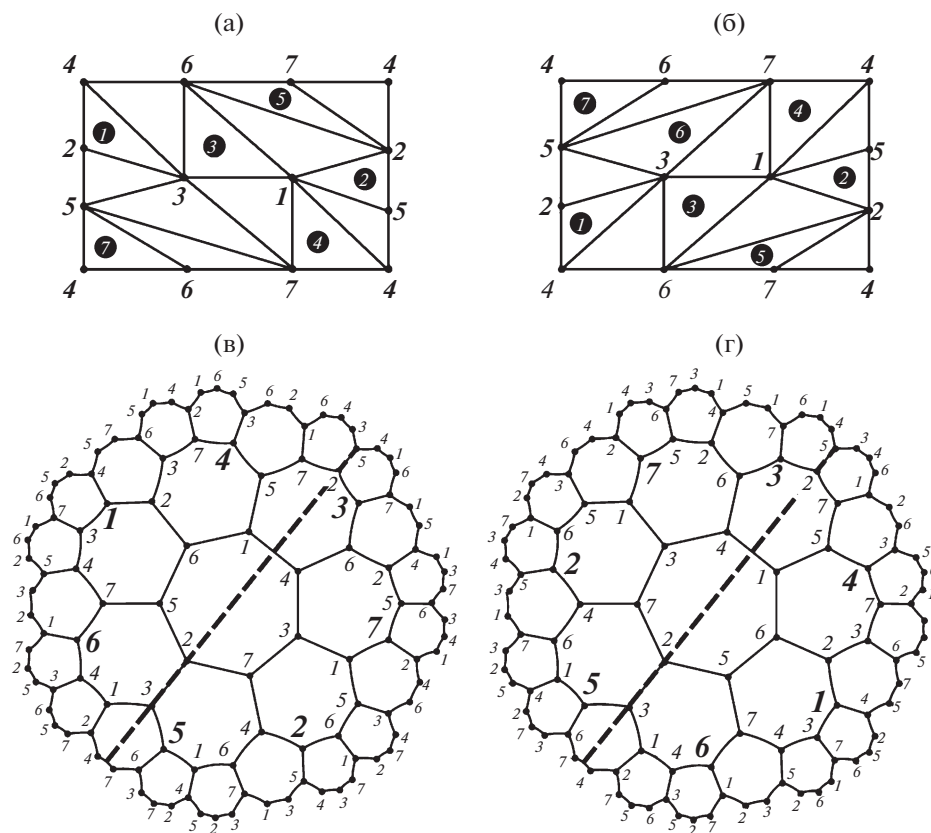


Рис. 3. Правый (а) и левый (б) варианты развертки регулярно триангулированного тора (рис. 3б адаптирован из [4, с. 17]). Разбиение, дуальное квартике Клейна (в, г): два способа деления его 56 вершин на семь совокупностей по восемь вершин в каждой (пары противоположных периферийных вершин с одним номером отождествляются). Одинаковые цифры указывают вершины, принадлежащие одному правому (в) или левому (г) кубу из семи возможных. Зеркальное отражение относительно пунктирной линии переводит рис. 3в в рис. 3г и наоборот. Номера вершин, указанные на рис. 3в (3г) самым крупным шрифтом, соответствуют номерам вершин на рис. 3а (3б) и 1а (1б).

