



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

ΤΟΜΕΑΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

**ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΣΤΙΣ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΕΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ**

Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης
στην Ανάλυση και Διαφορικές Εξισώσεις

**ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΘΕΩΡΙΑΣ ΚΟΜΒΩΝ
ΣΤΗ ΧΗΜΕΙΑ ΚΑΙ ΣΤΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ**

Διπλωματική Εργασία
Ιωάννη Α. Διαμαντή

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Σοφία Λαμπροπούλου
Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Ε.Μ.Π. (Επιβλέπων Καθηγήτης)

Δώρος Θεοδώρου
Καθηγητής Ε.Μ.Π. (Μέλος)

Αλέξανδρος Παπαϊωάννου
Επίκουρος Καθηγητής Ε.Μ.Π. (Μέλος)

ΑΘΗΝΑ 2007

**ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΘΕΩΡΙΑΣ ΚΟΜΒΩΝ
ΣΤΗ ΧΗΜΕΙΑ ΚΑΙ ΣΤΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ**

Διπλωματική Εργασία
Ιωάννη Α. Διαμαντή

Αθήνα 2007

Στην οικογένειά μου
και στη μνήμη της Λίλης

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Στερεοχημεία καλείται ο κλάδος της Χημείας, που ασχολείται με τη δομή των μορίων στον τρισδιάστατο χώρο. Τοπολογία καλείται ο κλάδος των Μαθηματικών, ο οποίος ασχολείται με τις ιδιότητες των γεωμετρικών αντικειμένων, που μένουν αμετάβλητες κάτω από συνεχείς μετασχηματισμούς. Η Θεωρία Κόμβων είναι ένας κλάδος της Τοπολογίας, που μελετά κόμβους και κρίκους ως προς συνεχείς μετασχηματισμούς στο χώρο. Ξεκίνησε το 1880 από τον William Thomson (Λόρδος Kelvin), συνεχίστηκε από τον φυσικό Tait και μέχρι σήμερα το βασικότερο πρόβλημα στη Θεωρία Κόμβων είναι η ταξινόμηση των κόμβων μέσω ισοτοπίας.

Για ένα συγκεκριμένο μόριο οι χημικοί ενδιαφέρονται για την εύρεση άλλων μορίων, τα οποία έχουν τον ίδιο μοριακό τύπο αλλά διαφορετικό χημικό τύπο. Τέτοια μόρια καλούνται *ισομερή* του αρχικού και υπάρχουν τρεις κατηγορίες ισομερών: Τα δομικά ισομερή από την πλευρά της Χημείας, τα γεωμετρικά ισομερή από την πλευρά της Γεωμετρίας και τα τοπολογικά ισομερή από την πλευρά της Τοπολογίας. Μία αξιοσημείωτη περίπτωση στερεοϊσομερών μπορεί να προκύψει από ένα ζευγάρι εμφυτευμένων γραφημάτων, τα οποία αποτελούν το ένα κατοπτρική εικόνα του άλλου. Ένα μόριο, το οποίο είναι ισοτοπικό με την κατοπτρική του εικόνα καλείται *αμφίχειρο*, ενώ σε αντίθετη περίπτωση μη αμφίχειρο. Ένα ζεύγος μη αμφίχειρων μορίων, που το ένα αποτελεί κατοπτρική εικόνα του άλλου καλούνται *εναντιομερή*. Την ιδέα της μοριακή αμφιχειρίας εισήγαγε πρώτος ο Pasteur (1848), παρατηρώντας ότι οι κατοπτρικές εικόνες των κρυστάλλων ταρταρικού οξέως, έστρεφαν το πολωμένο φως προς διαφορετικές διευθύνσεις.

Μέχρι το 1960, η ανάλυση των τοπολογικών ιδιοτήτων των ήδη γνωστών μοριακών δομών στηριζόταν στην ανάλυση των γεωμετρικών ιδιοτήτων των δομών αυτών, καθώς κάθε γνωστή δομή μπορούσε να παρασταθεί στο επίπεδο. Πρόσφατα όμως, κόμβοι, κρίκοι και άλλα πολύπλοκα μόρια συντέθηκαν και η δομή και οι ιδιότητές τους προέρχονταν τόσο από την τοπολογία τους, όσο και από τη γεωμετρία τους. Το κίνητρο για τους χημικούς στο να συνθέσουν τέτοιες τοπολογικά ενδιαφέρουσες δομές έγκειται στην επιθυμία τους να συνθέσουν νέα είδη μορίων, τα οποία ενδεχομένως να έχουν και ασυνήθιστες ιδιότητες. Τέτοιες ασυνήθιστες δομές συναντώνται στη φύση, για παράδειγμα στις πρωτεΐνες (1994) και στα μόρια DNA (1967).

Τα εναντιομερή είναι ιδιαίτερα σημαντικά για τη Χημεία, εφόσον διαφορετικά εναντιομερή μη αμφίχειρων μορίων συχνά έχουν διαφορετικές φυσικές ιδιότητες. Όταν έχουμε μόρια που το γράφημά τους αντιστοιχεί σε έναν κόμβο (ή σε έναν κρίκο), γνωρίζοντας ότι ο κόμβος (ή ο κρίκος) αυτός είναι τοπολογικά μη αμφίχειρας, έπεται ότι και το χημικό του γράφημα είναι τοπολογικά μη αμφίχειρο. Επειδή η σύνθεση χημικών μορίων είναι χρονοβόρα και δαπανηρή διαδικασία και επειδή μοριακοί κόμβοι και κρίκοι μπορούν πλέον να συντεθούν, είναι σημαντικό κάθε φορά να είμαστε σε θέση να αποφασίζουμε εάν τα παραπάνω είναι αμφίχειρα ή όχι.

Στη παρούσα εργασία λοιπόν, θα αναπτύξουμε τοπολογικές τεχνικές, που βοηθούν στον εντοπισμό της αμφιχειρίας μοριακών γραφημάτων. Στο Κεφάλαιο 1 γίνεται μία εισαγωγή στην Θεωρία Κόμβων και στη Θεωρία Γραφημάτων, καθώς και μία σύνδεση αυτών με την Χημεία. Στο Κεφάλαιο 2 αναπτύσσουμε τοπολογικές αναλλοίωτες κόμβων και γραφημάτων, που βοηθούν στον εντοπισμό της αμφιχειρίας ενός μοριακού γραφήματος, όπως: τα πολυώνυμα κόμβων, οι ορίζουσες και οι υπογραφές κόμβων, ο αριθμός συνέλιξης, καθώς και αναλλοίωτα σύνολα γραφημάτων. Στο Κεφάλαιο 3 αναπτύσσουμε συγκεκριμένα τοπολογικά αποτελέσματα για την αμφιχειρία των μοριακών σκαλών Moebius και συγγενικών μορίων. Συγκεκριμένα, αποδεικνύουμε το θεώρημα του Simon, ότι δηλαδή εμφυτευμένα γραφήματα που αντιπροσωπεύουν κανονικές μοριακές σκάλες Moebius με τρεις ή και περισσότερες συνδέσεις δεν είναι τοπολογικώς αμφίχειρα και άρα ούτε και χημικώς και αποδεικνύουμε το θεώρημα της Flapan, ότι δηλαδή κάθε εμφύτευση σκάλας Moebius με περιττό αριθμό συνδέσεων είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρη, ανεξάρτητα αν περιέχει κόμβους ή όχι. Στο Κεφάλαιο 4 αναλύουμε διαφορετικά είδη αμφιχειρίας, όπως τα γεωμετρικά και τοπολογικά ελαστικά γάντια. Τέλος, στο Κεφάλαιο 5 αναφερόμαστε στη τοπολογία του DNA, καθώς και σε τεχνικές για τον εντοπισμό της ιδιότητας της αμφιχειρίας σε μόρια DNA.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τη κυρία Σοφία Λαμπροπούλου, Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Ε.Μ.Π., για τον πολύτιμο χρόνο που μου αφιέρωσε.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1. Εισαγωγικές Έννοιες	10
1.1 Κόμβοι.....	10
1.2 Γραφήματα	14
1.3 Κόμβοι και Χημεία.....	19
2. Μοριακά Γραφήματα Κόμβων	24
2.1 Αναλλοίωτες Γραφημάτων.....	24
2.2 Πολυώνυμα Κόμβων.....	32
2.3 Εναλλασσόμενοι Κόμβοι.....	38
2.4 Σύνθεση Κόμβων.....	44
2.5 Ορίζουσες Κόμβων.....	46
2.6 Πολυώνυμο Conway και Υπογραφές Κόμβων.....	47
3. Σκάλες Moebius	52
3.1 Διακλαδιζόμενα Καλύμματα με Δύο Φύλλα.....	52
3.2 Εγγενώς Μη Αμφίχειρα Γραφήματα.....	66
3.3 Συγγενικά Μοριακά Γραφήματα.....	68
3.4 Σκάλες Moebius με Περισσότερες Στροφές.....	76
4. Είδη Αμφιχειρίας	79
4.1 Τοπολογικά Ελαστικά Γάντια.....	80
4.2 Μοριακά Τοπολογικά Ελαστικά Γάντια.....	85
4.3 Εγγενώς Τοπολογικά Ελαστικά Γάντια.....	87
5. Η Τοπολογία του DNA	90
5.1 Η Δομή του DNA.....	90
5.2 Αμφιχειρία του DNA.....	91
5.3 Υπερελίκωση του DNA.....	94
5.4 Η Θεμελιώδης Εξίσωση.....	95
Βιβλιογραφία	102

1

ΕΙΣΑΓΩΓΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ

Στο κεφάλαιο που ακολουθεί θα αναπτύξουμε όλους τους όρους και τα μαθηματικά εργαλεία από τη θεωρία κόμβων και τη θεωρία γραφημάτων που προαπαιτούνται για την παρούσα εργασία.

1.1 ΚΟΜΒΟΙ

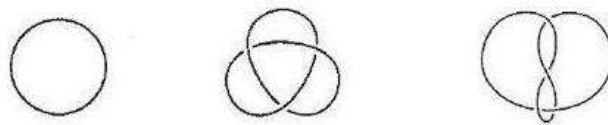
ΟΡΙΣΜΟΣ 1.1. Έστω $A, B \subseteq \mathbb{R}^3$ και $f: A \rightarrow B$ συνάρτηση. Ο f καλείται *ομοιομορφισμός* αν είναι ένα προς ένα, συνεχής και έχει συνεχή αντίστροφη εικόνα. Τα σύνολα A και B καλούνται τότε *ομοιομορφικά*.

Αν $A, B \subseteq \mathbb{R}^3$ και υπάρχει ομοιομορφισμός $h: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ τέτοιος ώστε $h(A) = B$, τότε γράφουμε $h: (\mathbb{R}^3, G_1) \rightarrow (\mathbb{R}^3, G_2)$

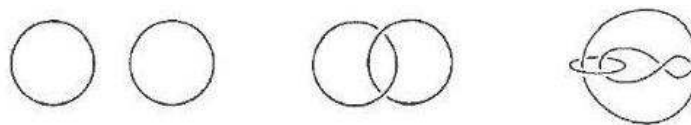
ΟΡΙΣΜΟΣ 1.2. Έστω G υποσύνολο του \mathbb{R}^3 . Μία *εμφύτευση* (*embedding*) του G είναι η εικόνα ενός ομοιομορφισμού $h: G \rightarrow G'$, όπου G' είναι επίσης υποσύνολο του \mathbb{R}^3 .

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.3. Ένας *κόμβος* K είναι μια εμφύτευση του κύκλου S^1 στον χώρο \mathbb{R}^3 ή στην σφαίρα S^3 . Ένας *κρίκος* L είναι μια εμφύτευση από n αντίγραφα του S^1 στον χώρο \mathbb{R}^3 ή στην σφαίρα S^3 .

Με τον όρο «κόμβος» θα εννοούμε κόμβους και κρίκους εκτός αν δηλώνεται διαφορετικά. Το γεγονός ότι ένας κόμβος είναι εικόνα ομοιομορφισμού του κύκλου, σημαίνει ότι δεν επιτρέπονται αυτοτομές.



Σχήμα 1.1 Παραδείγματα κόμβων



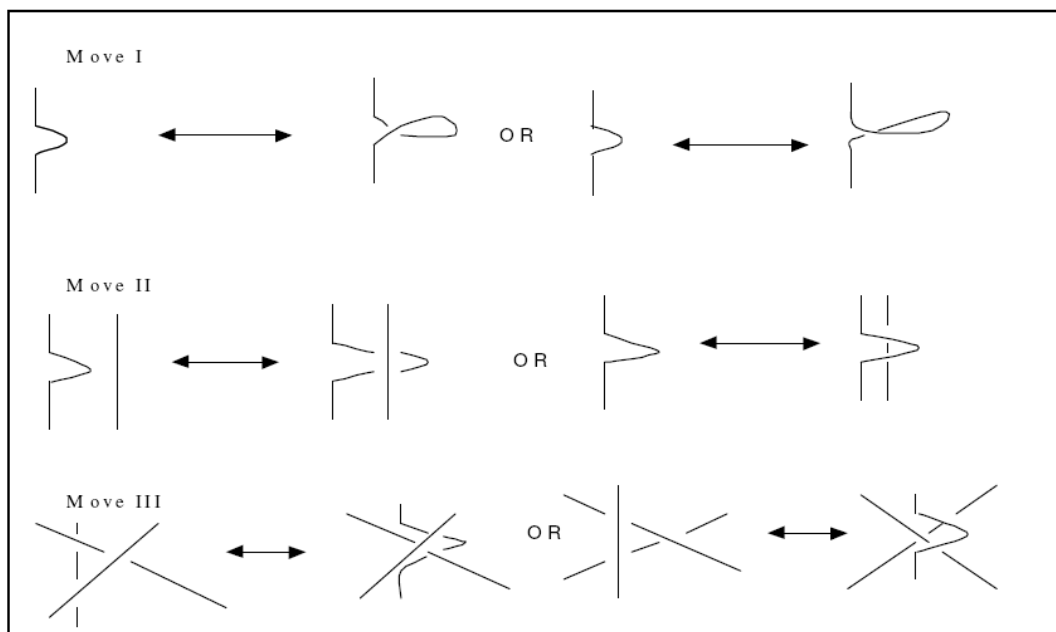
Σχήμα 1.2 Παραδείγματα κρίκων

Δύο κόμβοι K_1, K_2 θα θεωρούνται ίδιοι, αν μπορεί να προκύψει ο ένας από τον άλλο με συνεχή παραμόρφωση στο χώρο. Τέτοιοι κόμβοι καλούνται ισοτοπικοί.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.4. Δύο κόμβοι K_1, K_2 θα ονομάζονται *ισοτοπικοί*, αν υπάρχει ομοιομορφισμός ζευγών $h : (S^3, K_1) \rightarrow (S^3, K_2)$. Συμβολικά γράφουμε $K_1 \sim K_2$.

Η έννοια της ισοτοπίας είναι σημαντική, καθώς είναι η σχέση ισοδυναμίας που χρειαζόμαστε στους κόμβους, εφ' όσον δύο κόμβοι είναι πάντοτε ομοιομορφικοί, ενώ όχι αναγκαστικά ισοτοπικοί. Μία ισοτοπία κόμβων παράγεται από τριγωνικές κινήσεις- Δ στο χώρο (βλέπε Σχήμα 1.13). Το 1927 ο Kurt Reidemeister (1893-1971) απέδειξε ότι δύο διαφορετικά διαγράμματα του ίδιου κόμβου μπορούν να συσχετισθούν με μία σειρά από κινήσεις, γνωστές ως *κινήσεις Reidemeister*, μαζί με ισοτοπία επιπέδου (βλέπε Σχήμα 1.4) δείχνοντας ότι κάθε δυνατή κίνηση- Δ παράγεται από τέτοιες κινήσεις. Την ίδια περίοδο και δουλεύοντας ανεξάρτητα από τον Reidemeister, οι J.W. Alexander και G. B. Briggs κατέληξαν στο ίδιο συμπέρασμα.

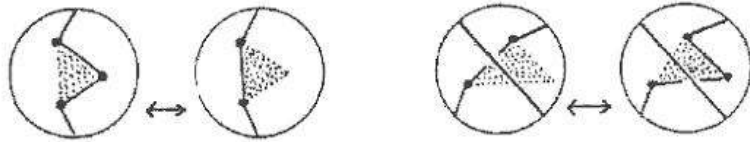
ΘΕΩΡΗΜΑ 1.5. (Reidemeister; 1927) Δύο κόμβοι K_1, K_2 είναι *ισοτοπικοί* αν και μόνο αν οποιαδήποτε δύο διαγράμματά τους $D(K_1), D(K_2)$ διαφέρουν κατά πεπερασμένο πλήθος κινήσεων Reidemeister και ισοτοπιών επιπέδου.



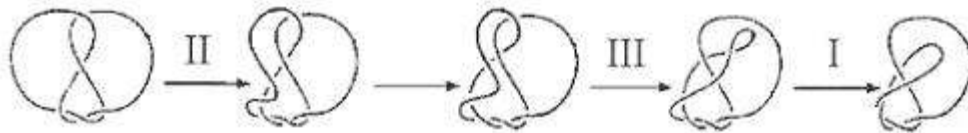
Σχήμα 1.3 Οι κινήσεις Reidemeister

Αν και οι παραπάνω κινήσεις αλλάζουν την προβολή του κόμβου, δεν αλλάζουν τον κόμβο που αντιπροσωπεύεται από την προβολή. Κάθε μία από τις τρεις αυτές κινήσεις αντιστοιχεί σε ισοτοπία στο χώρο.

Παρακάτω παρουσιάζονται οι κινήσεις ισοτοπίας επιπέδου.



