

---



---

**КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ  
СИММЕТРИЯ**


---



---

УДК 548.1

## СТРУКТУРНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ГЕЛИКОИДАЛЬНОПОДОБНЫХ БИОПОЛИМЕРОВ В РАМКАХ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ТОПОЛОГИИ. I. ОСОБЫЙ КЛАСС УСТОЙЧИВЫХ ЛИНЕЙНЫХ СТРУКТУР, ОПРЕДЕЛЯЕМЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬЮ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ ПОЛИТОПОВ

© 2013 г. М. И. Самойлович, А. Л. Талис\*

ОАО Центральный научно-исследовательский технологический институт “Техномаш”, Москва

E-mail: samoylovich@technomash.ru

\* Институт элементоорганических соединений РАН, Москва

Поступила в редакцию 30.10.2012 г.

Показано, что подсистемы второй координационной сферы восьмимерной кристаллографической решетки  $E_8$  определяют замкнутую последовательность четырехмерных полиэдров (политопов). На структурный уровень отображена цепочка конструкций алгебраической топологии, которая позволяет выделить класс дискретных геликоидальноподобных структур, топологически устойчивых в трехмерном евклидовом пространстве. Принадлежащая данному классу структура ограничена минимальной поверхностью, особые точки которой связаны преобразованиями, определяемыми симметрией политопов. Во второй части статьи будет показано, что развиваемый аппарат “структурного приложения алгебраической геометрии” позволяет априори определять структуры, которые задают симметричные параметры биополимеров, в частности  $\alpha$ -спирали и некоторых форм ДНК-структур.

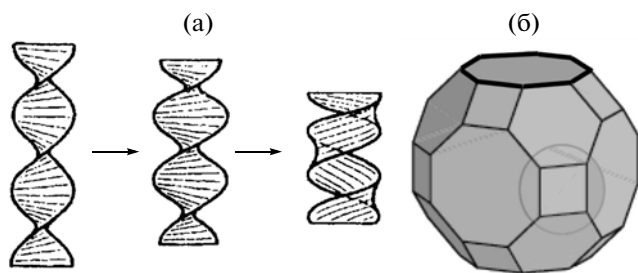
DOI: 10.7868/S0023476113040176

### ВВЕДЕНИЕ

Живая природа отгораживается от кристаллического типа упорядочения в трехмерном евклидовом пространстве  $E^3$  переходом от инвариантности относительно бесконечной трансляционной решетки к локальной периодичности, определяемой инвариантностью относительно конструкций алгебраической топологии. Необходимость использования таких конструкций обусловлена тем, что  $E^3$  образует алгебру Ли относительно операции векторного умножения. К подобным конструкциям относятся и фактически используемые локально периодические группы, все подгруппы которых конечны [1–3]. Необходимость в использовании таких групп обусловлена требованием разбиения на полиэдры первой и второй координационных сфер, которое согласуется с физически реализующимся взаимодействием ближайших друг к другу атомов.

Рассматриваемая трехмерная структура может быть ограничена поверхностью, автоморфизмы которой позволяют выделить определенные классы трехмерных многообразий. Поверхность является минимальной (локально минимальной) при условии равенства нулю ее средней кривизны. В дальнейшем ограничимся рассмотрением топологически устойчивых систем, характеризующихся минимальной поверхностью, определяемой

теоремой о трубчатой окрестности [1]. Особые точки такой поверхности могут быть связаны преобразованиями симметрии “алгебраического” политопов [4–9], который определяется соответствующей подсистемой восьмимерной решетки октав  $E_8$ , замыкающей ряд возможных чисел: действительные–комплексные–кватернионы–октавы. Минимальная поверхность может ограничивать и клеточные комплексы в  $E^3$ , для построения которых используются смешанные абелевы группы. При этом элементы конечной степени таких групп соотносятся с локальной периодичностью, а элементы бесконечного порядка используются в качестве топологического пространства. Взаимосвязь свойств клеточных (симплициальных) комплексов и поверхностей, их ограничивающих, определяется конструкцией расслоенного пространства [1, 2, 10]. Поэтому дальнейшие построения упорядоченных систем фактически сводятся к построению расслоенных пространств, базы которых представлены симплициальными или клеточными комплексами. Развиваемый подход позволяет построить семейство минимальных геликоидальноподобных поверхностей, которому может быть сопоставлено семейство спиралей с одинаковыми топологическими характеристиками.



**Рис. 1.** Контур, состоящий из двух спиралей и двух замыкающих отрезков (а). Уменьшение шага спирали приводит к трансформации геликоида в двуспиральную геликоидальноподобную намотку на катеноид [3]; б – прозрачным кругом показана одна из отбрасываемых полюсных шапочек сферы, которая в дискретном варианте 48-вершинного усеченного кубооктаэдра содержит вершины квадрата. Толстыми линиями выделен один из двух октагонов, не теряющий своих вершин при отбрасывании восьми вершин из 48.

В 1930 г. Коксетер открыл политоп  $\{240\}$  – алмазоподобную структуру с 240 вершинами на расположенной в  $E^4$  трехмерной сфере  $S^3$  [11, 12]. В настоящей работе будет показано, что политоп  $\{240\}$  представляет собой начало замкнутой последовательности “алгебраических” политопов, определяемых второй координационной сферой  $E_8$ . В целом изложенное выше позволяет говорить о существовании особой цепочки конструкций алгебраической топологии [1]: алгебраический политоп из второй координационной сферы решетки  $E_8 \rightarrow$  локально-однородное многообразие  $\rightarrow$  локально-минимальная поверхность  $\rightarrow$  однопараметрическое семейство геликоидов  $\rightarrow$  расслоение (накрытие) с базой из клеточных комплексов  $\rightarrow$  локально-решетчатая упаковка клеточных комплексов. Настоящая работа посвящена реализации в  $E^3$  данной цепочки, позволяющей выделить особый класс геликоидальноподобных топологически устойчивых структур. Наряду с [4–7, 10] в данной статье развивается аппарат “структурного приложения алгебраической геометрии (топологии)”, который можно назвать структурологией.