E^3 в виде многогранника. В частности, показано, что семивершинная триангуляция тора реализуется в E^3 в виде многогранника Часара (Császár) [24, р. 217; 25–28]. Многогранник Часара является тороидальным (т.е. в известном смысле линейным) объединением по граням семи тетраэдров, длины ребер в которых различаются, имеет 7 вершин, 21 ребро и 14 граней (как и триангуляция тора), следовательно, топологически является сферой с одной “ручкой” [4]. Для получения из многогранника Часара структуры, топологически эквивалентной сфере, нужно выделить и затем удалить в нем “ручку”. Можно показать, что в многограннике Часара такую “ручку” образуют любые три тетраэдра с общим ребром, примыкающие по граням друг к другу. При их удалении из обсуждаемого тороидального объединения удаляются шесть ребер и шесть боковых граней, но при этом остаются четыре тетраэдра, а “размыкание” тороидального многогранника приводит к тому, что два внутренних треугольника (ранее служившие основаниями “ручки”) становятся внешними. В результате удаления “ручки” (при

сохранении семи вершин) из 21 ребра многогранника Часара остаются 15 ребер, а вместо его 14 граней возникают 10 граней объединения по граням четырех неправильных тетраэдров. Теперь все ребра тетраэдров можно сделать одинаковыми, что дает тетраблок. Отметим, что один из вариантов многогранника Часара [27] обладает осью второго порядка, что гарантирует получение энантиоморфных вариантов тетраблока.

**ОТОБРАЖЕНИЕ СИММЕТРИИ
ТЕТРАБЛОКА:
ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВОЕ ОПИСАНИЕ**

Группой симметрии 2-(7, 3, 1)-схемы является проективная специальная линейная группа $PSL(2, 7)$ [20]. Группа симметрии $(A_5 \times A_5):2^2$ политопа {3, 3, 5} представляет собой полупрямое произведение прямого произведения $(A_5 \times A_5)$ и группы 2^2 (группа A_5 изоморфна группе I вращений икосаэдра, 2^2 изоморфна группе D_2 , двоеточие означает полупрямое произведение), которое

не содержит циклической подгруппы седьмого порядка [5, 29]. Тетраблок – часть политопа {3, 3, 5}, но в группе $PSL(2, 7)$, на основе которой должна быть определена группа симметрии тетраблока, циклическая подгруппа седьмого порядка есть. Сосуществование возможной симметрии тетраблока и симметрии политопа можно объяснить тем, что политоп {3, 3, 5} определяется решеткой E_8 , в группе симметрии которой $W(E_8)$ есть циклическая группа седьмого порядка [21, р. 85]. Иными словами, это сосуществование происходит в рамках охватывающей конструкции – группы $W(E_8)$ порядка $2^{14} \cdot 3^5 \cdot 5^2 \cdot 7$:

$$\begin{aligned} (A_5 \times A_5) : 2^2 \subset W(E_8) \supset S_8 = \\ = \bigcup_{q=1}^8 g_q (C_{15}(\text{PGL}(2, 7)) \supset A_8 = \end{aligned} \quad (1)$$

$$= C_{15}(2^3 : \text{PSL}(2, 7)),$$

где симметрическая группа $S_8 = A_8 : 2 \supset \text{PGL}(2, 7) = (\text{PSL}(2, 7) : 2) \not\subset A_8$ [21, р. 22; 30, р. 29]. Здесь A_8 – знакопеременная группа степени 8, $\text{PGL}(2, 7)$ – проективная общая линейная группа порядка 336. Нетривиальный элемент группы 2 можно рассматривать как отражение (σ) в гиперболической плоскости H^2 [8, 31]. Подгруппа A_8 группы $W(E_8)$ может быть представлена произведением циклической группы C_{15} и полупрямого произведения группы 2^3 (изоморфной D_{2h}) с группой $PSL(2, 7)$ [21, р. 85; 30, р. 29].