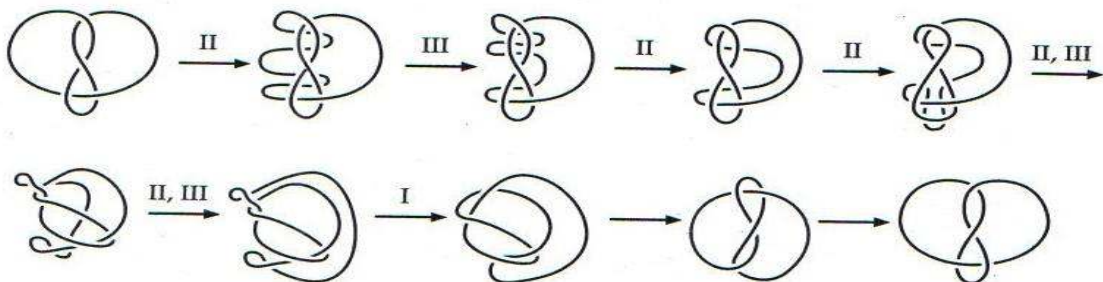
Σχήμα 1.4 Κινήσεις ισοτοπίας επιπέδου



Σχήμα 1.5 Ισοτοπικοί κόμβοι

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.6. Η κατοπτρική εικόνα (*mirror image*) K^* ενός κόμβου K προκύπτει με αλλαγή όλων των διασταυρώσεων σε ένα διάγραμμά του. Ένας κόμβος που είναι ισοτοπικός με την κατοπτρική του εικόνα καλείται τοπολογικώς *αμφίχειρας* (*achiral*).

Στο Σχήμα 1.6 δείχνουμε ότι ο κόμβος figure 8 είναι αμφίχειρας, ενώ στο Σχήμα 1.7 δίνουμε τον αριστερόστροφο και δεξιόστροφο κόμβο trefoil, που είναι παράδειγμα μη αμφίχειρων κόμβων, όπως αποδεικνύουμε στα παρακάτω.



Σχήμα 1.6 Ο κόμβος figure 8 είναι αμφίχειρας



Σχήμα 1.7 Ο κόμβος trefoil είναι μη αμφίχειρας

Ακολουθούν έννοιες που θα μας οδηγήσουν σε ισοδύναμους (και ίσως πιο «λειτουργικούς») ορισμούς της τοπολογικής αμφιχειρίας.

Ένα σημαντικό αποτέλεσμα της τοπολογίας, που οφείλεται στον Alexander (1930) είναι ότι κάθε ομοιομορφισμός $h: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ ή $h: S^3 \rightarrow S^3$ είναι ισοτοπικός είτε με την ταυτοτική απεικόνιση είτε με την κατοπτρική απεικόνιση, αλλά όχι και με τις δύο. Αν ο h είναι ισοτοπικός με την ταυτοτική απεικόνιση, τότε λέμε ότι ο h διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου (*orientation preserving*), ενώ αν ο h είναι ισοτοπικός με την κατοπτρική απεικόνιση, τότε λέμε ότι ο h αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου (*orientation reversing*).

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ 1.7. Ένας ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου απεικονίζει ένα κόμβο στην κατοπτρική του εικόνα, ενώ ένας ομοιομορφισμός που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου απεικονίζει έναν κόμβο στον εαυτό του ή σε ισοτοπικό του.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.8. Ένας κόμβος K είναι *τοπολογικώς αμφίχειρας* όταν υπάρχει ένας ομοιομορφισμός $h: (\mathbb{R}^3, K) \rightarrow (\mathbb{R}^3, K)$ που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Ισοδύναμα, όταν υπάρχει ομοιομορφισμός $g: (\mathbb{R}^3, K) \rightarrow (\mathbb{R}^3, K^*)$ που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου. Όταν δεν υπάρχει τέτοιος ομοιομορφισμός λέμε ότι ο κόμβος K είναι *τοπολογικώς μη αμφίχειρας*.

Ένας κρίκος λέγεται προσανατολισμένος όταν επιλέγεται ένας προσανατολισμός για κάθε συνιστώσα του. Τα παραπάνω περί ισοτοπίας ισχύουν και για προσανατολισμένους κρίκους, όπου στις κινήσεις ισοτοπίας εννοούνται όλοι οι πιθανοί προσανατολισμοί.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.9. Ένας προσανατολισμένος κρίκος L καλείται *αμφίχειρας* όταν είναι ισοτοπικός με τον όμοια προσανατολισμένο κατοπτρικό του, ενώ ένας κρίκος καλείται *αντιστρέψιμος* (*invertible*) αν υπάρχει ισοτοπία που απεικονίζει τον L στον εαυτό του, με αντίθετο όμως προσανατολισμό.

Για παράδειγμα ο κόμβος trefoil είναι αντιστρέψιμος και μη αμφίχειρας, ενώ ο κόμβος 8_{17} είναι αμφίχειρας, αλλά δεν είναι αντιστρέψιμος.

Ως προς την αμφιχειριότητα προσανατολισμένων ή μη κρίκων έχουμε τα παρακάτω:

ΠΡΟΤΑΣΗ 1.10. Έστω L κρίκος και έστω L' μία επιλογή προσανατολισμού του L . Τότε: $L \sim L^* \Rightarrow L' \sim L''^*$, για κάποιο προσανατολισμό L'' του L . Ισοδύναμα, αν L' μη ισοτοπικός με τον L''^* για κάθε επιλογή προσανατολισμού L'' του L , τότε και ο μη προσανατολισμένος κρίκος L δεν είναι ισοτοπικός με την κατοπτρική του εικόνα L^* .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω L' μη ισοτοπικός με τον L''^* για κάθε δυνατές επιλογές προσανατολισμού. Όμως, $L \sim L^*$, άρα υπάρχει πεπερασμένη ακολουθία κινήσεων Reidemeister από τον κρίκο L στον L^* και επιλέγοντας προσανατολισμό για τον L , έστω τον L' , θα καταλήξουμε στον L^* με κάποιον (άλλο πιθανώς) προσανατολισμό L''^* , δηλαδή $L' \sim L''^*$, άτοπο. \square

ΠΡΟΤΑΣΗ 1.11. Αν υπάρχουν προσανατολισμοί L', L'' του κρίκου L τέτοιοι ώστε $L' \sim L''^* \Rightarrow L \sim L^*$. Ισοδύναμα, αν L μη ισοτοπικός με την κατοπτρική του εικόνα L^* , τότε για κάθε δυνατή επιλογή προσανατολισμών L', L'' θα είναι και ο L' μη ισοτοπικός

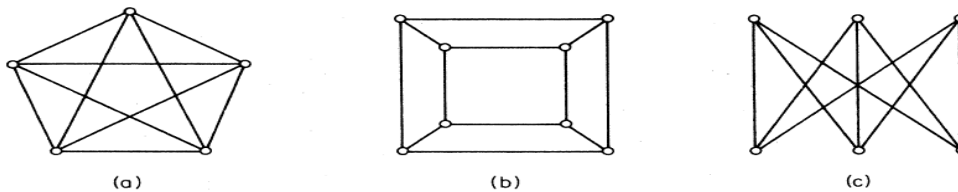
με τον L''^* . Συγκεκριμένα, για $L' = L''$ αν L μη ισοτοπικός με την κατοπτρική του εικόνα L^* , τότε και ο L' θα είναι μη ισοτοπικός με τον L^* .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Εφόσον $L' \sim L''^*$, θα υπάρχει μία πεπερασμένη ακολουθία προσανατολισμένων κινήσεων Reidemeister από τον κρίκο L' στον L''^* . Τότε, ξεχνώντας τον προσανατολισμό, η ίδια ακολουθία κινήσεων είναι μία ισοτοπία από τον κρίκο L στον κατοπτρικό του L^* . \square

1.2 ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ

Πολλά θεωρητικά αντικείμενα της θεωρίας γραφημάτων αντικατοπτρίζουν εφαρμογές, γι' αυτό κάποιοι συμβολισμοί ή ακόμα και ορισμοί δεν είναι καθιερωμένοι. Εδώ, θα χρησιμοποιήσουμε τις έννοιες που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή μοριακών δομών στη χημεία αλλά και για την θεωρητική προσέγγιση της θεωρίας γραφημάτων.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.12. Ένα *γράφημα* G είναι μία δυάδα από σύνολα E και V (συμβολικά $G = (E, V)$), όπου το σύνολο V είναι το σύνολο κορυφών του γραφήματος και E το σύνολο των πλευρών του γραφήματος. Κάθε πλευρά e του γραφήματος ($e \in E$) συνδέει δύο κορυφές v_1, v_2 του συνόλου V και συμβολίζεται ως $e = (v_1, v_2)$.



Σχήμα 1.8 Τρία διαφορετικά γραφήματα

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.13. Ένα γράφημα καλείται *κατευθυνόμενο* όταν κάθε πλευρά του σχετίζεται με ένα διατεταγμένο σύνολο κορυφών v_1, v_2 . Ήτοι η πλευρά $e = (v_1, v_2)$ συμβολίζει μία ακμή από την κορυφή v_1 στην κορυφή v_2 , ενώ η πλευρά $e = (v_2, v_1)$ συμβολίζει μία πλευρά από την κορυφή v_2 στην κορυφή v_1 .

Εκτός αν αναφέρεται το αντίθετο, σε ένα γράφημα $G = (E, V)$ τα σύνολα E και V θεωρούνται πεπερασμένα και διάφορα του κενού. Μία πλευρά $e = (v_1, v_2)$ ενός γραφήματος G λέγεται ότι εφάπτεται των κορυφών v_1, v_2 και οι κορυφές αυτές καλούνται *γειτονικές* (*adjacent*). Ο ορισμός του γραφήματος επιτρέπει την ύπαρξη διαφορετικών πλευρών που να συνδέουν το ίδιο ζεύγος κορυφών. Τέτοιες πλευρές καλούνται *παράλληλες*. Επίσης, επιτρέπει την ύπαρξη πλευρών της μορφής $e = (v_1, v_1)$, οι οποίες καλούνται *βρόγχοι* (*loops*).

Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με απλά γραφήματα, δηλαδή γραφήματα που δεν έχουν βρόχους και παράλληλες πλευρές.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.14. Ένα γράφημα G καλείται *πλήρες* (*complete*) με n κορυφές και συμβολίζεται με K_n , εάν είναι απλό με n κορυφές και για κάθε ζευγάρι κορυφών $v_i, v_j \in V$ υπάρχει μία πλευρά στο σύνολο E $e = (v_i, v_j)$. Ένα πλήρες γράφημα με n κορυφές θα αποτελείται επομένως από $\binom{n}{2}$ πλευρές.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.15. Καλούμε *βαθμό* μιας κορυφής ενός γραφήματος, το πλήθος των πλευρών που προσπίπτουν στην κορυφή αυτή.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.16. Έστω ένα γράφημα $G = (E, V)$. Το γράφημα $G' = (E', V')$ καλείται *υπογράφημα* (*subgraph*) του G , εάν $V' \subseteq V$ και $E' \subseteq E$ τέτοια ώστε $\forall e' \in E'$, η e' προσπίπτει σε δύο κορυφές, οι οποίες να ανήκουν στο V' .

Ορίζουμε τώρα την έννοια της κατοπτρικής εικόνας και την ιδιότητα της αμφιχειρίας που είναι και τα περισσότερο χρήσιμα εργαλεία για τα επόμενα κεφάλαια.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.17. Κατοπτρική εικόνα G^* ενός γραφήματος G καλείται το γράφημα εκείνο που προκύπτει από την συμμετρική απεικόνιση του γραφήματος G ως προς ένα επίπεδο.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.18. Αυτομορφισμός ενός γραφήματος G καλείται μία ένα προς ένα και επί συνάρτηση του G στον εαυτό του, η οποία απεικονίζει γειτονικές κορυφές σε γειτονικές κορυφές και αντίστοιχα μη γειτονικές κορυφές σε μη γειτονικές κορυφές.

Έστω η σκάλα Moebius με τρεις συνδέσεις M_3 με αριθμημένες τις κορυφές.

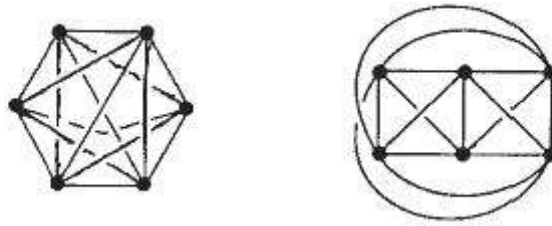


Σχήμα 1.9 Σκάλα Moebius με τρεις συνδέσεις

Η αντιμετάθεση της κορυφής 2 και της κορυφής 6, όπως και της κορυφής 5 με τη κορυφή 3 αποτελεί αυτομορφισμό του γραφήματος, ενώ η αντιμετάθεση των κορυφών 2 και 5 όχι, καθώς η κορυφή 2 είναι γειτονική της κορυφής 3, ενώ η 5 όχι.

Αν θεωρήσουμε ένα γράφημα G ως υποσύνολο του \mathbb{R}^3 (και όχι ως «αφηρημένο» γράφημα), τότε μπορούμε να μιλάμε για εμφύτευση γραφήματος αλλά και για «μετασχηματισμό» του γραφήματος στο χώρο, δηλαδή για ισοτοπία γραφημάτων. Από τον Ορισμό 1.2 έχουμε ότι μία εμφύτευση ενός γραφήματος G είναι η εικόνα ενός ομοιομορφισμού $h: G \rightarrow G'$, όπου G' είναι επίσης υποσύνολο του \mathbb{R}^3 . Ένα γράφημα μπορεί να έχει πολλές εμφυτεύσεις. Ένα αφηρημένο γράφημα θεωρείται ανεξάρτητο από

κάθε οποιαδήποτε συγκεκριμένη εμφύτευσή του στο χώρο. Παρακάτω παρουσιάζονται δύο διαφορετικές εμφυτεύσεις του K_6 .



Σχήμα 1.10 Δύο διαφορετικές εμφυτεύσεις του K_6

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.19. Ένα γράφημα G ονομάζεται *επίπεδο* όταν μπορεί να εμφυτευτεί στο επίπεδο έτσι ώστε οι πλευρές του να μην τέμνονται.

ΘΕΩΡΗΜΑ 1.20. (*Kuratowski: 1930*) Ένα γράφημα G είναι επίπεδο αν και μόνο αν δεν έχει σαν υπογραφήματα το γράφημα $K_{3,3}$ και το γράφημα K_5 .



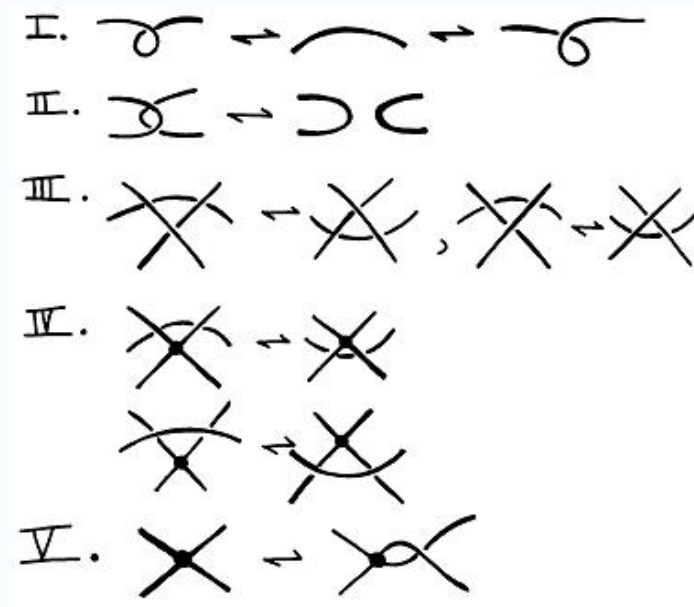
Σχήμα 1.11 Τα γραφήματα K_5 και $K_{3,3}$

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.21. Έστω γραφήματα $G_1, G_2 \subseteq \mathbb{R}^3$. Τα G_1, G_2 καλούνται *τοπολογικά ισοτοπικά* όταν υπάρχει ομοιομορφισμός $h : (\mathbb{R}^3, G_1) \rightarrow (\mathbb{R}^3, G_2)$, δηλαδή $h : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ με $h(G_1) = G_2$, τέτοιος ώστε να απεικονίζει κορυφές σε κορυφές και πλευρές σε πλευρές. Ένας τέτοιος ομοιομορφισμός καλείται *ισοτοπία*.

Η τοπολογική ισοτοπία γραφήματος λοιπόν είναι μια συνεχής παραμόρφωση του γραφήματος στο χώρο. Δύο διαφορετικές εμφυτεύσεις ενός γραφήματος G μπορεί να μην είναι ισοτοπικές και να είναι απλώς ομοιομορφικές. . Αν τα σύνολα A και B είναι ισοτοπικά στον \mathbb{R}^3 τότε είναι και ομοιομορφικά, καθώς η $h : (\mathbb{R}^3, A) \rightarrow (\mathbb{R}^3, B)$ είναι ομοιομορφισμός που μεταφέρει το A στο B . Από την άλλη μεριά όμως, αν A και B ομοιομορφικά υποσύνολα του \mathbb{R}^3 , τότε αυτά δεν είναι απαραίτητα ισοτοπικά. Για παράδειγμα, υπάρχει ομοιομορφισμός από τον μοναδιαίο κύκλο $S^1 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 / x^2 + y^2 = 1\}$ στον κόμβο trefoil, αλλά αυτοί δεν είναι ισοτοπικοί.