Во второй части работы будет показано, что симметричные закономерности строения ряда линейных биополимеров определяются конструкциями алгебраической геометрии и топологии, задающими сборку геликоидальноподобных структур из весьма ограниченного числа “клеток” по весьма ограниченному числу правил. Последнее означает, что развиваемый аппарат позволяет априори построить геликоидальноподобные структуры, определяющие симметричные параметры биополимеров, в частности  $\alpha$ -спирали и некоторых форм ДНК.

## ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ И ТОЧКИ БИФУРКАЦИЙ ГЕЛИКОИДАЛЬНОПОДОБНЫХ ПОДСТРУКТУР

Все неконгруэнтные полные линейчатые (при использовании полиэдральных построений данный фактор существенен) минимальные поверхности могут быть реализованы как однопараметрическое семейство геликоидов с параметром  $h$  – межвитковым шагом. Катеноид, определяемый одной из таких поверхностей, локально изоморфен геликоиду, относящемуся к классу минимальных поверхностей, допускающих задание конформных координат. Геликоид можно представить в виде бесконечнолистной намотки на катеноид (изгибы остаются в классе минимальных поверхностей) или на сферу без южного и северного полюсов. Если имеется контур, состоящий из двух соосных окружностей радиуса  $r$ , расположенных в параллельных плоскостях, тогда для описания всех минимальных поверхностей, затягивающих контур, достаточно описать все затягивающие его катеноиды [3].

Полное решение данной задачи получено еще Пуассоном. Обозначим расстояние между указанными окружностями  $h$ , тогда при малых  $h$  решение дает два катеноида, один из которых близок к цилиндру (устойчивая конфигурация), а другой – к конусу (неустойчивая конфигурация). При некотором значении  $h_{кр}$  оба катеноида образуют единую конфигурацию, превращаясь в пленку, которая затягивает каждую из окружностей плоским диском. Можно показать, что

$$h_{кр} = 2.4r, \quad (1)$$

где  $r$  – радиус цилиндра, отвечающего затягивающей пленке (рис. 1а). Соотношение (1) задает точку бифуркации [13] катеноида, когда последний распадается на устойчивый цилиндр и неустойчивый конус. В точке бифуркации нарушается топологическая регулярность, и на рассматриваемом многообразии формируется клеточная структура.

Стереографическая проекция  $S^3$  на  $E^3$  представляет собой объединение тороидальных поверхностей, поэтому переход от  $S^3$  к универсальному накрытию можно рассматривать как соответствующий гауссовому отображению  $S^3$  в трубчатую поверхность в  $E^3$  [1]. Задание на  $S^3$  политопа [4, 5] соответствует введению внешней метрики, когда для любых двух точек поверхности геликоида расстояние между ними равно евклидовому расстоянию в  $E^3$ . В таком случае в  $E^3$  можно определить объединение по винтовой линии локально цилиндрических (трубчатых) поверхностей (рис. 2а). При этом только отдельные особые точки данной линии лежат на указанной поверхности.

Кривизна и кручение пространственной кривой в  $E^3$  являются полным набором ее геометрических инвариантов. Поэтому если кривая задается векторами, то (при определенных условиях) последние можно задать в соответствующей подалгебре. В [14, 15] показано, что характеризующий кривую вектор Дарбу и другие векторы можно задать как элементы из алгебры  $G_2$ , не принадлежащие ее базису корней. Фактически используются группы Шевалле (для экспоненциальных представлений) типа  $G_2$ , определенные над кольцом целых чисел и представляющие собой обобщение групп типа  $G_2$  над локальными и коммутативными кольцами [16]. В дискретном варианте такое условие означает, что число (не обязательно целое) вершин, приходящееся на один виток винтовой линии, является постоянным, что задает однородность соответствующих стержневых структур. В конечном итоге однородность винтовой линии задается соотношением связи расстояния между витками (если рассматривается навивка на цилиндр) с длиной отдельного витка.

Устойчивость минимальных поверхностей определяется возможным изменением их площади (как и объема ею ограниченного) при малых деформациях. Характеристикой устойчивости является индекс  $\text{Ind}M$ , который соотносится с числом способов изменения площади поверхности. Поверхность  $M$  неустойчива, если  $\text{Ind}M \neq 0$ . Индексы всех периодических минимальных поверхностей, в том числе геликоидов, бесконечны и в указанном смысле неустойчивы [3]. Однако существуют методы построения полных погруженных в  $E^3$  минимальных поверхностей с нулевым индексом, когда применяются представления Вейерштрассе [1]. Пусть  $M$  – некоторая поверхность, заданная представлением Вейерштрассе  $(U, w, (aw + b)^m)$ ,  $a, b \in \mathbb{C}$  и  $a \neq 0$ , где  $m$  – целое ненулевое число, например  $m = 1$ ,  $U \subset \mathbb{C}$  – некоторая подобласть комплексной плоскости  $\mathbb{C}$ . Поверхность  $M$  характеризуется нулевым индексом  $\text{Ind}M$  при содержании образа области  $U$  (при гауссовом отображении) в некотором открытом подмножестве  $W$  сферы  $S^2$  [1]. Подмножество  $W$  может быть определено либо как заданное на открытой полусфере без полюса ( $W = S^2 \cap \{x^3 \leq 0\}$ ), либо как подмножество на части (около  $5/6$  общей площади) сферы  $S^2$ , заключенной между двумя параллельными плоскостями (рис. 1б). Действительно, такие плоскости отстоят от центра сферы на расстоянии  $\text{th}t_0$ , где  $t_0$  – единственный корень уравнения  $\text{cth}t_0 = t_0$ , и отсекают область, составляющую около  $1/6$  поверхности сферы.

