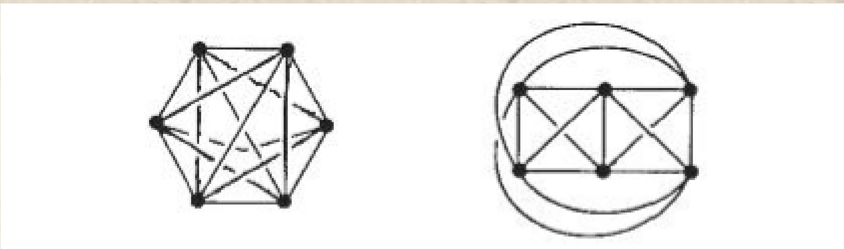
ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΘΕΩΡΙΑΣ ΚΟΜΒΩΝ

ΣΤΗ ΧΗΜΕΙΑ ΚΑΙ ΣΤΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ

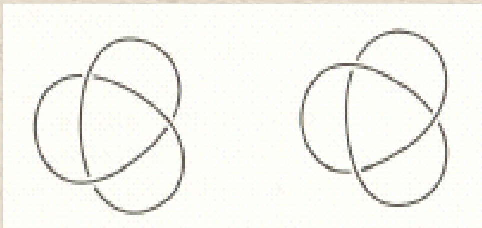
ΔΙΑΜΑΝΤΗΣ ΙΩΑΝΝΗΣ

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΕΡΓΑΛΕΙΑ

- Θεωρία Γραφημάτων



- Θεωρία Κόμβων

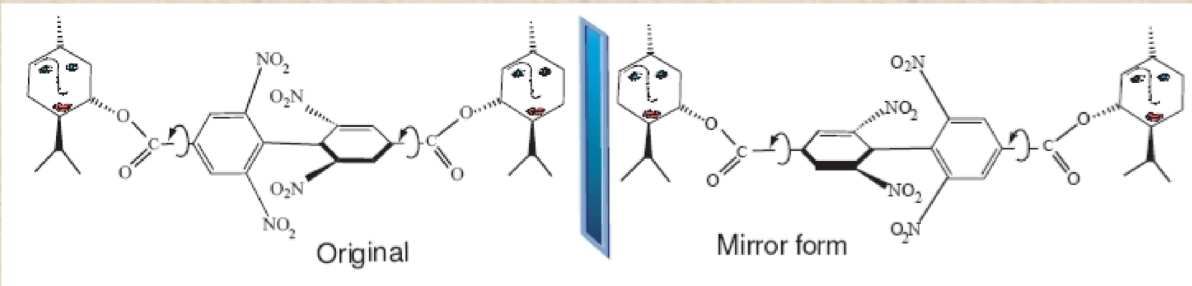


ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ

- Ένα *γράφημα* G είναι μία δυάδα από σύνολα E και V, όπου το σύνολο E είναι το σύνολο κορυφών του G και V το σύνολο των πλευρών του G.

ΚΑΤΟΠΤΡΙΚΗ ΕΙΚΟΝΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΟΣ

- *Κατοπτρική εικόνα* G^* ενός γραφήματος *G* καλείται το γράφημα εκείνο που προκύπτει από την συμμετρική απεικόνιση του *G* ως προς ένα επίπεδο.



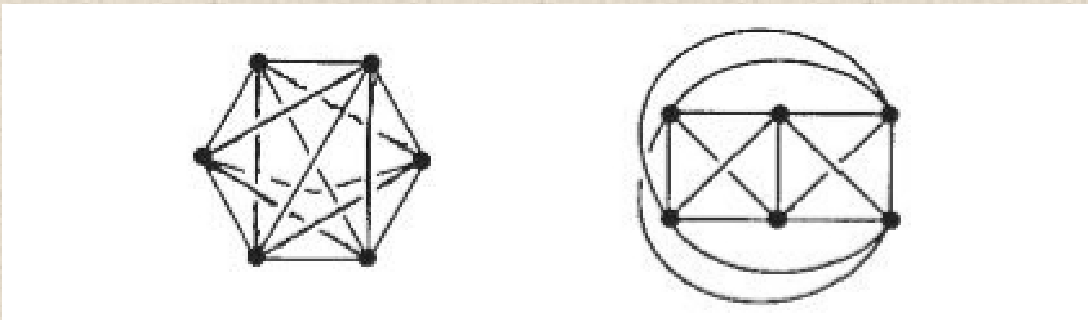
ΟΜΟΙΟΜΟΡΦΙΣΜΟΙ

- Έστω $A, B \subseteq \mathbb{R}^3$ και $f : A \to B$ συνάρτηση. Ο *f* καλείται *ομοιομορφισμός* αν είναι 1-1, συνεχής και έχει συνεχή αντίστροφη εικόνα.

- Αν *A,B* γραφήματα τότε ο *f* απεικονίζει κορυφές σε κορυφές και πλευρές σε πλευρές διατηρώντας τις γειτνιάσεις.

ΕΜΦΥΤΕΥΣΕΙΣ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ

- Έστω *G* αφηρημένο γράφημα. Μία *εμφύτευση* του *G* είναι η εικόνα ενός ομοιομορφισμού $h: G \to G'$, όπου G' υποσύνολο του $\mathbb{R}^3$.



Δύο διαφορετικές εμφυτεύσεις του K_6

ΙΣΟΤΟΠΙΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ

- Δύο εμφυτευμένα γραφήματα G_1, G_2 λέγονται *ισοτοπικά* αν υπάρχει ομοιομορφισμός $h : \left(\mathbb{R}^3, G_1\right) \rightarrow \left(\mathbb{R}^3, G_2\right)$ που να διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου.

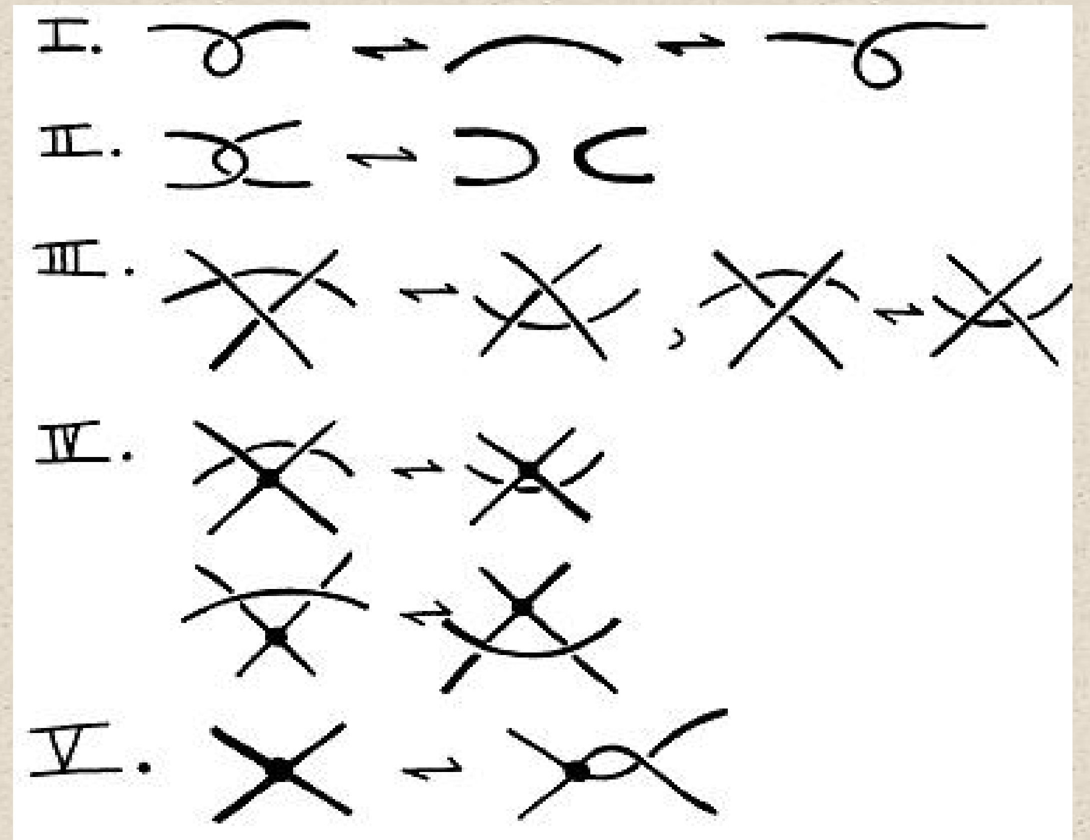
- Όταν υπάρχει δηλαδή, συνεχής ελαστική παραμόρφωση του χώρου που απεικονίζει το ένα γράφημα στο άλλο.

ΑΜΦΙΧΕΙΡΙΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ

- Ένα εμφυτευμένο γράφημα *G* λέγεται *τοπολογικώς αμφίχειρο* αν είναι ισοτοπικό με την κατοπτρική του εικόνα G^*.

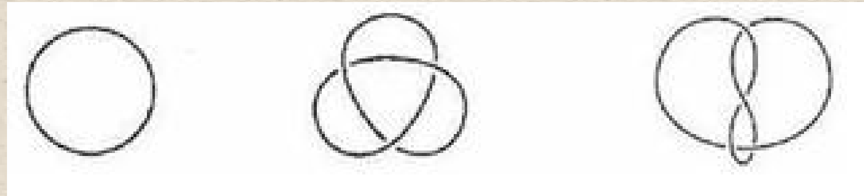
- Ισοδύναμα, ένα γράφημα *G* είναι *τοπολογικώς αμφίχειρο* όταν υπάρχει ένας ομοιομορφισμός $h:\left(\mathbb{R}^3,G\right)\to\left(\mathbb{R}^3,G\right)$ που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου.

Γενικευμένες κινήσεις Reidemeister (Θ.Kauffman)



ΚΟΜΒΟΙ ΚΑΙ ΚΡΙΚΟΙ

- Ένας *κόμβος K* είναι μια εμφύτευση του κύκλου S^1 στο χώρο $\mathbb{R}^3$ ή στη σφαίρα S^3.

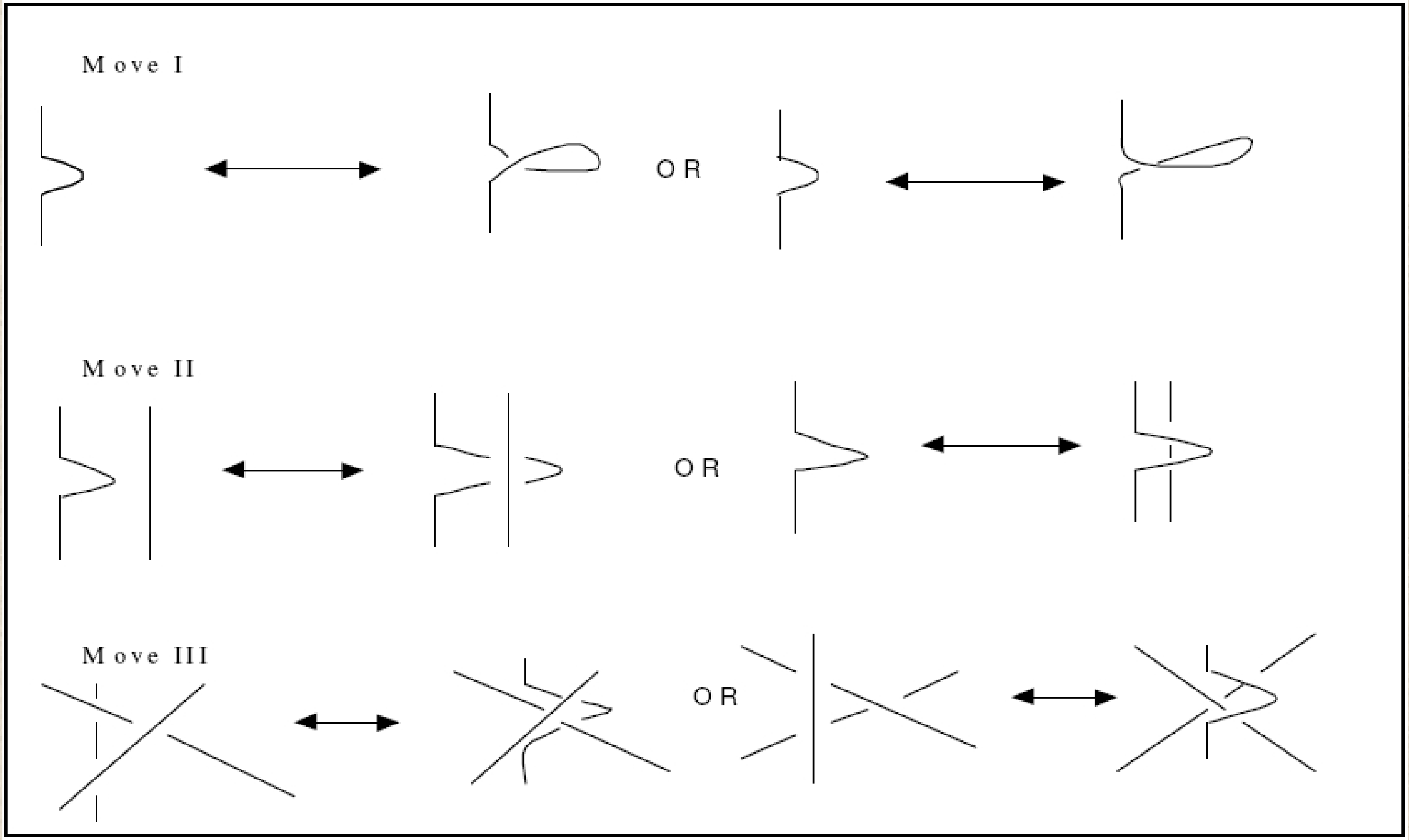


- Ένας *κρίκος L* είναι μια εμφύτευση από *n* αντίγραφα του S^1 στο χώρο ή στη σφαίρα.

<u>ΙΣΟΤΟΠΙΑ ΚΟΜΒΩΝ</u>

- Δύο κόμβοι K_1, K_2 είναι *ισοτοπικοί* αν υπάρχει ομοιομορφισμός $h:\left(S^3, K_1\right) \rightarrow \left(S^3, K_2\right)$ που να διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου.

Κινήσεις Reidemeister

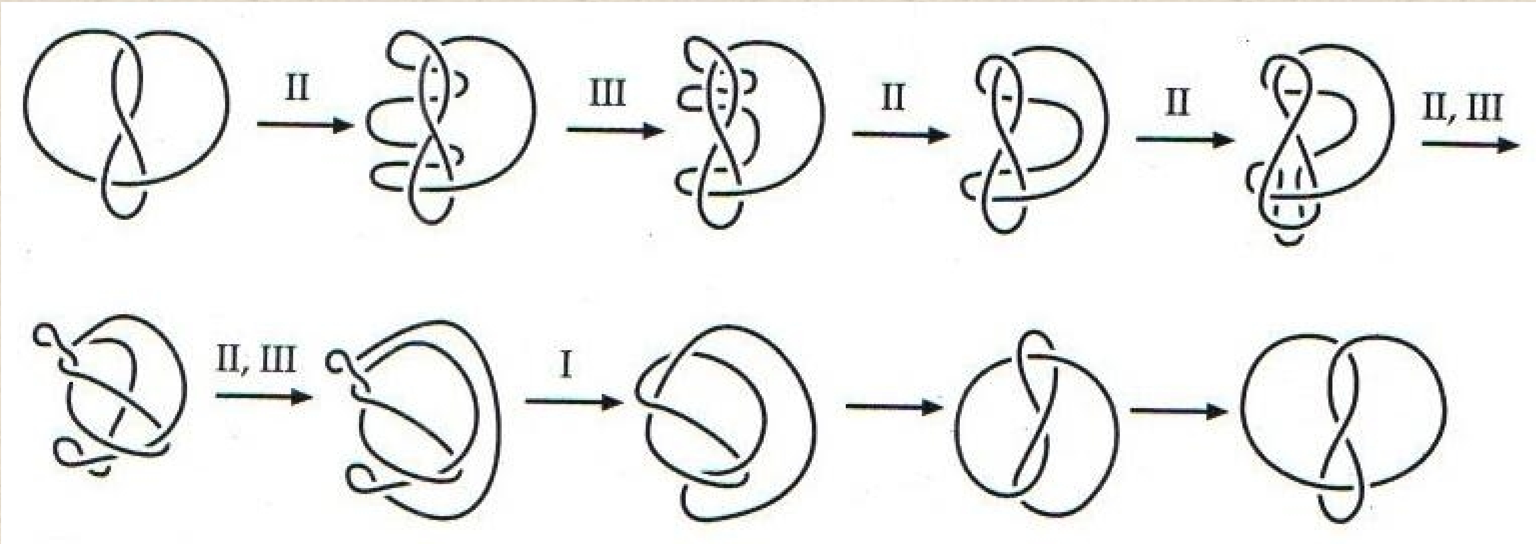


ΑΜΦΙΧΕΙΡΙΑ ΚΟΜΒΩΝ

- Η *κατοπτρική εικόνα* ενός κόμβου προκύπτει με αλλαγή όλων των διασταυρώσεων σε ένα διάγραμμά του.