Αξίζει να σημειωθεί ότι η υπόθεση $h(G) = G$ δεν σημαίνει ότι κάθε σημείο του γραφήματος G μένει αμετάβλητο μέσω του h . Σημειώνεται ότι όταν οι κορυφές του γραφήματος έχουν βαθμό τουλάχιστον ίσο με τρία, τότε η υπόθεσή μας «αναγκάζει» τον h να απεικονίζει πλευρές σε πλευρές και κορυφές σε κορυφές. Πολλά όμως γραφήματα που θα μας απασχολήσουν παρακάτω, έχουν κορυφές βαθμού δύο και για αυτό απαιτούμε ο h να απεικονίζει κορυφές σε κορυφές και πλευρές σε πλευρές.

Ο Kauffman (1989) απέδειξε ότι η ισοτοπία γραφημάτων παράγεται από τις κινήσεις που φαίνονται στο Σχήμα 1.12, δείχνοντας ότι οι κινήσεις αυτές παράγουν συνδυαστική ισοτοπία μέσω κινήσεων- Δ , στις οποίες κάποιες κορυφές του τριγώνου μπορεί να είναι κορυφές του γραφήματος (Σχήμα 1.13).

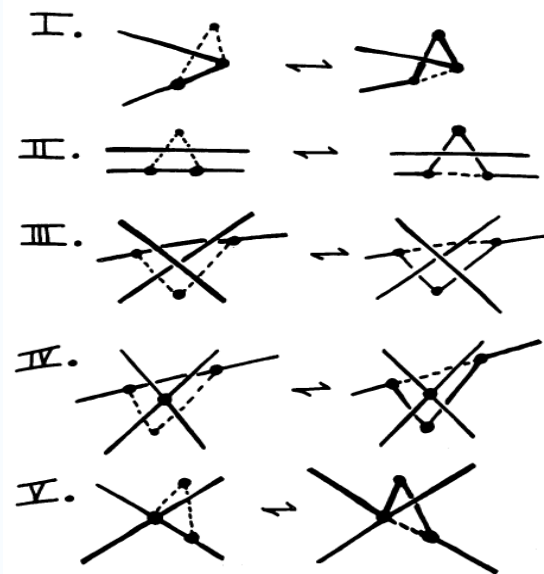


Σχήμα 1.12 Οι κινήσεις Reidemeister για γραφήματα



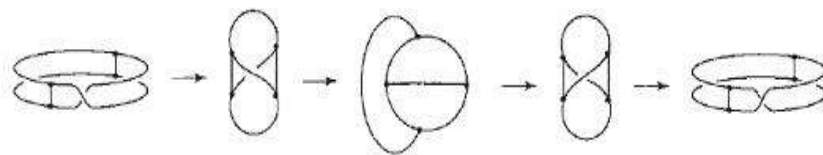
Σχήμα 1.13 Συνδυαστική ισοτοπία

Γενικεύοντας το Θεώρημα 1.5 (Θ. Reidemeister) για γραφήματα συμπεραίνουμε ότι δύο εμφυτευμένα γραφήματα είναι τοπολογικώς ισοτοπικά αν και μόνο αν διαφέρουν κατά πεπερασμένο πλήθος κινήσεων του Σχήματος 1.12.



Σχήμα 1.14 Οι γενικευμένες κινήσεις Reidemeister παράγουν συνδυαστική ισοτοπία

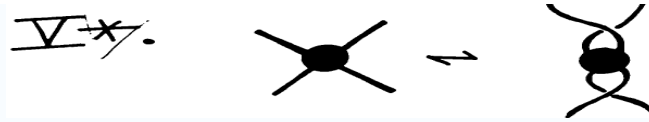
ΟΡΙΣΜΟΣ 1.22. Ένα γράφημα G εμφυτευμένο στον \mathbb{R}^3 είναι *τοπολογικώς αμφίχειρο* αν το G είναι ισοτοπικό με την κατοπτρική του εικόνα. Διαφορετικά είναι *τοπολογικώς μη αμφίχειρο*.



Σχήμα 1.15 Μετασχηματισμός του M_2 στη κατοπτρική του εικόνα

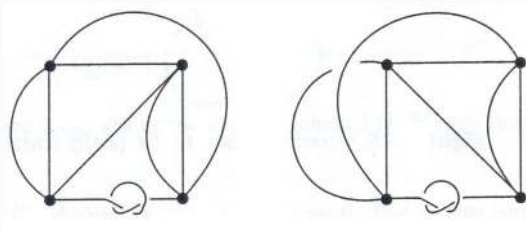
Ένα γράφημα G είναι *τοπολογικώς αμφίχειρο* όταν υπάρχει ένας ομοιομορφισμός $h : (\mathbb{R}^3, G) \rightarrow (\mathbb{R}^3, G)$ που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Ισοδύναμα, όταν υπάρχει $g : (\mathbb{R}^3, G) \rightarrow (\mathbb{R}^3, G^*)$ που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου. Όταν δεν υπάρχει τέτοιος ομοιομορφισμός λέμε ότι το γράφημα G είναι *τοπολογικώς μη αμφίχειρο*.

Μία άλλη κατηγορία γραφημάτων με την οποία θα ασχοληθούμε είναι τα *γραφήματα άκαμπτων κορυφών* (*rigid vertex graphs*). Ένα γράφημα άκαμπτων κορυφών είναι τέτοιο ώστε όλες οι κορυφές έχουν αντικατασταθεί από δίσκους, και οι πλευρές που προσπίπτουν στις κορυφές είναι κολλημένες στο σύνορο των δίσκων αυτών. Παραδείγματα γραφημάτων άκαμπτων κορυφών παρουσιάζονται στο Σχήμα 1.17. Η ισοτοπία εδώ παράγεται από τις τέσσερις πρώτες κινήσεις του Σχήματος 1.12 και από την κίνηση που φαίνεται παρακάτω.



Σχήμα 1.16 Κίνηση ισοτοπίας για γραφήματα άκαμπτων κορυφών

Η διάταξη των πλευρών στο σύνορο ενός δίσκου είναι καθορισμένη και έχει σημασία, καθώς, κατά μία κίνηση ισοτοπίας κάθε πλευρά μένει προσκολλημένη στο σύνορο του δίσκου και άρα δεν μεταβάλλεται η διάταξή τους. Δύο γραφήματα μπορεί να είναι ισοτοπικά σαν απλά γραφήματα (τοπολογική ισοτοπία), αλλά όχι σαν γραφήματα άκαμπτων κορυφών (ισοτοπία άκαμπτων κορυφών). Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε τα γραφήματα άκαμπτων κορυφών του Σχήματος 1.17.



Σχήμα 1.17 Μη ισοτοπικά εμφυτευμένα γραφήματα άκαμπτων κορυφών

Αν τα γραφήματα αυτά ήταν απλά γραφήματα, δηλαδή αν θεωρούσαμε τους δίσκους ως κορυφές, τότε θα ήταν ισοτοπικά. Η ισοτοπία όμως θα αλλάξει τη διάταξη των πλευρών που προσπίπτουν σε μία κορυφή, και άρα ως γραφήματα άκαμπτων κορυφών, δεν είναι ισοτοπικά. Ένα γράφημα άκαμπτων κορυφών εμφυτευμένο στον \mathbb{R}^3 είναι αμφίχειρο όταν το γράφημα είναι ισοτοπικό με την κατοπτρική του εικόνα. Πιο συγκεκριμένα, αν G ένα αμφίχειρο γράφημα άκαμπτων κορυφών, τότε η ισοτοπία του G στην κατοπτρική του εικόνα πρέπει να διατηρεί την διάταξη των πλευρών στο σύνορο κάθε δίσκου. Ένα άλλο παράδειγμα αναλύεται παρακάτω (βλέπε Σχήμα 1.18).

1.3 ΚΟΜΒΟΙ ΚΑΙ ΧΗΜΕΙΑ

Συνδέουμε τώρα τις παραπάνω έννοιες με την χημεία και συγκεκριμένα με τη δομή των μορίων στο χώρο.

ΟΡΙΣΜΟΣ 1.23. *Μοριακό γράφημα (molecular bond graph)* καλείται η αναπαράσταση ενός μορίου από ένα απλό γράφημα εμφυτευμένο στον \mathbb{R}^3 , έτσι ώστε οι κορυφές του γραφήματος να αντιπροσωπεύουν άτομα και οι πλευρές χημικούς δεσμούς.

Καλούμε *κατοπτρική εικόνα* ενός μορίου, το μόριο με γράφημα την κατοπτρική εικόνα του πρώτου.

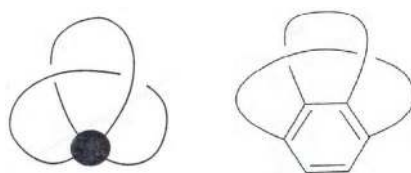
ΟΡΙΣΜΟΣ 1.24. Ένα μόριο καλείται *χημικώς αμφίχειρο* όταν είναι τοπολογικώς αμφίχειρο και επιπλέον είναι εφικτός ο μετασχηματισμός του στην χημική κατοπτρική του εικόνα στο εργαστήριο.

Εάν ένα μόριο μπορεί να μετασχηματιστεί στη κατοπτρική του εικόνα, τότε ο μετασχηματισμός αυτός συμφωνεί με τον μετασχηματισμό του γραφήματος στην κατοπτρική του εικόνα. Ειδικότερα, δεν επιτρέπουμε αυτοτομές στις πλευρές ενός γραφήματος όταν συμβαίνει ένας μετασχηματισμός (ισοτοπία) και ανάλογα, οι δεσμοί ενός μορίου δεν συναντώνται ποτέ σε θερμοκρασία δωματίου αν και είναι ελαστικοί και αν και μπορούν να περιστρέφονται. Άρα:

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ 1.25. *Αν ένα γράφημα είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο, τότε το μόριο, το οποίο το γράφημα αντιπροσωπεύει, είναι απαραίτητως χημικώς μη αμφίχειρο. Όταν όμως ένα μοριακό γράφημα είναι τοπολογικώς αμφίχειρο, τότε δεν μπορούμε να αποφανθούμε εάν είναι χημικώς αμφίχειρο.*

Όπως θα δούμε και παρακάτω, η έννοια των αμφίχειρων μορίων είναι σημαντικότερη για την *στεreoχημεία*, τον κλάδο δηλαδή της χημείας που ασχολείται με την δομή των μορίων στο χώρο. Δύο μη αμφίχειρα μόρια, που το ένα αποτελεί κατοπτρική εικόνα του άλλου, καλούνται *εναντιομερή* και έχουν διαφορετικές ιδιότητες.

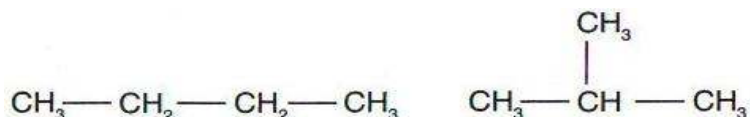
Για να κατανοήσουμε τη διαφορά ανάμεσα στην τοπολογική αμφιχειρία, την αμφιχειρία άκαμπτων κορυφών και την μοριακή αμφιχειρία, ας δούμε ένα παράδειγμα. Το γράφημα του Σχήματος 1.18, εάν θεωρηθεί ως απλό γράφημα, είναι πολύ εύκολο να δούμε ότι είναι αμφίχειρο και αν αυτό ήταν ένα μοριακό γράφημα με την κορυφή να αναπαριστά ένα άτομο και τους δύο κύκλους να αναπαριστούν χημικές αλυσίδες, τότε το μόριο θα ήταν χημικώς αμφίχειρο. Αντιθέτως όμως, αν το γράφημα θεωρηθεί ως γράφημα άκαμπτων κορυφών, τότε δεν είναι αμφίχειρο όπως αποδεικνύεται παρακάτω. Αν τώρα στη θέση της κορυφής τοποθετηθεί ένας δακτύλιος βενζολίου, τότε αυτός ο δακτύλιος στα γράφημα δρα σαν δίσκος άκαμπτης κορυφής, καθώς οι δεσμοί που συνδέουν τον δακτύλιο και το υπόλοιπο μόριο συμβαίνουν με καθορισμένη διάταξη γύρω από το εξάγωνο. Άρα ένα τέτοιο μόριο θα ήταν χημικώς μη αμφίχειρο.



Σχήμα 1.18 Ένα γράφημα άκαμπτων κορυφών και ένα μοριακό γράφημα άκαμπτων κορυφών

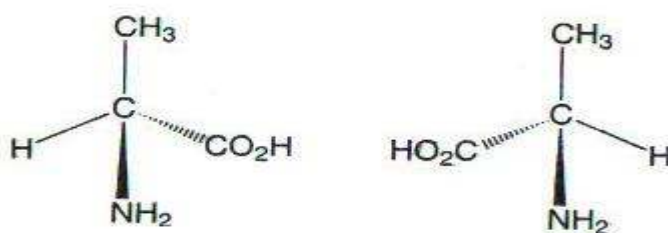
Το 1983 ο Walba χρησιμοποίησε τον όρο *στεreoχημική τοπολογία* (*stereochemical topology*) για να αναφερθεί στη σύνθεση, τον χαρακτηρισμό και στην ανάλυση μοριακών δομών που τοπολογικά δεν είναι τετριμμένες, για παράδειγμα, για κάθε μόριο, οι χημικοί ενδιαφέρονται να κατασκευάσουν εργαστηριακά άλλα μόρια, που η δομή τους να συνδέεται αυτήν του αρχικού μορίου. Τέτοια μόρια καλούνται *ισομερή* (*isomers*) του αρχικού και διακρίνονται σε τρία είδη:

1. Από τη σκοπιά της χημείας διακρίνουμε τα *δομικά ισομερή* (*structural isomers*) ενός μορίου είναι τα μόρια εκείνα που έχουν τον ίδιο μοριακό τύπο, αλλά αναπαρίστανται από διαφορετικά μοριακά γραφήματα. Ο μοριακός τύπος παρέχει τη λίστα των ατόμων που περιέχονται στο μόριο αλλά δεν καθορίζει τις θέσεις και το είδος των δεσμών μεταξύ τους. Ένα παράδειγμα δομικών ισομερών είναι το βουτάνιο και το ισοβουτάνιο που έχουν μοριακό τύπο C_4H_{10} , αλλά τα μοριακά τους γραφήματα είναι αντίστοιχα:



Σχήμα 1.19 Δομικά ισομερή

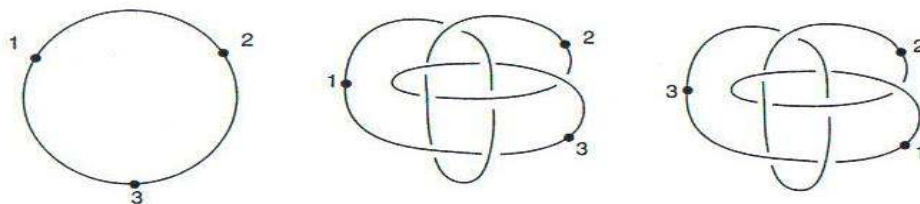
2. Από τη σκοπιά της γεωμετρίας διακρίνουμε τα *γεωμετρικά ισομερή* (*rigid isomers*) ενός μορίου, τα μόρια δηλαδή που έχουν το ίδιο αφηρημένο γράφημα με το αρχικό μοριακό γράφημα, αλλά σαν στερεά αντικείμενα, το ένα δεν μπορεί να υπερτεθεί επί του άλλου. Ένα παράδειγμα γεωμετρικών ισομερών είναι η L-αλανίνη και η D-αλανίνη:



Σχήμα 1.20 Γεωμετρικά ισομερή

Το ένα μόριο αποτελεί κατοπτρική εικόνα του άλλου, και στον τρισδιάστατο χώρο οι κορυφές των δύο γραφημάτων αντιστοιχούν σε κορυφές ενός κανονικού τετραέδρου. Τα γραμμοσκιασμένα τμήματα του σχήματος δηλώνουν τις πλευρές του γραφήματος που βρίσκονται στο πίσω μέρος του επιπέδου, τα έντονα τμήματα δηλώνουν τις πλευρές που βρίσκονται στο εμπρός μέρος του και οι απλές πλευρές αντιστοιχούν στις πλευρές που βρίσκονται πάνω στο επίπεδο. Αν τα παραπάνω γραφήματα ήταν «ελαστικά» (όπως επιτρέπει η τοπολογία), τότε το ένα θα μπορούσε να μετασχηματισθεί στο άλλο. Όμως σαν στερεά αντικείμενα το ένα δεν μπορεί να υπερτεθεί επί του άλλου.

