ОБОЗРЕНИЕ
ПРИКЛАДНОЙ И ПРОМЫШЛЕННОЙ
Том 25 МАТЕМАТИКИ Выпуск 3
2018

А. Л. Рабинович, А. Л. Талис (Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН; Москва, ИНЭОС РАН). **Алгебраическая геометрия и структурная основа барьерной функции биомембраны.**

Одна из функций биомембран — создание преграды против проникновения в клетки инородных молекул. Основа мембран — молекулы фосфолипидов; в реализации «барьерной» функции могут участвовать как полярные головные группы, так и углеводородные цепи фосфолипидов. Цепи в своей значительной части — тетракоординированные, их протяженность значительно больше протяженности головных групп. Максимально плотное тетракоординированное окружение всех тетракоординированных вершин достигается только в «политопе $\{240\}$» — 4-мерном аналоге алмаза [1, 2]. Все его 240 вершин принадлежат 3-мерной сфере S^3 (пространству постоянной положительной кривизны), погруженной в 4-мерное евклидово пространство E^4, порядок группы симметрии политопа $\{240\}$ равен 2880. В каждой его вершине сходятся 18 гексациклов [1] в конформации «скрученная ванна», — одной из конформаций с наименьшей для гексациклов энергией [1]. Модель из пространства S^3 — формальный, но идеальный образец; реальную систему даст отображение в 3-мерное евклидово пространство E^3 (пространство с нулевой кривизной) той части политопа $\{240\}$, которая позволит столь же плотно, без значительных искажений, заполнить в E^3 некоторую область (искомое отображение определит также и размеры области). В римановом [3] пространстве вдоль любой линии (но не поверхности!) существует евклидово пространство, соприкасающееся [3; p. 99] с ним, т. е. с точностью до бесконечно малых второго порядка сохраняющее все расстояния, измеренные в соседстве с заданной кривой. Требуемое отображение в E^3 из тетракоординированной структуры политопа $\{240\}$ можно осуществить, следовательно, только для линейных тетракоординированных подструктур, т. е. цепей. Политоп $\{240\}$ — это объединение 2-х копий политопа $\{3,3,5\}$, каждая из которых является правильным 4-мерным многогранником со 120 вершинами [4] и группой симметрии порядка 14400 [1]. Если осуществить единообразно, в строго определенных направлениях, бесконечно малые смещения 96 вершин политопа $\{3,3,5\}$, то итоговая система из 120=(24+96) вершин будет обладать группой симметрии подсистемы $(D_4)^2$, содержащей уже 110592 элементов [5], 8-мерной системы векторов E_8 [5]. Если затем разбиение (24+96) удвоить по аналогии с политопом $\{240\}$, то порядок группы для объединения вершин (48+192) удвоится (т. к. в данной системе оси 5-го порядка не было [5]). При этом в системе (48+192) конформации всех гексациклов [1] бесконечно близки к исходным («скрученная ванна»), но количество элементов симметрии возросло (в $2\cdot 110592/2880$=76.8 раза). Увеличение энтропии означает, что системе (48+192) вершин отвечает более глубокий, чем в политопе $\{240\}$, минимум свободной энергии. Выделим подсистему вершин из (48+192), которая при отображении из E^4 заполняет непрерывно и однородно некоторую область в E^3. Политоп $\{3,3,5\}$ можно представить состоящим из 24 икосаэдров и 24 вершин в их центрах [4; p. 153, 298], при этом все вышеупомянутые 96 вершин охватываются 8 непересекающимися икосаэдрами [4; p. 298, Table V(i)]. Три пары таких («экваториальных») икосаэдров преобразуются осью 3-го порядка друг в друга, образуя единую систему из $3\cdot 2\cdot 12 = 72$ вершин, оставшиеся («полюсные») икосаэдры отображаются осью сами на себя; единство этой системы определяет возможность непрерывно и однородно заполнить область в E^3. Упомянутые 72 вершины политопа $\{3,3,5\}$ при переходе бесконечно малыми смещениями к системе (24+96)=(24+12+72+12) вершин могут быть представлены как три 24-вершинные цепи, которые преобразуются друг в друга осью 3-го порядка. Нами показано, что группа симметрии каждой из цепей изоморфна трионной подгруппе $2^6 : (L_3(2) \times S_3)$ группы Матье M_{24} (подгруппа имеет порядок 64512), где $L_3(2)$ — проективная специальная линейная группа (порядка 168), S_3 — симметрическая группа степени 3; символы $\times$ и $:$ означают прямое и полупрямое произведения, соответственно [6; p. 96]. Порядок группы симметрии всех трех цепей $3 \cdot 64512 = 193536$. Подсистема из $2 \cdot 72 = 144$ вершин является единственной и искомой: в ней есть 3 совокупности по 48 вершин, которые представимы в виде 3-х тетракоординированных «углеводородно-подобных» спиралей (вида « $C_{16}H_{32}$ »); группа симметрии этой подсистемы имеет порядок $2 \cdot 193536 = 387072$. При отображении в E^3 тройка «углеводородно-подобных» спиралей скручена (подобно геликоидам Коксетера-Бьерджика [4]) в «цилиндрический тройник». У такой 144-вершинной подсистемы имеются «висячие» вершины (концы ребер), что позволяет таким тройкам спиралей образовать в E^3 единый слой: проекции их осей на плоскость формируют гексагональную сетку, и структура осуществляет «барьерную» функцию.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mosseri R. et al.* Phys. Rev. B., 1985, 32, 6, 3974–4000.
2. *Ishii Y.* Acta Cryst. A., 1988, 44, 987–998.
3. *Cartan E.* Geometry of Riemannian spaces. Brookline: Math Sci. Press, 1983.
4. *Coxeter H. S. M.* Regular Polytopes. N. Y.: Dover Publ., 1973.
5. *Totaro B.* DUKE Math. J., 2004, 121, 3, 425–455.
6. *Conway J. H. et al.* Atlas of Finite Groups. Oxford: Clarendon Press, 1985.