Максимальная регулярная триангулированная структура, которую можно отобразить на себя группой $PSL(2, 7)$, – квартика Клейна. Это регулярное разбиение части гиперболической плоскости на 56 гиперболических треугольников, сходящихся по семь в каждой из 24 вершин, из которых 14 треугольников соответствуют рассмотренной выше триангуляции тора [6, 8, 20]. Разбиение, дуальное квартике Клейна (образованное центрами треугольников), содержит 24 семиугольника; его 56 вершин можно разделить на семь совокупностей по восемь вершин – семь кубов. Отбирать восемь вершин куба можно либо правыми, либо левыми поворотами; в итоге 56 вершин разделяются как на семь правых кубов (рис. 3в), так и на семь левых кубов (рис. 3г). Группу $PSL(2, 7)$ можно рассматривать как 7O – расширение группы вращений октаэдра (куба) O циклической группой седьмого порядка C_7 . Она имеет две несопряженные подгруппы O' и O'' , изоморфные O [20, 31]. Поэтому стартовый правый куб будет отображаться на себя группой O' , левый куб – группой O'' . Симметрия квартики Клейна, разбитой на семь правых кубов, опреде-

ляется разложением группы $PSL(2, 7) \equiv {}^7O$ на смежные классы по подгруппам:

$$\begin{aligned} {}^7O = \bigcup_{i=1}^{56} g_i C_3 = \bigcup_{n=1}^{28} g_n D_3 = \bigcup_{j=1}^{24} g_j C_7 = \\ = \bigcup_{k=1}^8 g_k M_{3,7} = C_7 \bigcup_{s=1}^8 g_s C_3 = \bigcup_{m=1}^7 g_m O', \end{aligned} \quad (2)$$

где $C_3 \subset D_3$, $M_{3,7}$ – прямое произведение C_3 и C_7 , $g_i \notin C_3$, $g_s, g_n \notin D_3$, $g_j \notin C_7$, $g_k \notin M_{3,7}$, $g_m \notin O'$. Если элементы g_j и g_m выбираются только из подгрупп O' и C_7 соответственно, то группа 7O является произведением подгрупп $O' C_7 = C_7 O' = {}^7O$. Числа смежных классов 56, 28, 24, 8, 7 определяются тем, что семиугольники сходятся по три в каждой из 56 вершин [6, 8]. Каждая из восьми подгрупп C_7 группы 7O оставляет инвариантной определенную тройку семиугольников. Любой из кубов можно принять в качестве стартового, позволяющего получить остальные шесть кубов действием группы C_7 . Вершины стартового куба взаимно однозначно определяются восемью смежными классами $\bigcup_{s=1}^8 g_s C_3$, стартовая вершина этого куба – смежным классом $g_s C_3$, а множество стартовых вершин всех семи кубов – семью смежными классами $g_m g_s C_3 = C_7 g_s C_3$, $g_s \notin C_7$. Стартовые вершины, представляющие собой одну орбиту группы C_7 , изображены самым крупным шрифтом на рис. 3в, 3г.

Подобно тому, как O является подгруппой индекса 2 группы O_h , $PSL(2, 7) \equiv {}^7O$ является подгруппой индекса 2 группы $\text{PGL}(2, 7) \equiv {}^7O_d$ [31]:

$$\begin{aligned} {}^7O_d = {}^7O \bigcup \sigma {}^7O, \quad \sigma^2 = 1, \quad \sigma G \sigma = G, \\ \sigma O' \sigma = O'', \end{aligned} \quad (3)$$

где $\sigma \notin {}^7O$, символом G обозначены группы $C_3, D_3, C_7, M_{3,7}$ из соотношения (2). С учетом (3) симметрия квартики Клейна, разбитой на левые кубы, определяется разложением группы 7O по подгруппам:

$$\begin{aligned} {}^7O = \bigcup_{i=1}^{56} (\sigma g_i \sigma) C_3 = \bigcup_{n=1}^{28} (\sigma g_n \sigma) D_3 = \\ = \bigcup_{j=1}^{24} (\sigma g_j \sigma) C_7 = \bigcup_{k=1}^8 (\sigma g_k \sigma) M_{3,7} = \bigcup_{m=1}^7 g_f O'', \end{aligned} \quad (4)$$

где $g_f \notin O''$, элемент σ группы 7O_d определен (3), а элементы $\sigma g \sigma$ (сопряженные с элементами g внешним автоморфизмом σ группы 7O) принадлежат 7O .