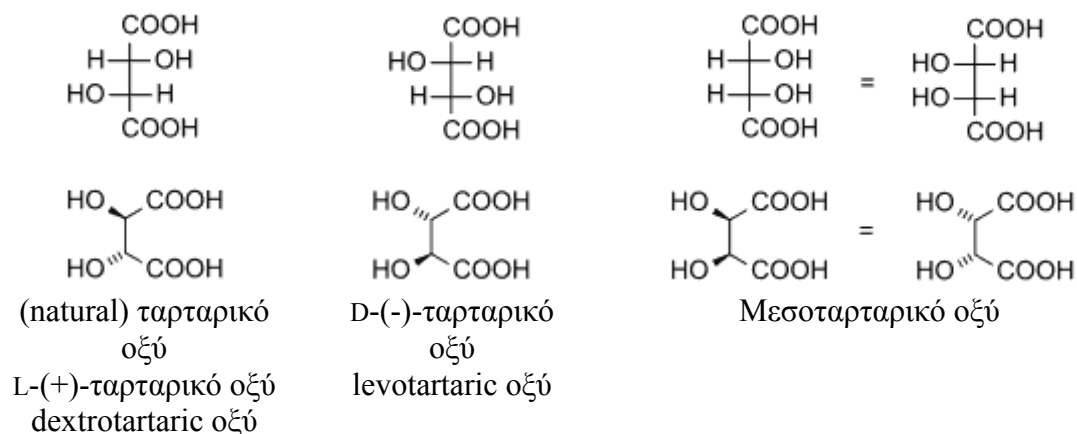
3. Από τη σκοπιά της τοπολογίας τέλος, διακρίνουμε τα *τοπολογικά στερεοϊσομερή* (*topological stereoisomers*) ενός μορίου, τα μόρια δηλαδή εκείνα που έχουν το ίδιο αφηρημένο γράφημα, αλλά ως εμφυτευμένα γραφήματα το ένα δεν μπορεί να μετασχηματισθεί στο άλλο, δηλαδή δεν είναι ισοτοπικά. Ένα παράδειγμα τοπολογικών στερεοϊσομερών παρουσιάζεται παρακάτω:



Σχήμα 1.21 Τοπολογικά ισομερή

Προκύπτει άμεσα από τα παραπάνω ότι το σύνολο των τοπολογικών στερεοϊσομερών ενός μορίου είναι υποσύνολο του συνόλου των γεωμετρικών στερεοϊσομερών του μορίου και αυτό συμβαίνει γιατί αν ένα γράφημα δεν μπορεί να ισοτοπηθεί σε ένα άλλο, τότε προφανώς δεν μπορεί και να υπερτεθεί επί του άλλου. Πολλοί χημικοί δεν διαχωρίζουν τα δύο αυτά είδη ισομερών και ορίζουν ένα ζευγάρι μορίων να αποτελούν στερεοϊσομερή, αν έχουν το ίδιο αφηρημένο γράφημα αλλά το ένα δεν μπορεί να αλλάξει χημικά ώστε να προκύψει το άλλο. Τέλος, τα γεωμετρικά και τα τοπολογικά στερεοϊσομερή είναι υποσύνολα των δομικών στερεοϊσομερών.

Η σημαντικότερη περίπτωση στερεοϊσομερών μπορεί να προκύψει από ένα ζευγάρι εμφυτευμένων γραφημάτων, όπου το ένα αποτελεί κατοπτρική εικόνα του άλλου. Όπως αναφέραμε και παραπάνω, ένα μόριο το οποίο είναι διαφορετικό από την κατοπτρική του εικόνα καλείται μη αμφίχειρο, ενώ σε αντίθετη περίπτωση αμφίχειρο. Ένα ζεύγος μη αμφίχειρων μορίων που το ένα αποτελεί κατοπτρική εικόνα του άλλου καλούνται *εναντιομερή*, ενώ τα στερεοϊσομερή εκείνα που δεν μοιράζονται σχέση κατοπτρικής εικόνας, καλούνται *διαστερεοϊσομερή*. Στο ταρταρικό οξύ που παρουσιάζεται παρακάτω. Τα L-(+)-ταρταρικό οξύ και D-(-)-ταρταρικό οξύ αποτελούν εναντιομερή, ενώ το μεσοταρταρικό οξύ αποτελεί διαστερεοϊσομερές αυτών.



Σχήμα 1.22 Εναντιομερή και διαστερεοϊσομερή

Τα εναντιομερή συμπεριφέρονται όμοια στις χημικές αντιδράσεις και η διαφορετικότητά τους εμφανίζεται όταν βρίσκονται μαζί με άλλα μη αμφίχειρα μόρια.

Διαφορετικά εναντιομερή μη αφίχειρων μορίων συχνά έχουν διαφορετική γεύση, οσμή και διαφορετικές φυσικές ιδιότητες.

Τα περισσότερα αμινοξέα των πρωτεϊνών σε ζωντανούς οργανισμούς είναι μη αμφίχειρα μόρια. Αυτό οδηγεί στο συμπέρασμα ότι ο ανθρώπινος οργανισμός αντιδρά διαφορετικά στο ένα εναντιομερές έναντι του άλλου. Συνήθως μόνο το ένα εναντιομερές μίας φαρμακευτικής ουσίας έχει το επιθυμητό αποτέλεσμα, ενώ το άλλο περνά από το ανθρώπινο σώμα χωρίς να το επηρεάζει. Παράδειγμα αποτελεί το φάρμακο *Thalidomide* που χρησιμοποιήθηκε τη δεκαετία του '60 για την καταπολέμηση της ναυτίας κατά την εγκυμοσύνη, όπου το ένα εναντιομερές είχε τα επιθυμητά αποτελέσματα, ενώ το άλλο προκαλούσε προβλήματα στο έμβryo. Άλλα παραδείγματα αποτελούν το φάρμακο *Ethambutol*₂ όπου το ένα εναντιομερές χρησιμοποιείται για την καταπολέμηση της φυματίωσης, ενώ το άλλο προκαλεί τύφλωση, το φάρμακο *Naproxen*, όπου το ένα εναντιομερές χρησιμοποιείται για την καταπολέμηση του πόνου από την αρθρίτιδα, ενώ το άλλο προκαλεί προβλήματα στο ήπαρ χωρίς ορατά συμπτώματα.

Επειδή η σύνθεση χημικών μορίων είναι χρονοβόρα και δαπανηρή διαδικασία, είναι σημαντικό να υπάρχουν θεωρητικά αποτελέσματα, για το πότε κάποια μοριακά γραφήματα μπορούν να έχουν στερεοϊσομερή και πότε όχι. Το ίδιο ισχύει και για πρωτεΐνες, καθώς πολλές πρωτεΐνες περιέχουν κόμβους ή κρίκους (Liang και Mislou, *Topological Features In Proteins: knots and links*, J. Math. Chem. **18**, 1994). Γνωρίζοντας ότι ένας κόμβος (ή κρίκος) είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρας, συμπεραίνουμε εάν το αντίστοιχο μοριακό γράφημα ή η πρωτεΐνη είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο. Στα επόμενα κεφάλαια λοιπόν θα αναπτύξουμε πολλές τεχνικές ώστε να μπορούμε να αποφανθούμε εάν ένας κόμβος ή κρίκος είναι τοπολογικώς αμφίχειρας ή όχι.

2

ΜΟΡΙΑΚΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ ΚΟΜΒΩΝ

Στο κεφάλαιο αυτό θα αναλύσουμε τοπολογικές τεχνικές που βοηθούν στην ανίχνευση της αμφιχειρίας ενός μοριακού γραφήματος.

Για να ξεχωρίσουμε διαγράμματα κόμβων /γραφημάτων μεταξύ τους χρειάζεται να ορίσουμε την έννοια της αναλλοίωτης κόμβων /γραφημάτων.

ΟΡΙΣΜΟΣ 2.1. Μία συνάρτηση $I: \{\text{κόμβοι/γραφήματα}\} \rightarrow L$, όπου το σύνολο L μπορεί να αποτελείται από σύμβολα, αριθμούς, πολυώνυμα κλπ, λέγεται *αναλλοίωτη κόμβων /γραφημάτων* αν ισχύει: $K_1 \sim K_2 \Rightarrow I(K_1) = I(K_2)$.

Κάθε αναλλοίωτη είναι καλά ορισμένη σε κλάσεις ισοτοπίας και για να αποδείξουμε ότι μία συνάρτηση αποτελεί αναλλοίωτη αρκεί να δείξουμε ότι η τιμή της δεν επηρεάζεται όταν εφαρμόσουμε σε ένα διάγραμμα τις εκάστοτε κινήσεις ισοτοπίας.

2.1 ΑΝΑΛΛΟΙΩΤΕΣ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ

Μετά από τη ανακάλυψη των πολυωνύμων κόμβων και κρίκων, αρκετά πολυώνυμα ανακαλύφθηκαν και για εμφυτευμένα γραφήματα, όπως των Kauffman (1989), Yamada (1989), Yokota (1996) και άλλα. Τα περισσότερα από αυτά τα πολυώνυμα αφορούν γραφήματα των οποίων όλες οι κορυφές έχουν βαθμό τρία ή όλες οι κορυφές έχουν βαθμό τέσσερα. Τα πολυώνυμα των εμφυτευμένων γραφημάτων βαθμού τέσσερα χρησιμοποιούνται κυρίως στα γραφήματα άκαμπτων κορυφών.

Ο Yokota ανακάλυψε μία πολυωνυμική αναλλοίωτη για συνήθη γραφήματα, αλλά το πολυώνυμο αυτό δεν ξεχωρίζει ένα γράφημα από την κατοπτρική του εικόνα, και άρα δε μπορούμε να το χρησιμοποιήσουμε για να εντοπίζουμε αν ένα γράφημα έχει την ιδιότητα της αμφιχειρίας ή όχι (Y. Yokota, *Topological invariants of graphs in 3-space*, *Topology* **35**, 77-87, 1996). Ο Kauffman όμως (1989) όρισε μία άλλη αναλλοίωτη για συνήθη γραφήματα, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον εντοπισμό των αμφίχειρων γραφημάτων. Πιο συγκεκριμένα:

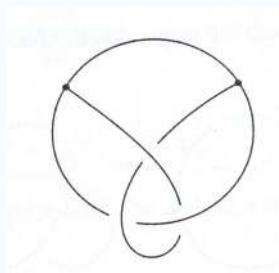
ΟΡΙΣΜΟΣ 2.2. Έστω G ένα εμφυτευμένο γράφημα. Ορίζουμε ως $T(G)$ το σύνολο με στοιχεία όλους τους κόμβους και κρίκους που εμπεριέχονται στο γράφημα G , και προκύπτουν ενώνοντας οποιεσδήποτε δύο πλευρές που προσπίπτουν σε μια κορυφή και διαχωρίζοντας κάθε άλλη πλευρά από την κορυφή αυτή (βλέπε Σχήμα 2.1). Κατασκευάζουμε έτσι όλες τις κλειστές καμπύλες, συμβολικά $r(G)$, για κάθε επιλογή σύνδεσης δύο πλευρών σε κάθε κορυφή του G . Αυτή η διαδικασία δημιουργεί πλήθος ανοικτών τόξων, τα οποία όμως δεν συμπεριλαμβάνονται στο $T(G)$. Επιπλέον, επιτρέπουμε ισοτοπία στο $T(G)$.

Άρα, αν το G περιέχει n_3 το πλήθος κορυφές βαθμού 3 έχουμε $(2+1)^{n_3} = 3^{n_3}$ επιλογές για το $T(G)$, αν περιέχει n_4 κορυφές βαθμού 4 έχουμε $(3+2+1)^{n_4} = 6^{n_4}$ επιλογές για το $T(G)$ και, εν γένει, αν το γράφημα G περιέχει n_k κορυφές βαθμού k θα έχουμε $(k-1)+(k-2)+\dots+1 = \frac{k(k-1)}{2}$ επιλογές για κάθε τέτοια κορυφή, άρα συνολικά $\left(\frac{k(k-1)}{2}\right)^{n_k}$ επιλογές για το σύνολο $T(G)$. Συνολικά έχουμε: $3^{n_3} + 6^{n_4} + \dots + \left(\frac{k(k-1)}{2}\right)^{n_k}$ επιλογές για το $T(G)$, με πιθανές επαναλήψεις.



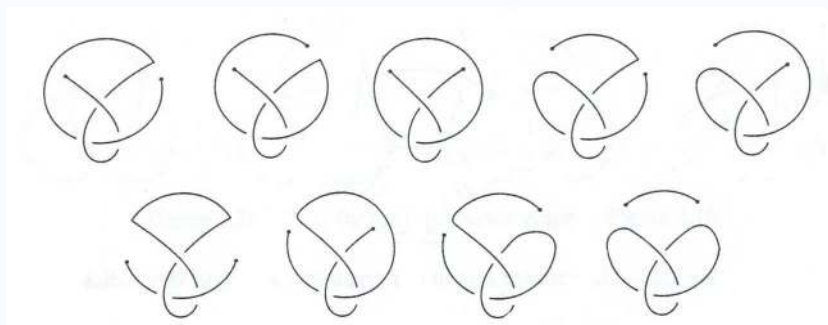
Σχήμα 2.1 Τοπικές αντικαταστάσεις σε κορυφές

Για να γίνει κατανοητή η παραπάνω διαδικασία θα υπολογίσουμε το σύνολο $T(G)$ του γραφήματος του Σχήματος 2.2.



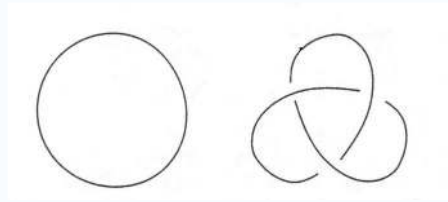
Σχήμα 2.2 Ένα εμφυτευμένο γράφημα

Ακολουθώντας την διαδικασία που προαναφέραμε έχουμε όλη τη συλλογή των ανοικτών τόξων και απλών κλειστών καμπυλών να αποτελείται από τα ακόλουθα:



Σχήμα 2.3 Τα στοιχεία του συνόλου $T(G)$ του γραφήματος στο Σχήμα 2.2

Όλα τα στοιχεία του συνόλου $T(G)$ είναι ισοτοπικά είτε με τον τετριμμένο, είτε με τον κόμβο trefoil.

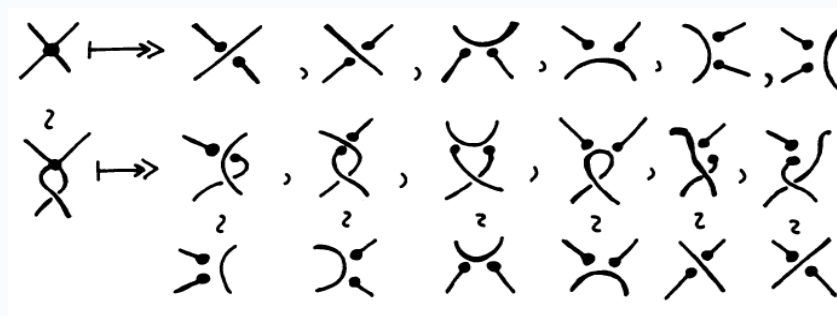


Σχήμα 2.4 Τα στοιχεία του συνόλου $T(G)$

Ο Kauffman [25] απέδειξε το παρακάτω:

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.3. Το σύνολο $T(G)$ είναι αναλλοίωτη ισοτοπίας του εμφυτευμένου γραφήματος G .

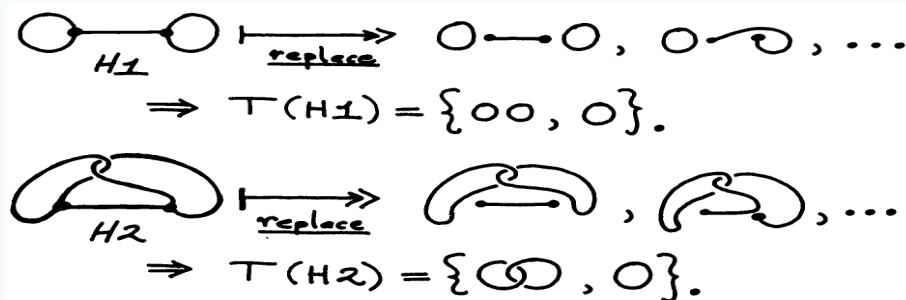
ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω δύο ισοτοπικά εμφυτευμένα γραφήματα G_1 και G_2 . Τότε, από Θεώρημα Reidemeister τα G_1 και G_2 θα διαφέρουν κατά πεπερασμένο πλήθος κινήσεων του Σχήματος 1.12. Για να δείξουμε ότι το σύνολο $T(G_1)$ είναι αναλλοίωτη ισοτοπίας του G_1 , αρκεί να δείξουμε ότι $T(G_1) = T(G_2)$. Γι' αυτό, αρκεί να παρατηρήσουμε ότι όλες οι δυνατές κλειστές καμπύλες $r(G_1)$ που προκύπτουν από το G_1 πριν από μία κίνηση IV ή V είναι ισοτοπικές με τις αντίστοιχες καμπύλες $r(G_2)$, που προκύπτουν από το G_2 μετά από την κίνηση αυτή. Αυτό πράγματι ισχύει και στο Σχήμα 2.5 δείχνουμε τη μία περίπτωση. Σημειώνουμε ότι για τις κινήσεις Reidemesiter I,II,III, που δεν περιέχουν κορυφές είναι προφανές ότι $T(G_1) = T(G_2)$. \square



Σχήμα 2.5

Αξίζει να σημειωθεί ότι το Θεώρημα 2.3 μπορεί να εφαρμοστεί και στο να ανιχνεύσουμε εάν ένα γράφημα είναι επίπεδο ή όχι. Πράγματι, έστω G επίπεδο γράφημα, τότε το σύνολο $T(G)$ θα περιέχει μόνο τετριμμένους κόμβους και, ισοδύναμα,

εάν το $T(G')$ περιέχει μη τετριμμένους κόμβους, έπεται ότι το G' δεν είναι επίπεδο γράφημα. Εφαρμόζουμε τα παραπάνω για τα γραφήματα του Σχήματος 2.6.



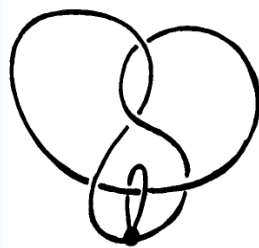
Σχήμα 2.6 Τα σύνολα $T(H_1), T(H_2)$ των γραφημάτων H_1, H_2

Τα γραφήματα H_1, H_2 λοιπόν δεν είναι ισοτοπικά, αφού $T(H_1) \neq T(H_2)$ και το γράφημα H_2 δεν είναι επίπεδο, αφού το σύνολο $T(H_2)$ περιέχει ένα μη τετριμμένο κρίκο (ενώ το γράφημα H_1 είναι).