- Ένας κόμβος που είναι ισοτοπικός με την κατοπτρική του εικόνα καλείται *τοπολογικώς αμφίχειρας.*

Ο κόμβος figure 8 είναι αμφίχειρας



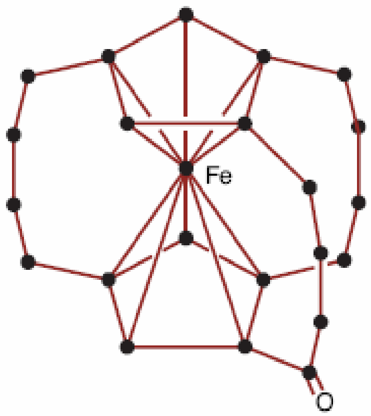
Ο κόμβος trefoil είναι μη αμφίχειρας

Δεξιόστροφος trefoil　　　　Αριστερόστροφος trefoil

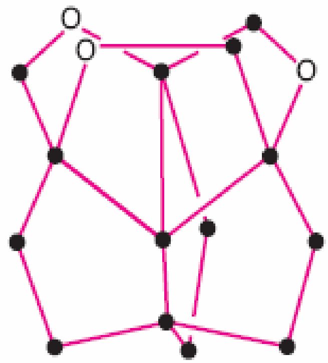
ΜΟΡΙΑΚΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ

- *Μοριακό γράφημα* καλείται η αναπαράσταση ενός μορίου από ένα απλό γράφημα, έτσι ώστε οι κορυφές του γραφήματος να αντιπροσωπεύουν άτομα και οι πλευρές χημικούς δεσμούς.

ferrocenophane

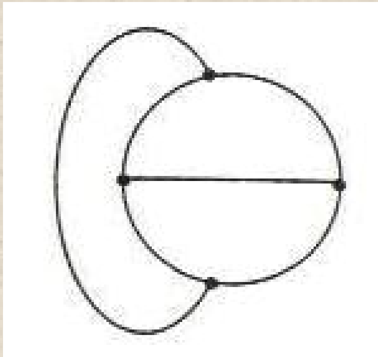


Simmons - Paquette Molecule



<u>ΧΗΜΙΚΗ ΑΜΦΙΧΕΙΡΙΑ</u>

- Ένα μόριο καλείται *χημικώς αμφίχειρο* όταν είναι τοπολογικώς αμφίχειρο και επιπλέον είναι εφικτός στο εργαστήριο ο μετασχηματισμός του στην χημική κατοπτρική του εικόνα.



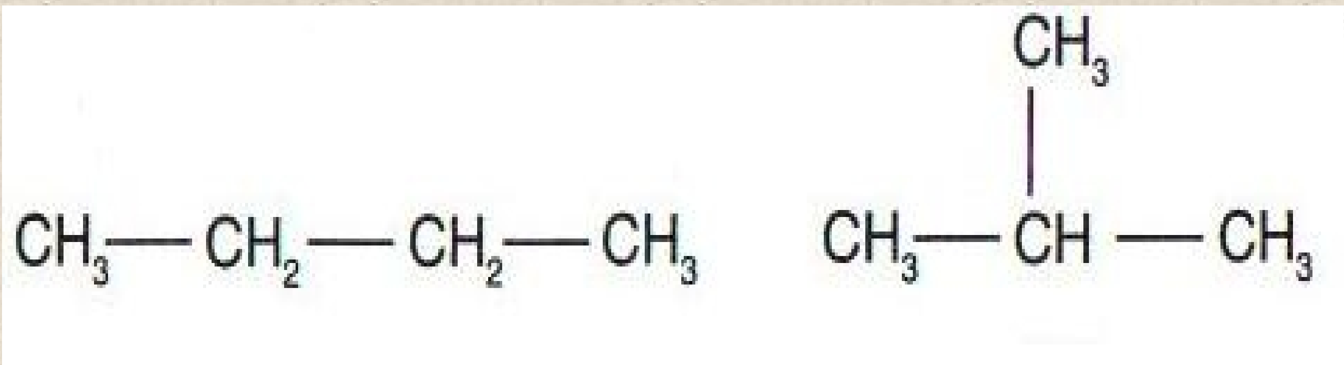
- Ένα επίπεδο γράφημα είναι χημικώς αμφίχειρο.

- Για πολλά μόρια, οι χημικοί ενδιαφέρονται να κατασκευάσουν εργαστηριακά άλλα μόρια, που η δομή τους να συνδέεται με αυτήν του αρχικού μορίου.

- Τέτοια μόρια καλούνται *ισομερή* του αρχικού και διακρίνονται σε τρία είδη:

ΔΟΜΙΚΑ ΙΣΟΜΕΡΗ

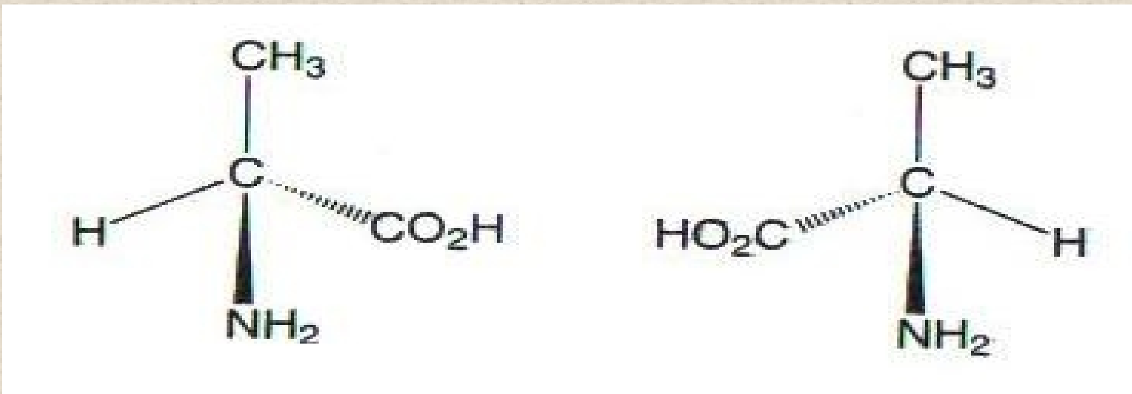
Έχουν τον ίδιο μοριακό τύπο, αλλά αναπαρίστανται από διαφορετικά μοριακά γραφήματα.



Βουτάνιο Ισοβουτάνιο

ΓΕΩΜΕΤΡΙΚΑ ΙΣΟΜΕΡΗ

Μόρια με το ίδιο αφηρημένο γράφημα, αλλά σαν άκαμπτα αντικείμενα, το ένα δεν μπορεί να υπερτεθεί επί του άλλου.

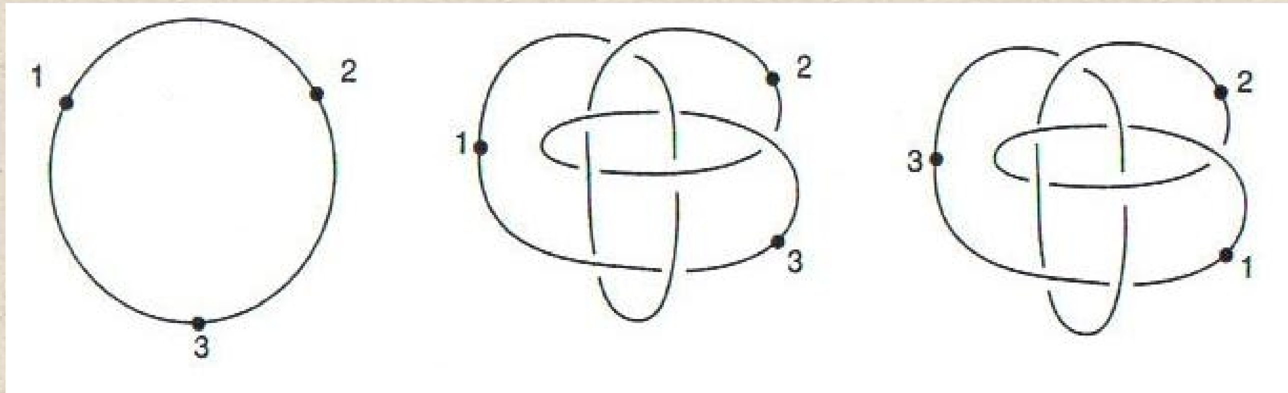


L- Αλανίνη

D- Αλανίνη

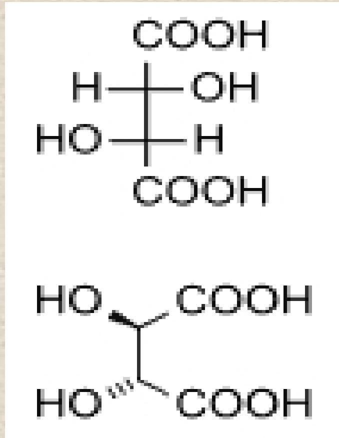
ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΑ ΙΣΟΜΕΡΗ

Μόρια με το ίδιο αφηρημένο γράφημα, αλλά ως εμφυτευμένα γραφήματα το ένα δεν μπορεί να ισοτοπηθεί στο άλλο.

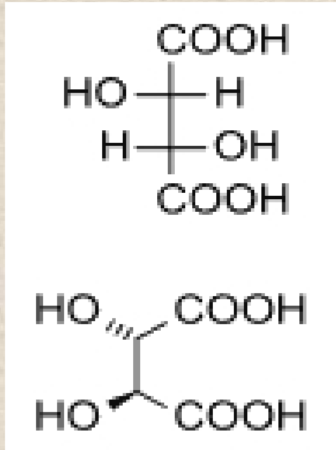


ΕΝΑΝΤΙΟΜΕΡΗ

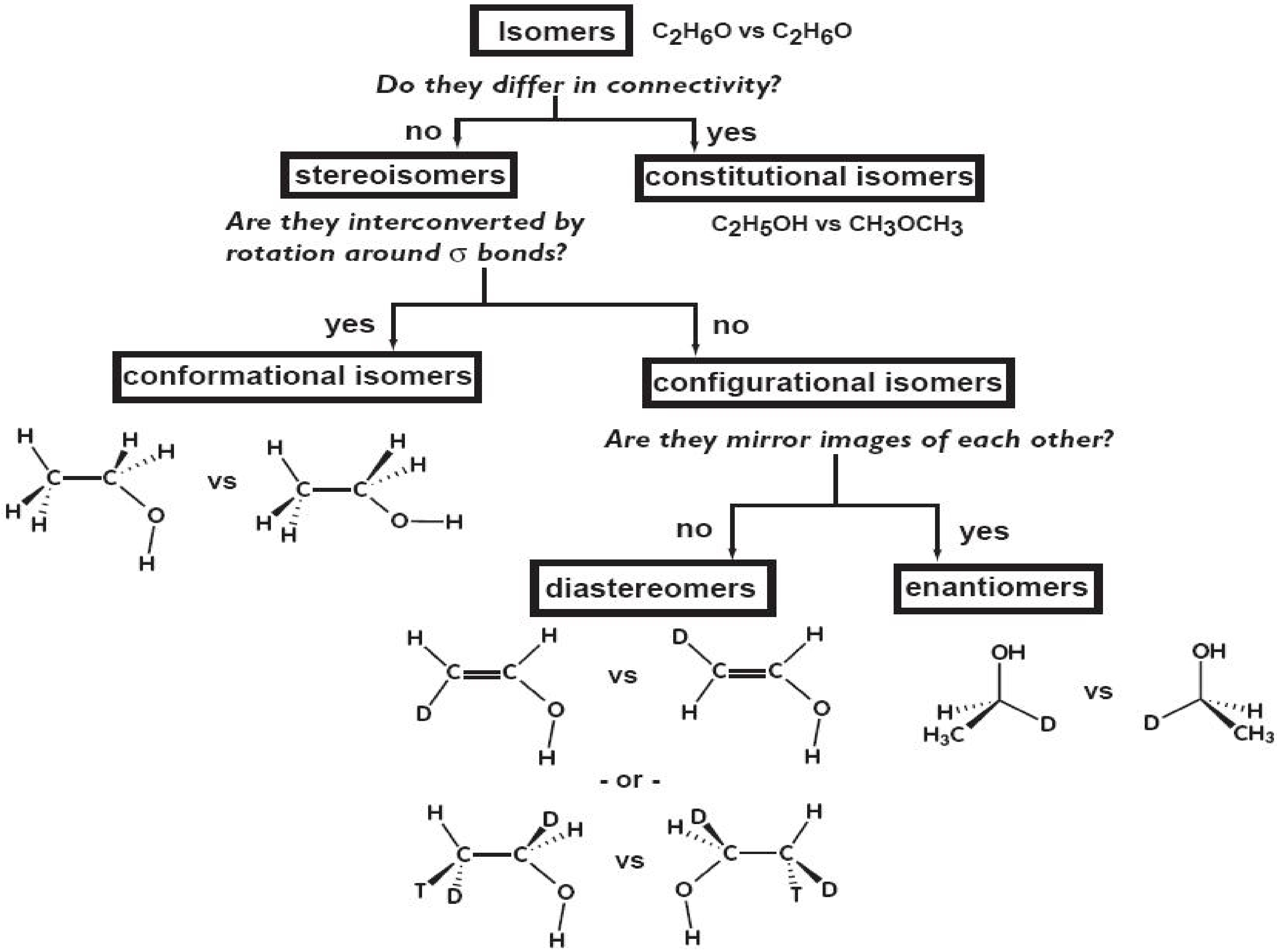
- Ένα ζεύγος μη αμφίχειρων μορίων που το ένα αποτελεί κατοπτρική εικόνα του άλλου καλούνται *εναντιομερή*.



L-(+)-Ταρταρικό Οξύ



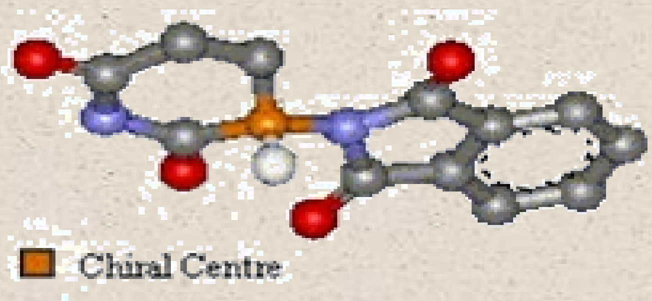
D-(-)-Ταρταρικό Οξύ

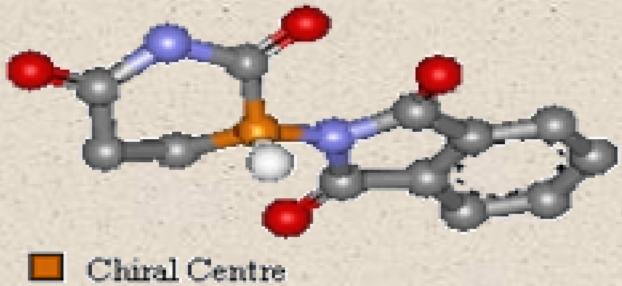

Isomers
C2H6O vs C2H6O
Do they differ in connectivity?
no
yes
stereoisomers
constitutional isomers
C2H5OH vs CH3OCH3
Are they interconverted by rotation around σ bonds?
yes
no
conformational isomers
configurational isomers
vs
Are they mirror images of each other?
no
yes
diastereomers
enantiomers
vs
- or -
vs
vs

Thalidomide

- Η Thalidomide είναι μη αμφίχειρο μόριο και περιέχει και τα δύο εναντιομερή του μορίου.

- Το ένα εναντιομερές δρούσε όπως πίστευαν οι γιατροί.
- Το άλλο εναντιομερές προκαλούσε προβλήματα στο έμβρυο.



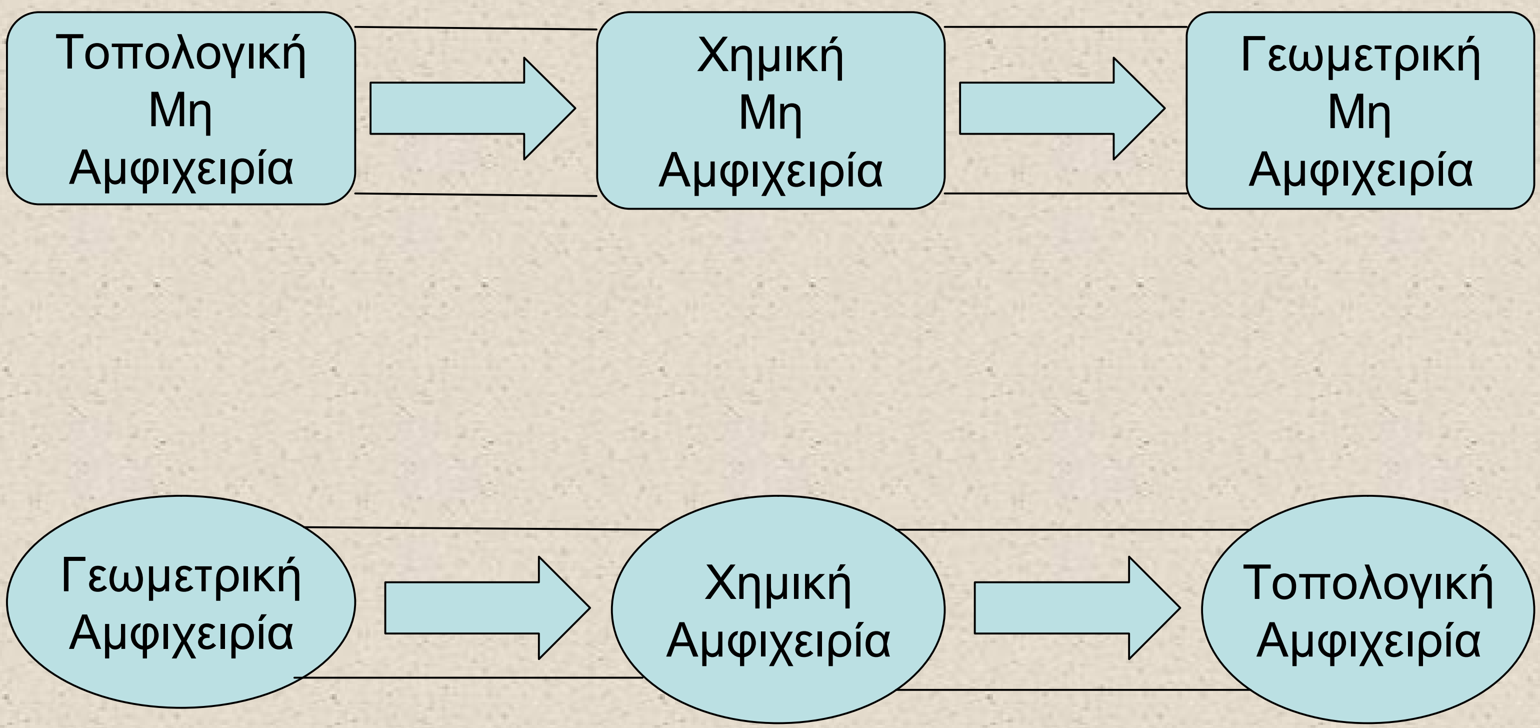


ΣΥΝΘΕΣΗ

- Οι Χημικοί προσπαθούν να κατασκευάσουν την κατοπτρική εικόνα μορίων στο εργαστήριο.
- Στη συνέχεια, μελετούν τα δύο μόρια ως προς τις ιδιότητές τους.
- Αν η κατοπτρική εικόνα ενός μορίου έχει «χαρισματικές» ιδιότητες, τότε επιλέγουν το κατοπτρικό του αρχικού μορίου.
- Οι Χημικοί θέλουν να γνωρίζουν πότε ένα μόριο δεν είναι αμφίχειρο, γιατί διαφορετικά, τα μόρια θα έχουν τις ίδιες ιδιότητες.

