

УДК 548.4:577.3

ТЕТРАЭДРИЧЕСКИЙ АНАЛОГ ЛЕНТЫ МЕБИУСА – ГЕКСАЦИКЛ "ТВИСТ-ВАННА"

В. П. Мартовицкий

Из правых T-узлов, представленных в виде полиэдров двух подрешеток: икосаэдров и искаженных тетрагексаэдров, может быть построен левый фрактальный узел следующего уровня иерархии. Замкнутый цикл такого узла является тетраэдрическим аналогом ленты Мебиуса и изоморфен скрученному на 120° тору, поверхность которого раскрашена в три цвета с циклическим переходом цветов при каждом обходе по тору. "Мебиусный" характер гексацикла "твист-ванна" делает его "обратным усилителем", переводя левовинтовое закручивание троек атомов на каждой связи в правый T-узел с правовинтовыми двойными спиралями 30/11, и наоборот.

Для тетракоординированных атомов известны три замкнутых гексацикла: "кресло", "ванна" и "твист-ванна" [1]. Каждый из них образуется при определенном угле закручивания Θ вокруг общей связи одной тройки атомов относительно другой тройки атомов. Кристаллическая структура алмаза с бинарным параметром $\Theta = 60^\circ$ состоит только из "кресел", кристаллическая структура гексагонального льда 1H с $\Theta = 0^\circ$ и 60° в отношении 1:3 состоит из "кресел" и "ванн", а некристаллографические кластеры триплет (20 атомов) и T-узел (27 атомов) с бинарным параметром $\Theta \approx 38^\circ$ на каждой связи состоят только из гексациклов "твист-ванна". Триплет был использован в качестве элементарного "кирпича" для получения 11 параметрических структур связанной воды, которые по симметрии, метрике и топологии оказались комплементарными (взаимно дополнительными) структурам важнейших биополимеров – ДНК, РНК, коллаген и др. [2, 3]. Однако триплет с симметрией D_3 не является изометричным кластером в отличие от T-узла с симметрией T-23, поэтому полученные структуры не удалось представить в

полиэдрическом виде. Если T -узел изобразить в виде полиэдров двух его подрешеток – икосаэдра и искаженного тетрагексаэдра, тогда семь возможных способов конденсации T -узлов можно представить как объединение одинаковых или различных полиэдров по граням или с началом каждого следующего полиэдра в центре предыдущего [4].

При рассмотрении образующихся из T -узлов структур наиболее интересными представляются случаи образования замкнутых циклов, которые могут быть использованы в качестве строительных единиц для получения структур следующего уровня иерархии по принципу "системы систем". При этом возможно образование совершенно новых структур, например, сферических "молекул" из стержней $\langle \tau 01 \rangle$ [5], или самоподобного фрактального T -узла следующего уровня иерархии. Такие фрактально-триплетные структуры, состоящие из левых T -узлов (T^0) и триплетов (L^0) с длиной каждого стержня (T^0) – $m(L^0)$ – (T^0), где $m = 1, 3, 5$ были описаны в работе [6].

В настоящей работе построен замкнутый гексацикл *левого* фрактального узла из *правых* T -узлов и показано, что перевод правой структуры одного уровня иерархии в левую структуру следующего уровня является свойством самого цикла "твист-ванна".