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.4. (Kauffman; 1989) Έστω G ένα γράφημα το οποίο είναι 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 $T(G)$, τότε το γράφημα G δεν είναι αμφίχειρο.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω G αμφίχειρο γράφημα, δηλαδή $G \sim G^*$. Από Θεώρημα Kauffman θα είναι $T(G) = T(G^*)$. Έστω τώρα ότι το σύνολο $T(G)$ περιέχει ένα μη αμφίχειρο κόμβο ή κρίκο $r(G)$ και δεν περιέχει την κατοπτρική του εικόνα $r(G)^*$. Από τη κατασκευή του $T(G)$, το σύνολο $T(G^*)$ θα πρέπει να περιέχει τη καμπύλη $r(G)^*$, οπότε $T(G^*) \neq T(G)$, άτοπο. \square

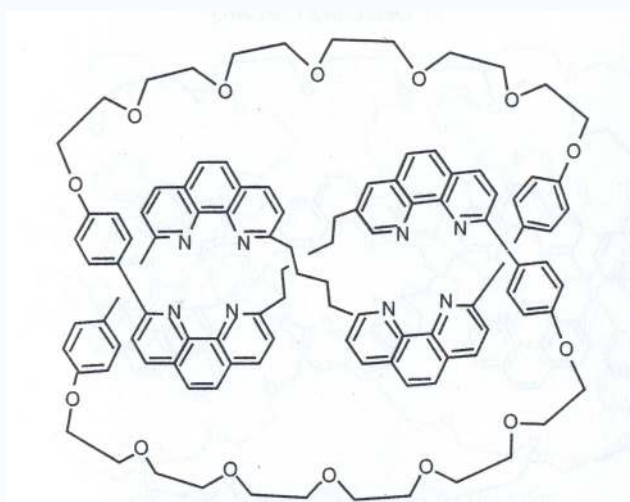
Για παράδειγμα, εφαρμόζοντας το Θεώρημα 2.4 στο γράφημα του Σχήματος 2.2 συμπεραίνουμε ότι το γράφημα είναι μη αμφίχειρο και αυτό γιατί το μόνο μη τετριμμένο στοιχείο του συνόλου $T(G)$ είναι ο δεξιόστροφος trefoil, ο οποίος, όπως αποδείξαμε παραπάνω δεν είναι αμφίχειρας. Το αντίστροφο του Θεωρήματος 2.4 όμως δεν ισχύει. Ας θεωρήσουμε το γράφημα του Σχήματος 2.7. Το σύνολο T του γραφήματος θα αποτελείται από τετριμμένους κόμβους και από τον κόμβο figure 8, ο οποίος είναι αμφίχειρας (βλέπε Σχήμα 1.6). Ο Wylbur Whitten απέδειξε ότι το γράφημα αυτό είναι μη αμφίχειρο χρησιμοποιώντας τη θεωρία διακλαδιζόμενων καλυμμάτων, την οποία αναπτύσσουμε στο επόμενο κεφάλαιο.



Σχήμα 2.7 Γράφημα J. Simon

Θα εφαρμόσουμε τώρα τη παραπάνω τεχνική για να ανιχνεύσουμε την ιδιότητα της αμφιχειρίας μοριακών κόμβων και κρίκων. Σημειώνουμε ότι αν αποδείξουμε ότι ένα μοριακό γράφημα είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο, τότε και το μόριο που απεικονίζει είναι χημικώς μη αμφίχειρο, γιατί κάθε μοριακή κίνηση αντιστοιχεί σε έναν τοπολογικό μετασχηματισμό του μοριακού γραφήματος.

- Θεωρούμε το μοριακό κόμβο trefoil που συνέθεσαν οι Dietrich-Buchecker και Sauvage το 1989 (C.Dietrich-Buchecker, J.-P. Sauvage, *A synthetic molecular trefoil knot*, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **28**, 189-192, 1989).

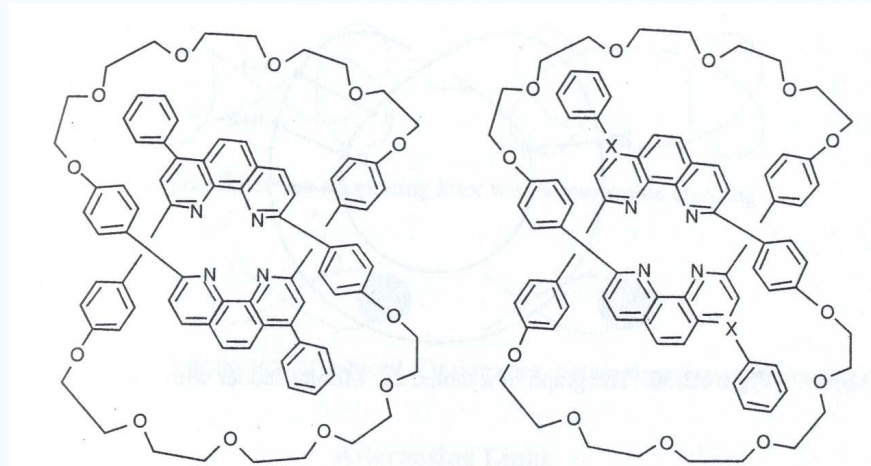


Σχήμα 2.8 Ο μοριακός κόμβος trefoil

Αν φανταστούμε ότι κάθε εξάγωνο στο μοριακό γράφημα αντικαθίσταται από μία πλευρά, τότε θα προκύψει ένας δεξιόστροφος κόμβος trefoil, ο οποίος δεν είναι αμφίχειρας. Όμως το αρχικό μας γράφημα είναι τοπολογικώς πιο πολύπλοκο και αυτό γιατί τα εξάγωνα είναι τοπολογικώς αρκετά διαφορετικά από τις πλευρές του κόμβου trefoil. Γι' αυτό υπολογίζουμε το σύνολο $T(G)$. Έχουμε 32 κορυφές (εξαγώνων) βαθμού 3, όμως οι τυχαίες κλειστές καμπύλες του $T(G)$ είναι πάρα πολύ λιγότερες από το σύνολο των 3^{32} επιλογών. Όλοι οι μη τετριμμένοι κόμβοι που εμπεριέχονται στο G κατευθύνονται γύρω από κάθε εξάγωνο δακτύλιο και υπάρχουν δύο τρόποι για να γίνει αυτό. Το σύνολο $T(G)$ λοιπόν αποτελείται από πολλούς τετριμμένους κρίκους και απλούς κόμβους, κάθε ένας από τους οποίους είναι ο δεξιόστροφος κόμβος trefoil.

Επειδή τώρα ο δεξιόστροφος κόμβος trefoil δεν είναι αμφίχειρας και επειδή το σύνολο $T(G)$ δεν περιέχει αριστερόστροφο κόμβο trefoil, από το Θεώρημα 2.4 προκύπτει άμεσα ότι το εμφυτευμένο γράφημα G είναι μη αμφίχειρο. Άρα και ο μοριακός κόμβος trefoil δεν είναι αμφίχειρας.

- Ας θεωρήσουμε τώρα τον προσανατολισμένο κρίκο Hopf, που συνέθεσαν το 1988 οι Mitchell και Sauvage (D.K. Mitchell, J.-P. Sauvage, *A topologically chiral [2]-catenane*, Angew. Chem. Int. Ed. **27**, 930-931, 1988), όπως παρουσιάζεται στα αριστερά του Σχήματος 2.9.

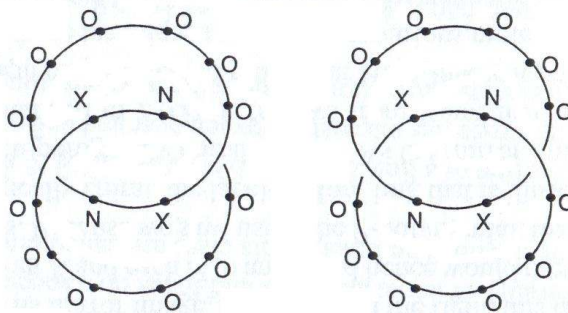


Σχήμα 2.9 Προσανατολισμένοι μοριακοί κρίκοι Hopf

Κάθε ομάδα τριών εξαγώνων συνδέεται με ένα ακόμα εξάγωνο ως «ουρά». Η ύπαρξη αυτής της «ουράς» δίνει ένα φυσικό προσανατολισμό στη συνιστώσα του κρίκου που το περιέχει. Αν αγνοήσουμε τον προσανατολισμό το σύνολο $T(G)$ θα αποτελείται τελικά από τετριμμένους κρίκους και από μη προσανατολισμένους κρίκους Hopf, οι οποίοι όπως θα δούμε παρακάτω, είναι αμφίχειρες. Άρα, βάσει του Θεωρήματος 2.4 δεν μπορούμε να αποφανθούμε για την ιδιότητα της αμφιχειριότητας του G .

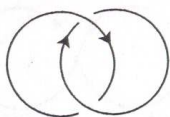
Για να αποφύγουμε αυτό το πρόβλημα θα πρέπει να ονομάσουμε τις κορυφές του παραπάνω μοριακού γραφήματος, όπου οι κορυφές ονομάζονται N ή O (δεν ονομάζουμε τον άνθρακα) και τοποθετούμε ένα X στις κορυφές που η «ουρά» παραμένει ακίνητη ώστε να ελέγχουμε τον προσανατολισμό καθώς θα εφαρμόσουμε τη μέθοδο του Kauffman. Πιο συγκεκριμένα, αν μπορούσαμε να μετασχηματίσουμε το γράφημα του προσανατολισμένου μοριακού κρίκου Hopf στην κατοπτρική του εικόνα, τότε ο μετασχηματισμός αυτός θα έστειλε κάθε N σε N , κάθε O σε O και κάθε X σε X . Η εικόνα στα δεξιά του σχήματος 2.9 προέκυψε με την τοποθέτηση των παραπάνω στο μοριακό μας γράφημα.

Έστω G το εμφυτευμένο γράφημα, που φαίνεται στα αριστερά του Σχήματος 2.10.



Σχήμα 2.10 Αυτή η σήμανση δίνει προσανατολισμό στον Hopf κρίκο και τον κάνει τοπολογικώς μη αμφίχειρα

Ο προσανατολισμένος κρίκος Hopf που αντιστοιχεί στο αριστερό μόριο του Σχήματος 2.10 δίνεται στο Σχήμα 2.11. Η κατοπτρική του εικόνα είναι ο κρίκος Hopf με ίδιο προσανατολισμό, αλλά αντίθετες διασταυρώσεις. Όπως δείχνουμε παρακάτω ο προσανατολισμένος κρίκος Hopf είναι μη αμφίχειρας και άρα και το μοριακό γράφημα G είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο.

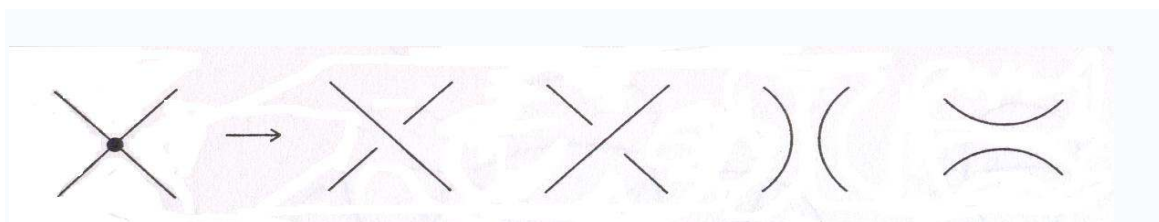


Σχήμα 2.11 Προσανατολισμένος κρίκος Hopf

Επιπλέον, το σύνολο $T(G)$ αποτελείται από πολλούς τετριμμένους κρίκους και πολλούς κρίκους Hopf, των οποίων κάθε συνιστώσα περιλαμβάνει έξι O , αλλά δεν περιλαμβάνουν όλοι οι κρίκοι Hopf X , ή τον ίδιο αριθμό από N , ή τον ίδιο αριθμό από κορυφές χωρίς όνομα (που προέρχονται από τα άτομα του άνθρακα). Το σημαντικό είναι ότι κάποιοι κρίκοι Hopf του συνόλου $T(G)$ έχουν ίδιο γράφημα με το αριστερό γράφημα του Σχήματος 2.10 G , αλλά κανένα δεν έχει γράφημα σαν της κατοπτρικής εικόνας του G , που φαίνεται στα δεξιά του ίδιου σχήματος. Επομένως, από το Θεώρημα 2.4 προκύπτει άμεσα ότι το γράφημα G είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο.

Ας έρθουμε τώρα στα γραφήματα άκαμπτων κορυφών. Ο Kauffman (1989) ανακάλυψε, ανεξάρτητα από τα πολυώνυμα γραφημάτων, μία απλούστερη αναλλοίωτη, η οποία είναι το ίδιο αποτελεσματική στο να μας οδηγεί σε ασφαλή συμπεράσματα για την αμφιχειρία ενός γραφήματος άκαμπτων κορυφών με όλες του τις κορυφές βαθμού τέσσερα. Παρουσιάζουμε αυτήν την αναλλοίωτη.

Για κάθε εμφυτευμένο γράφημα άκαμπτων κορυφών G , του οποίου όλες οι κορυφές έχουν βαθμό τέσσερα, ορίζουμε ως $C(G)$ το σύνολο των κόμβων και κρίκων που προκύπτουν από το G με την αντικατάσταση όλων των δίσκων-κορυφών και των τεσσάρων πλευρών που προσπίπτουν σε κάθε έναν από αυτούς, με κάθε μία από τις παρακάτω τέσσερις εικόνες:



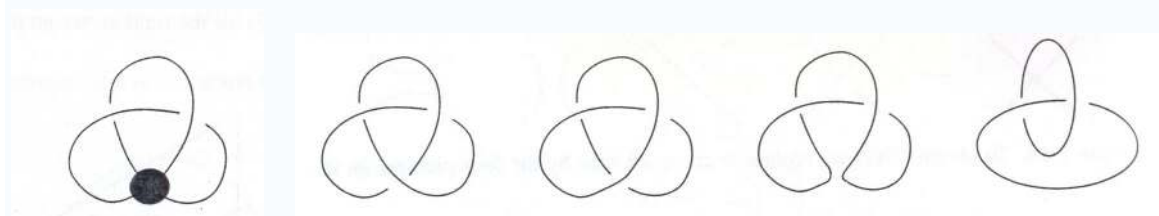
Σχήμα 2.12 Το σύνολο $C(G)$ προκύπτει με την αντικατάσταση κάθε δίσκου-κορυφής με τις τέσσερις εικόνες δεξιά

Άρα, αν n είναι ο αριθμός των δίσκων-κορυφών στο γράφημα G , τότε το σύνολο $C(G)$ θα περιέχει 4^n διαγράμματα κόμβων, πιθανώς με επαναλήψεις. Τέλος, στο $C(G)$ επιτρέπουμε ισοτοπία. Ο Kauffman απέδειξε ότι το σύνολο $C(G)$ αποτελεί τοπολογική αναλλοίωτη για κάθε εμφυτευμένο γράφημα άκαμπτων κορυφών G , και από αυτό το αποτέλεσμα προκύπτει το παρακάτω:

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.5. (Kauffman; 1989) Έστω G ένα γράφημα άκαμπτων κορυφών με βαθμό όλων των κορυφών τέσσερα, το οποίο είναι εμφυτευμένο στον \mathbb{R}^3 . Αν υπάρχει ένα στοιχείο του $C(G)$ το οποίο είναι μη αμφίχειρο και η κατοπτρική του εικόνα δεν περιέχεται στο $C(G)$, τότε το G είναι μη αμφίχειρο ως γράφημα άκαμπτων κορυφών.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω G αμφίχειρο γράφημα άκαμπτων κορυφών με βαθμό όλων των κορυφών τέσσερα, δηλαδή $G \sim G^*$. Επειδή το σύνολο $C(G)$ αποτελεί τοπολογική αναλλοίωτη, θα είναι $C(G) = C(G^*)$. Έστω τώρα ότι το σύνολο $C(G)$ περιέχει ένα μη αμφίχειρο κόμβο ή κρίκο L και δεν περιέχει την κατοπτρική του εικόνα L^* . Από τη κατασκευή του $C(G)$, το σύνολο $C(G^*)$ θα πρέπει να περιέχει τη καμπύλη L^* , οπότε $C(G) \neq C(G^*)$, άτοπο. \square

Θα εφαρμόσουμε το Θεώρημα 2.5 στο γράφημα άκαμπτων κορυφών στα αριστερά του Σχήματος 2.13, ενώ τα στοιχεία του συνόλου $C(G)$ παρουσιάζονται στα δεξιά του ίδιου σχήματος.



Σχήμα 2.13 Ένα γράφημα άκαμπτων κορυφών και το σύνολο $C(G)$

Επειδή το σύνολο $C(G)$ περιέχει τον κόμβο trefoil αλλά όχι την κατοπτρική του εικόνα, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι το γράφημα άκαμπτων κορυφών είναι μη αμφίχειρο.

2.2 ΠΟΛΥΩΝΥΜΑ ΚΟΜΒΩΝ

Σε αυτή τη παράγραφο θα μελετήσουμε μια πολυωνυμική αναλλοίωτη προσανατολισμένων κόμβων και κρίκων. Δύο ισοτοπικοί κρίκοι δηλαδή, θα έχουν το ίδιο πολυώνυμο. Αν λοιπόν ο L είναι ένας προσανατολισμένος κρίκος ο οποίος είναι ισοτοπικός με την κατοπτρική του εικόνα L^* (βλέπε Ορισμό 1.8), τότε το πολυώνυμο του L και του L^* θα είναι το ίδιο. Αν όμως οι L και L^* έχουν το ίδιο πολυώνυμο, δεν σημαίνει ότι ο L είναι αμφίχειρας. Αντίστοιχα, αν τα πολυώνυμα διαφέρουν, τότε μπορούμε άμεσα να αποφανθούμε ότι ο κρίκος L είναι μη αμφίχειρας.