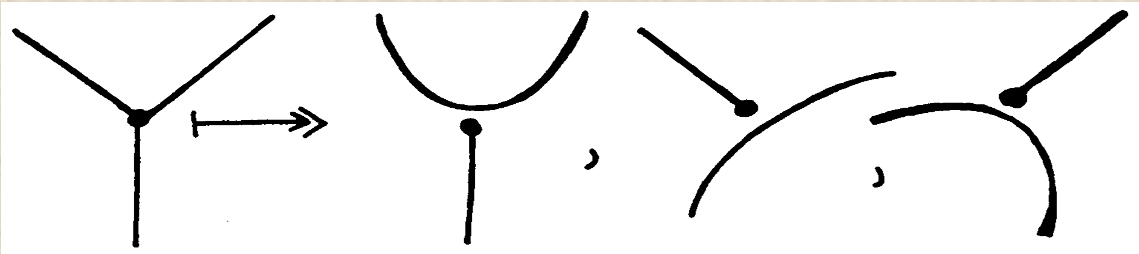
- *Αν ένα γράφημα είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο, τότε το μόριο, το οποίο το γράφημα αντιπροσωπεύει, είναι απαραιτήτως χημικώς μη αμφίχειρο.*

- *Όταν ένα μοριακό γράφημα είναι τοπολογικώς αμφίχειρο, τότε δεν μπορούμε να αποφανθούμε εάν είναι χημικώς αμφίχειρο.*


Τοπολογική Μη Αμφιχειρία
Χημική Μη Αμφιχειρία
Γεωμετρική Μη Αμφιχειρία
Γεωμετρική Αμφιχειρία
Χημική Αμφιχειρία
Τοπολογική Αμφιχειρία

ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΕΣ ΑΝΑΛΛΟΙΩΤΕΣ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ

- Το σύνολο *T(G)* προκύπτει ενώνοντας οποιεσδήποτε δύο πλευρές που προσπίπτουν σε μια κορυφή και διαχωρίζοντας κάθε άλλη πλευρά από την κορυφή αυτή.



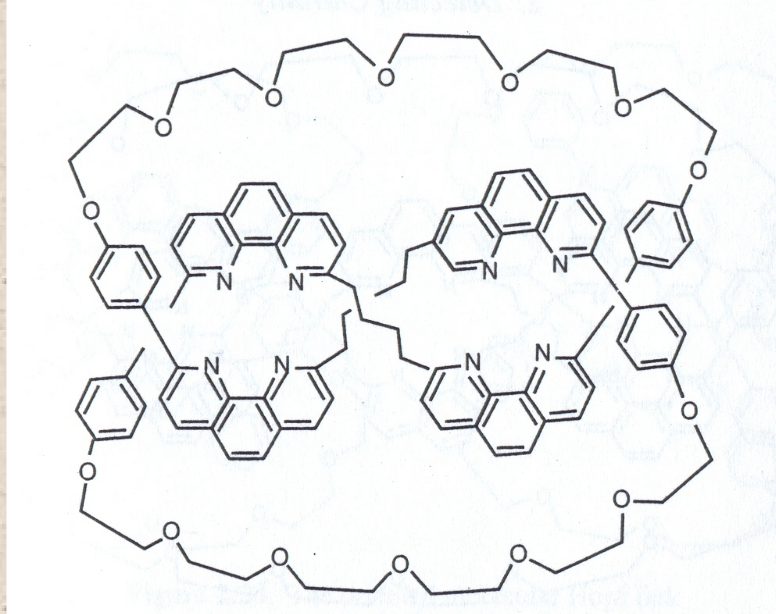
<u>ΘΕΩΡΗΜΑ</u> **(***Kauffman; 1989***)**

- Έστω ένα γράφημα *G* εμφυτευμένο στον $\mathbb{R}^3$. Αν υπάρχει ένα στοιχείο του *T(G)* το οποίο είναι μη αμφίχειρο και η κατοπτρική του εικόνα δεν περιέχεται στο σύνολο *T(G)*, τότε το γράφημα είναι μη αμφίχειρο.

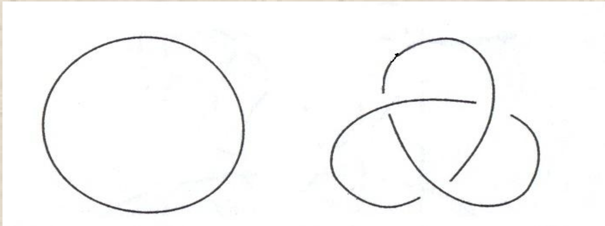
ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

ΣΕ ΜΟΡΙΑΚΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ

<u>Εφαρμογή 1</u>: Ο μοριακός κόμβος trefoil (1989)

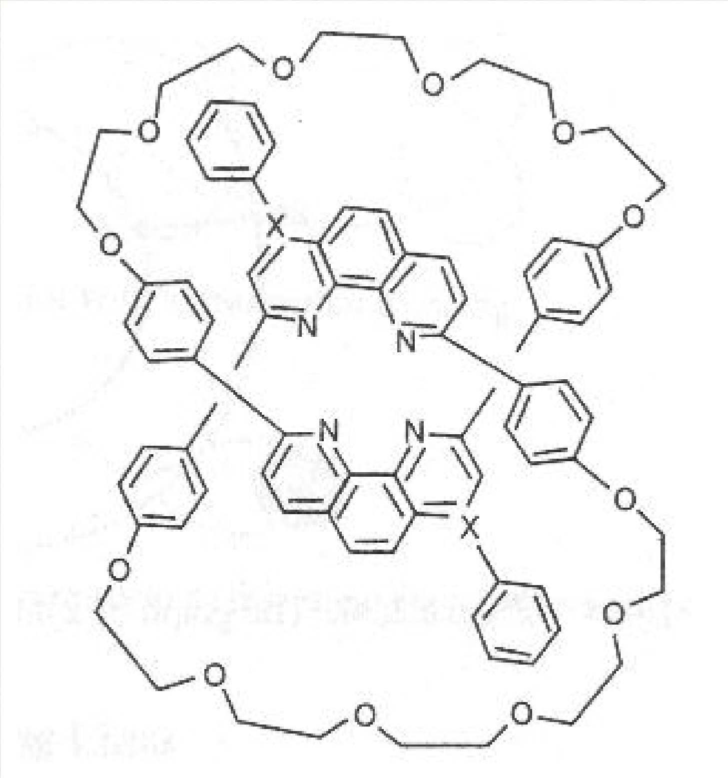


- Τα στοιχεία του συνόλου *T(G)* είναι:

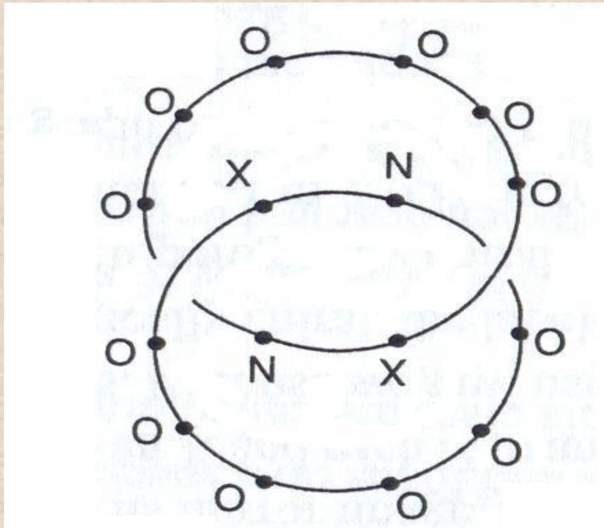


Ο τετριμμένος κόμβος και ο δεξιόστροφος κόμβος trefoil, ο οποίος είναι *μη αμφίχειρας*

Εφαρμογή 2: Ο μοριακός κρίκος Hopf (1988)



Ο κρίκος έχει έναν φυσικό προσανατολισμό και τα στοιχεία του *T(G)* είναι ο:



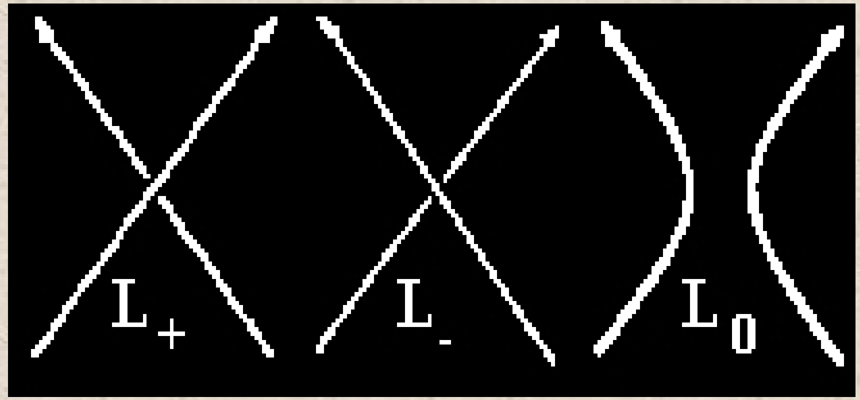
ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΕΣ ΑΝΑΛΛΟΙΩΤΕΣ ΚΟΜΒΩΝ ΚΑΙ ΚΡΙΚΩΝ

ΠΟΛΥΩΝΥΜΟ HOMFLYPT

(*P-πολυώνυμο*)

Πολυώνυμο Jones δύο μεταβλητών (1985)

1. P(unknot) = 1
2. Σχέση skein $l \cdot P(L_+) + l^{-1} \cdot P(L_-) + m \cdot P(L_0) = 0.$
3. Το πολυώνυμο δεν αλλάζει από ισοτοπία.



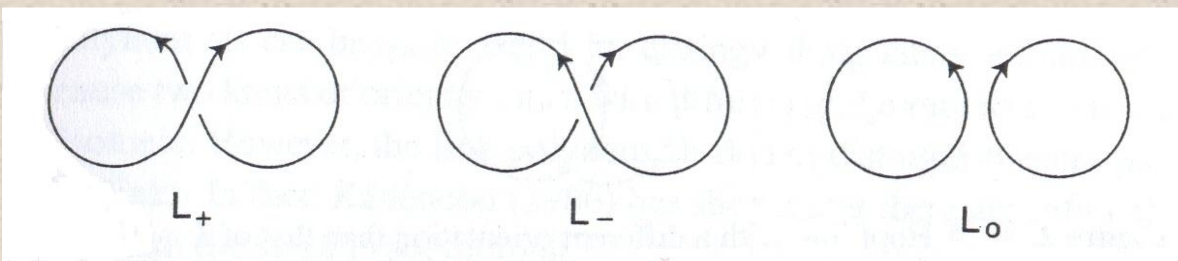
- Έστω *L* προσανατολισμένος κρίκος με *P*-πολυώνυμο *P(L)*. Έστω $\overline{P}(L)$ το πολυώνυμο που προκύπτει από το *P(L)* αν αντικαταστήσουμε το l με l^{-1}. Τότε: $P(L^*)=\overline{P}(L)$

- Αν $P(L)\neq\overline{P}(L)$ τότε ο *L* δεν είναι αμφίχειρας ως προσανατολισμένος *κρίκος*.

- Αν ο *L* είναι *κόμβος* και $P(L)\neq\overline{P}(L)$, τότε ο *L* δεν είναι αμφίχειρας, ανεξαρτήτως προσανατολισμού.

- Άρα, αν το *P*-πολυώνυμο ενός προσανατολισμένου κρίκου *L* δεν είναι συμμετρικό ως προς τα l και l^{-1}, τότε ο κρίκος *L* δεν είναι τοπολογικώς αμφίχειρας.

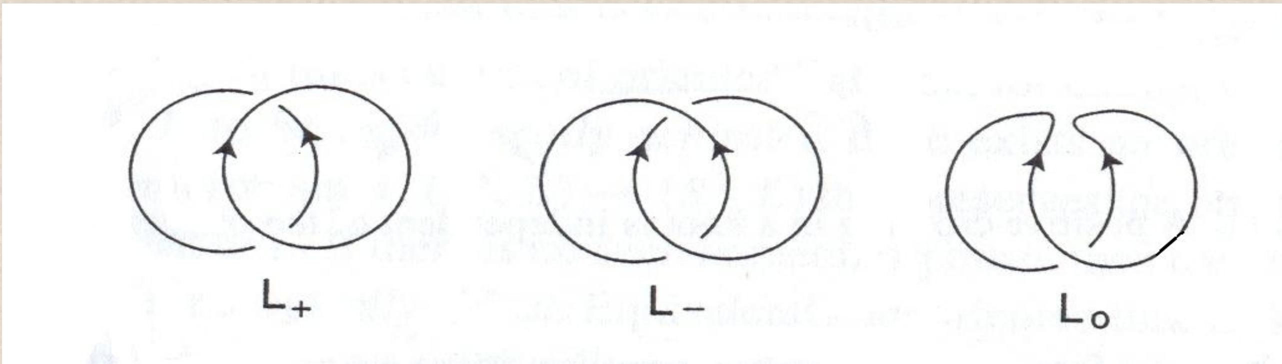
- Το αντίστροφο δεν ισχύει.



$$l \cdot P(L_+) + l^{-1} \cdot P(L_-) + m \cdot P(L_0) = 0 \Rightarrow$$

$$l \cdot 1 + l^{-1} \cdot 1 + m \cdot P(L_0) = 0 \Rightarrow$$

$$P(\text{τετριμμένου κρίκου}) = -m^{-1} \cdot \left(l + l^{-1}\right)$$



$$P\left(L_+\right) = -m^{-1}\cdot\left(l + l^{-1}\right) \qquad P\left(L_0\right) = 1$$

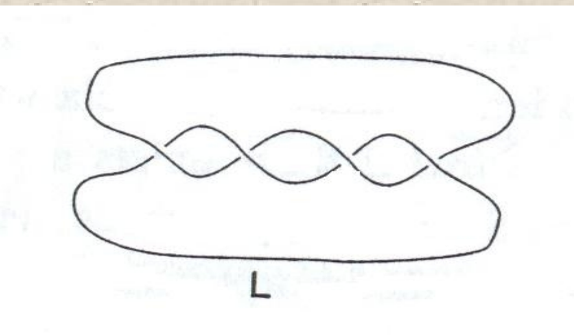
$$l\cdot P\left(L_+\right) + l^{-1}\cdot P\left(L_-\right) + m\cdot P\left(L_0\right) = 0 \Rightarrow$$

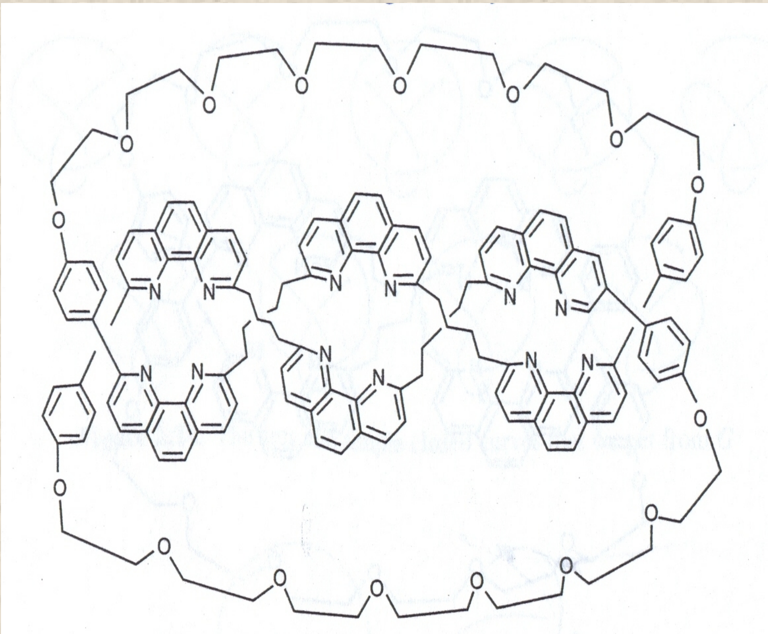
$$P\left(\mathrm{Hopf}\right) = l^3\cdot m^{-1} + l\cdot m^{-1} - l\cdot m$$