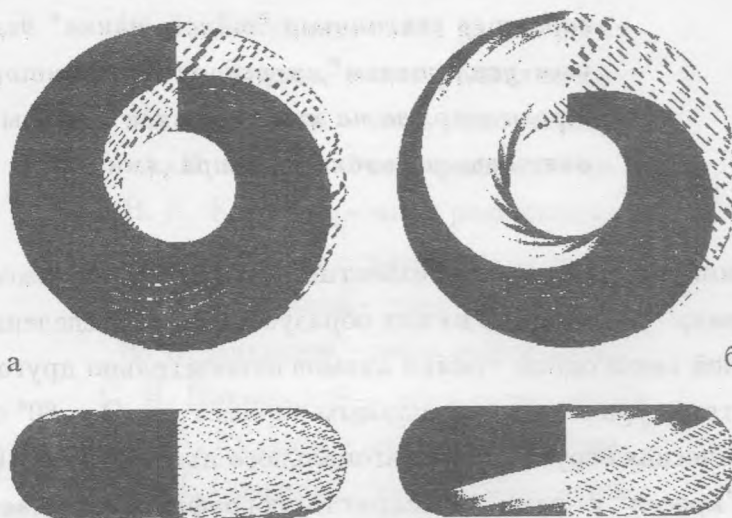


Рис. 1. Скрученные двух- и трехцветные торы, изоморфные замкнутым петлям из скрученных стержней. Закручивание при обходе по тору равно половине оборота (а) и двум третям оборота (б).

Последовательное объединение нескольких T -узлов вдоль одного и того же направления приводит к образованию скрученных стержней [4]. Если раскрасить боковую поверхность стержня продольными цветными полосами, то скручивание становится

наглядным. Развитие таких стержней в эквивалентных направлениях позволяет получить замкнутую петлю, которая изоморфна скрученному тору, поверхность которого раскрашена в несколько цветов (рис. 1). Число цветов для раскраски поверхности тора выбирается исходя из следующих соображений. Все атомы двух T -узлов полностью совмещаются при условии совмещения их центров и атомов первой координационной сферы. То есть, вращения T -узлов могут быть рассмотрены как вращения тетраэдров. Когда тетраэдр вращается вокруг двойной оси, то при образовании совершенной замкнутой петли возможны два положения при совмещении первого узла с узлом, присоединяемом к последнему узлу: либо все атомы обоих тетраэдров занимают те же самые позиции при обходе по замкнутому циклу, либо пары атомов меняются местами. Когда пары атомов меняются местами, это изоморфно закручиванию на пол-оборота при обходе по тору. Такой двухцветный скрученный на пол-оборота тор (рис. 1а) во многом напоминает ленту Мебиуса, поскольку половина образующей окружности положительной кривизны тора при обходе по тору переходит в другую половину образующей окружности отрицательной кривизны тора с возвратом в первоначальное положение после второго обхода. Тетраэдрический аналог ленты Мебиуса с двумя обходами по циклу был описан в работе [7].

При вращении тетраэдра возможен еще один вариант частичного совпадения ориентаций совмещающихся тетраэдров (и T -узлов). Если ось вращения совпадает с (111) , то одна вершина тетраэдра остается на оси вращения, тогда как три других могут переходить друг в друга при закручивании на углы $2\pi/3$ или $4\pi/3$ при обходе по замкнутому циклу. Этот случай изоморфен скрученному тору, поверхность которого раскрашена в три цвета с последовательным переходом одного цвета в каждом из двух других (рис. 1б). Очевидно, что для возврата в первоначальное положение нужно совершить не два, как в предыдущем случае, а три полных обхода по замкнутому циклу.

Объединение взаимопроникающих T -узлов вдоль направления $[111]$ (два T -узла имеют общий триплет) просто соответствует помещению центра следующего T -узла в одну из вершин предыдущего, а вдоль $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ приводит к образованию очень плотных спиралей 5_1 и 3_1 . Но в сочетании с одним или несколькими T -узлами, присоединяемым по цветным граням [4] (или по трикветрам, т.е. по группам из 7 атомов, согласно [2, 3]) эти способы дают фрактальные T -узлы следующего уровня иерархии. Особенно интересно сочетание в стержне объединения одного полиэдра по грани и одного с общим центром вдоль $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$. В этом случае из *правых* T -узлов образуется *левый* фрактальный узел следующего уровня иерархии. Замкнутая петля такого фрактального узла (рис. 2) имеет