Το πολυώνυμο που θα μελετήσουμε καλείται HOMFLYPT και ονομάστηκε έτσι προς τιμή εκείνων που το ανακάλυψαν: Hoste, Ocneanu, Millet, Freyd, Lickorish, Yetter, Przytycki και Traczyk (1985). Το πολυώνυμο HOMFLYPT, γνωστό και ως P -πολυώνυμο, είναι ένα πολυώνυμο Laurent, έχει δηλαδή θετικούς και αρνητικούς εκθέτες στις δυνάμεις που περιλαμβάνει.

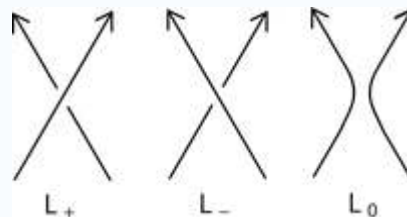
Για να ορίσουμε και να υπολογίσουμε το πολυώνυμο HOMFLYPT ενός κρίκου L , δίνουμε κατ' αρχάς προσανατολισμό στο διάγραμμα του κρίκου, επιλέγοντας προσανατολισμό για την κάθε συνιστώσα του. Σημειώνουμε ότι δύο προσανατολισμένοι κρίκοι είναι ισοτοπικοί αν και μόνο αν διαφέρουν κατά προσανατολισμένες κινήσεις Reidemeister. Ξεχωρίζουμε δύο διαφορετικές προσανατολισμένες διασταυρώσεις σε θετικές και αρνητικές:



Σχήμα 2.14 Είδη διασταυρώσεων

Το P -πολυώνυμο $P(L)$ έχει δύο μεταβλητές m και l και ορίζεται από το διάγραμμα του προσανατολισμένου κρίκου μέσω των τριών αξιωμάτων που ακολουθούν:

1. Αν K ο τετριμμένος κόμβος, τότε $P(K) = 1$.
2. Υποθέτουμε ότι L_+, L_-, L_0 είναι προσανατολισμένα διαγράμματα κρίκων που είναι παντού ίδια εκτός από μία διασταύρωση, όπου διαφέρουν κατά μία θετική, αρνητική και μηδενική διασταύρωση αντίστοιχα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.15.



Σχήμα 2.15 Τα L_+, L_-, L_0 διαφέρουν μόνο σε αυτή τη διασταύρωση

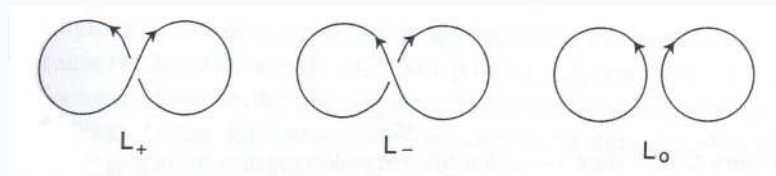
Τότε: $l \cdot P(L_+) + l^{-1} \cdot P(L_-) + m \cdot P(L_0) = 0$.

3. Το πολυώνυμο $P(L)$ δεν αλλάζει από ισοτοπία στο L .

Από το τρίτο αξίωμα έπεται ότι το P -πολυώνυμο είναι ανεξάρτητο της επιλογής του διαγράμματος του κρίκου και αποδείχτηκε ότι καθορίζεται μοναδικά από τα τρία αξιώματα που προαναφέραμε.

Δίνουμε τώρα κάποια παραδείγματα υπολογισμού του P -πολυωνύμου.

1. Έστω L προσανατολισμένος τετριμμένος κρίκος αποτελούμενος από δύο συνιστώσες. Τότε, όπως φαίνεται και στο σχήμα παρακάτω, τα L_+, L_- είναι ισοτοπικά με τον τετριμμένο κόμβο και άρα θα ισχύει ότι $P(L_+) = P(L_-) = P(\text{unknot}) \stackrel{\text{1ο Αξίωμα}}{=} 1$.



Σχήμα 2.16 Τα L_+, L_-, L_0

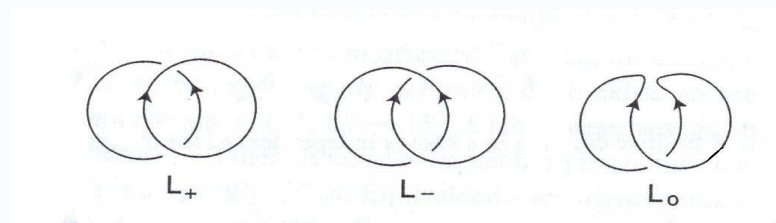
Από το δεύτερο αξίωμα τώρα προκύπτει ότι:

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

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

Αν και ο κρίκος L είναι η ένωση δύο τετριμμένων κόμβων, το πολυώνυμό του δεν ισούται με δύο.

2. Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω θα υπολογίσουμε το πολυώνυμο του Hopf link. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.17, ο κρίκος L_0 είναι ισοτοπικός με τον τετριμμένο κόμβο και ο κρίκος L_+ ισοτοπικός με τον κρίκο του οποίου το πολυώνυμο υπολογίσαμε στο προηγούμενο παράδειγμα.

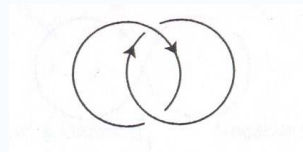


Σχήμα 2.17 Ο L_- είναι ο προσανατολισμένος Hopf link

$$\text{Άρα } P(L_0) = P(\text{unknot}) \stackrel{1\text{o Αξίωμα}}{=} 1 \text{ και } P(L_+) \stackrel{3\text{o Αξίωμα}}{=} -m^{-1} \cdot (l + l^{-1}).$$

Από το δεύτερο αξίωμα τώρα προκύπτει ότι $P(L_-) = l^3 \cdot m^{-1} + l \cdot m^{-1} - l \cdot m$ και άρα $P(L_-) = l^3 \cdot m^{-1} + l \cdot m^{-1} - l \cdot m$.

3. Παρατηρούμε ότι αν αλλάξουμε τον προσανατολισμό μίας από τις συνιστώσες του Hopf link όπως φαίνεται και στο σχήμα, τότε το P -πολυώνυμο γίνεται $P(L) = l^{-3} \cdot m^{-1} + l^{-1} \cdot m^{-1} - l^{-1} \cdot m$, δηλαδή ο όρος l αντικαταστάθηκε από τον όρο l^{-1} .



Σχήμα 2.18 Ένας Hopf link διαφορετικά προσανατολισμένος από τον L_- του Σχ. 2.4

4. Σε αντίθεση με τους κρίκους ο προσανατολισμός δεν επηρεάζει το P -πολυώνυμο στους κόμβους (αλλά ούτε και στους κρίκους, αν αλλάξουμε τον προσανατολισμό όλων των συνιστωσών): Μια θετική ή αρνητική διασταύρωση παραμένει θετική ή αρνητική αν αντιστραφεί ο προσανατολισμός.

Τα πολυώνυμα κρίκων είναι αρκετά χρήσιμα στο να ξεχωρίζουμε μη ισοτοπικούς κρίκους. Το αντίστροφο όμως δεν ισχύει, δηλαδή υπάρχουν μη ισοτοπικοί προσανατολισμένοι κρίκοι με το ίδιο πολυώνυμο HOMFLYPT. Ο Kanenobu (1986) απέδειξε ότι υπάρχουν άπειροι κόμβοι με το ίδιο πολυώνυμο. Πιο συγκεκριμένα, ένα ζευγάρι μεταλλαγμένων κόμβων (*mutant knots*) έχουν το ίδιο πολυώνυμο HOMFLYPT (T. Kanenobu, *Infinitely many knots with the same polynomial invariant*, Proc. Am. Math. Soc. **97**, 158-161, 1986). Δύο κόμβοι καλούνται μεταλλαγμένοι όταν τα διαγράμματά τους διαφέρουν τοπικά στη περιοχή ενός δίσκου, ο οποίος έχει υποστεί μία πλήρη περιστροφή στο χώρο.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.6. Έστω L προσανατολισμένος κρίκος με P -πολυώνυμο $P(L)$. Έστω $\bar{P}(L)$ το πολυώνυμο που προκύπτει από το $P(L)$ αν αντικαταστήσουμε το l με l^{-1} . Τότε $P(L^*) = \bar{P}(L)$. Άρα, αν $P(L) \neq \bar{P}(L)$ τότε ο L δεν είναι αμφίχειρας ως προσανατολισμένος κρίκος. Αν ο L είναι κόμβος και $P(L) \neq \bar{P}(L)$, τότε ο L δεν είναι αμφίχειρας ανεξαρτήτως προσανατολισμού.

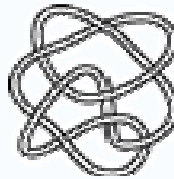
ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω L^* η κατοπτρική εικόνα του προσανατολισμένου κρίκου L . Τότε ο L^* προκύπτει από την αλλαγή όλων των διασταυρώσεων του L , δηλαδή ο L^* έχει θετικές διασταυρώσεις εκεί που ο L έχει αρνητικές και αντίστροφα. Έτσι, καθώς σταδιακά αλλάζουμε τις διασταυρώσεις για τον υπολογισμό του πολυωνύμου του L^* , οι ρόλοι των L_+, L_- είναι οι αντίστροφοι των L_+, L_- στον υπολογισμό του πολυωνύμου του

L . Από το δεύτερο αξίωμα του ορισμού του πολυώνυμου προκύπτει ότι για το L^* και για κάθε πιο απλό κρίκο που επάγει ο L^* , οι ρόλοι των l και l^{-1} είναι οι αντίστροφοι απ' ό τι ήταν για τον L στην εξίσωση $l \cdot P(L_+) + l^{-1} \cdot P(L_-) + m \cdot P(L_0) = 0$. Άρα, στο $P(L^*)$, οι όροι l και l^{-1} έχουν αντιστραφεί από εκείνους στο $P(L)$ και άρα $P(L^*) = \bar{P}(L)$.

Γνωρίζουμε ότι το P -πολυώνυμο είναι μία τοπολογική αναλλοίωτη, οπότε αν υπάρχει ισοτοπία από τον προσανατολισμένο κρίκο L στον προσανατολισμένο κρίκο L^* , τότε $P(L) = P(L^*) = \bar{P}(L)$. Άρα, αν $P(L) \neq \bar{P}(L)$, τότε ο L δεν είναι αμφίχειρας ως προσανατολισμένος κρίκος.

Τέλος, αν L κόμβος, τότε και επειδή ο προσανατολισμός δεν επηρεάζει το πολυώνυμο ενός κόμβου, η σχέση $P(L) \neq \bar{P}(L)$ οδηγεί στο συμπέρασμα ότι ο κόμβος L δεν είναι αμφίχειρας, ανεξάρτητα από τον προσανατολισμό του. \square

Το παραπάνω θεώρημα, όμως, δεν εντοπίζει όλους τους μη αμφίχειρες κόμβους και προσανατολισμένους κρίκους. Δηλαδή, αν $P(L) = P(L^*)$ δεν έπεται ότι $L \sim L^*$. Σημειώνουμε ότι αν $P(L) = P(L^*)$, το πολυώνυμο $P(L)$ είναι συμμετρικό ως προς τα l και l^{-1} . Για παράδειγμα, το ζεύγος κόμβων 9_{42} και 9_{42}^* (*knot table - Rolfsen, 1976*, βλέπε Σχήμα 2.19), έχει αυτήν την ιδιότητα, καθώς το πολυώνυμό του είναι $P(9_{42}) = (-2 \cdot l^{-2} - 3 - 2 \cdot l^2) + m \cdot (l^{-2} + 4 + l^2) - m^4 = P(9_{42}^*)$. Στην τελευταία παράγραφο του κεφαλαίου θα δείξουμε ότι ο κόμβος 9_{42} δεν είναι αμφίχειρας.



Σχήμα 2.19 Ο κόμβος 9_{42}

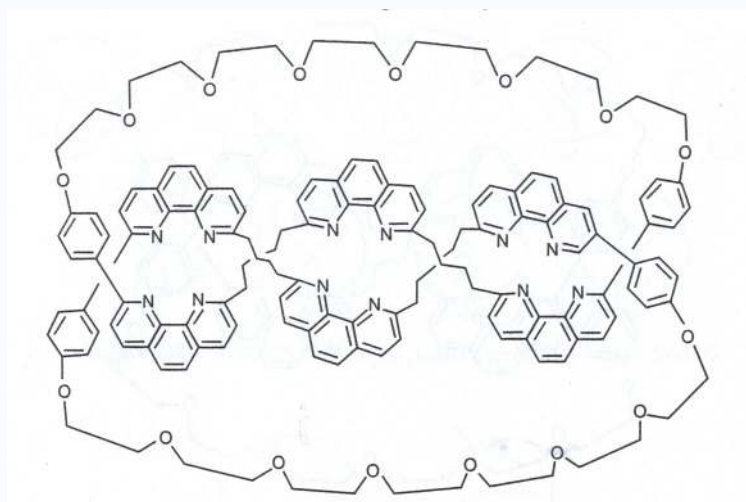
Παρ' όλα αυτά, το γεγονός ότι $P(L) = P(L^*)$ για κάποιον προσανατολισμένο κρίκο L , είναι μία ισχυρή ένδειξη πιθανής αμφιχειρίας. Το παραπάνω θεώρημα αποτελεί ένα αρκετά χρήσιμο εργαλείο. Για παράδειγμα, ο προσανατολισμένος κρίκος Hopf του παραδείγματος 2 που προαναφέραμε έχει πολυώνυμο $P(L) = l^3 \cdot m^{-1} + l \cdot m^{-1} - l \cdot m$ και επειδή $P(L) \neq \bar{P}(L)$, το θεώρημα μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι ο προσανατολισμένος Hopf link δεν είναι αμφίχειρας. Η κατοπτρική εικόνα του προσανατολισμένου Hopf link L^* είναι ισοτοπική με τον L' του παραδείγματος 3, και από το θεώρημα συμπεραίνουμε ότι $P(L^*) = P(L') = \bar{P}(L)$, συμπέρασμα στο οποίο καταλήξαμε και στο παραπάνω παράδειγμα 3. Αν αγνοήσουμε όμως τον προσανατολισμό στον Hopf link, τότε αυτός είναι αμφίχειρας, δηλαδή είναι ισοτοπικός με την κατοπτρική του εικόνα.

Το Θεώρημα 2.6 μπορεί να εφαρμοσθεί σε κόμβους χωρίς να μας ενδιαφέρει ο προσανατολισμός. Για παράδειγμα, ο κόμβος trefoil έχει P -πολυώνυμο $-l^4 + l^2 \cdot m^2 - 2 \cdot l^2$, ανεξάρτητα από τον προσανατολισμό του. Το πολυώνυμο αυτό δεν

είναι συμμετρικό ως προς τους όρους l και l^{-1} , οπότε μπορούμε άμεσα να αποφανθούμε ότι ο κόμβος trefoil δεν είναι αμφίχειρας. Η πρώτη απόδειξη ότι ο αριστερόστροφος trefoil είναι διαφορετικός από τον δεξιόστροφο trefoil έγινε από τον Max Dehn το 1914, δείχνοντας ότι τα τοπολογικά τους συμπληρώματα είναι μη ομοιομορφικά (M. Dehn, *Die beiden Kleeblattschlingen*, Math. Ann. **75**, 402-413, 1914).

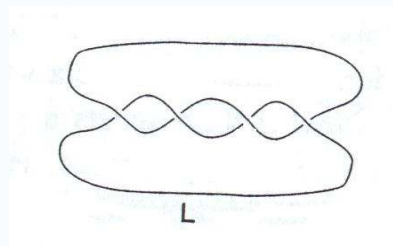
Το Θεώρημα 2.6 μπορεί να εφαρμοστεί και σε κρίκους ως εξής: Έστω L' μία επιλογή προσανατολισμού ενός κρίκου L . Από Πρόταση 1.11 (Κεφάλαιο 1) αν δείξουμε ότι L' μη ισοτοπικός με L'' για κάθε επιλογή προσανατολισμού L'' του L , τότε και ο κρίκος L δεν είναι ισοτοπικός με την κατοπτρική του εικόνα L^* , δηλαδή ο κρίκος L είναι μη αμφίχειρας. Αυτό θα το εφαρμόσουμε στο παρακάτω παράδειγμα.

- Ας θεωρήσουμε τώρα τον μοριακό κρίκο (4,2)-torus link που συνέθεσαν το 1994 οι Nierengarten, Dietrich-Buchecker και Sauvage (J.-F. Nierengarten, C. Dietrich-Buchecker, J.-P. Sauvage, *Synthesis of a doubly interlocked [2]-catenane*, J. Am. Chem. Soc. **116**, 375-376, 1994).



Σχήμα 2.20 Ο μοριακός κρίκος (4,2)-torus link

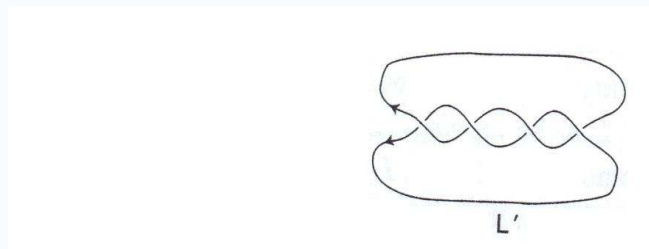
Το σύνολο $T(G)$ αποτελείται από πολλούς τετριμμένους κρίκους και από πολλούς κρίκους (4,2)-torus link.