Совокупность 56 вершин семи кубов можно разбить на 28 пар; каждая пара лежит на одной тройной оси одного куба, и этой паре соответ-

стует тетраэдр в правом разбиении $M(T_{2+\zeta})$, содержащем 28 гиперболических тетраэдров [6]. Разбиение $M(T_{2+\zeta})$ является одним из восьми разбиений на тетраэдры, которые имеют конечный объем в сотах $\{3, 3, 6\}$; символ $T_{2+\zeta}$ обозначает правую семивершинную триангуляцию тора (рис. 3а), определяющую $M(T_{2+\zeta})$, где $\zeta = (1 + \sqrt{-3})/2$, $\bar{\zeta} = (1 - \sqrt{-3})/2$, $(2 + \zeta)(2 + \bar{\zeta}) = 7$ [6]. Тетраблок вкладывается в правую $T_{2+\zeta}$ (или левую $T_{2+\bar{\zeta}}$, рис. 3б) семивершинную триангуляцию тора со взаимно однозначным соответствием ее вершинам. При вложении тора $T_{2+\zeta}$ (или $T_{2+\bar{\zeta}}$) в квартиру Клейна [20] его вершины (вершины разверток на рис. 3а, 3б) совпадают с множеством семи стартовых вершин семи кубов (вершин, обозначенных самым крупным шрифтом на семиугольниках рис. 3в, 3г). Это множество семи вершин составляет “правую” (“левую”) орбиту подгруппы C_7 группы 7O , взаимно однозначно соответствующую орбите из семи правых (левых) кубов; последней в соотношениях (2) и (4) взаимно однозначно соответствует разложение 7O на смежные классы по подгруппе O' (O''). Тетраблок вкладывается в тор $T_{2+\zeta}$ (или $T_{2+\bar{\zeta}}$), который в свою очередь вкладывается в квартиру Клейна. Тетраблок обладает точечной группой симметрии C_2 , поэтому, чтобы удовлетворять указанным условиям, симметрия тетраблока должна определяться разложением 7O на двойные смежные классы, которое в соотношениях (2) и (4) приводит к разложению семивершинной орбиты группы C_7 на четыре орбиты группы C_2 :

$$\begin{aligned} {}^7O &= C_7 O' = \bigcup_{i=1}^7 g_i O' = \bigcup_{k=1}^4 C_2 g_k O' = \\ &= C_7 O'' = \bigcup_{j=1}^7 g_j O'' = \bigcup_{f=1}^4 C_2 g_f O'', \end{aligned} \quad (5)$$

где $g_i, g_j \in C_7$, $g_i, g_k \in O'$, $g_j, g_f \in O''$, $g_k, g_f \in C_2$. Соотношение (5) определяет группы цветной [32] W -симметрии $({}^7O')$ и $({}^7O'')$, изоморфные группе 7O , в которых все элементы 7O , кроме C_2 , нагружены дополнительными преобразованиями.

Преобразование σ (“гиперболическое зеркало”, символически показанное пунктиром на рис. 3в, 3г), которое определяется соотношением (3), отображает семь правых кубов (2) в семь левых кубов (4). Следовательно, должно существовать дробно-линейное преобразование второго порядка, переводящее правый вариант тетраблока в левый (5). Таким преобразованием (подробно рассмотренным в [33]) является переброска диагонали в “ромбе” из двух соседних треугольных граней тетраблока. Действительно, если

в правом тетраблоке (рис. 1а) удалить ребро 6–7, а вершины 1 и 2 соединить ребром той же длины (т.е. в “ромбе” 1267 диагональ 6–7 заменить диагональю 1–2), то получим левый тетраблок (рис. 1б).