Hopf μη ισοτοπικός με Hopf*

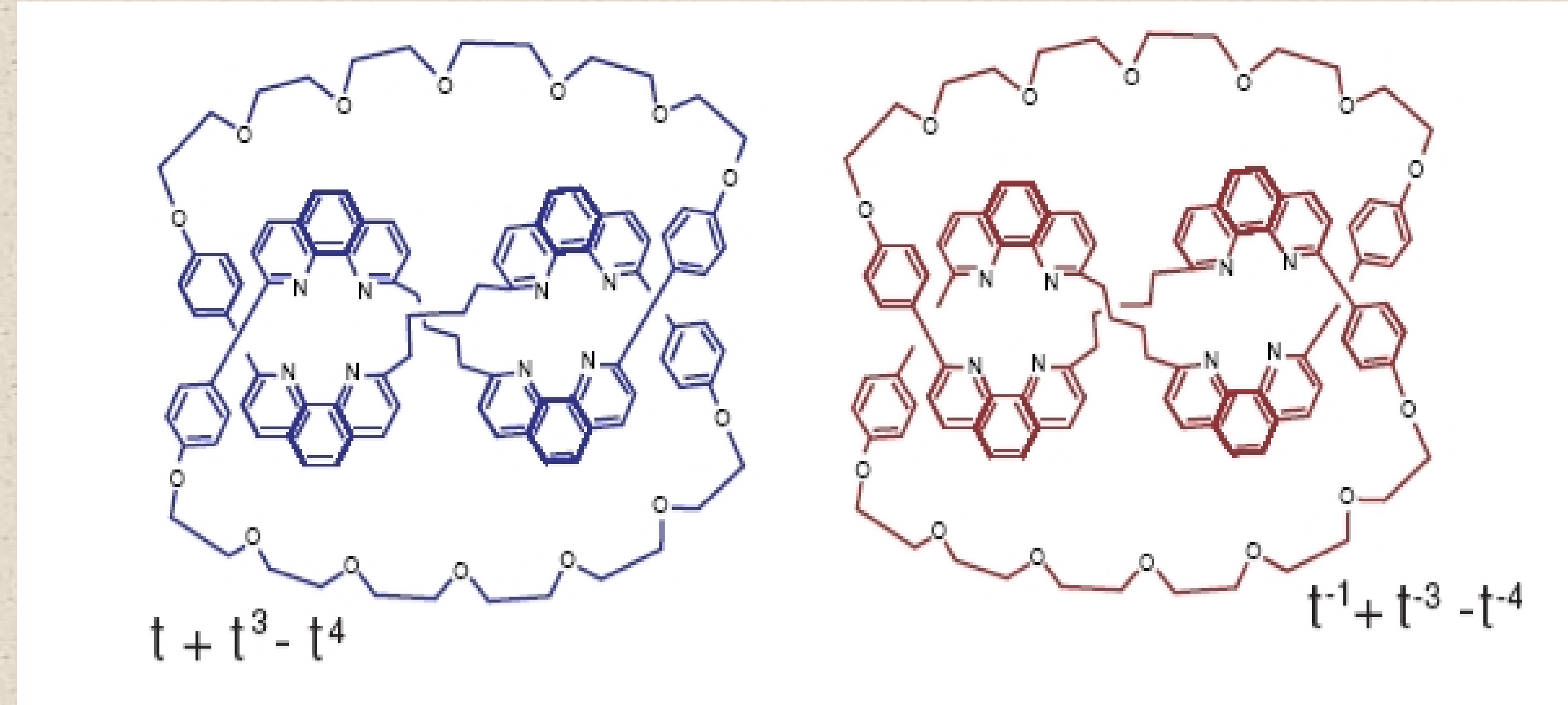
<u>Εφαρμογή 3</u>: Ο μοριακός κρίκος (4,2)-torus link

- Το σύνολο *T(G)* περιέχει μόνο τον τετριμμένο κρίκο και τον κρίκο (4,2)-torus link, ο οποίος είναι μη αμφίχειρας.





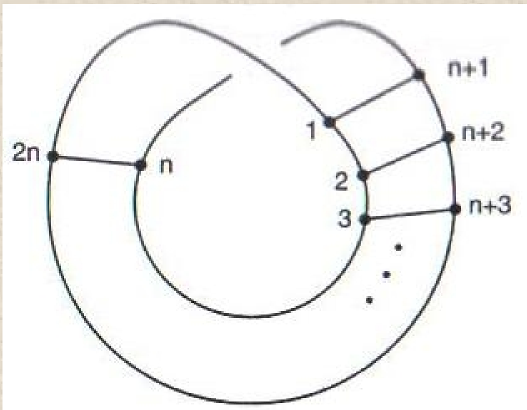
<u>Εφαρμογή 4</u>: Ο μοριακός κόμβος trefoil

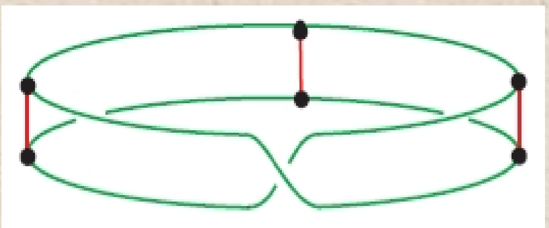


ΣΚΑΛΕΣ MOEBIUS

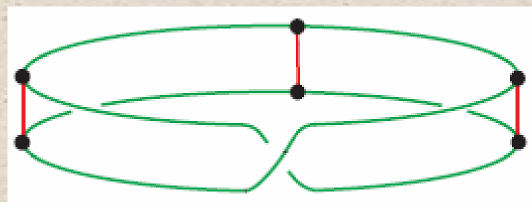
- Μια *σκάλα Moebius*, M_n, αποτελείται από μία απλή κλειστή καμπύλη *K* με 2*n* κορυφές και *n* επιπλέον πλευρές $a_1, a_2, ..., a_n$, τέτοιες ώστε:

- Αν οι κορυφές του *K* είναι αριθμημένες 1,2,…,2*n*, τότε οι κορυφές κάθε πλευράς a_i θα είναι οι *i,i*+*n*.



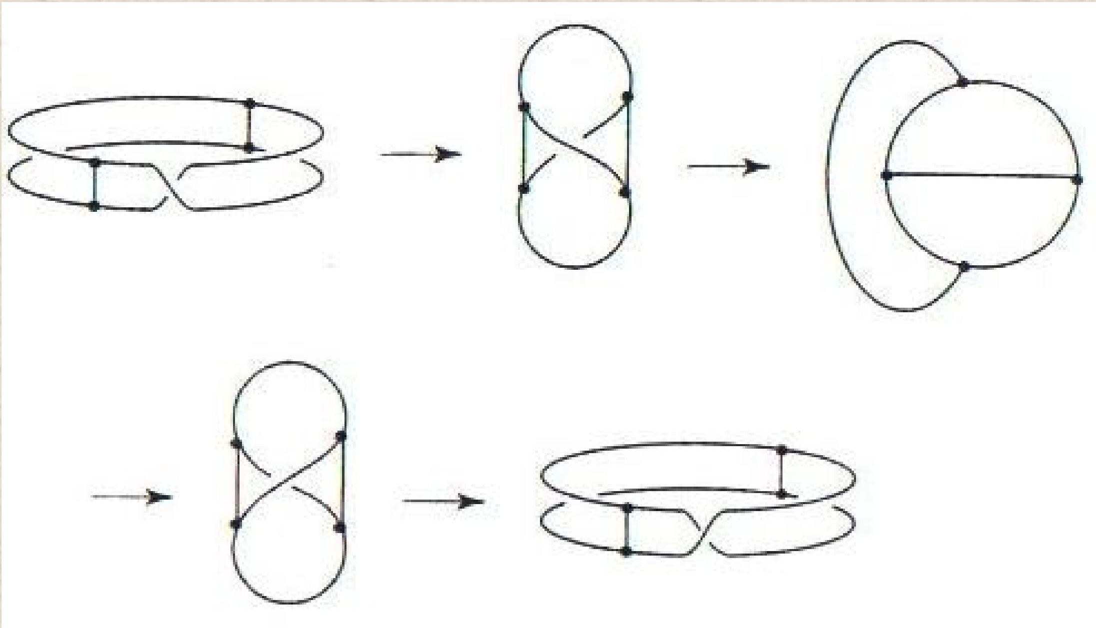


Σκάλα Moebius

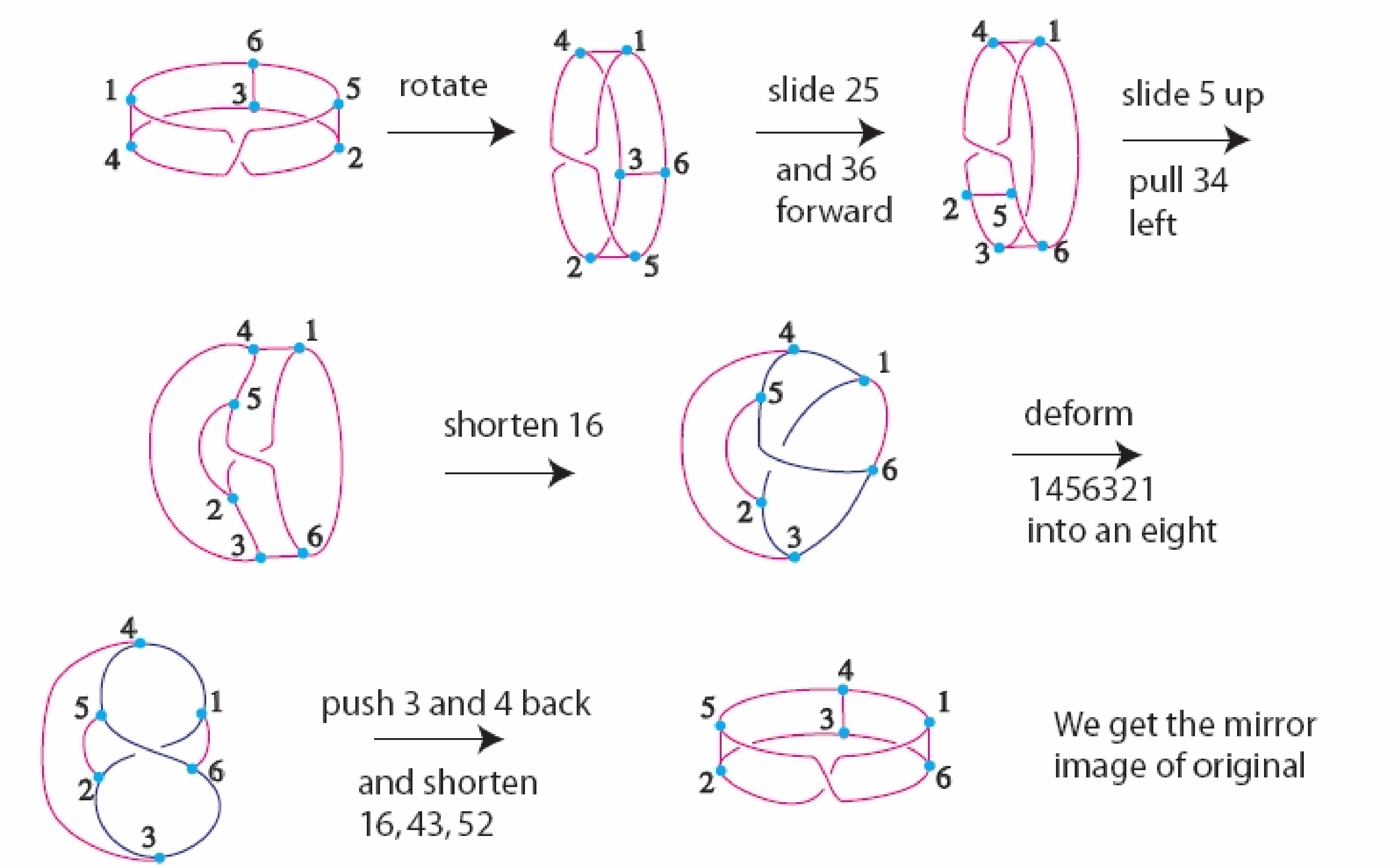


Κατοπτρική Εικόνα

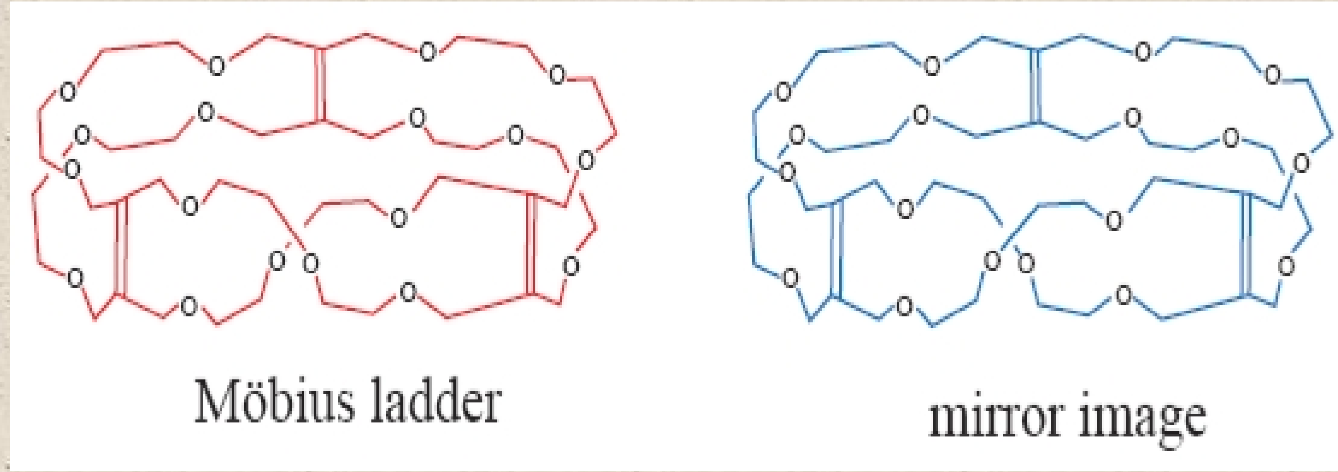
ΣΚΑΛΑ MOEBIUS ΜΕ ΔΥΟ ΣΥΝΔΕΣΕΙΣ



ΣΚΑΛΑ MOEBIUS ΜΕ ΤΡΕΙΣ ΣΥΝΔΕΣΕΙΣ



ΜΟΡΙΑΚΗ ΣΚΑΛΑ MOEBIUS (1982)



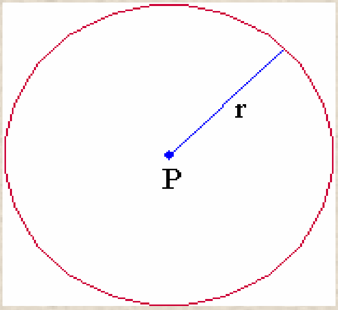
ΘΕΩΡΗΜΑ (*Simon; 1986*)

- Έστω M_n κανονική εμφύτευση σκάλας Moebius με $n \geq 3$ και βρόγχο *K*. Τότε, δεν υπάρχει ομοιομορφισμός $h:(S^3, M_n) \to (S^3, M_n)$ που να αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου τέτοιος ώστε *h(K)=K*.

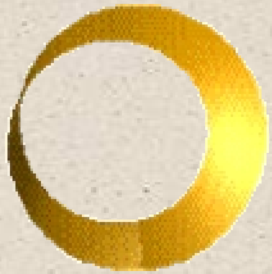
Μία μοριακή σκάλα Moebius
με περισσότερες από δύο συνδέσεις
είναι χημικώς μη αμφίχειρη

ΠΟΛΛΑΠΛΟΤΗΤΕΣ

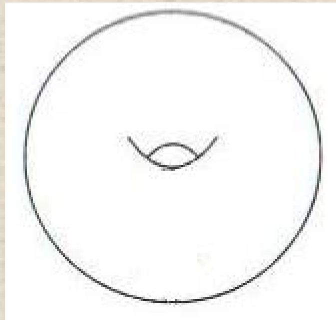
Έστω $M \subseteq \mathbb{R}^p$ για κάποιο $p \in \mathbb{N}$ και έστω $n \in \mathbb{N}$. Το *M* καλείται *n-πολλαπλότητα* αν κάθε σημείο του *M* περιέχεται σε ένα ανοιχτό υποσύνολο *U* του *M*, το οποίο είναι ομοιομορφικό είτε με τον $\mathbb{R}^n$, είτε με τον $\mathbb{R}^n_+$.



1-πολλαπλότητα



2-πολλαπλότητα



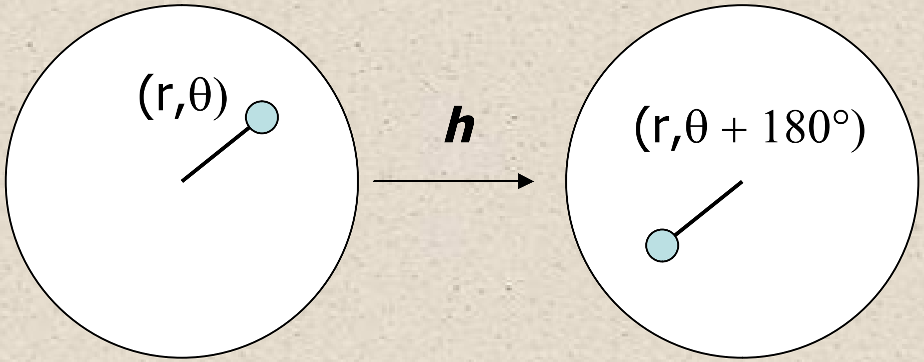
3-πολλαπλότητα

ΒΑΘΜΟΣ ΟΜΟΙΟΜΟΡΦΙΣΜΟΥ

- Έστω $M \subseteq \mathbb{R}^n$ και $h: M \to M$ ομοιομορφισμός. Για κάθε φυσικό αριθμό *r*, ορίζουμε $h^r = h \circ h \circ ... \circ h$, *r* φορές. Αν *r* είναι ο ελάχιστος φυσικός αριθμός τέτοιος ώστε ο h^r να είναι η ταυτοτική απεικόνιση, τότε ο ομοιομορφισμός *h* έχει *βαθμό r*.