Σχήμα 2.21 Ο κρίκος (4,2)-torus link

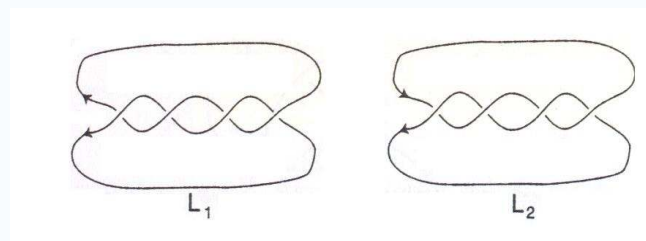
Αν λοιπόν δείξουμε ότι ο κρίκος (4,2)-torus link είναι μη αμφίχειρας, τότε επειδή το σύνολο $T(G)$ περιέχει μόνο τον (4,2)-torus link και όχι την κατοπτρική του εικόνα, θα καταλήξουμε στο ότι το μοριακό γράφημα είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο, και άρα και χημικώς μη αμφίχειρο.

Για να δείξουμε ότι ο κρίκος (4,2)-torus link είναι μη αμφίχειρας, δίνουμε έναν τυχαίο προσανατολισμό στον κρίκο L , παίρνοντας τον προσανατολισμένο κρίκο L' , και υπολογίζουμε το $P(L')$.



Σχήμα 2.22 Ο προσανατολισμένος (4,2)-torus κρίκος

$P(L') = -l^{-5} \cdot m^{-1} - l^{-3} \cdot m^{-1} + m \cdot l^{-5} - m^3 \cdot l^{-3} + 3 \cdot m \cdot l^{-3}$. Αν ήταν $L \sim L^*$, τότε βάσει της Πρότασης 1.11, ο προσανατολισμένος (4,2)-torus κρίκος L' θα μπορούσε να ισοτοπηθεί στον L''^* , για κάποιο προσανατολισμό L'' . Επειδή ο L''^* αποτελείται από δύο συνιστώσες, υπάρχουν τέσσερις τρόποι να προσανατολιστεί, δύο από τους οποίους παρουσιάζονται στο Σχήμα 2.23.



Σχήμα 2.23 Διαφορετικοί προσανατολισμοί του (4,2)-torus κρίκου

Υπάρχουν δύο ακόμα τρόποι να δώσουμε προσανατολισμό στον L^* , οι οποίοι προκύπτουν από την αντιστροφή των προσανατολισμών και στις δύο συνιστώσες των κρίκων L_1 και L_2 και άρα θα έχουν το ίδιο P -πολυώνυμο με τους L_1 και L_2 αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι ο L_1 είναι η κατοπτρική εικόνα του L' και άρα: $P(L_1) = -l^5 \cdot m^{-1} - l^3 \cdot m^{-1} + m \cdot l^5 - m^3 \cdot l^3 + 3 \cdot m \cdot l^3 \neq P(L')$. Υπολογίζουμε το P -πολυώνυμο του L_2 : $P(L_2) = -m^{-1} \cdot l^{-3} - m \cdot l^{-1} - m^{-1} \cdot l^{-5} + m \cdot l^{-3} \neq P(L')$.

Επειδή υποθέσαμε ότι ο L' είναι ισοτοπικός με τον L^* με κάποιο προσανατολισμό, το P -πολυώνυμο του L' θα έπρεπε να ισούται με το P -πολυώνυμο του L_1 ή του L_2 . Άτοπο. Άρα ο μη προσανατολισμένος (4,2)-torus κρίκος είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρας και επομένως και ο μοριακός (4,2)-torus κρίκος είναι χημικώς μη αμφίχειρας.

2.3 ΕΝΑΛΛΑΣΣΟΜΕΝΟΙ ΚΟΜΒΟΙ

Μία κατηγορία κόμβων που μπορούμε πιο εύκολα να ανιχνεύσουμε την ιδιότητα της αμφιχειρίας είναι οι *εναλλασσόμενοι* κόμβοι.

ΟΡΙΣΜΟΣ 2.7. Ένας κόμβος καλείται *εναλλασσόμενος* (*alternating*) αν στην προβολή του οι διασταυρώσεις εναλλάσσονται πάνω και κάτω, καθώς κανείς κινείται πάνω στον κόμβο με μια συγκεκριμένη φορά.

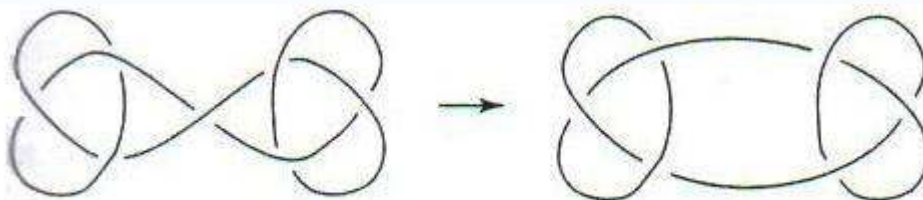
ΟΡΙΣΜΟΣ 2.8. Ένα διάγραμμα ενός κόμβου καλείται *ανηγμένο* (*reduced*) αν δεν περιλαμβάνει διασταυρώσεις της μορφής:



Σχήμα 2.24 Μη ανηγμένα διαγράμματα

Μέσα στους μαύρους δίσκους μπορεί να υπάρχουν άλλες διασταυρώσεις

Για παράδειγμα, οι παρακάτω κόμβοι είναι ισοτοπικοί, αλλά ο δεξιός έχει μία διασταύρωση λιγότερη. Η ιδέα που οδήγησε στον παραπάνω ορισμό ήταν η εύρεση αναλλοίωτης που να σχετίζεται με τον αριθμό των διασταυρώσεων του κόμβου.



Σχήμα 2.25 Εναλλασσόμενος κόμβος με μία λιγότερη διασταύρωση

Για ένα κόμβο ή κρίκο K ορίζουμε τον *αριθμό ελάχιστων διασταυρώσεων* (*crossing number*) του K , συμβολικά $c(K)$, ως τον ελάχιστο αριθμό διασταυρώσεων ενός διαγράμματος του K στο σύνολο όλων των διαγραμμάτων του. Είναι προφανές ότι ο αριθμός ελάχιστων διασταυρώσεων είναι αναλλοίωτη ισοτοπίας του K , όμως είναι πάρα πολύ δύσκολο στη πράξη να βρεθεί ένα διάγραμμα του K που να τον πραγματοποιεί.

Χρησιμοποιώντας πολυώνυμα κόμβων, οι Murasugi (K. Murasugi, *Jones polynomials and classical conjectures in knot theory*, *Topology* **26**, 187-194, 1987) και Thistlethwaite (M. Thistlethwaite, *A spanning tree expansion of the Jones polynomial*, *Topology* **27**, 311-318, 1987) απέδειξαν ανεξάρτητα το παρακάτω πολύ ισχυρό θεώρημα, το οποίο ήταν μία εικασία του Tait και το οποίο παραθέτουμε χωρίς απόδειξη.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.9. Αν ένας κόμβος έχει ένα ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα, τότε αυτό το διάγραμμα έχει τον ελάχιστο αριθμό διασταυρώσεων από κάθε άλλο διάγραμμα του κόμβου.

Παράδειγμα του παραπάνω θεωρήματος είναι ο δεξιός κόμβος του Σχήματος 2.25, ο οποίος είναι ανηγμένος και εναλλασσόμενος. Δίνουμε τώρα τον ορισμό του αριθμού συστροφής, συμβολικά Wr , ο οποίος είναι πολύ χρήσιμος στον εντοπισμό της αμφιχειρίας ενός εναλλασσόμενου κόμβου.

ΟΡΙΣΜΟΣ 2.10. Έστω ένα διάγραμμα ενός προσανατολισμένου κρίκου. Ορίζουμε τον αριθμό συστροφής (*writhing number*) του διαγράμματος αυτού ως το άθροισμα των $+1$, για κάθε θετική διασταύρωση, και -1 , για κάθε αρνητική διασταύρωση του κρίκου.

Δηλαδή, $Wr(K) = \sum_{i=1}^n (\delta_i)$, όπου $\delta_i = \begin{cases} +1, & \text{για θετικές διασταυρώσεις} \\ -1, & \text{για αρνητικές διασταυρώσεις} \end{cases}$.

Ο αριθμός συστροφής δεν είναι τοπολογική αναλλοίωτη κόμβων, εφόσον η πρώτη κίνηση Reidemeister πάντα θα αλλάζει τον αριθμό συστροφής κατά ± 1 . Για παράδειγμα, στο Σχήμα 2.25 παρουσιάζεται ο ίδιος κόμβος, αλλά ο αριθμός συστροφής της μίας προβολής είναι -5 ενώ της άλλης -6 , χωρίς να εξαρτώνται από τον προσανατολισμό που θα δώσουμε. Επίσης, ο Thistlethwaite (1988) απέδειξε το παρακάτω:

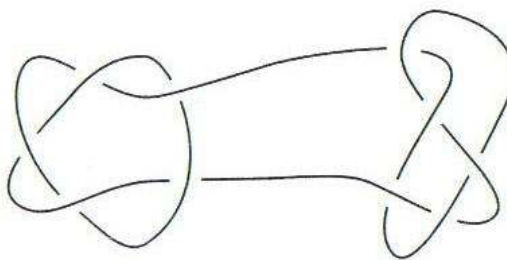
ΘΕΩΡΗΜΑ 2.11. Δύο οποιαδήποτε ανηγμένα εναλλασσόμενα διαγράμματα ενός εναλλασσόμενου προσανατολισμένου κόμβου έχουν τον ίδιον αριθμό συστροφής.

Από το παραπάνω θεώρημα προκύπτει το εξής:

ΠΟΡΙΣΜΑ 2.12. Αν ένας εναλλασσόμενος προσανατολισμένος κόμβος είναι αμφίχειρας, τότε ο αριθμός συστροφής κάθε ανηγμένου εναλλασσόμενου διαγράμματός του θα είναι μηδέν.

Πράγματι, έστω L προσανατολισμένος κόμβος με ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα που ο αριθμός συστροφής του είναι w . Η κατοπτρική εικόνα αυτού του διαγράμματος είναι ένα ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα του προσανατολισμένου κόμβου L^* , που είναι η κατοπτρική εικόνα του L . Κάθε θετική διασταύρωση στο διάγραμμα του L^* αντιστοιχεί σε μία αρνητική διασταύρωση στο διάγραμμα του L και αντίστροφα κάθε αρνητική διασταύρωση στο διάγραμμα του L^* αντιστοιχεί σε μία θετική διασταύρωση στο διάγραμμα του L . Άρα ο αριθμός συστροφής του διαγράμματος του L^* είναι $-w$. Αν L αμφίχειρας, τότε είναι ισοτοπικός με τον L^* και άρα τα L και L^* είναι ανηγμένα εναλλασσόμενα διαγράμματα ισοτοπικών κόμβων και από το θεώρημα προκύπτει ότι $w = -w \Rightarrow w = 0$.

Αν λοιπόν έχουμε ένα ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα ενός προσανατολισμένου κόμβου με μη μηδενικό αριθμό συστροφής, τότε άμεσα καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι ο προσανατολισμένος κόμβος είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρας. Αντιθέτως όμως, αν σε ένα ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα ενός προσανατολισμένου κόμβου ο αριθμός συστροφής είναι ίσος με μηδέν, αυτό δεν σημαίνει απαραίτητα ότι ο προσανατολισμένος κόμβος είναι αμφίχειρας. Για παράδειγμα ο παρακάτω ανηγμένος και εναλλασσόμενος κόμβος δεν είναι τοπολογικώς αμφίχειρας γιατί το P -πολυώνυμό του δεν είναι συμμετρικό ως προς τα l και l^{-1} , αλλά ο αριθμός συστροφής του είναι ίσος με μηδέν.

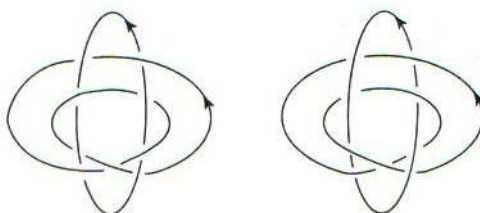


Σχήμα 2.26 Τοπολογικώς αμφίχειρας κόμβος με αριθμό περιέλιξης ίσο με μηδέν

Επιπλέον, αν ο αριθμός συστροφής ενός προσανατολισμένου αηγημένου εναλλασσόμενου κρίκου δεν είναι ίσος με μηδέν, δεν σημαίνει ότι ο μη προσανατολισμένος κόμβος δεν είναι αμφίχειρας. Για παράδειγμα, ο κρίκος Hopf είναι αμφίχειρας ως μη προσανατολισμένος κρίκος, αλλά έχει αηγημένο εναλλασσόμενο διάγραμμα με αριθμό συστροφής ίσο με δύο (Σχήμα 2.17).

ΟΡΙΣΜΟΣ 2.13. Έστω K_1, K_2 διαγράμματα προσανατολισμένων κόμβων, που θεωρούνται συνιστώσες ενός κρίκου. Ορίζουμε τον αριθμό συνέλιξης Lk (linking number) των K_1, K_2 , συμβολικά $Lk(K_1, K_2)$, να ισούται με το ημίαθροισμα των $+1$ και -1 για κάθε θετική ή αρνητική αντίστοιχα διασταύρωση μεταξύ των K_1 και K_2 .

Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε τους κρίκους 9_{41}^2 και 9_{61}^2 που παρουσιάζονται στα αριστερά και στα δεξιά του Σχήματος 2.27 αντίστοιχα.



Σχήμα 2.27 Οι προσανατολισμένοι κρίκοι 9_{41}^2 και 9_{61}^2

Στον κρίκο 9_{41}^2 , ο οποίος είναι εναλλασσόμενος, είναι $Lk(9_{41}^2) = 0$, αφού υπάρχουν τέσσερις θετικές και τέσσερις αρνητικές διασταυρώσεις μεταξύ των δύο συνιστωσών του παραπάνω κρίκου, ενώ στον κρίκο 9_{61}^2 , ο οποίος δεν είναι εναλλασσόμενος, είναι $Lk(9_{61}^2) = -4$, γιατί όλες οι οκτώ διασταυρώσεις είναι αρνητικές.

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ 2.14.

1. Από τον ορισμό του αριθμού συνέλιξης προκύπτει άμεσα ότι $Lk(K_1, K_2) = Lk(K_2, K_1)$.
2. Επειδή κάθε συνιστώσα του κρίκου θα πρέπει να διασταυρώνεται άρτιο αριθμό φορών με οποιαδήποτε άλλη συνιστώσα του κρίκου, ο αριθμός συνέλιξης είναι πάντα ακέραιος αριθμός, $Lk \in \mathbb{Z}$.

3. Αν αλλάξουμε τον προσανατολισμό στη μία από τις δύο συνιστώσες του κρίκου, τότε οι θετικές διασταυρώσεις γίνονται αρνητικές και αντίστροφα. Αν έστω συμβολίσουμε με K' τον κόμβο K με αντίθετο προσανατολισμό, τότε $Lk(K_1, K_2) = -Lk(K_1', K_2) = -Lk(K_1, K_2') = Lk(K_1', K_2')$.
4. Ο αριθμός συνέλιξης παραμένει αναλλοίωτος μέσω των τριών κινήσεων Reidemeister, αφού η πρώτη κίνηση προσθέτει ή αφαιρεί μία διασταύρωση στις δύο συνιστώσες του κρίκου, ενώ η δεύτερη κίνηση είτε προσθέτει μία αρνητική και μία θετική διασταύρωση, είτε τις αφαιρεί, οπότε ο αριθμός συνέλιξης δεν μεταβάλλεται και η τρίτη κίνηση δεν επηρεάζει τα πρόσημα των διασταυρώσεων. Άρα είναι αναλλοίωτη ισοτοπίας για κάθε προσανατολισμένο κρίκο $L \supseteq K_1 \cup K_2$. Άρα, αν $L \supseteq K_1 \cup K_2$ προσανατολισμένος κρίκος και h ένας ομοιομορφισμός του \mathbb{R}^3 , που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου, τότε $Lk[h(K_1), h(K_2)] = Lk(K_1, K_2)$. Αντίθετα αν h ομοιομορφισμός του \mathbb{R}^3 που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, επειδή θα αντιστρέψει όλες τις διασταυρώσεις του κρίκου, θα είναι $Lk[h(K_1), h(K_2)] = -Lk(K_1, K_2)$.

ΟΡΙΣΜΟΣ 2.15. Έστω Q το διάγραμμα ενός προσανατολισμένου κρίκου. Ορίζουμε $i(Q)$ να είναι το άθροισμα των $+1/-1$, για κάθε θετική/ αρνητική διασταύρωση μιας συνιστώσας του κρίκου με τον εαυτό της, όπου το άθροισμα γίνεται σε όλες τις συνιστώσες του κρίκου. Άρα αν $j(Q) = 2 \cdot \sum_{K_i, K_j \in Q} Lk(K_i, K_j)$, τότε $i(Q) = Wr(Q) - j(Q)$.

Αν ο Q είναι κόμβος, τότε $i(Q) = Wr(Q)$. Αν Q συμβολίζει τους κρίκους 9_{41}^2 ή 9_{61}^2 , τότε $i(Q) = 1$.

Όπως αναφέραμε παραπάνω, το είδος της διασταύρωσης σε ένα κόμβο δεν επηρεάζεται από τον προσανατολισμό του κόμβου και άρα ο αριθμός $i(Q)$ ενός κρίκου Q είναι ανεξάρτητος της επιλογής προσανατολισμού των συνιστωσών του Q .

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.16. (Flapan) Έστω L ένας μη προσανατολισμένος εναλλασσόμενος κρίκος και έστω L_1 και L_2 προσανατολισμένα ανηγμένα εναλλασσόμενα διαγράμματα του L . Τότε $i(L_1) = i(L_2)$. Αν ο μη προσανατολισμένος κρίκος L είναι αμφίχειρας, τότε $i(L_1) = 0$ και το L_1 έχει άρτιο αριθμό συστροφής.