Плоский тетраблок неэнантиоморфный и определяется разложением

$${}^7O_d = \bigcup_{n=1}^4 (C_2 \times \sigma) g_n (O : \sigma), \quad (6)$$

где $(C_2 \times \sigma)$ – надгруппа группы C_2 из соотношения (5), изоморфная группе симметрии C_{2v} плоского тетраблока, $g_n \in (O : \sigma)$, $g_n \in (C_2 \times \sigma)$.

Таким образом, тетраблок – это максимально возможная универсальная единица, позволяющая отобразить некристаллографическую (скрытую) симметрию таких линейных цепей правильных тетраэдров в E^3 , которые допускают вложение в конструкции, определяемые предельно симметричными объединениями тетраэдров по граням в S^3 и H^3 . Некристаллографическая (скрытая) симметрия цепи (спирали), собранной из тетраблоков, должна определяться надгруппами группы $PSL(2, 7)$, которые вкладываются в группы, гарантирующие необходимую тетраэдрическую структуру системы. В частности, такими группами являются конечная (соотношение (1)) или бесконечная [19, с. 131; 34] группы симметрии решетки E_8 , непосредственно определяющей политоп $\{3, 3, 5\}$. Квартика Клейна позволяет “подняться” и до группы Матье M_{24} порядка $2^{10} \cdot 3^3 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11 \cdot 23$ [19, с. 346]. Ее подгруппа $PSL(2, 11)$ (порядка 660) также может отображать симметрию объединения тетраэдров [20, 33].

Генерирование по единому закону спирали из тетраблоков, объединяемых по торцевым граням, может привести к наличию у нее некристаллографической симметрии. Например, линейное объединение по торцевым граням пары тетраблоков (имеющее 11 вершин) обладает группой симметрии, изоморфной группе $PSL(2, 11)$ [20, 33]. Спираль из правильных тетраэдров, объединенных друг с другом по граням (спираль Бердийка–Коксетера) [35, с. 89], рис. 4а, не обладает трансляционной симметрией, но таковая возникает при искажениях тетраэдров. В [36, 37] показано, что минимальные искажения отвечают периоду в восемь тетраэдров. Объединение по конечным торцевым граням двух тетраблоков (11 вершин) соответствует стержню именно из восьми тетраэдров. Таким образом, спираль Бердийка–Коксетера можно представить состоящей из пар тетраблоков, объединенных по торцевым граням. Подобный стержень использован при описании некоторых реальных кристаллических структур [36] и полиморфных превращений в металлах [33].