ΕΝΕΛΙΞΗ ΚΑΛΥΨΗΣ

- Έστω *M* μία 3-πολλαπλότητα και έστω $h: M \to M$ ομοιομορφισμός που διατηρεί τον προσανατολισμό, βαθμού δύο.



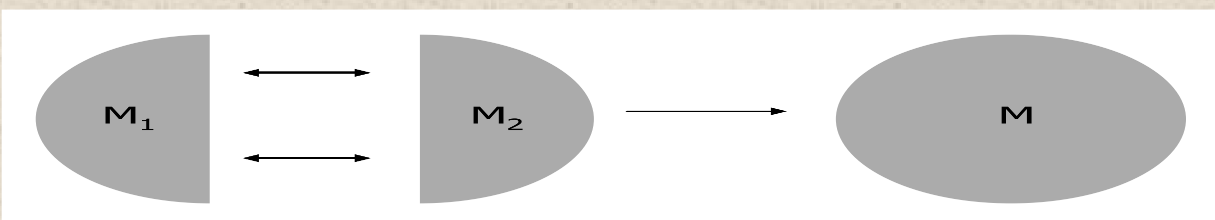
$$h(r,\theta) = (r,\theta + 180^\circ)$$

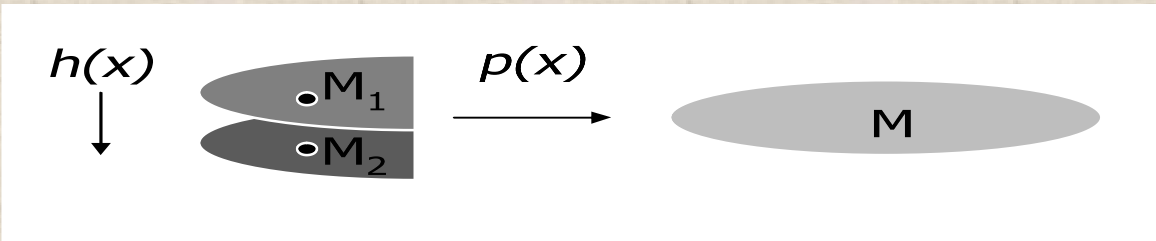
ΠΡΟΒΟΛΙΚΗ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ

- Έστω ακόμα *N* μία 3-πολλαπλότητα και $p : M \to N$ ανοικτή απεικόνιση, τέτοια ώστε

$$p(x) = p(y) \Leftrightarrow x \quad y \text{ ή } h(x) \quad y$$

Διακλαδιζόμενο Κάλυμμα με Δύο Φύλλα (σε 2 διαστάσεις)





- *M* ο μοναδιαίος κυκλικός δίσκος.
- $h(r,\theta)=(r,\theta+180^\circ),\ p(r,\theta)=(r,2\theta)$
- $\forall x,y\in M\ ,\ p(x)=p(y)\Leftrightarrow x \quad y$ ή $h(x) \quad y.$
- Κόβουμε τον *M* κατά μήκος μιας ακτίνας του.

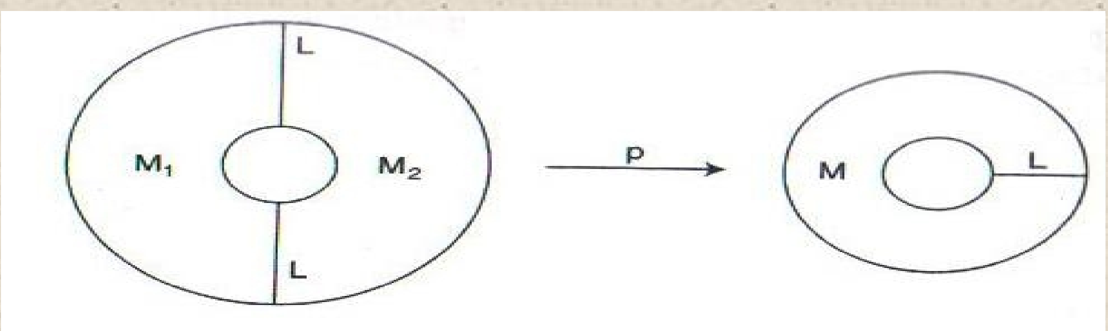
Διακλαδιζόμενα Καλύμματα με Δύο Φύλλα

- Έστω το σύνολο $A=\left\{x\in M \mid h\left(x\right)=x\right\}$.

- Αν το σύνολο *A* είναι το κενό, τότε το *M* είναι *κάλυμμα* του *N με δύο φύλλα*.

- Αν το σύνολο *A* είναι μη κενό και *B=p(A)* είναι μία 1-πολλαπλότητα, τότε το *M* είναι *διακλαδιζόμενο κάλυμμα* του *N με δύο φύλλα διακλαδιζόμενο πάνω στο B*.

- Έστω M_1 η επιφάνεια που προκύπτει αν κόψουμε τον κυκλικό δίσκο *M* κατά μήκος μιας γραμμής *L*. Μπορούμε να θεωρήσουμε την M_1 ως το μισό κυκλικό δακτύλιο *M* και έστω M_2 ένα αντίγραφό της. Η *M* προκύπτει με την ένωση των M_1 και M_2 κατά μήκος των συνόρων τους στο *L*.



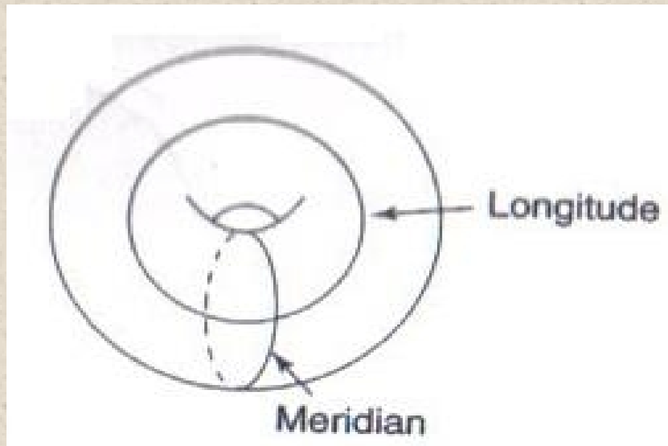
- Ο *M* είναι το κάλυμμα με δύο φύλλα του εαυτού του.

Διακλαδιζόμενο Κάλυμμα με Δύο Φύλλα της

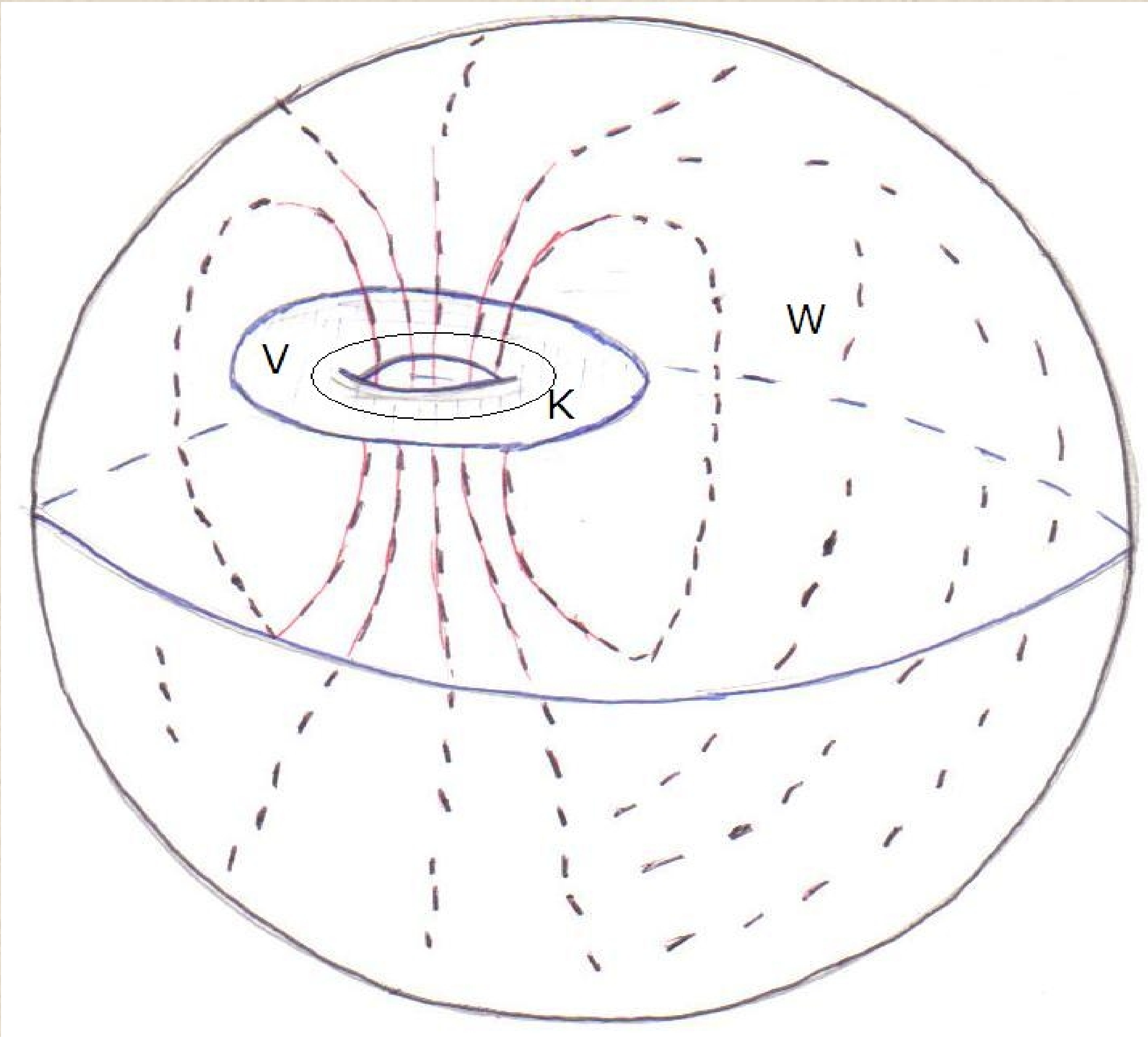
$$N = S^3$$

διακλαδιζόμενο πάνω στον Τετριμμένο Κόμβο

- Παράλληλος και μεσημβρινός στερεού τόρου.



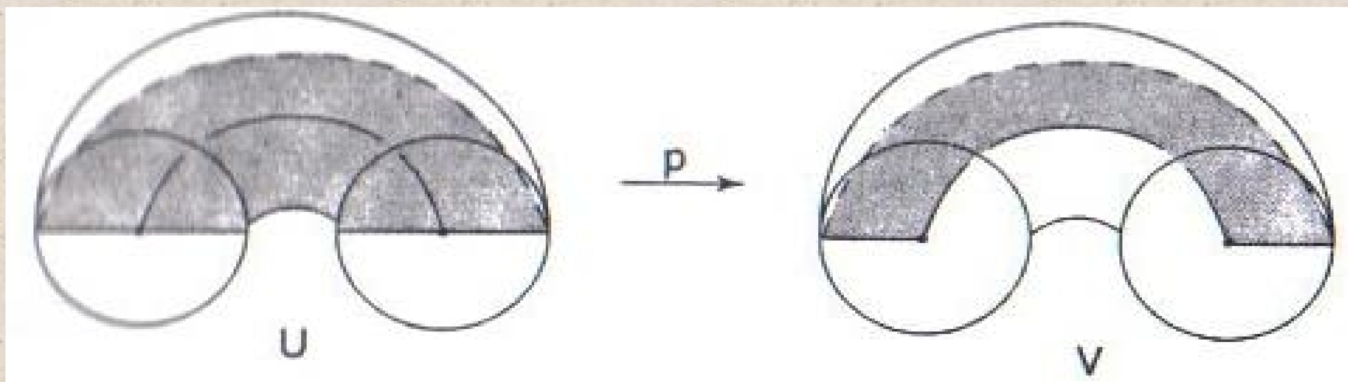
Η $N = S^3$ προκύπτει από την ένωση δύο τετριμμένων στερεών τόρων *V*, *W*, έτσι ώστε ο παράλληλος του ενός να ενώνεται με τον μεσημβρινό του άλλου.



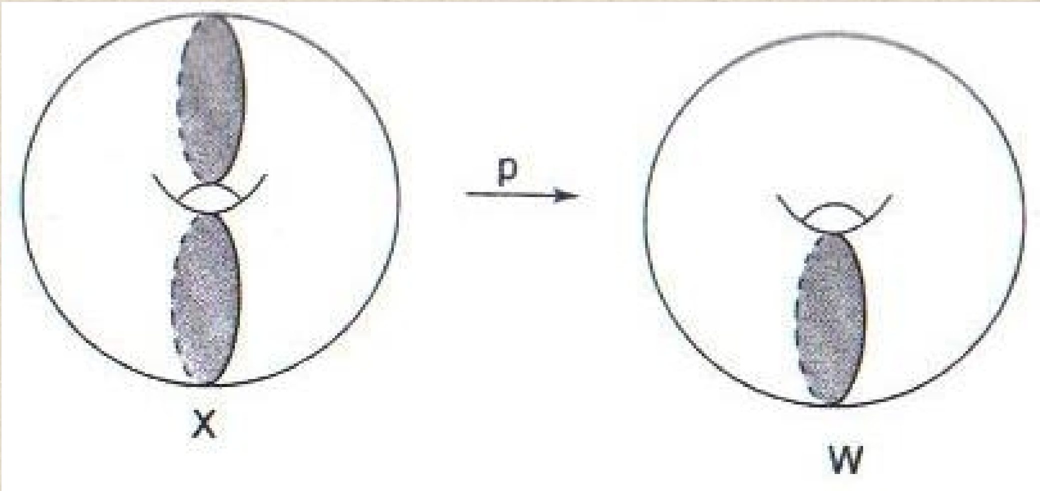
- Έστω *V* ένας στερεός τόρος με κεντρική καμπύλη *K* και *W* ο συμπληρωματικός του.

- Η κατασκευή προκύπτει από την ένωση του καλύμματος με δύο φύλλα του *W* και του διακλαδιζόμενου καλύμματος του *V* διακλαδιζόμενο πάνω στο *K*.

Διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα του *V* διακλαδιζόμενο πάνω στο *K*

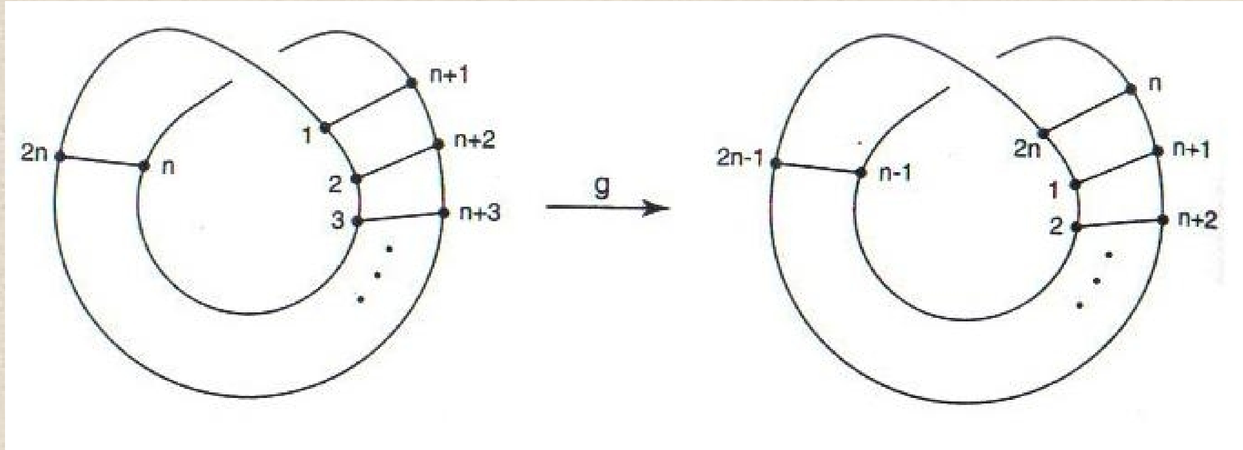


Κάλυμμα με δύο φύλλα του *W*

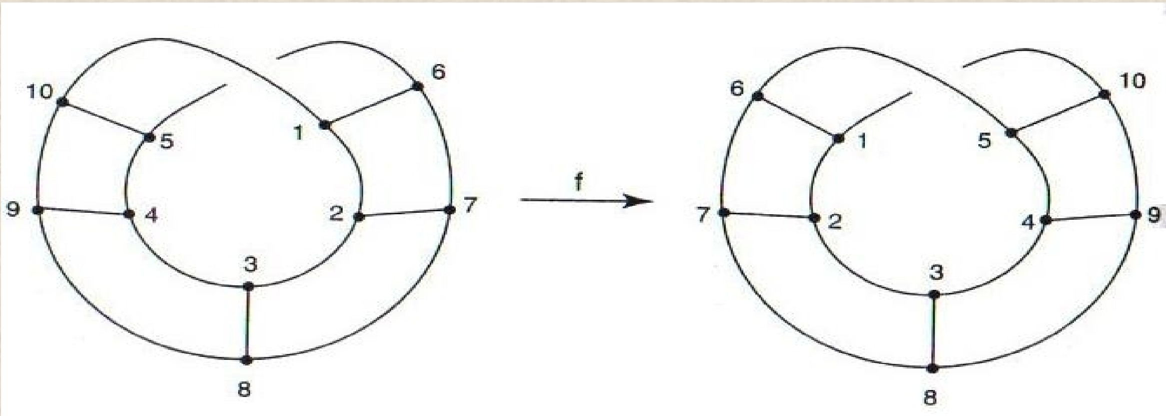


<u>ΑΠΟΔΕΙΞΗ</u> Θ.SIMON

- Για την M_n υπάρχει $g:\left(S^3, M_n\right) \to \left(S^3, M_n\right)$
 που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου τέτοιος ώστε:



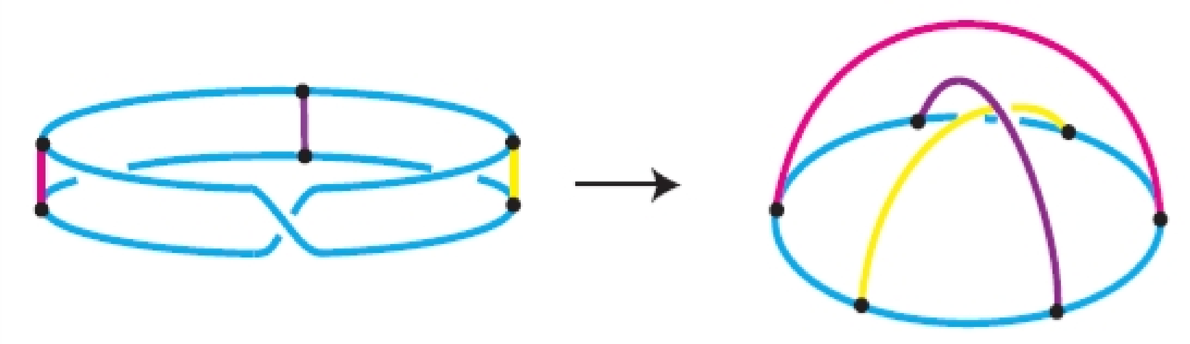
- Για την M_n υπάρχει $f:\left(S^3,M_n\right)\to\left(S^3,M_n\right)$
που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου
και αντιστρέφει τον προσανατολισμό του βρόγχου *K*
τέτοιος ώστε:

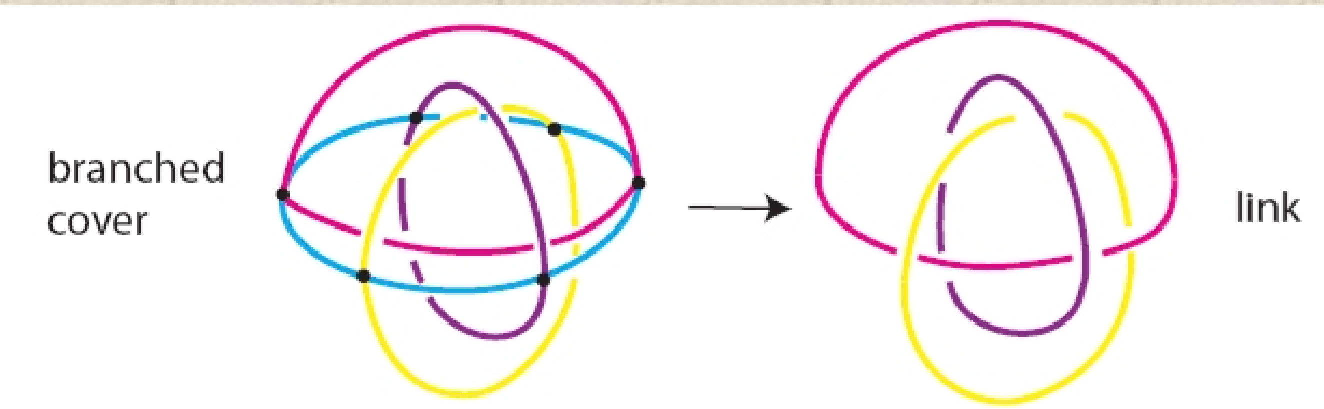


- Υποθέτουμε ότι υπάρχει $h:(S^3,M_n)\to(S^3,M_n)$ που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου και $h(K)=K$, διατηρώντας σταθερές τις κορυφές της σκάλας.

- Αφαιρούμε όλες εκτός από τρεις συνδέσεις. Θα δείξουμε ότι ισχύει για *n*=3.

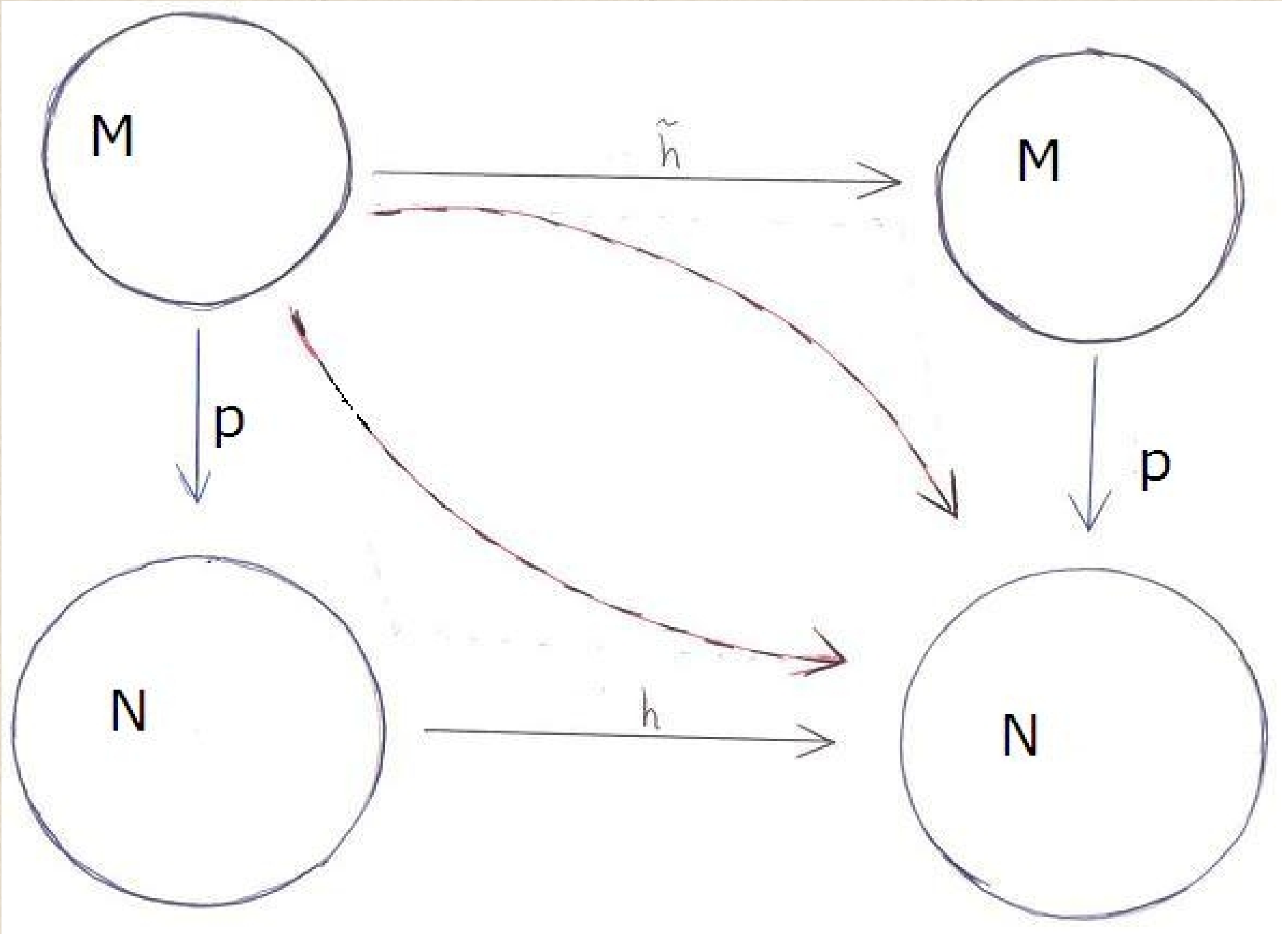
- Θεωρούμε το διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα της S^3, το οποίο διακλαδίζεται πάνω στον *K*.




branched
cover
link

- Μπορεί να οριστεί ομοιομορφισμός $\overline{h}$ του διακλαδιζόμενου καλύμματος με δύο φύλλα τέτοιος ώστε:

$$p \circ \overline{h} = h \circ p$$


M
$\tilde{h}$
M
p
p
N
h
N

<u>ΑΡΙΘΜΟΣ ΣΥΝΕΛΙΞΗΣ *Lk*</u>

- Ορίζουμε τον *αριθμό συνέλιξης* δύο συνιστωσών *A* και *B* ενός κρίκου ως το ημιάθροισμα των *+1* και *-1* για κάθε θετική ή αρνητική αντίστοιχα διασταύρωση μεταξύ των *A* και *B*.

- Θετική Διασταύρωση

Αρνητική Διασταύρωση

- Ισχύει ότι $Lk\left(K_1,K_2\right)=Lk\left(K_2,K_1\right)$, $Lk\in\mathbb{Z}$.

- Έστω *h* ομοιομορφισμός που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου. Τότε

$$Lk\left[h\left(K_1\right),h\left(K_2\right)\right]=Lk\left(K_1,K_2\right)$$

- Έστω *h* ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Τότε

$$Lk\left[h\left(K_1\right),h\left(K_2\right)\right]=-Lk\left(K_1,K_2\right)$$

<u>ΘΕΩΡΗΜΑ</u> (*Flapan; 1989*)

- Έστω σκάλα Moebius M_n τυχαία εμφυτευμένη στην S^3, όπου $n \geq 3$ *περιττός* φυσικός αριθμός. Τότε δεν υπάρχει ομοιομορφισμός $h:\left(S^3, M_n\right) \to \left(S^3, M_n\right)$ που να αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, τέτοιος ώστε $h\left(K\right) = K$.

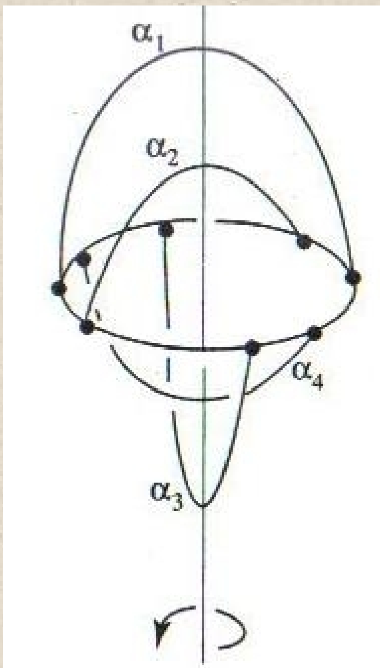
Τα μόρια με μοριακό γράφημα
που περιλαμβάνουν μία οποιαδήποτε
εμφύτευση μιας σκάλας Moebius
είναι χημικώς μη αμφίχειρα,
και συνεπώς μαζί με την
κατοπτρική τους εικόνα
αποτελούν τοπολογικά ισομερή.

ΕΓΓΕΝΩΣ ΜΗ ΑΜΦΙΧΕΙΡΙΑ

- Ένα αριθμημένο ή μη γράφημα καλείται *εγγενώς μη αμφίχειρο* αν κάθε εμφύτευσή του στον $\mathbb{R}^3$ είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρη.

ΣΚΑΛΕΣ MOEBIUS ΜΕ ΑΡΤΙΟ ΑΡΙΘΜΟ ΣΥΝΔΕΣΕΩΝ

- Σε αντίθεση με το αποτέλεσμα του Θεωρήματος της Flapan, αν μία σκάλα Moebius έχει άρτιο αριθμό συνδέσεων, τότε υπάρχει εμφύτευσή της που είναι αμφίχειρη.



ΆΛΛΑ ΜΟΡΙΑΚΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ ΠΟΥ ΣΧΕΤΙΖΟΝΤΑΙ ΜΕ ΣΚΑΛΕΣ MOEBIUS

Variant-3 Scorpion Neurotoxin (1994)

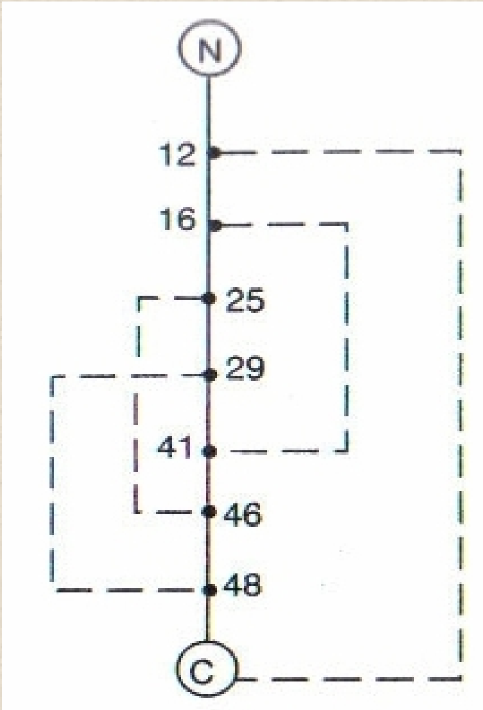
- Βρόγχος *K*: 12-C-48-46-41-29-25-16-12
- Συνδέσεις:

  1: 16-41

  2: 26-46

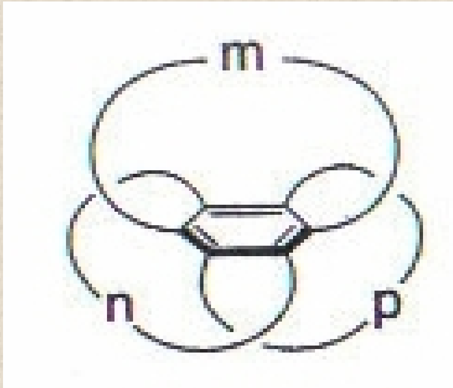
  3: 29-48

- Η πρωτεΐνη είναι η M_3 με μία ακόμη κορυφή *N*.

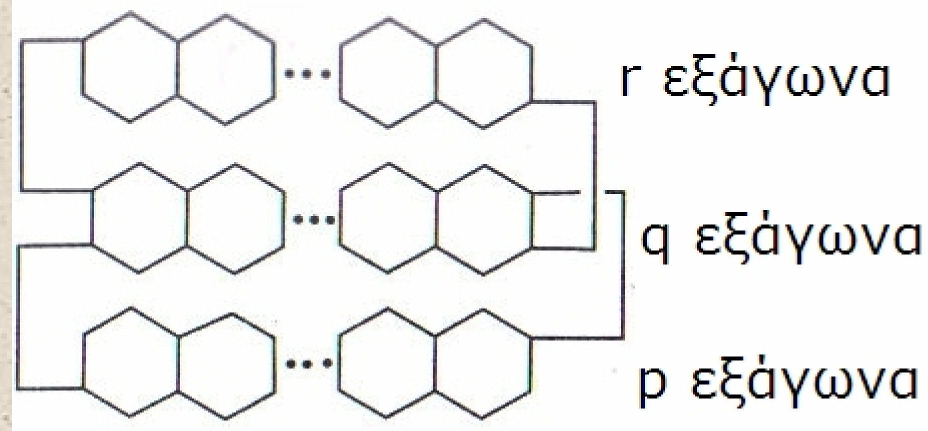


$[m][n][p]$ - Paracyclophane (1984)

- Πλευρές: Δακτύλιος Βενζολίου
- Συνδέσεις: Οι *m*, *n*, *p* αλυσίδες.
- Εμφύτευση της M_3 και άρα, εγγενώς μη αμφίχειρο γράφημα.



Naphthalenophane τριών στρωμάτων (1983)



ΘΕΩΡΗΜΑ (*Flapan and Forcum; 1998*)

Αν p, q, r άρτιοι αριθμοί, τότε το γράφημα $G(p,q,r)$ είναι εγγενώς μη αμφίχειρο.

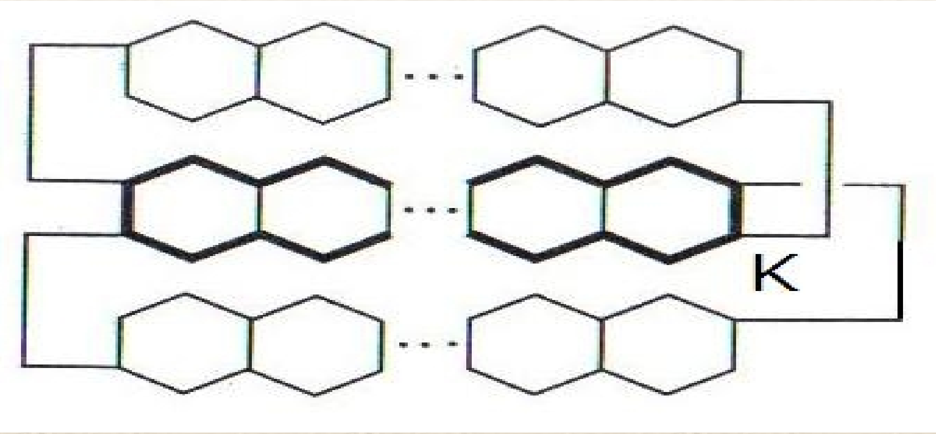
ΑΠΟΔΕΙΞΗ

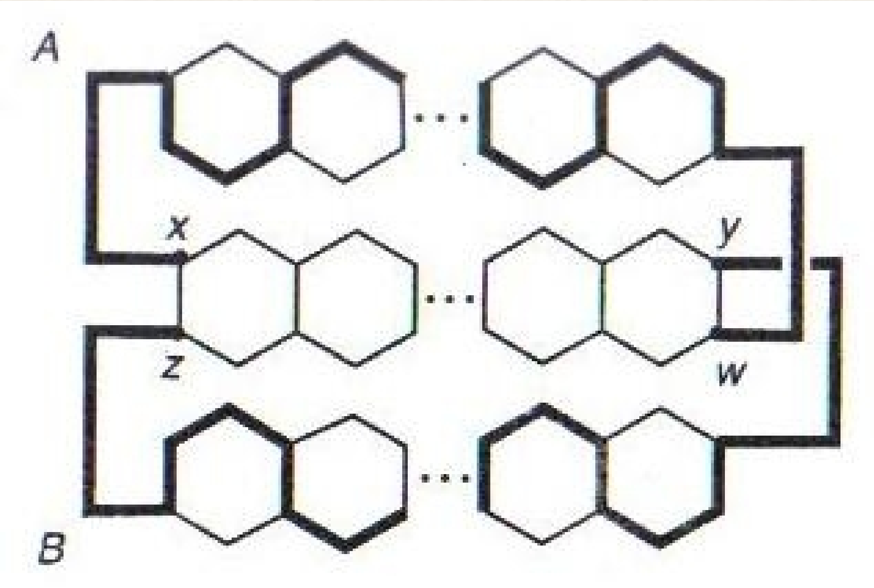
- Ανέλυσαν μάλλον το γράφημα ως αφηρημένο και όχι μία συγκεκριμένη εμφύτευσή του.