Само гауссово отображение позволяет сохранять углы между векторами. Представления Вейерштрассе позволяют задать как катеноид, так и полный геликоид, а в общем случае и ассоциированное семейство для некоторой минимальной

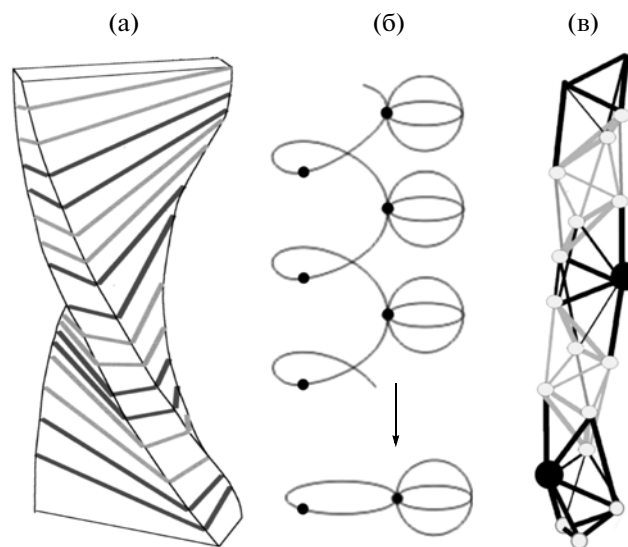


Рис. 2. Геликоидальное объединение стержней (а). Накрытие над букетом окружности и сферы  $S^1 \cup S^2$  как набор сфер, прикрепленных к прямой (нарисованной как винтовая линия) в целых точках (б) ([1], рис. 103б). Симплициальный комплекс из четырех тетраэдров с общей вершиной (черный шар) показан толстыми линиями. Два таких комплекса объединены связной суммой – тремя тетраэдрами между ними (в).

поверхности  $M$ , состоящей из локально изометричных минимальных поверхностей. Последнее обеспечивается (при соответствующих значениях их параметров) локальным диффеоморфизмом [1], сохраняющим метрику соответствующих конфигураций. Параметрами таких семейств можно выбрать для геликоидов шаг  $h$ , а для катеноидов – радиус горловины  $r$ . Отличие таких конфигураций заключается в том, что образующими для катеноидов являются цепные линии  $v(u)$  в плоскости  $XZ$  (так что при возрастании  $u$  координата по  $Z$  точек на  $v(u)$  растет), тогда как для геликоида – ось  $Y$  (так что при возрастании  $u$  координата по  $Y$  убывает). У геликоида средняя кривизна поверхности вдоль любой образующей равна нулю, поэтому для любой пары образующих существует движение, переводящее одну образующую в другую и геликоид в себя. При определенных условиях можно построить конфигурацию, объединяющую геликоид и катеноид, а именно, систему “суммарных” радиус-векторов для обеих конфигураций при одинаковых значениях  $u$ . Для этого необходимо провести через цепную линию  $v(u)$  семейство прямых, параллельных оси  $Y$ , так, чтобы точки  $u = 0$  соответствовали вершинам такой цепи (в рассматриваемом случае можно использовать ребра и вершины многогранников) [3]. При этом можно использовать разбиение  $v(u)$  на систему кусочно-гладких отрезков. Полученная поверхность характеризуется сдвигом  $|u|$ , а также некоторой кривой  $\omega$ , чьи точки с ростом  $u$

сдвигаются вправо, а с уменьшением  $u$  — влево. При изменении высоты образующей геликоида на шаг  $h$  кривая  $\omega$  подымается на ту же высоту. Такое сопряженное семейство линий обеспечивается на поверхности радиус-вектором вида:

$$\mathbf{r}(u, \varphi, \alpha) = \mathbf{r}_1(u, \varphi)\cos\alpha + \mathbf{r}_2(u, \varphi)\sin\alpha, \quad (2)$$

где  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  — радиус-векторы, описывающие катеноид и геликоид,  $\varphi$  — угол в цилиндрической системе координат;  $\alpha \in [0, \pi/2]$ , при  $\alpha = \pi/2$  кривая  $\omega$  превращается в образующую геликоида, при  $\alpha = 0$  — в цепную линию катеноида [3].

**ЛОКАЛЬНО-ПЕРИОДИЧЕСКИЕ  
ГЕЛИКОИДАЛЬНЫЕ КОНСТРУКЦИИ  
И АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ ПОЛИТОПЫ,  
ОПРЕДЕЛЯЕМЫЕ ВТОРОЙ  
КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРОЙ  
РЕШЕТКИ  $E_8$**

Любая вкладываемая в  $E^3$  компактная ориентированная поверхность гомеоморфна связной сумме торов, поэтому переход от  $S^3$  к универсальному накрытию над букетом  $S^1 \cup S^2$  окружности и сферы (рис. 2б) возможен только при выделении на  $S^3, S^2$  и  $S^1$  (как групповых многообразий) соответствующих многообразий и характеризующих их алгебр. Пусть  $S_0^2$  вкладывается в группу  $SU(2)$  как двумерная сфера, а окружность  $S_0^1$  — как экватор  $S_0^2$ . Полусфера сферы  $S_0^2$  идентифицируется с двумерным диском  $D_0^2$ , поэтому все рассматриваемые конструкции относятся к минимально геометрическим подмножествам.  $S_0^1$  — окружность большого круга в сфере  $S^7$ , а диск  $D_0^2$  — центральное плоское сечение сферы  $S^7$  трехмерной плоскостью  $E^3$ , проходящей через начало координат в  $E^8$  [1, 3]. При трактовке  $S_0^1$  как части максимального тора  $T^1$  в группе  $SU(2)$  инварианту группы Вейля типа  $E_8$  соответствует определенный диск  $D_0^2$ , поэтому построение алгебраических политопов фактически определяется конструкцией:

$$\begin{aligned} SU(2)/U(1) &\cong S^1 \subset S^3 \cong D_0^2 \times S^1 \sim \\ &\sim S^1 \cup S^2 \leftarrow \sum_i^k S_i^2, \end{aligned} \quad (3)$$

в которой  $D_0^2$  соотносится с тором  $T^2$ , а  $S^1$  — с группой  $U(1) = \{\exp(i\varphi)\}$  всех комплексных чисел. Имеется несколько типов подобных отображений, в частности для прямого произведения сфер  $S^i \times S^j$  и лежащего в нем “координатного креста”  $S^i \cup S^j = (S^i \times s_0^j) \cup (s_0^i \times S^j)$ , где  $s_0^i \in S^i, s_0^j \in S^j$  — отмеченные точки сфер [1]. В таком случае существует естественное отображение

$$f: D^{i+j} = D^i \times D^j \rightarrow S^i \times S^j, \quad (4)$$

где  $f$  — прямое произведение отображений  $D^i \rightarrow S^i$  и  $D^j \rightarrow S^j$  (при отображении границы  $\partial D^i \rightarrow s_0^i, \partial D^j \rightarrow s_0^j$ ), точка  $s_0 = s_0^i \times s_0^j$  определена в  $S^i \times S^j$ .