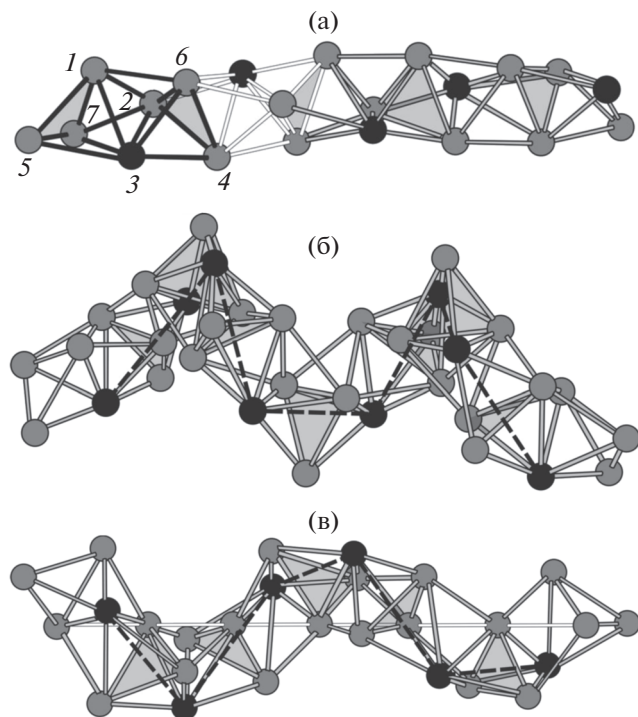


Рис. 4. Шаростержневые модели спиральных объединений по торцевым граням правых линейных тетраблочков. Центры тетраблочков обозначены черными шарами, а общие грани соседних тетраблочков окрашены в серый цвет. Угол поворота φ (по часовой стрелке в плоскости общей грани каждого последующего тетраблочка относительно предыдущего), равный 0 (а), определяет правую спираль Бердийка–Коксетера из тетраэдров, угол вращения спирали $\theta = 131.81\dots^\circ$ [35, с. 89]; ребра первого слева тетраблочка выделены жирными линиями, его вершины пронумерованы в соответствии с рис. 1а, ребра второго слева тетраблочка – светлые. При $\varphi = 120^\circ$ (б) центры тетраблочков образуют показанную пунктиром спираль 40/11 с углом $\theta = 99^\circ$ [9, 13]. При $\varphi = 240^\circ$ (в) центры тетраблочков образуют показанную пунктиром спираль 10/3 с углом $\theta = 108^\circ$ [13]; ось спирали – горизонтальная линия из светлых ребер.

При объединении двух тетраблочков по торцевым граням возможны три варианта, различающиеся углами поворота φ (по часовой стрелке в плоскости общей грани) каждого последующего тетраблочка относительно предыдущего ($\varphi = 0^\circ, 120^\circ, 240^\circ$). Объединение по торцевым граням линейных тетраблочков одинаковой хиральности по одному (одному из трех перечисленных) варианту позволяет получить три варианта спирали с разными углами вращения θ (рис. 4). Если $\varphi = 0^\circ$, воспроизводится правая или левая спираль Бердийка–Коксетера [35, с. 89]; она характеризуется иррациональным значением угла $\theta = 131.81\dots^\circ$ (рис. 4а). Если $\varphi = 120^\circ$, то, как показано в [9, 13], центры тетраблочков (вершины типа 3 на рис. 1а,

т.е. общие вершины четырех тетраэдров) образуют спираль 40/11, имеющую угол $\theta = 99^\circ$ (рис. 4б). Параметры такой спирали 40/11 воспроизводят с точностью до 2% экспериментальные структурные параметры α -спирали [9, 13, 38]. Отметим, что спираль 40/11 близка к широко известной спирали 18/5 с углом $\theta = 100^\circ$, с помощью которой (начиная с [39]) описывается α -спираль. Однако спираль 18/5 не отображает все симметрии, характеризующие α -спираль, так как в отличие от спирали 40/11 спираль 18/5 не связана с симметриями политопа $\{3, 3, 5\}$ [13, 40]; очевидно, теоретическая спираль 40/11 отвечает “топологии” α -спирали. Если $\varphi = 240^\circ$, то центры тетраблочков образуют спираль 10/3, имеющую угол $\theta = 108^\circ$ [13] (рис. 4в); эта спираль используется, например, в качестве одной из моделей коллагена [41].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Тетраблочок – это семивершинное линейное объединение по граням четырех правильных тетраэдров, представляющее собой универсальную базовую структурную единицу цепей правильных тетраэдров в трехмерном евклидовом пространстве E^3 . С его помощью можно отобразить некристаллографическую (скрытую) симметрию линейных цепей правильных тетраэдров в пространстве E^3 . Структуры, определяемые сборкой слегка деформированных правильных тетраэдров (кристаллы, квазикристаллы, наноструктуры и т.п.), широко представлены в различных областях кристаллографии. Насколько известно авторам, “тетраблочный” класс структур (определяемых сборкой тетраблочков, не имеющих общих тетраэдров) введен лишь в настоящей работе.

Тетраблочок определяется нерегулярной семивершинной триангуляцией сферы, которая задается [24, р. 218] регулярной семивершинной триангуляцией тора. Если внести определенным образом изменения в длины ребер тетраблочка, сделав их неодинаковыми, то все его вершины можно совместить с вершинами тороидально-подобного многогранника Часара, который является реализацией регулярной семивершинной триангуляции тора в виде объединения по граням семи неправильных тетраэдров [25].