- Έστω ότι υπάρχει ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου τέτοιος ώστε:

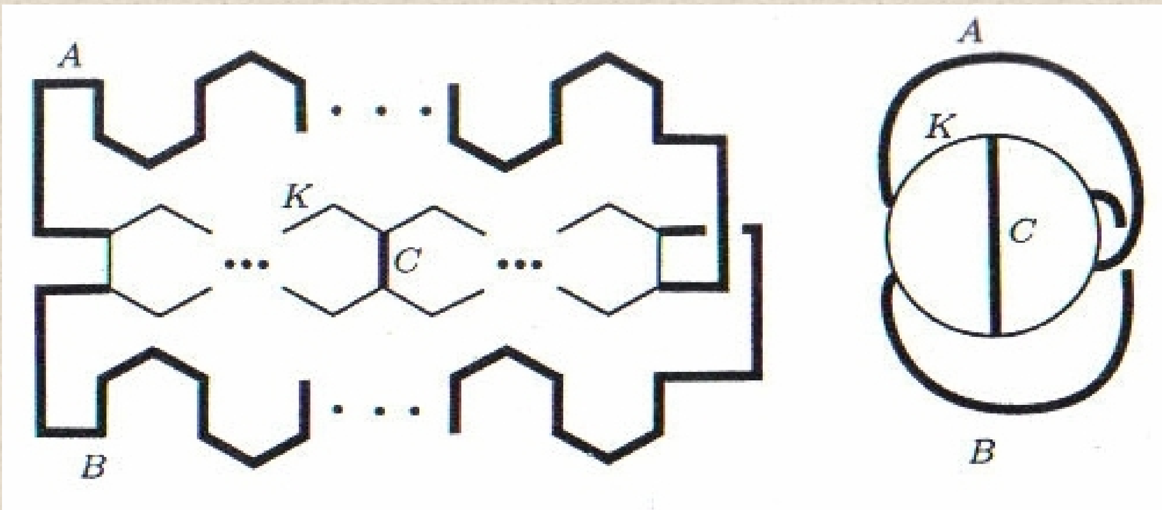
$$h\left[G\left(p,q,r\right)\right]=G\left(p,q,r\right)$$

- Θα ισχύει ότι *h(K)=K*




A
x
y
z
w
B

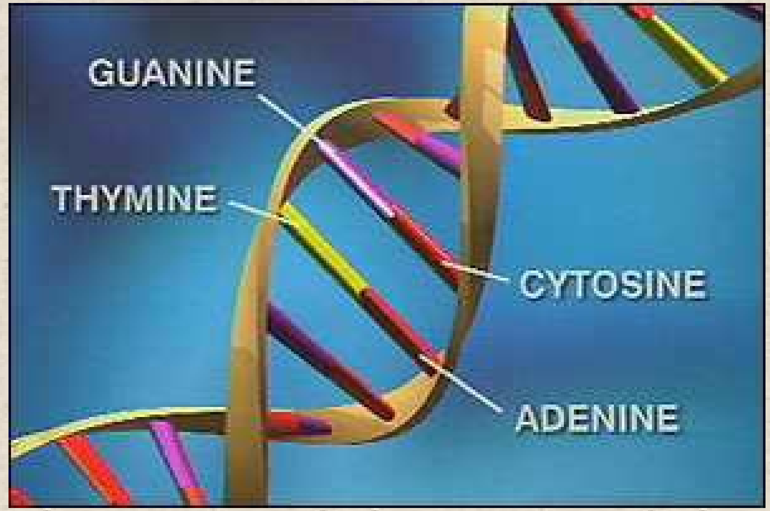
- Το γράφημα περιέχει μία σκάλα Moebius με τρείς συνδέσεις και άρα είναι εγγενώς μη αμφίχειρο.



ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

ΣΤΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ

Η ΤΟΠΟΛΟΓΙΑ ΤΟΥ DNA



Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ DNA

- Το DNA αποτελείται από δύο δεξιόστροφες πολυνουκλεοτιδικές έλικες, που περιελίσσονται γύρω από τον ίδιο άξονα ώστε να σχηματίζουν μια διπλή έλικα.

- Κάθε έλικα αποτελείται από μόρια ζάχαρης και φωσφορικού άλατος και κάθε μόριο ζάχαρης συνδέεται με μία από τις τέσσερις βάσεις, αδενίνη, θυμίνη, γουανίνη, κυτοσίνη.

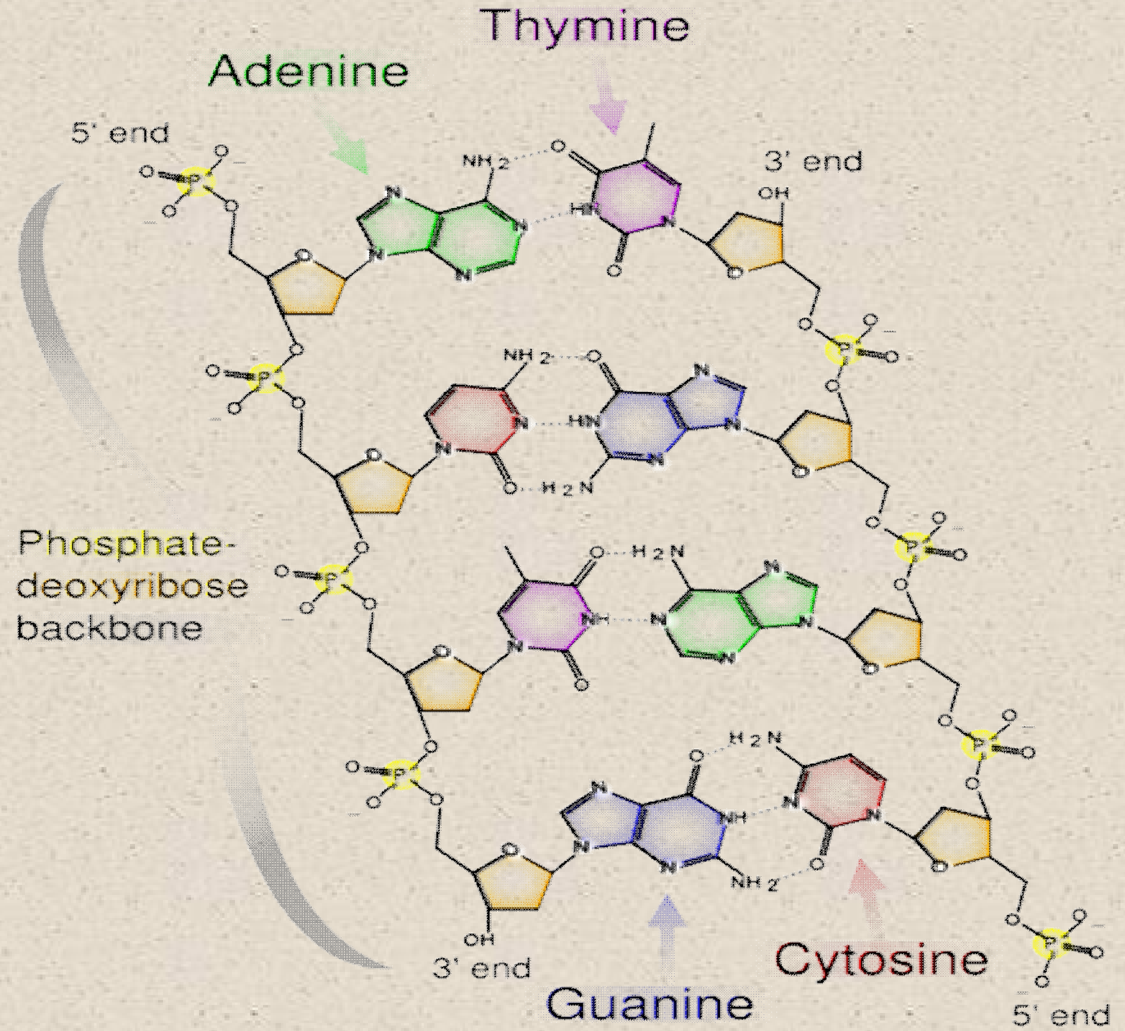
Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ DNA

- Οι βάσεις τοποθετούνται στο εσωτερικό της διπλής έλικας και τα επίπεδα των βάσεων είναι παράλληλα μεταξύ τους και κάθετα προς τον επιμήκη άξονα της διπλής έλικας.

- Οι βάσεις της μιας έλικας σχηματίζουν ζεύγη με τις βάσεις της άλλης έλικας με δεσμούς υδρογόνου, οι οποίοι συμβάλλουν στη διατήρηση της διπλής έλικας.

- Το ζευγάρωμα γίνεται μεταξύ βάσεων, οι οποίες βρίσκονται στο ίδιο επίπεδο με τέτοιο τρόπο, ώστε η αδενίνη να ζευγαρώνει πάντοτε με τη θυμίνη και η γουανίνη με τη κυτοσίνη.

Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ DNA

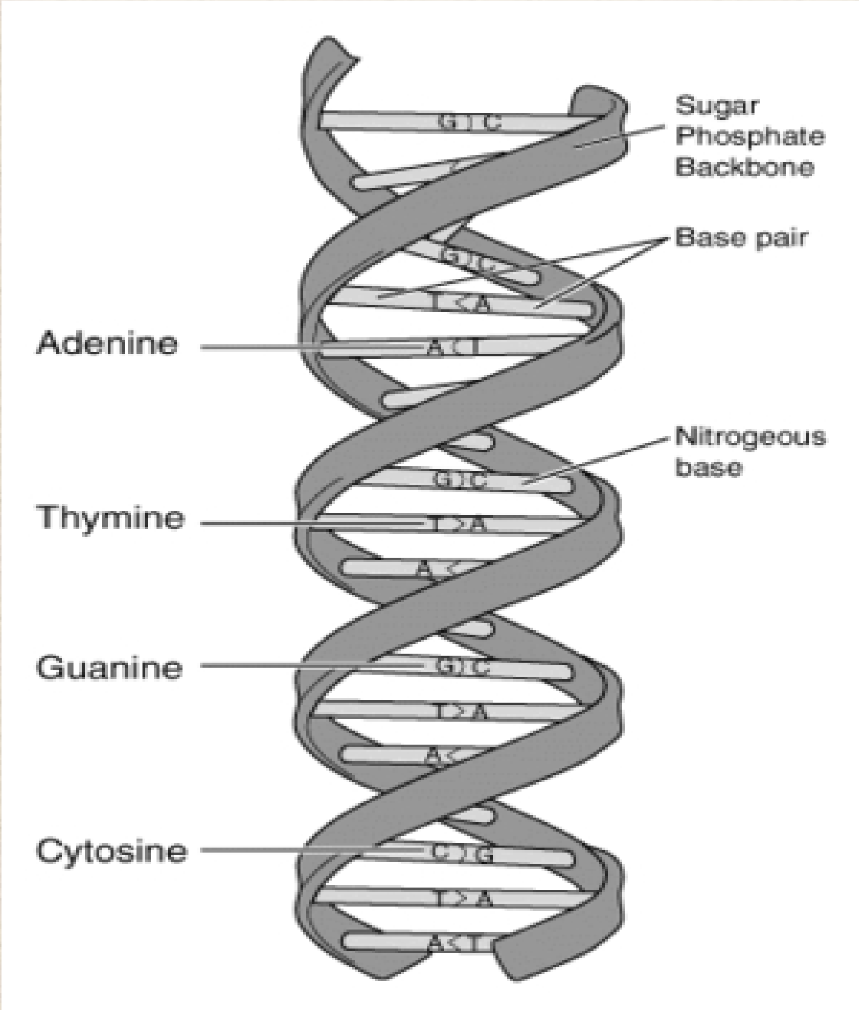


- Οι βάσεις τοποθετούνται η μια επάνω από την άλλη και η απόσταση των επιπέδων τους είναι 3,4 Å.

- Σε μια πλήρη περιστροφή της έλικας αντιστοιχούν περίπου 10.5 επίπεδα βάσεων και κάθε ζεύγος βάσεων στρέφεται περίπου κατά 34° σχετικά με το γειτονικό του.

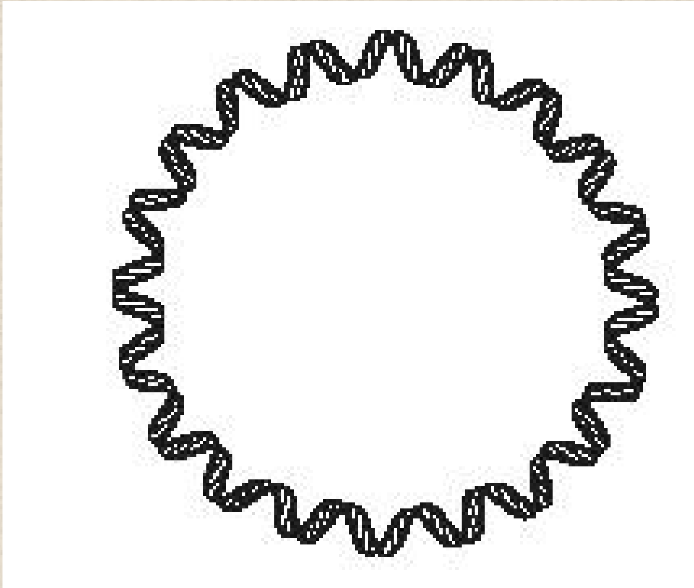
- Οι δύο πολυνουκλεοτιδικές έλικες είναι αντιπαράλληλες.

Η ΔΙΠΛΗ ΕΛΙΚΑ

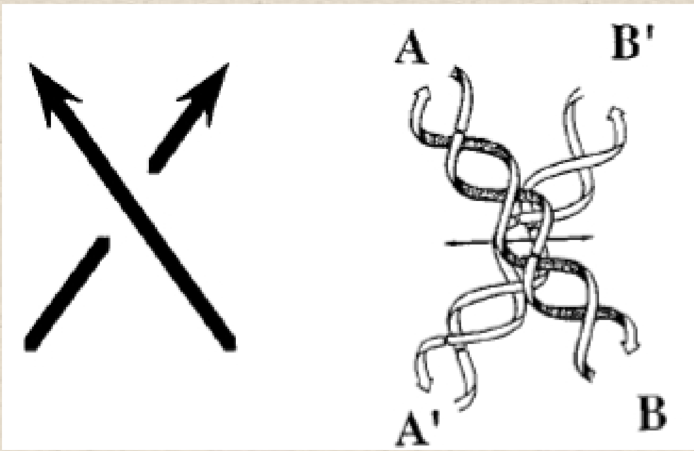


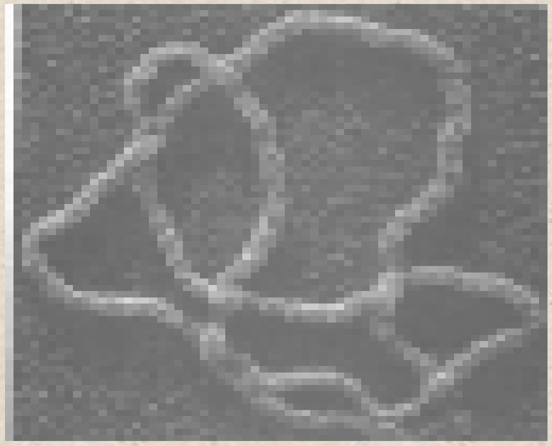
ΚΥΚΛΙΚΟ ΜΟΡΙΟ DNA

- Προκύπτει με ένωση των δύο πολυνουκλεοτιδικών ελίκων με φωσφοδιεστερικούς δεσμούς.



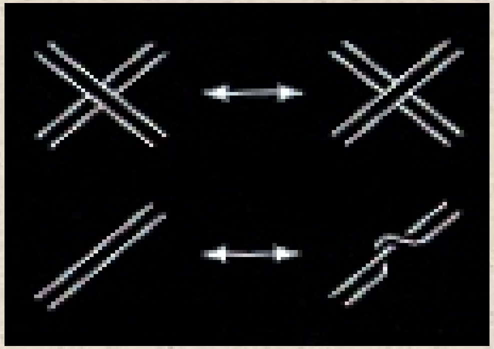
- Ένα (κλειστό) μόριο DNA μπορεί να έχει τοπικά τη μορφή κόμβου και δύο ή περισσότερα μόρια μπορούν να δημιουργούν κρίκους.