В последующем могут быть построены более сложные конструкции, обусловленные неориентированностью проективной плоскости  $RP^2$ , для которой  $S^2$  является универсальной накрывающей. Возможно построение и клеточных (симплициальных) комплексов (рис. 2в), которые позволяют наглядно представить расслоение:










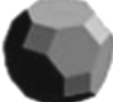


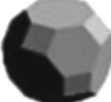
$$\sigma_E^{i+j} \cong \sigma_B^i \times \sigma_F^j, \quad \partial \sigma_E^{i+j} \cong \sigma_B^i \times (\partial \sigma_F^j), \quad (5)$$

где  $\sigma_B^i$  и  $\sigma_F^j$  — числа вершин в базе и слое. Любые преобразования диска без потери локальной минимальности сводятся к поворотам диска вокруг его граничной окружности  $S_1^0$  с использованием автоморфизмов группы  $SU(2)$  [1].

Для задания локальной периодичности в клеточном комплексе используются смешанные абелевы группы, содержащие подгруппы без кручения (каждый элемент обладает конечной периодичностью) и подгруппы с кручением (с использованием элементов унитарных подгрупп, не равных единице). При этом связывающую роль играют первая и вторая дифференциальные формы с фиксированными свойствами [1, 2, 15]. Выполнение указанных условий обеспечивается использованием векторного представления при наличии гауссовости отображения для минимальной поверхности (с локально нулевой кривизной), заданной векторной алгебраической подсистемой [3]. Векторам, характеризующим положение вершин полиэдров на геликоидальной поверхности, можно сопоставить элементы указанной алгебры  $G_2$ , которые отвечают автоморфизмам указанных выше решеток и соотносятся с автоморфизмами решетки  $E_8$ . Операция сшивки (склейки) по плоскому тору  $T^2$  задает закон объединения соответствующих дисков, который определяет сборку полиэдров в стержень.

Переход от конструкций, заданных на  $S^2$ , к рассмотрению их на плоскости (плоской области) обусловлен наличием взаимно однозначного соответствия между их метриками: любое преобразование, сохраняющее метрику на  $S^2$ , является линейным и ортогональным преобразованием  $E^2$ . Трудность заключается в том, что ни одно замкнутое неориентируемое двумерное многообразие не вложимо в  $E^3$ . В то же время это возможно для соответствующего ориентируемого многообразия, для задания которого можно использовать удвоение числа элементов. Для плоского варианта имеются только четыре системы корней ранга 2:  $A_1 \times A_1, A_2, B_2 = C_2$  (решетка корней  $Z_2$ ) и  $G_2$  (решетка корней  $A_2$ ) [15], которые можно использовать при классификации простых групп. Соответ-

Политоп  $\{3, 4, 3\}$  и нерегулярные политопы, определяемые подгруппами группы Коксетера  $F_4$  [17]

Полиэдры, являющиеся ячейками политопов				ячейки	грани	ребра	вершины
				24	96	96	24
				48	240	288	96
				240	1104	1440	576
				144	720	1152	576
				240	1392	2304	1152

ственно возможны наборы из  $q = 4, 12$  векторов, которые могут быть использованы для задания локально решетчатых упаковок.

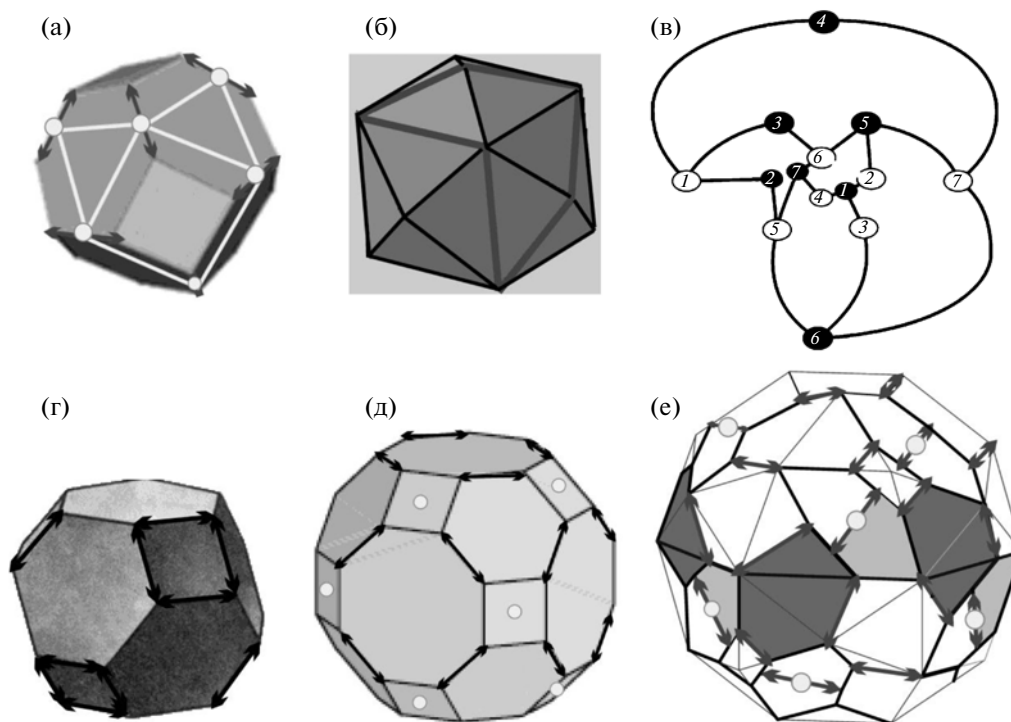
Сдвиг начала координат в глубокую дыру решетки  $E_8$  определяет последовательность координационных сфер из 16, 128, 448, 1024 векторов [8], что позволяет выделить подмножество из  $1152 = 128 + 1024$  векторов второй координационной сферы  $E_8$ , которое соответствует политопу 1152 (таблица). Данный политоп определяется группой Коксетера  $F_4$  (порядка  $1152 = 12 \times 96$ ), которая является централизатором группы  $G_2$  в группе  $E_8$ . В строке таблицы приведены ячейки политопа [17], определяемого подгруппой группы  $F_4$ ; там же указано число ячеек (четыре возможных типа), граней, ребер и вершин.