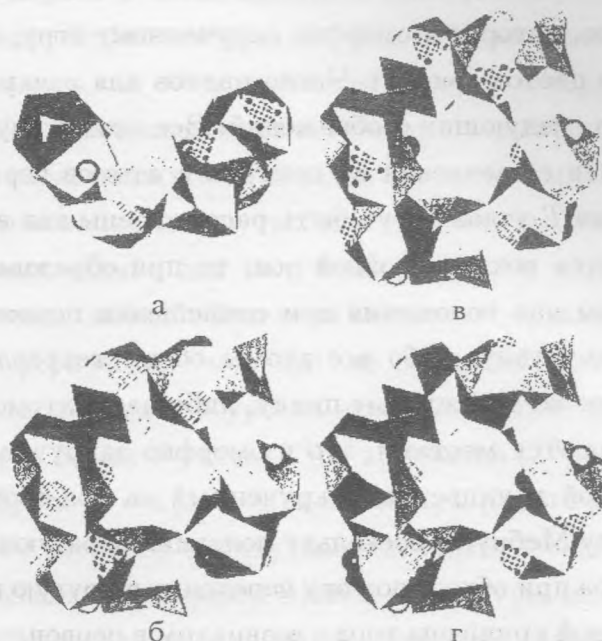


Рис. 2. Замкнутый цикл "твист-ванна" левого фрактального узла, образующегося из правых T -узлов при чередующемся объединении вдоль $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ одинаковых полиэдров по цветным граням и различных взаимопроникающих полиэдров. Ориентация первого гексацикла повернута вокруг горизонтальной оси на 90° (а) для того, чтобы было видно левовинтовое скручивание пары противоположных ребер цикла. Полное повторение цветов выделенного тетраэдра в икосаэдрах происходит после трех обходов по циклу (б, в, г).

конфигурацию "твист-ванна" и ее ориентация на рис. 2а выбрана таким образом, чтобы по ней можно определить левизну фрактального узла. В левом T -узле скрещивание противоположных связей цикла "твист-ванна" имеет левовинтовой характер, тогда как в правом T -узле – правовинтовой. Этот замкнутый цикл состоит из 6 пар полиэдров, поскольку объединение T -узлов вдоль $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ по цветным граням происходит по одинаковым полиэдрам, а взаимопроникающее объединение вдоль $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ – по различным полиэдрам. На рис. 2 выделены грани одного тетраэдра только у икосаэдров для того, чтобы не загружать чрезмерно рисунок. Хорошо видно, что три грани выделенного тетраэдра последовательно переходят друг в друга при каждом следующем обходе по замкнутому циклу. То есть, этот цикл изоморфен скрученному трехцветному тору с циклическим переходом цветов после каждого обхода по замкнутому циклу (рис. 1б).

Образование левого фрактального узла из правых T -узлов наводит на мысль, что и в самом T -узле с бинарным параметром $\Theta \approx 38^\circ$ на каждой связи обход по замкнутому

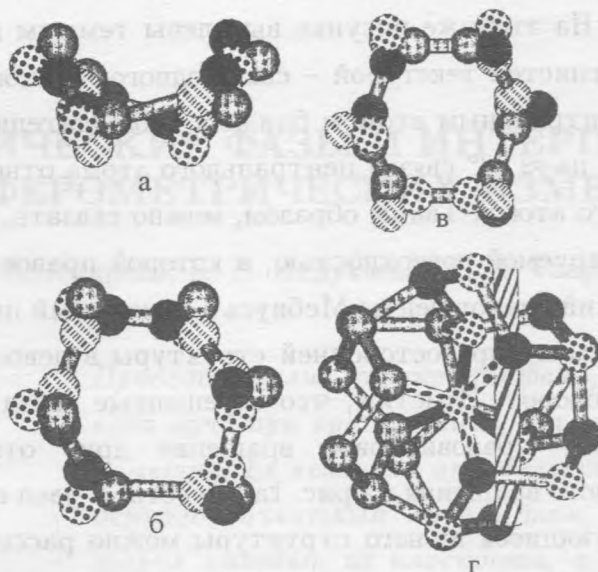


Рис. 3. "Мебиусный" характер замкнутого цикла "твист-ванна" с бинарным параметром $\Theta \approx 38^\circ$ с несовпадением цветов связей первого и последнего атомов (а, б) и идеальное совпадение цветов связей в цикле "кресло" алмазной структуры (в). Правовинтовое вращение двойных спиралей 30/11 в правом T-узле при левовинтовом закручивании на каждой бинарной связи (г). Связи центрального атома и икосаэдрические атомы выделены темным цветом на рис. 3г.