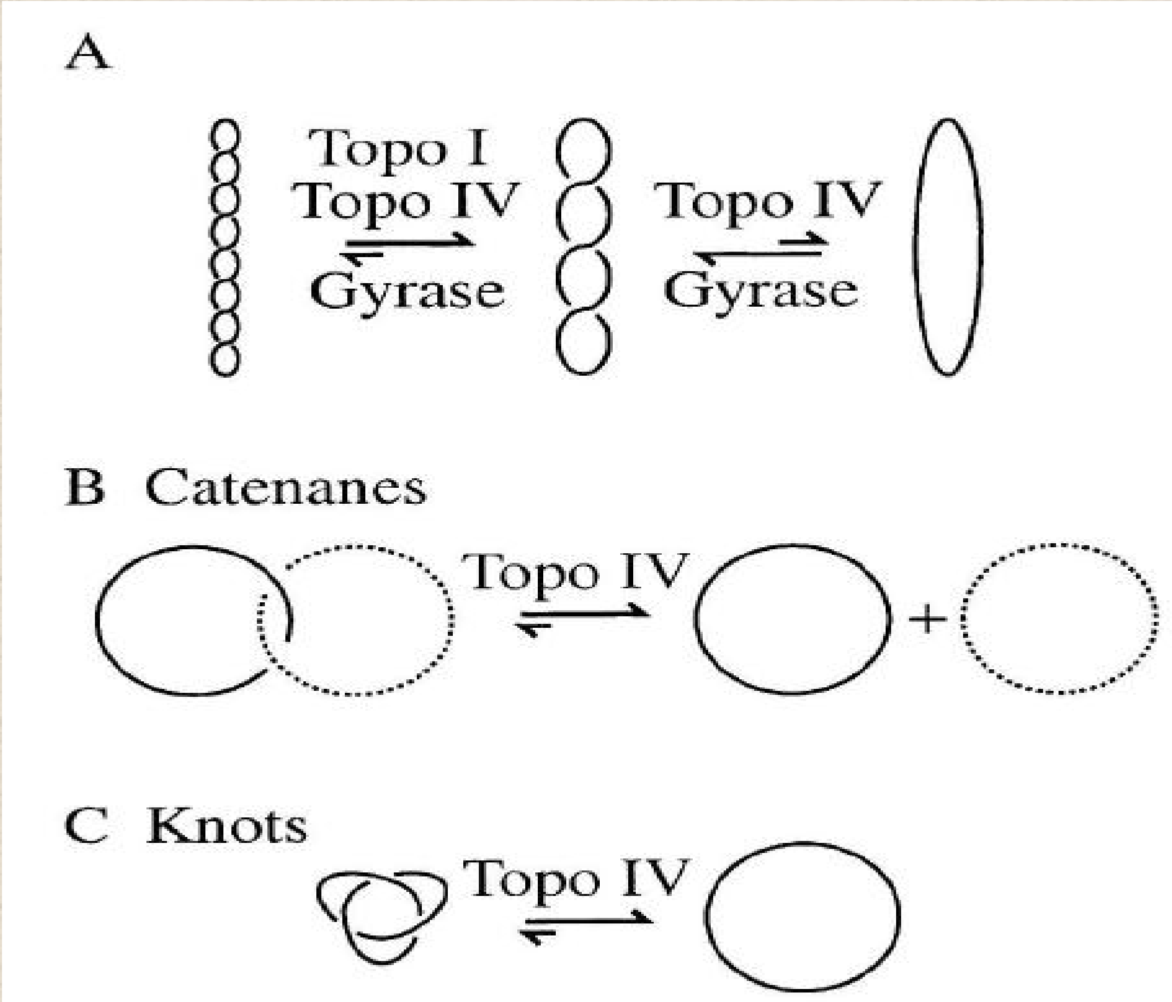


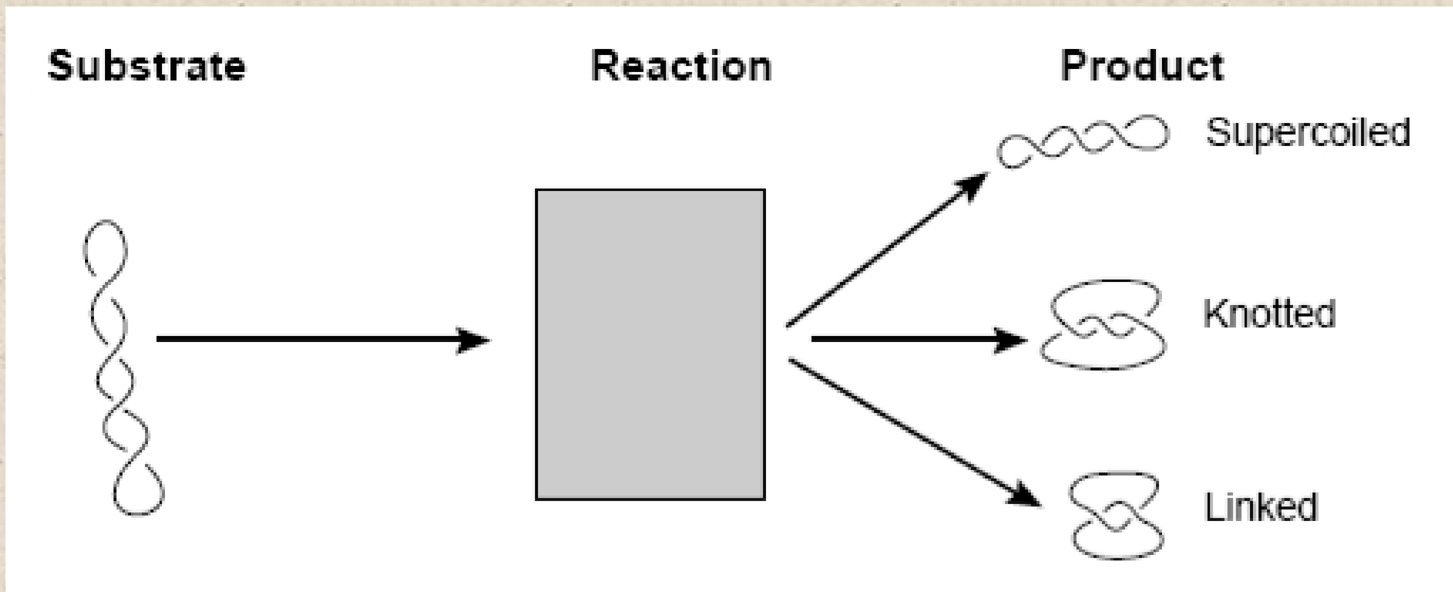


- Η δημιουργία κόμβων μπορεί να προκληθεί από τη δράση κάποιων ενζύμων στο DNA, κατά τη διάρκεια της αναδιάταξης.

- Η δράση των ενζύμων Topo I και Topo II στο DNA:




A
Topo I
Topo IV
Gyrase
Topo IV
Gyrase
B Catenanes
Topo IV
+
C Knots
Topo IV


Substrate
Reaction
Product
Supercoiled
Knotted
Linked

- Μία κατηγορία κόμβων που συναντάται συχνά σε πειράματα αναδιάταξης του DNA είναι οι *ρητοί κόμβοι*.

- Οι ρητοί κόμβοι είναι όλοι εναλλασσόμενοι και είναι από τις ελάχιστες κατηγορίες κόμβων που έχουν ταξινομηθεί πλήρως.

- Ένας ρητός κόμβος μπορεί να παρασταθεί από ένα ρητό αριθμό p/q, όπου $(p,q)=1$.

ΘΕΩΡΗΜΑ *(Schubert; 1956)*

- Δύο ρητοί κόμβοι *K*, *L*, που αντιστοιχούν σε δύο ρητούς αριθμούς p/q και p’/q’ είναι ισοτοπικοί αν και μόνο αν:

$$p = p'$$

$$q \equiv q' \pmod{p}$$

$$\acute{\eta}$$

$$qq' \equiv 1 \pmod{p}$$

ΘΕΩΡΗΜΑ *(Siebenmann)*

- Ένας ρητός κόμβος που αναπαρίσταται από έναν ρητό p/q είναι αμφίχειρας αν και μόνο αν:

$$q^2 \equiv (-1)(\mathrm{mod}\, p)$$

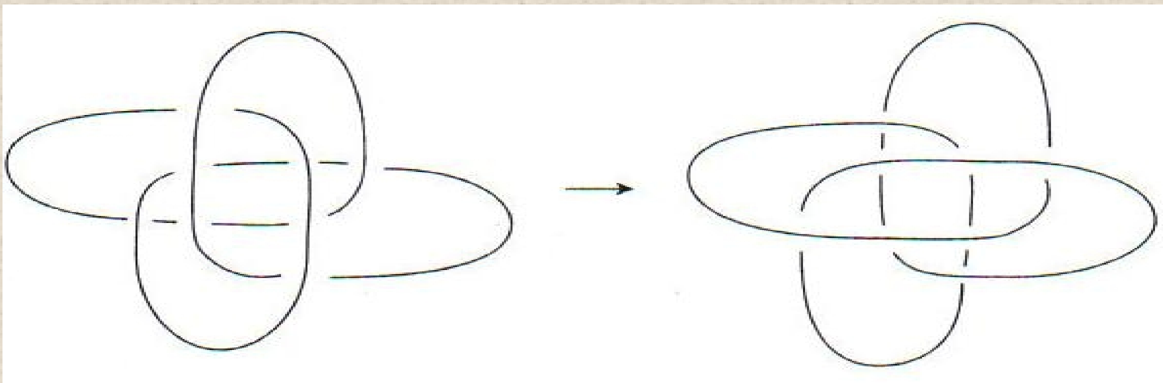
- Το θεώρημα χρησιμοποιήθηκε από τους J.H. White και N.R. Cozzarelli (1984) για να παραθέσουν όλα τα πιθανά στερεοϊσομερή ενός υπερελικωμένου μορίου DNA και να τα ταξινομήσουν.

ΑΛΛΑ ΕΙΔΗ ΑΜΦΙΧΕΙΡΙΑΣ

ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΑ ΕΛΑΣΤΙΚΑ ΓΑΝΤΙΑ

<u>ΣΥΜΜΕΤΡΙΚΗ ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ</u>

- Καλούμε *συμμετρική αναπαράσταση* ενός γραφήματος μια εμφύτευση του γραφήματος που είναι γεωμετρικά αμφίχειρη.



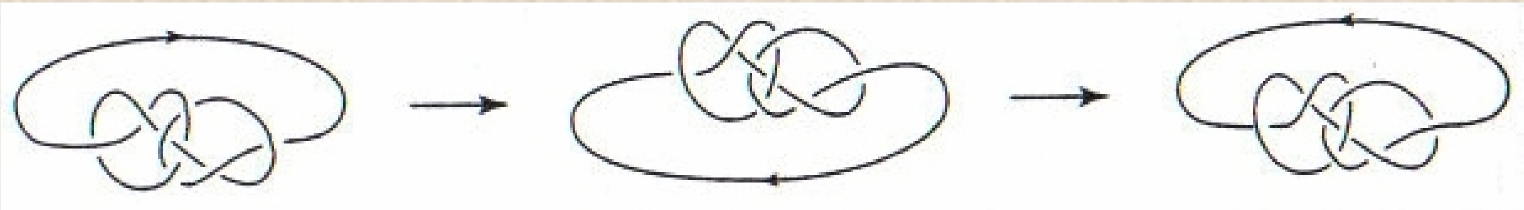
Άκαμπτη Αμφιχειρία

- Ένα εμφυτευμένο γράφημα καλείται *άκαμπτα αμφίχειρο* όταν, θεωρούμενο εύκαμπτο, μπορεί να ισοτοπηθεί σε μία θέση από την οποία μπορεί να περιστραφεί στην κατοπτρική του εικόνα.

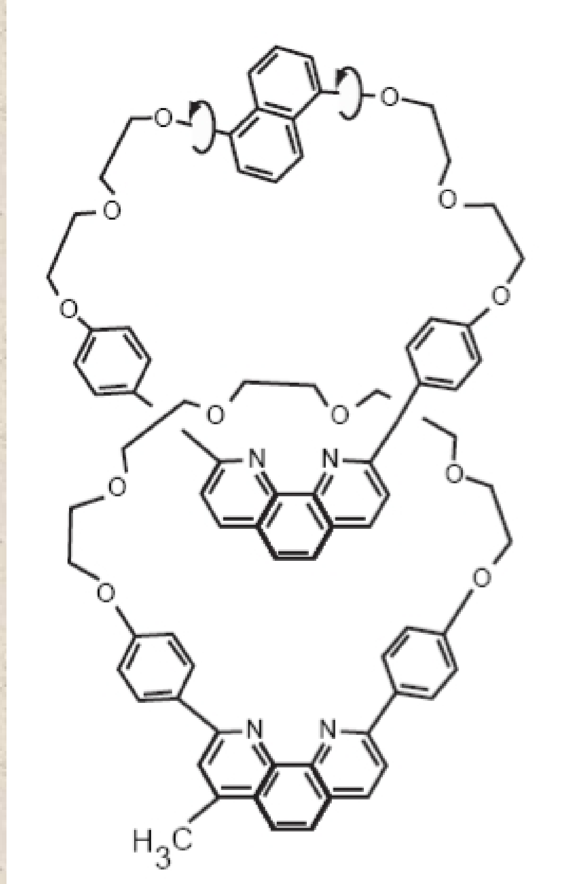
- Επομένως, ένα άκαμπτα αμφίχειρο γράφημα έχει συμμετρική αναπαράσταση.

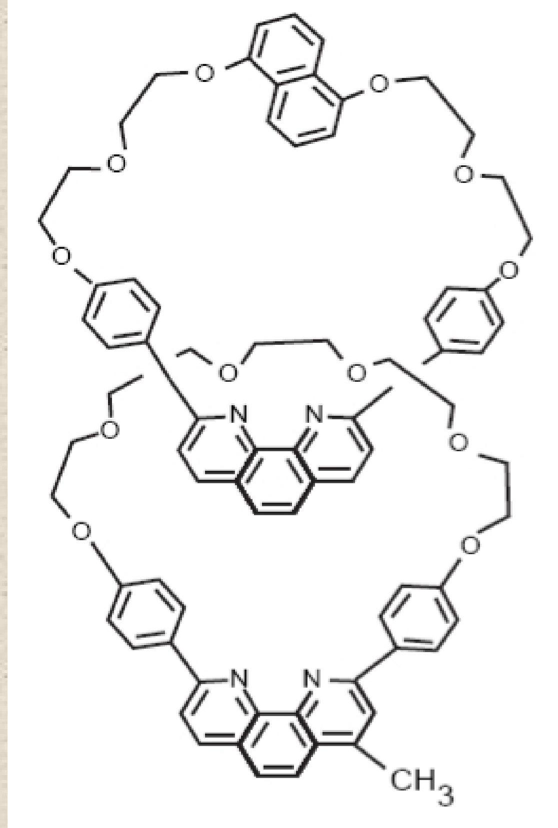
ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΑ ΕΛΑΣΤΙΚΑ ΓΑΝΤΙΑ

- Μοριακό γράφημα, χημικώς αμφίχειρο (άρα και τοπολογικώς αμφίχειρο), το οποίο, ακόμα και αν ήταν τελείως εύκαμπτο, να μη μπορεί να ισοτοπηθεί σε συμμετρική αναπαράσταση.



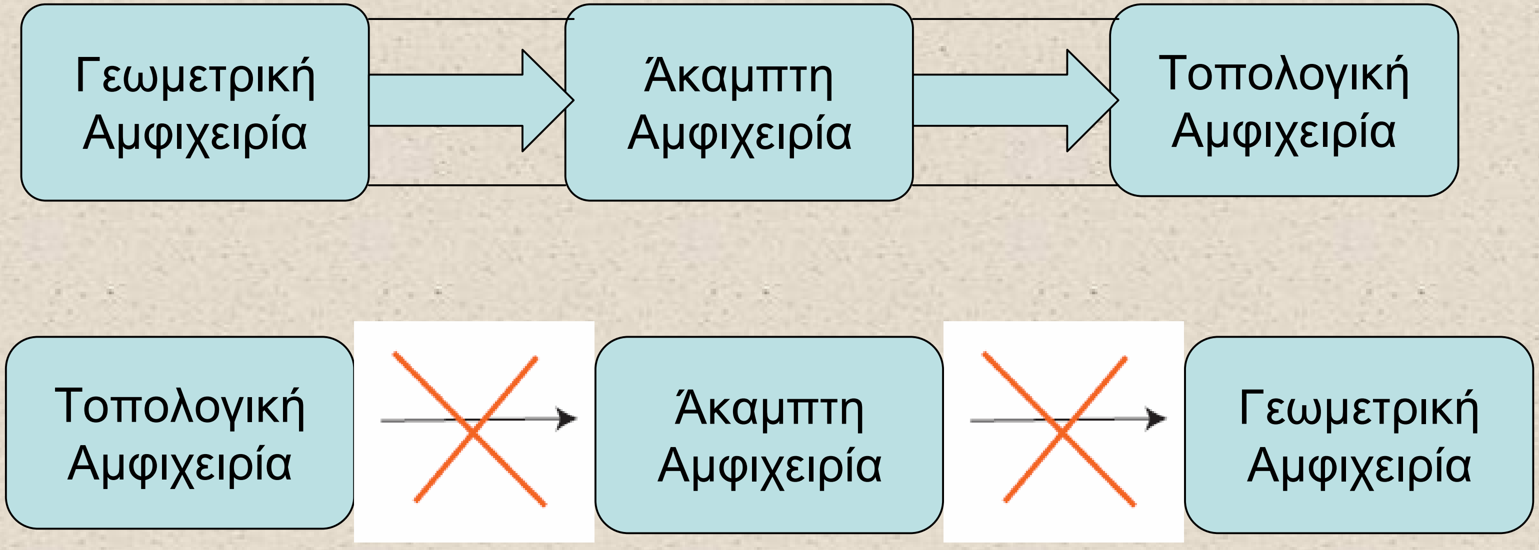
Μοριακό Τοπολογικά Ελαστικό Γάντι





<u>ΘΕΩΡΗΜΑ</u> *(Flapan, Seeman)*

- Το γράφημα του μονού νήματος DNA σε μορφή κόμβου figure 8 είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι.


Γεωμετρική Αμφιχειρία
Άκαμπτη Αμφιχειρία
Τοπολογική Αμφιχειρία
Τοπολογική Αμφιχειρία
Άκαμπτη Αμφιχειρία
Γεωμετρική Αμφιχειρία