В общем случае политоп  $\{q(2^n \times 24)\}$ ,  $n = 0, 1, 2$  из второй координационной сферы  $E_8$  можно отобразить в “нагруженный” полиэдр  $\{2^n \times 24\}_q$  (рис. 3а, 3д, 3е) таким образом, что каждая точка  $s_0$  из соотношения (4) отображается в центр объединения  $2 \times 2^n$  вершин полиэдра. Для полиэдров  $\{2^n \times 24\}_q$ ,  $n = 0, 1, 2$ , точка  $s_0$  попадает в середину ребра (рис. 3а), центр квадрата (рис. 3д) и центр общего ребра двух пятиугольников (рис. 3е). При этом каждой из вершин полиэдра  $\{2^n \times 24\}_q$  соответствует  $q$ -элементное многообразие ( $q = 4, 12$ ), задаваемое точками на спирали, соответствующей  $S^1$ . В соответствии с изложенным выше, для построения в  $E^3$  отображаемой из  $S^3$  топологически устойчивой конструкции на  $S^2$  необходимо

оставить  $5/6$  из  $2^n \times 24$  точек. Иными словами в политопе  $\{q(2^n \times 24)\}$  может быть выделено  $\{q(2^n \times 20)\}$ -вершинное подмногообразие. В дальнейшем будет показано, что переходу от множества  $2^n \times 24$  вершин на  $S^2$  к  $2^n \times 20$  вершинам соответствуют реализующиеся или гипотетические трансформации структур в  $E^3$ . В политопе  $\{q(2^n \times 24)\}$  возможно и выделение подмногообразия  $\{10(2^n \times 24)\}$ , которое отражает возможность сопоставления 2400 векторам второй координационной сферы решетки  $E_8$  объединения 10 первых координационных сфер из 240 векторов в каждой [6].

#### ЗАМКНУТАЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ ПОЛИТОПОВ И ОПРЕДЕЛЯЕМЫЕ ЕЮ ЛИНЕЙНЫЕ ПОДСТРУКТУРЫ В $E^3$

Согласно (3), (4), задача построения поверхности с заданными свойствами оказывается связанной как с построением для  $S^3$  координатного креста, так и с построением плоского тора  $T^2$  как диска  $D^2$ . Рассмотрение дисков  $D^2$  приводит к использованию конструкций типа системы корней  $G_2$ , которая состоит из векторов первой и второй координационных сфер решетки  $A_2$ . По квазиразложимости  $G_2$  соотносится с  $D_4$ , что позволяет использовать борелевы подгруппы [15] и построить политоп  $\{q(2^n \times 24)\}$ . Группа Шевалле типа  $G_2$  совпадает (при наличии представления в группе  $GL_7(K)$ ) с тором и содержит три неединичные инволюции [8, 15], ее группа Вейля изоморф-



**Рис. 3.** 24-Вершинный усеченный октаэдр с шестью квадратными и восемью гексагональными гранями; центры 12 непесекающихся ребер-стрелок показаны белыми кружками (а). Разбиение 14-вершинного тетрагексаэдра (дуального усеченному октаэдру) на шесть гексациклов; один гексацикл выделен толстыми черными линиями (б); в – разбиение (б) как нерегулярное разбиение сферы, которое вкладывается в карту  $\{6, 3\}_{2,1}$  на торе [10]; г – усеченный октаэдр (а), в котором выделена подсистема 24 пересекающихся ребер; д – 48-вершинный усеченный кубооктаэдр с 24 непесекающимися ребрами-стрелками; белыми кружками выделены центры 12 квадратов; е – 96-вершинный простой многогранник с 5-, 6- и 7-вершинными гранями и 48 непесекающимися ребрами-стрелками. Чередующиеся светло- и темно-серые пяти- и семивершинники образуют экваториальный пояс; белыми кружками выделены центры 12 ребер, каждое из которых является общим для двух пятивершинников.

на диэдральной группе порядка 12. Таким образом, для сохранения при отображении (3)–(5) всех рассмотренных ранее требований операции вырезания диском  $D_0^2$  должна определять наличие трех ближайших векторов для каждого отображаемого из  $E_8$  на  $S^2$  вектора. Последнее означает, что полиэдры  $\{2^n \times 24\}_q$ ,  $n = 0, 1, 2$  должны быть простыми (в каждой вершине три ребра), а дуальные им полиэдры – триангулированными.

Согласно [6, 10], алгебраический политоп может быть алмазоподобным, если полиэдр  $\{2^n \times 24\}$  будет простым, содержащим  $2^n \times 36$  ребер и  $f_m$  граней с  $m$  вершинами,  $m = 4, 5, 6, 7, 8$ . В силу теоремы Эйлера для простых полиэдров

$$\begin{aligned} 2f_4 + f_5 - f_7 - 2f_8 &= 12, \\ f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 &= 2 + 2^n \times 12. \end{aligned} \quad (6)$$

Условие (6) является лишь необходимым условием алмазоподобности политопа. В политопе объединение  $2\{q\}$  вершин, расположенных на двух соседних окружностях  $S^1$ , образует  $Q$ -цепочку, подобную  $\langle 110 \rangle$  – цепочке в структуре алмаза.