циклу "твист-ванна" приводит лишь к частичному совпадению ориентаций первого и последнего атомов. Действительно, если каждый атом представить в виде четырех сфер различных цветов, соответствующим четырем связям, то последняя связь в цикле "твист-ванна", расположенная ближе всего к наблюдателю на рис. 3а и самая нижняя на рис. 3б, связывает атомы различных цветов. То есть, присоединение атома к шестому атому по тому же самому алгоритму как и на всех остальных связях приводит к тому, что хотя центр седьмого атома и совпадает с центром первого атома, но он повернут вокруг тройной оси на 120° относительно ориентации первого атома, и нужно совершить три обхода по циклу для полного совпадения цветов всех четырех связей этих двух атомов. В то же самое время, обход по замкнутому циклу "кресло" кристаллической структуры алмаза с бинарным параметром $\Theta = 60^\circ$ дает идеальное совпадение цветов связей первого и последнего атомов (рис. 3в). Такое же идеальное совпадение цветов связей первого и шестого атомов наблюдается и в гексацикле "ванна" кристаллической структуры лонсдейлита или гексагонального льда 1Н.

На рис. 3г показан правый T-узел в проекции вдоль тройной оси, в котором выде-

лена одна двойная спираль 30/11 с правовинтовым вращением, то есть с поворотом на 132° на каждый атом. На этом же рисунке выделены темным цветом три связи центрального атома, и пятнистой текстурой – связи одного из атомов малого тетраэдра, расположенного над центральным атомом ближе к наблюдателю. Хорошо видно левовинтовое закручивание на $\approx 38^\circ$ связей центрального атома относительно выделенных связей тетраэдрического атома. Таким образом, можно сказать, что если лента Мебиуса является неориентируемой поверхностью, в которой правое и левое неразличимы [8, 9], то тетраэдрический аналог ленты Мебиуса – замкнутый цикл "твист-ванна", наоборот, переводит фрагмент правосторонней структуры в левосторонний следующего уровня иерархии, и наоборот. Заметим, что скрещенные связи в гексацикле правого T -узла на рис. 3а имеют правовинтовое вращение друг относительно друга в отличие от левовинтового вращения на рис. 1а. То есть, T -узел с замкнутыми циклами "твист-ванна" и образующиеся из него структуры можно рассматривать как "обратный усилитель" знака закручивания связей тетракоординированных атомов на угол Θ , равный примерно 38° для левого T -узла и -38° – для правого правого T -узла.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Mosseri R., Di Vincenzo D. P., Sados J. F., and Brodsky M. H. Phys. Rev. **B 32**, 3974 (1985).
- [2] Бульенков Н. А. Кристаллография, **33**, 424 (1988).
- [3] Бульенков Н. А. Биофизика, **36**, 181 (1991).
- [4] Мартовицкий В. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 10, 3 (2000).
- [5] Мартовицкий В. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 11, 23 (2000).
- [6] Бульенков Н. А. Кристаллография, **35**, 155 (1990).
- [7] Мартовицкий В. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9, 3 (2000).
- [8] Гилберт Д., Кон – Фоссен С. Наглядная геометрия, М., Наука, 1981, 344 с.
- [9] Никулин В. В., Шафаревич И. Р. Геометрии и группы, М., Наука, 1983, 240 с.

Поступила в редакцию 22 сентября 2000 г.

После переработки 16 ноября 2001 г.