Группа симметрии тетраблочка изоморфна проективной специальной линейной группе $PSL(2, 7)$ порядка 168, порождающие элементы которой связаны соотношениями [21, р. 3]: $(g_2)^2 = (g_3)^3 = (g_2 g_3)^7 = 1$. Минимальное отклонение от классической симметрии (с кристаллографическими осями порядка 2, 3, 4 и 6) возникает в группе симметрии икосаэдра, так как помимо осей второго и третьего порядков она содержит оси пятого порядка. Это отражается в соотношениях

$(g_2)^2 = (g_3)^3 = (g_2g_3)^5 = 1$ для порождающих элементов группы икосаэдра. Таким образом, по степени отклонения от классической симметрии группа $PSL(2, 7)$ представляет собой аналог группы икосаэдра, являющейся симметрией основной многочисленных структурных приложений [42, 43]. Поэтому использование $PSL(2, 7)$ является многообещающим и сулит появление новых структурных приложений; некоторые единичные работы в настоящее время уже известны [31, 44, 45]. Максимальные надгруппы $PSL(2, 7)$ – группы симметрии решетки E_8 и группа Матье M_{24} – позволяют отобразить симметрии систем правильных тетраэдров. Поэтому подгруппы этих групп, содержащие произведение $PSL(2, 7)$ и циклической подгруппы, способны отображать некристаллографическую (скрытую) симметрию цепей, собранных из одинаковых тетраблоков по единому закону.

В качестве примеров структур “тетраблочного” класса рассмотрено генерирование по единому закону спирали из объединенных по торцевым граням линейных тетраблоков одинаковой хиральности. Можно получить три варианта спирали с разными углами вращения: это спираль Бердйика–Коксетера, спираль 40/11 (которая с точностью до 2% воспроизводит экспериментальные структурные параметры α -спирали) и спираль 10/3 (используется в качестве одной из моделей коллагена).

Некристаллографические симметрии структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров, могут быть определены отображением на структурный уровень системы конструкций алгебраической геометрии и топологии. При этом математические конструкции указывают лишь “идеальные прототипы” структур, которые физически допустимыми искажениями можно преобразовать в реальные структуры. Для 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).