При отображении политопа в нагруженный полиэдр  $\{2^n \times 24\}_q$   $Q$ -цепочка отображается в  $Q$ -ребро, которое обозначим двухконечной стрелкой (рис. 3). Все вершины полиэдра  $\{2^n \times 24\}$  могут быть охвачены множеством  $2^n \times 12$  изолированных ребер, поэтому достаточное условие алмазоподобности политопа

$$2^n \times 12 = V_Q, \quad (7)$$

где  $V_Q$  – множество  $Q$ -ребер. При выполнении (7) в каждой вершине будут сходиться одно  $Q$ -ребро и два  $q$ -ребра, в которые отображаются ребра, соединяющие вершины  $Q$ -цепочек.

Полиэдр, дуальный простому полиэдру  $\{2^n \times 24\}$ ,  $n = 0, 1, 2$ , определяет  $2 + (2^n \times 12)$ -вершинное нерегулярное разбиение сферы на  $2^n \times 24$  треугольника, которое позволяет задать соответствующий симплициальный (клеточный) комплекс. При  $n = 0$  полиэдр  $\{24\}$  – это полиэдр Кельвина (усеченный октаэдр)  $[4^6, 6^8]$  (рис. 3а) с шестью квадратными и восемью гексагональными гранями. Дуальный к  $[4^6, 6^8]$  полиэдр – неканонический 14-вершинный полиэдр Франка–Каспера [10], который можно обозначить  $Z14(4^6, 6^8)$ . В его ше-

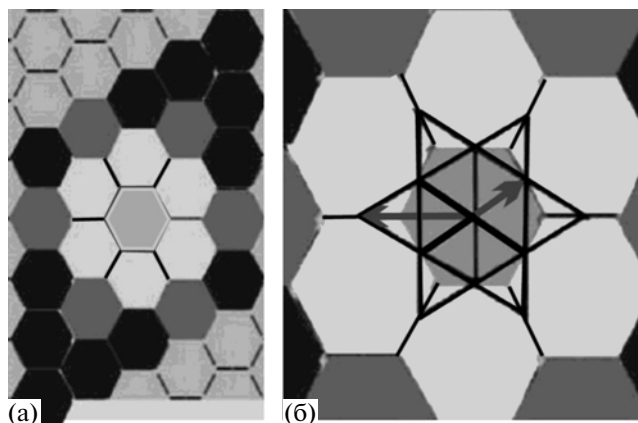
сти вершинах сходятся по четыре треугольника, а в восьми — по шесть треугольников. Объединив четверки треугольников в гексагоны (рис. 3б), получим  $\{6, 3\}_{2,1}^3$  — нерегулярное разбиение сферы на шесть гексагонов (рис. 3в). Данное разбиение возникает из карты  $\{6, 3\}_{2,1}$  на торе при отбрасывании трех ребер, которые образуют ручку, дополняющую сферу до тора [10]. Объединение в гексагоны четверок треугольников такого разбиения сферы возможно “правым” или “левым” способом (рис. 3б, 3г), что выделяет правую или левую тройку непересекающихся ребер гексагона. Ребра правой тройки отделяют друг от друга только гексагоны, левой — гексагоны и квадраты. Отображение правой тройки в левую определяется инволюцией из группы  $E_8$ .

Карты  $\{6, 3\}_{n,1}$  представляют собой графы инцидентности конечных проективных плоскостей  $PG(2, q)$ . Таким образом, учет всех рассмотренных выше отображений позволяет получить последовательность, связывающую  $PG(2, 2)$  (минимальную из всех конечных проективных плоскостей) с политопом  $\{240\}$ :

$$\begin{aligned} \{6, 3\}_{2,1} &\rightarrow \{6, 3\}_{2,1}^3 \rightarrow Z14(4^6, 6^8) \rightarrow \\ &\rightarrow [4^6, 6^8] \rightarrow \{2^0 \times 24\}_q \rightarrow \{240\}, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $\{6, 3\}_{2,1}$  определяет регулярное (три гексагона в каждой вершине) 14-вершинное разбиение тора на семь гексагонов.

Удвоение по определенному закону данной вершины можно трактовать как снятие конфигурационного вырождения. В итоге подобная операция задает функции склейки для соответствующего накрытия типа (3), которое позволяет построить объединение стержней. Если в гексагонах усеченного октаэдра  $\{2^0 \times 24\}_q$  правые тройки  $Q$ -ребер заменить на левые, получится неалмазоподобный нагруженный полиэдр  $\{2^0 \times 24\}'_q$  (рис. 3г), для которого не выполняется условие (7). Данный политоп можно рассматривать как дважды вырожденный, для него снятие вырождения обеспечивает выполнение (7) и переход к нагруженному усеченному кубооктаэдру  $\{2 \times 24\}_q$  (рис. 3д). Аналогично изложенному замена в каждом гексагоне  $\{2 \times 24\}_q$  “правой” тройки стрелок на “левую” приводит к дважды вырожденному неалмазоподобному нагруженному полиэдру. Снятие вырождения обеспечивает переход к 96-вершинному алмазоподобному нагруженному полиэдру  $\{2^2 \times 24\}_q$  с  $2^2 \times 12$  изолированными  $Q$ -ребрами, который определяется соотношениями  $f_5 - f_7 = 12$  и  $f_5 + f_6 + f_7 = 2 + 2^2 \times 12$  (рис. 3е). Дальнейшая замена в каждом гексагоне полиэдра  $\{2^2 \times 24\}_q$  “правой” тройки стрелок на “левую” не приведет к изменению типа полиэдра. Таким образом, подмноже-



**Рис. 4.** Карта  $\{6, 3\}_{5,0}$  из 25 (белых, серых и черных) гексагонов гексагональной сетки (с отождествляемыми вершинами), в которую вкладываются 7 (белых) и 13 (белых и серых) гексагонов, составляющие карты  $\{6, 3\}_{2,1}$  и  $\{6, 3\}_{3,1}$  (а); б — гексагон сетки (а) и объединение 12 треугольников решетки  $A_2$ , определяемое векторами системы  $G_2$ . Фундаментальные векторы  $G_2$  показаны стрелками.

