ОБОЗРЕНИЕ
ПРИКЛАДНОЙ И ПРОМЫШЛЕННОЙ
Том 25 МАТЕМАТИКИ Выпуск 1
2018

А. Л. Рабинович, **А. Л. Талис** (Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН; Москва, ИНЭОС РАН). **Универсальность тетраблока как основа общего подхода к отображению некристаллографической симметрии углеводородных цепей.**

Существует евклидово пространство, соприкасающееся с данным римановым [1] вдоль любой данной кривой [1, p. 99]. Это позволяет для выявления «скрытой» симметрии линейных молекулярных структур (цепных молекул) в 3-мерном евклидовом пространстве E^3 использовать симметрии линейных подструктур в 3-мерных римановых [1] пространствах. Углеводородные цепи — тетракоординированные структуры, допускающие аппроксимацию одинаковыми правильными тетраэдрами, поэтому поиск подходящих структур следует вести в 3-мерных римановых пространствах лишь постоянной кривизны — сфере S^3 постоянной положительной кривизны и пространстве H^3 постоянной отрицательной кривизны. Анализ идеально плотных упаковок правильных тетраэдров, реализующихся лишь в политопе $\{3,3,5\}$ (разбиении S^3 на 600 тетраэдров [2]), показывает, что для цепей, имеющих не более 30 вершин [2], максимально-возможной единицей, которая с неизменным количеством вершин отображается из $\{3,3,5\}$ в E^3, является 7-вершинное линейное объединение по граням 4-х правильных (платоновых) тетраэдров — тетраблок. Использование серии комбинаторных конструкций, связанных с линейным объединением правильных тетраэдров по граням, и переход к евклидовой подконфигурации минимальной конечной проективной плоскости [3], также позволяют от 7-вершинной триангуляции тора $\{3,6\}_{2,1}$ (где количество вершин 7 определяется соотношением $2^2+2\cdot 1+1^2$) перейти к тому же тетраблоку (7 вершин, 10 треугольных граней, 15 ребер). Триангулированный тор $\{3,6\}_{2,1}$ вкладывается в открытую [4, 5] квартику Клейна - компактную риманову поверхность, для которой можно задать метрику плоскости Лобачевского H^2 постоянной отрицательной кривизны [4]. В свою очередь, открытая квартика Клейна определяет в гиперболических сотах $\{3,3,6\}$ с 6 тетраэдрами у каждого ребра [4] в H^3 многообразие $M(\{3,6\}_{2,1})$, — одно из тех 8 многообразий, которые имеют конечный объем [5]. Оно состоит из 7 четверок гиперболических тетраэдров, объединенных по граням. Каждая из таких четверок соответствует тору $\{3,6\}_{2,1}$ и при отображении $M(\{3,6\}_{2,1})$ в E^3 отображается в тетраблок, — он является максимально-возможной единицей, которая отображается из $\{3,3,6\}$ в E^3 без изменения количества вершин. Максимальное многообразие, имеющее конечный объем в бесконечных сотах $\{3,3,6\}$, содержит 672 гиперболических тетраэдра [5], 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 [4], которое приводит к существованию взаимно-однозначного соответствия тетраблоков в регулярных тетраэдрических разбиениях $\{3,3,5\}$ и $\{3,3,6\}$ пространств S^3 и H^3. В силу теоремы об отображении [1, p. 99], это взаимно-однозначное соответствие распространяется и на пространство E^3, определяя тем самым универсальность тетраблока в 3-мерных римановых пространствах постоянной кривизны. Элементы группы PSL(2,7) — группы симметрии квартики Клейна, в зависимости от локализации тетраблока — в пространствах S^3, E^3 или H^3, нагружаются дополнительными преобразованиями, образуя группу симметрии тетраблока, изоморфную PSL(2,7). 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 конечные объединения тетраэдров по граням в S^3 и H^3. Для возникновения реальных структур в тетракоординированных цепях существование симметрии тетраблока является необходимым, но не достаточным условием (подобно существованию федоровской группы, определяющей возможность кристаллического упорядочения, и реальным кристаллом).

Работа выполнена по теме № 0221-2017-0050 (№ г.р. АААА-А17-117031710039-3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Cartan E.* Geometry of Riemannian spaces. Brookline: Math Sci. Press, 1983.
2. *Coxeter H. S. M.* Regular Polytopes. N.Y.: Dover Publ., 1973.
3. *White A. T.* Proc. London Math. Soc., 1995, s3-70, 1, 33–55.
4. *Agol I.* Thurston's congruence link. http://www.math.uic.edu/ $\sim$ agol/conglink.pdf
5. *Görner M.* arXiv:1406.2827v3 [math.GT], 2016.