Работа выполнена при финансовой поддержке федерального бюджета: гос. заданий № 0085-2019-0004 (№ гос. рег. АААА-А18-118012590359-8, ИНЭОС РАН) и № 0221-2017-0050 (№ гос. рег. АААА-А17-117031710039-3, ИБ КарНЦ РАН).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Физматлит, 2004. 224 с.
2. Cartan E. Geometry of Riemannian spaces. Brookline: Math Sci. Press, 1983. 506 p.
3. Mason J.H. // Math. Gaz. 1972. V. 56. P. 194.
4. Рунгель Г. Теорема о раскраске карт. М.: Мир, 1977. 256 с.
5. Coxeter H.S.M. Regular Polytopes. N.Y.: Dover Publ, 1973. 322 p.
6. Görner M. // arXiv:1406.2827v3 [math.GT].
7. Thurston W.P. // Classical Quantum Gravity. 1998. V. 15. P. 2545.
8. Agol I. <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.121.3407&rep=rep1&type=pdf>.
9. Samoylovich M., Talis A. // Acta Cryst. A. 2014. V. 70. P. 186.
10. Mackay A.L. // THEOCHEM. 1995. V. 336. P. 293.
11. Zheng C., Hoffmann R., Nelson D.R. // J. Am. Chem. Soc. 1990. V. 112. P. 3784.
12. Babiker H., Janeczko S. // Commun. Inf. Syst. 2015. V. 15. P. 331.
13. Samoylovich M., Talis A. // Arxiv1606.01237.
14. Rabinovich A.L., Talis A.L. // Обзор. прикл. и промышл. матем. 2018. Т. 25. Вып. 1. С. 53.
15. Talis A.L., Rabinovich A.L. // Обзор. прикл. и промышл. матем. 2018. Т. 25. Вып. 1. С. 56.
16. Talis A.L., Рабинович А.Л. // Обзор. прикл. и промышл. матем. 2018. Т. 25. Вып. 3. С. 280.
17. Рабинович А.Л., Talis A.L. // Обзор. прикл. и промышл. матем. 2018. Т. 25. Вып. 3. С. 275.
18. Talis A.L., Рабинович А.Л. // Обзор. прикл. и промышл. матем. 2018. Т. 25. Вып. 2. С. 191.
19. Конвэй Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. Т. 1. М.: Мир, 1990. 415 с.
20. Martin P., Singerman D. // Eur. J. Combinatorics. 2012. V. 33. P. 1619.
21. Conway J.H., Curtis R.T., Norton S.P. et al. Atlas of Finite Groups. Oxford: Clarendon Press, 1985. 286 p.
22. White A.T. // Proc. London Math. Soc. 1995. V. s3-70. P. 33.
23. Brehm U., Kühnel W. // Eur. J. Combinatorics. 2008. V. 29. P. 1843.
24. Altshuler A. // Discrete Math. 1971. V. 1. P. 211.
25. Császár A. // Acta Scientiarum Mathematicarum Universitatis Szegediensis. 1949. V. 13. P. 140.
26. Bokowski J., Eggert A. // Struct. Topology. 1991. № 17. P. 59.
27. Szilassi L. // 3rd Int. Conf. APLIMAT-2004. Plenary Lecture. Department of Mathematics, Faculty of Mechanical Engineering, Slovak University of Technology in Bratislava, 2004. P. 173.
28. Stojanović M. // Kragujevac J. Math. 2017. V. 41. P. 203.
29. Mosseri R., DiVincenzo D.P., Sadoc J.F., Brodsky M.H. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. P. 3974.
30. Li C.H., Xia B. // arXiv:1408.0350v3 [math.GR].

31. *Ceulemans A., King R.B., Bovin S.A. et al.* // J. Math. Chem. 1999. V. 26. P. 101.
32. *Koptsik V.A.* // Comput. Math. Appl. 1988. V. 16. P. 407.
33. *Talis A., Kraposhin V.* // Acta Cryst. A. 2014. V. 70. P. 616.
34. *Shioda T.* // Comment. Math. Univ. St. Paul. 1993. V. 42. P. 61.
35. *Лорд Э., Маккей А., Ранганатан С.* Новая геометрия для новых материалов. М.: Физматлит, 2010. 264 с.
36. *Nyman H., Carroll C.E., Hyde B.G.* // Z. Kristallogr. 1991. B. 196. S. 39.
37. *Sadler G., Fang F., Kovacs J., Irwin K.* // arXiv:1302.1174v1 [math.MG].
38. *Kumar S., Bansal M.* // Biophys. J. 1998. V. 75. P. 1935.
39. *Pauling L., Corey R.B., Branson H.R.* // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1951. V. 37. P. 205.
40. *Sadoc J.F., Rivier N.* // Eur. Phys. J. B. 1999. V. 12. P. 309.
41. *Beck K., Brodsky B.* // J. Struct. Biol. 1998. V. 122. P. 17.
42. *Steurer W., Deloudi S.* Crystallography of Quasicrystals. Concepts, Methods and Structures. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. 384 p.
43. *Zandi R., Reguera D., Bruinsma R.F. et al.* // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2004. V. 101. P. 15556.
44. *Lijnen E., Ceulemans A., Fowler P.W., Deza M.* // J. Math. Chem. 2007. V. 42. P. 617.
45. *King R.B.* // Croat. Chem. Acta. 2000. V. 73. P. 993.