ство простых нагруженных полиэдров  $\{2^n \times 24\}_q$ ,  $n = 0, 1, 2$ , образует замкнутую последовательность относительно (определяемой сменой троек  $Q$ -ребер в восьми гексагонах) операции снятия вырождения вершин.

Аналогично (8) карта  $\{6, 3\}_{3,1}$  приводит к 26-вершинной триангуляции сферы  $(4^{12}, 6^8, 8^6)$  и нагруженному полиэдру  $\{2 \times 24\}_q$ . Карта  $\{6, 3\}_{5,0}$  (через промежуточный этап карты  $\{4, 4\}_{5,5}$ ) приводит к 50-вершинной триангуляции сферы  $(4^6, 5^{24}, 6^8, 7^{12})$  и нагруженному полиэдру  $\{2^2 \times 24\}_q$ . Таким образом, замкнутая последовательность нагруженных полиэдров  $\{2^n \times 24\}_q$ ,  $n = 0, 1, 2$ , определяется последовательностью вложений карт (рис. 4а):

$$\{6, 3\}_{2,1} \leftarrow \{6, 3\}_{3,1} \leftarrow \{6, 3\}_{5,0} \leftarrow \{6, 3\} = A_2, \quad (9)$$

для которых универсальным накрытием является гексагональная мозаика — решетка  $A_2$ , вторая координационная сфера которой определяет систему  $G_2$ . Карта  $\{6, 3\}_{2,1}$  содержит достаточно гексагонов, чтобы определить все векторы системы корней  $G_2$  (рис. 4б). Можно показать, что различным вариантам триангуляции гексагонов в (9) соответствуют различные системы групп Шевалле типа  $G_2$ , определяющие рассматриваемые в работе полиэдры и политопы. Соотношения (8), (9) позволяют утверждать, что существует особая замкнутая последовательность алмазоподобных алгебраических политопов  $\{q(2^n \times 24)\}$ ,  $n = 0, 1, 2$ , которая начинается с открытого Коксетером политопа  $\{240\}$ .

Пусть канал  $K$  — трехмерная стержневая подструктура политопа из данной последовательно-

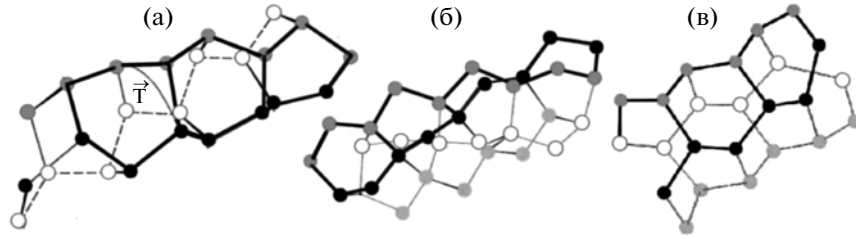


Рис. 5. Каналы 30/11 (а), 40/9 (б) [12] и 40/11 (в), которые соответствуют гексагональным, квадратным и октагональным граням полиэдра рис. 3д. Преобразование  $T$  представляет собой винтовое вращение 30/11 (а).

сти, который удовлетворяет рассмотренным требованиям топологической устойчивости. Согласно (6), (7), данный канал должен соответствовать грани нагруженного полиэдра  $\{2^n \times 24\}_q$  (рис. 3), образованной  $m$  ребрами, из которых  $Q$ -ребрами являются  $m_Q$ , при  $0 < m_Q < m/2$ ,  $m = 5, 6, 7, 8$ . В  $E^3$  соответствующий канал  $K$  (стержень) образуют конгруэнтные  $Q$ -цепочки, которые по отношению к каналу разделяются на два типа. В цепочке 1-го типа у каждой вершины каналу принадлежат три ребра (из четырех), а в цепочке 2-го типа – поочередно два или четыре ребра. Цепочке 1-го типа соответствует  $Q$ -ребро, а 2-го типа – одна вершина  $Q$ -ребра. Согласно [10, 11], если канал  $K$  образован цепочками одного типа, он может быть аппроксимирован орбитой винтовой оси, осуществляющей сдвиг на вектор  $h$  вдоль оси и вращение на угол  $L/d$  (в общем случае нецелочисленный) [5, 6, 10].

Действительно, политоп  $\{240\}$  с группой симметрии  $(O' \times Y')/2$ , где  $O'$  и  $Y'$  – двойные группы вращений икосаэдра и октаэдра [12], представляет собой объединение четырех каналов 30/11, в промежутках между которыми возникают шесть каналов 40/9 (рис. 3а). Образующими для этого политопа являются соотношения  $(30/11)^3 = -(40/9)^4 = (10)^1$  между движениями в  $E^4$ , которые обладают вращательными компонентами (в одной из двух плоскостей) на  $132^\circ$ ,  $81^\circ$  и  $36^\circ$  соответственно. При этом канал 30/11 в  $E^3$  образуют три  $Q$ -цепочки 1-го типа, а канал 40/9 – четыре  $Q$ -цепочки 2-го типа (рис. 5а, 5б). Следующий за  $\{240\}$  политоп  $\{q(2 \times 24)\}$  (рис. 3д) характеризуется соотношениями

$$(30/11)^3 = (40/11)^4 = -(40/9)^4 = (10)^1, \quad (10)$$

которые задают в  $E^3$  и канал 40/11 (рис. 5в); знак минус определяет противоположную (30/11) хиральность вращения.

Канал  $K$  в свою очередь может определять топологически устойчивую, геликоидальноподобную структуру  $\Omega$ , удовлетворяющую соотношениям

$$\Omega \leftarrow \langle L/d | \lambda h(\mathbf{r}(u, \varphi, \alpha)) \rangle 2\{q\} \leftarrow \leftarrow \{q(2^n \times 24)\} \leftarrow E_8, \quad (11)$$

где  $L/d = \frac{8}{\gamma_1 \gamma_2} \frac{I_n m_{js} + 1}{m_{js}} = \frac{8I_n}{\gamma_1 k_{js} \gamma_2 m_{js}}$ ,  $\gamma_1, \gamma_2$  равны 1 или 2,  $I_n, I_s = k_{js}(m_{js} + 1)$  – инварианты,  $m_{js}$  – показатели решетки  $E_8$  [5];  $\lambda$  – целое,  $n = 0, 1, 2$ . В силу (1)  $h = 2.4r$ , где  $r$  – определяемый (2) радиус цилиндрически подобной поверхности, на которую может быть отображена  $\Omega$ . Если  $L/d$  зависит только от инвариантов  $E_8$ , то локальная решетчатость отображается в зависимости  $h$  от  $\mathbf{r}(u, \varphi, \alpha)$ . Оператор федоровской группы определяется (11) в предельном случае  $L/d = n$ ,  $n = 1, 2, 3, 4, 6$ , и  $h = t/n$ , где  $t$  – вектор кубической решетки  $D_3$  или гексагональной решетки  $A_2 \times A_1$ .  $D_3$  – это ГЦК-решетка, которая вкладывается в четырехмерную решетку  $D_4$ , из которой (по квазиразложимости [15]) может быть получена система  $G_2$ , определяемая векторами первой и второй координационных сфер решетки  $A_2$ .

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дискретная система, состоящая из подсистем, предпочтительнее непрерывной, поскольку обладает более высокой надежностью. В такой системе каждая подсистема может находиться в небольшом числе возможных состояний, поэтому она, как правило, игнорирует малые отклонения от нормы различных физических параметров системы, восстанавливая (в исходном виде) одно из своих допустимых состояний. В непрерывной системе малые возмущения накапливаются, что может привести к принципиальным изменениям самой системы. Таким образом, для получения физически значимых результатов необходимо использовать решения, относящиеся к конечным стационарным гамильтоновым системам, для которых система уровней также дискретна.

В работе показано, что для этого могут быть использованы трехмерные локально решетчатые конструкции, инвариантные относительно конструкций алгебраической геометрии и топологии



[1, 13, 18]. Как известно, проблема классификации трехмерных многообразий не только не решена, но и неизвестно, существует ли алгоритмический подход к решению такой задачи [1, т. 3]. Однако если рассматривать лишь диффеоморфизмы (или автоморфизмы) поверхности, которая ограничивает объем данной трехмерной структуры, то оказывается возможным выделить определенные классы трехмерных многообразий. Для этого потребовалось рассмотреть поверхности, относящиеся к минимальным (локально минимальным) и содержащие особые точки, которые было необходимо соотнести с выбранным типом решетчатости и автоморфизмами системы.

Показано, что определенный Коксетером политопа  $\{240\}$  представляет собой начало замкнутой последовательности алгебраических политопов, отображаемых в “нагруженные” полиэдры ( $2^n \times 24$ ),  $n = 0, 1, 2$ . Соотношения взаимосвязи политопов данной последовательности с расслоенными пространствами (накрытиями) и клеточными комплексами позволили определить особый класс геликоидальноподобных подструктур, топологическая устойчивость которых определяется их соответствием представлению Вейерштрассе и выполнению условия равенства нулю индекса неустойчивости поверхности, ограничивающей объем такой структуры.

В следующей работе, представляющей собой вторую часть данной, будет показано, что априори выведенные локально решетчатые упаковки клеточных комплексов (ограниченные поверхностью геликоидальноподобного типа) реализуются в виде  $\alpha$ -спирали и различных форм ДНК-структур.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дубровин Б.Л., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия. М.: Эдиториал, 2001. Т. 1. 336 с.; Т. 2. 296 с.; Т. 3. 288 с.
2. Курош А.Г. Теория групп. М.: Гостехиздат, 1953. 544 с.
3. Тужилин А.А., Фоменко А.Т. Элементы геометрии и топологии минимальных поверхностей. М.: Наука, 1991. 175 с.
4. Самойлович М.И., Талис А.Л. // Докл. РАН. 2008. Т. 420. С. 472.
5. Самойлович М.И., Талис А.Л. // Кристаллография. 2007. Т. 52. С. 599.
6. *Samoylovich M.I., Talis A.L.* // Cryst. Rep. 2009. V. 54. P. 1117.
7. *Samoylovich M.I., Talis A.L.* // Acta Cryst. A. 2010. V. 66. P. 616.
8. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. М.: Мир, 1990. Т. 1. 414 с.
9. Coxeter H.S.M. Regular polytopes. New York: Dauer, 1973. 321 p.
10. *Samoylovich M.I., Talis A.L.* A foundation for the theory of symmetry of ordered nanostructures. М.: CNITI “Technomash”, 2007. 198 p.
11. Coxeter H.S.M. // Philos. Trans. R. Soc. London. A. 1930. V. 229. P. 346.
12. Mosseri R., Di Vincenzo D.P., Sadoc T.F., Brodsky M.H. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. P. 3974.
13. Арнольд В.И. Теория катастроф. М.: УРСС, 2004. 128 с.
14. Самойлович М.И., Талис А.Л. // Матер. XVIII междунар. конф. “Высокие технологии в промышленности России”. М.: Техномаш, 2012. С. 394.
15. Хамфри Дж. Линейные алгебраические группы. М.: Наука, 1980. 400 с.
16. Бунина Е.И. // Фундаментальная и прикладная математика. 2007. Т. 13. С. 3.
17. Koca M., Koca R., Al-Barwani M. // J. Math. Phys. 2006. V. 47. P. 043507.
18. Новиков С.П. Алгебраическая топология // Совр. пробл. матем. 2004. Т. 4. 46 с.