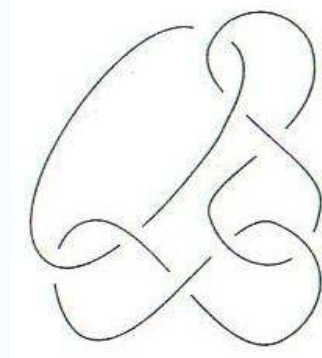
ΑΠΟΔΕΙΞΗ Κατ' αρχάς δίνουμε έναν τυχαίο προσανατολισμό στον L και θεωρούμε τα διαγράμματα L_1, L_2 με τον προσανατολισμό του L . Επειδή ο αριθμός συνέλιξης ενός προσανατολισμένου κρίκου για δύο συνιστώσες του είναι αναλλοίωτη, από τον ορισμό του έπεται ότι και η τιμή του j είναι αναλλοίωτη και άρα $j(L_1) = j(L_2)$. Από το Θεώρημα 2.11, είναι $Wr(L_1) = Wr(L_2)$ και από την εξίσωση $i(L_1) = Wr(L_1) - j(L_1)$ προκύπτει ότι $i(L_1) = i(L_2)$. Όμως, όπως αναφέραμε και παραπάνω, ο προσανατολισμός

ενός κρίκου δεν επηρεάζει την τιμή του i , και άρα $i(L_1) = i(L_2)$, ανεξάρτητα από τον προσανατολισμό τους.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι υπάρχει μία ισοτοπία του μη προσανατολισμένου κρίκου L στην κατοπτρική του εικόνα. Έστω L_1 ένα προσανατολισμένο ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα του L και έστω L_3 η κατοπτρική εικόνα του L_1 . Λόγω της υπόθεσής μας, ότι δηλαδή $L \sim L^*$, και ο L_3 θα είναι προσανατολισμένο ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα του L (μετά από κινήσεις ισοτοπίας) και άρα $i(L_1) = i(L_3)$. Από την άλλη, αφού ο κρίκος L_3 προκύπτει μετά από εναλλαγή όλων των θετικών και αρνητικών διασταυρώσεων στον L_1 , έχουμε ότι $i(L_3) = -i(L_1)$. Από τις σχέσεις αυτές προκύπτει ότι $i(L_3) = -i(L_3)$ και άρα $i(L_1) = i(L_3) = 0$. Αυτό σημαίνει ότι $Wr(L_1) = j(L_1)$, και από τον ορισμό του j , ο αριθμός συστροφής του κρίκου είναι πάντοτε άρτιος αριθμός. \square

Κάθε προσανατολισμένος κρίκος που είναι αμφίχειρας, είναι αμφίχειρας και χωρίς προσανατολισμό. Αν τώρα L προσανατολισμένος εναλλασσόμενος κρίκος που είναι αμφίχειρας, τότε από Πρόταση 2.12 ο αριθμός συστροφής οποιουδήποτε ανηγμένου εναλλασσόμενου διαγράμματος L_1 του L , είναι ίσος με μηδέν, $Wr(L_1) = 0$. Άρα, από Θεώρημα 2.16 $i(L_1) = 0$ οπότε $j(L_1) = 0$, άρα και $j(L) = 0$. Επομένως και $\sum_{K_i, K_j \in L} Lk(K_i, K_j) = 0$. Άρα: αν, $\sum_{K_i, K_j \in L} Lk(K_i, K_j) \neq 0$, τότε ο προσανατολισμένος κρίκος δεν είναι αμφίχειρας. Αυτό όμως δεν ισχύει για μη προσανατολισμένους κρίκους, αφού ο μη προσανατολισμένος κρίκος Hopf είναι αμφίχειρας, αλλά έχει μη μηδενικό αριθμό συνέλιξης.

Εφαρμόζοντας το Θεώρημα 2.16 στον κρίκο 8_3^3 , ο οποίος αποτελείται από τρεις συνιστώσες και παρουσιάζεται παρακάτω, παρατηρούμε ότι ανεξάρτητα από τον προσανατολισμό των συνιστωσών του, $i(8_3^3) = 2$, και άρα ο κρίκος 8_3^3 δεν είναι αμφίχειρας.

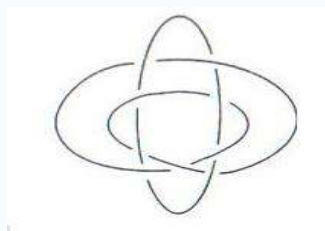


Σχήμα 2.28 Ο κρίκος 8_3^3

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.17. (*Flapan*) Κάθε αμφίχειρας μη προσανατολισμένος και εναλλασσόμενος κρίκος έχει άρτιο αριθμό ελάχιστων διασταυρώσεων.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Από Θεώρημα 2.9, κάθε ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα του κρίκου έχει ελάχιστο αριθμό διασταυρώσεων. Όπως αναφέραμε παραπάνω (Θεώρημα 2.16), αν ο κρίκος είναι επιπλέον αμφίχειρας, τότε ο αριθμός συστροφής κάθε ανηγμένου εναλλασσόμενου διαγράμματός του, L_1 , πρέπει να είναι άρτιος. Άρα θα έχει είτε περιττό πλήθος θετικών και περιττό πλήθος αρνητικών διασταυρώσεων, είτε άρτιο πλήθος θετικών και άρτιο πλήθος αρνητικών διασταυρώσεων. Σε κάθε περίπτωση, ο συνολικός αριθμός διασταυρώσεων του L_1 είναι άρτιος και ο L_1 έχει ελάχιστο αριθμό διασταυρώσεων. \square

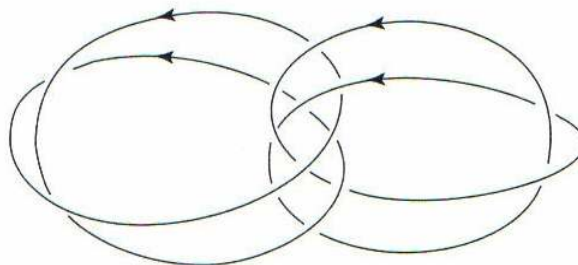
Εφαρμόζοντας το παραπάνω θεώρημα στον κρίκο 9_{41}^2 , παρατηρούμε ότι υπάρχει ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα του, το οποίο έχει περιττό πλήθος διασταυρώσεων και άρα δεν είναι αμφίχειρας.



Σχήμα 2.29 Ανηγμένο εναλλασσόμενο διάγραμμα του κρίκου 9_{41}^2

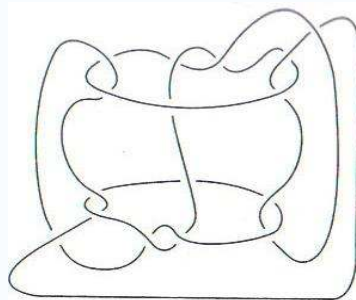
ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ 2.18

Το 1898, στην εργασία του για την θεωρία κόμβων, ο Tait είκασε ότι κάθε αμφίχειρας κόμβος ή κρίκος έχει άρτιο αριθμό ελάχιστων διασταυρώσεων. Το Θεώρημα 2.17 δείχνει ότι η εικασία του Tait είναι σωστή για εναλλασσόμενους κόμβους και κρίκους, όμως οι Liang και Mislow (*Topological chirality and achirality of links*, J.Math Chem. **18**, 1995) και οι Liang, Mislow και Flapan (*Amphicheiral links with odd crossing number*, J.Knot Theory Ramif. **7**, 1998) απέδειξαν ότι υπάρχουν μη εναλλασσόμενοι κρίκοι που είναι αμφίχειρες και έχουν περιττό αριθμό ελάχιστων διασταυρώσεων. Ένας τέτοιος κρίκος είναι ο 9_{61}^2 (Σχήμα 2.30), ο οποίος είναι αμφίχειρας μη εναλλασσόμενος και έχει αριθμό ελάχιστων διασταυρώσεων εννέα.



Σχήμα 2.30 Συμμετρική αναπαράσταση του μη προσανατολισμένου κρίκου 9_{61}^2

Για να δούμε ότι είναι αμφίχειρας, παρατηρούμε κατ' αρχάς ότι ο 9_{61}^2 είναι ισοτοπικός με τον κρίκο που φαίνεται στο Σχήμα 2.30, αν αγνοήσουμε τον προσανατολισμό. Ο παραπάνω κρίκος μπορεί να θεωρηθεί ως το σύνορο δύο λωρίδων του κρίκου Moebius, όπου η μία λωρίδα έχει μία δεξιόστροφη μισή στροφή, ενώ η άλλη έχει μία αριστερόστροφη μισή στροφή. Παρατηρούμε ότι αν αγνοήσουμε τους προσανατολισμούς και στρέψουμε τον κρίκο κατά 90° ως προς έναν οριζόντιο άξονα που διέρχεται από το κέντρο του διαγράμματος, τότε προκύπτει η κατοπτρική εικόνα του κρίκου και άρα ο κρίκος 9_{61}^2 είναι αμφίχειρας, κάτι που έρχεται σε αντίθεση με την εικασία του Tait. Οι Doll και Hoste (*A tabulation of oriented links*, Math. Compu. **57**, 1991) απέδειξαν ότι ο παραπάνω κρίκος δεν είναι αμφίχειρας όταν του δοθεί προσανατολισμός. Πιο συγκεκριμένα απέδειξαν ότι δεν υπάρχει προσανατολισμένος κρίκος με περιττό ελάχιστο αριθμό διασταυρώσεων μικρότερο του δέκα, που να είναι αμφίχειρας. Οι Hoste, Thistlethwaite και Weeks (*The first 1,701,936 knots*, Math. Intell. **20:4**, 1998) ανακάλυψαν έναν μη εναλλασσόμενο κόμβο με αριθμό ελάχιστων διασταυρώσεων ίσο με δεκαπέντε, ο οποίος είναι αμφίχειρας.



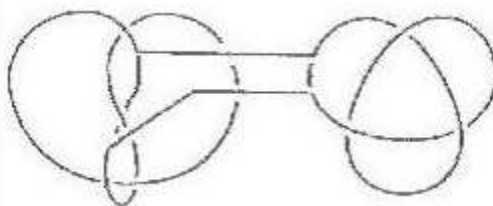
Σχήμα 2.31 Τοπολογικώς αμφίχειρας κόμβος με 15 διασταυρώσεις

Είναι λοιπόν σαφές ότι η εικασία του Tait, ότι δηλαδή κάθε αμφίχειρας κρίκος έχει άρτιο αριθμό ελάχιστων διασταυρώσεων, είναι εσφαλμένη για μη εναλλασσόμενους κόμβους και κρίκους.

Τέλος, το 1997, η Corrine Cerf [6] απέδειξε ότι κάθε προσανατολισμένος κρίκος που αποτελείται από άρτιο αριθμό συνιστωσών δεν είναι αμφίχειρας. Υπάρχουν όμως και εναλλασσόμενοι προσανατολισμένοι κρίκοι αποτελούμενοι από περιττό πλήθος συνιστωσών, οι οποίοι δεν είναι αμφίχειρες.

2.4 ΣΥΝΘΕΣΗ ΚΟΜΒΩΝ

Έστω δύο κόμβοι K, L μη ισοτοπικοί με τον τετριμμένο. Μπορούμε να ορίσουμε έναν νέο κόμβο ως το *συνδετικό άθροισμα* των K και L , συμβολικά $K \# L$, αν αφαιρέσουμε δύο τόξα από τα διαγράμματα των παραπάνω κόμβων και τα ενώσουμε, ώστε τα νέα τόξα που επιλέξαμε να μην δημιουργούν νέες διασταυρώσεις μεταξύ τους ή με τμήματα των αρχικών κόμβων. Σημειώνουμε ότι το συνδετικό άθροισμα κόμβων δεν εξαρτάται από τα σημεία όπου αφαιρούνται τα δύο τόξα (δηλαδή είναι καλά ορισμένο).



Σχήμα 2.32 Συνδεδετικό άθροισμα κόμβων

Άμεση συνέπεια αυτού, είναι ότι κάθε κόμβος μπορεί να χαρακτηριστεί ως πρώτος, αν δεν είναι συνδεδετικό άθροισμα δύο άλλων κόμβων, και ως σύνθετος, αν είναι. Δοθέντος ενός σύνθετου κόμβου K , μπορούμε πάντοτε να καθορίσουμε τους πρώτους παράγοντες που τον συνθέτουν. Έχει αποδειχτεί ότι ο αριθμός ελάχιστων διασταυρώσεων ενός κόμβου είναι «αθροιστική» συνάρτηση για κάποιους τύπους κόμβων, δηλαδή ισχύει $c(K \# L) = c(K) + c(L)$, όπου ως άθροισμα θεωρούμε το συνδεδετικό άθροισμα κόμβων.

Πράγματι, το 1983 ο William Menasco απέδειξε ότι αυτό ισχύει για $K \# L$ εναλλασσόμενο κόμβο, ενώ δεν έχει ακόμα αποδειχτεί ότι η ιδιότητα αυτή ισχύει για όλους τους κόμβους [1]. Στον παρακάτω πίνακα βλέπουμε ότι υπάρχει μόνο ένας μη εναλλασσόμενος πρώτος κόμβος με περιττό αριθμό ελάχιστων διασταυρώσεων (ο κόμβος του Σχήματος 2.31).

Crossing number	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Number of prime knots (excluding mirror images)	1	1	2	3	7	21	49	165	552	2176	9988	46972	253293
Number of prime knots (including mirror images)	2	1	4	5	14	37	98	317	1104	4294	19976	93670	506585
Number of achiral prime knots	0	1	0	1	0	5	0	13	0	58	0	274	1

Ένας ακόμα τρόπος στο να εντοπίζουμε αν ένας σύνθετος κόμβος είναι αμφίχειρας είναι να εντοπίζουμε τους πρώτους παράγοντές του και να χρησιμοποιούμε την ιδιότητα του πολυωνύμου HOMFLYPT, ότι δηλαδή $P(K \# L) = P(K) \cdot P(L)$. Αν το γινόμενο αυτό δεν είναι συμμετρικό, τότε ο κόμβος $K \# L$ δεν είναι αμφίχειρας. Μας ενδιαφέρει να γνωρίζουμε πότε ένας κόμβος που προκύπτει από την σύνθεση δύο αμφίχειρων κόμβων, είναι αμφίχειρας. Η απάντηση είναι στο παρακάτω:

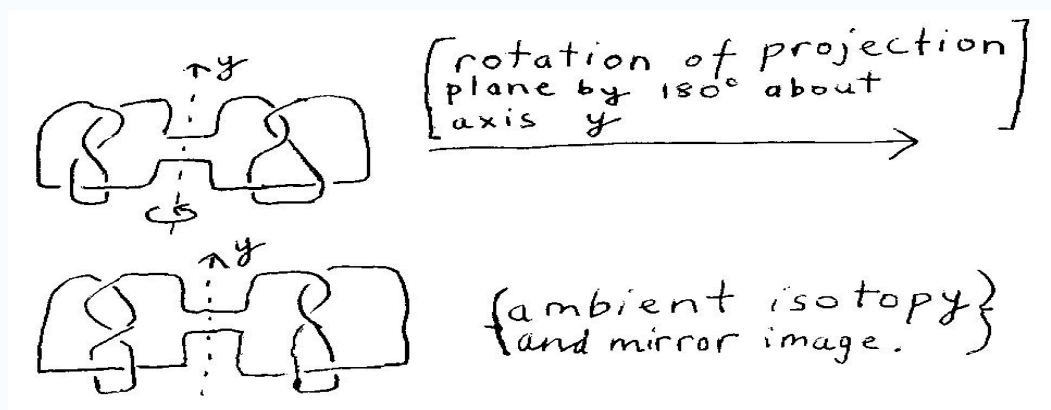
ΘΕΩΡΗΜΑ 2.19. Αν όλοι οι πρώτοι παράγοντές ενός σύνθετου κόμβου είναι αμφίχειρες, τότε ο κόμβος είναι αμφίχειρας.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Θα το δείξουμε αρχικά για δύο παράγοντες (όχι αναγκαστικά πρώτους). Έστω K_1, K_2 αμφίχειρες κόμβοι και έστω $K_1 \# K_2$ το συνδεδετικό τους άθροισμα. Σμικρύνουμε τον κόμβο K_1 του συνδεδετικού αθροίσματος και ισοτοπούμε τον K_2 στην κατοπτρική του εικόνα, K_2^* και μεγεθύνουμε τον K_1 . Επειδή το συνδεδετικό άθροισμα είναι καλά ορισμένο, με την παραπάνω διαδικασία θα προκύψει ο κόμβος $K_1 \# K_2^*$. Σμικρύνουμε τον κόμβο K_2^* , ισοτοπούμε τον K_1 στην κατοπτρική του εικόνα, K_1^* και μεγεθύνουμε τον K_2^* . Ο κόμβος που θα προκύψει θα είναι ο $K_1^* \# K_2^*$, που είναι η

σύνθεση των κατοπτρικών εικόνων των αρχικών κόμβων και είναι η κατοπτρική εικόνα του $K_1 \# K_2$.

Για n πρώτους παράγοντες, θεωρούμε τους $n-1$ ως έναν κόμβο και εφαρμόζουμε τα παραπάνω επιχειρήματα και επαγωγή στο n . \square

Σαν παράδειγμα, ας θεωρήσουμε τον κόμβο figure eight (κόμβος 4_1), που είναι αμφίχειρας (Σχήμα 1.6, Κεφάλαιο 1) και το συνδεδετικό του άθροισμα με τον εαυτό του, $4_1 \# 4_1$.



Σχήμα 2.33 Μετασχηματισμός του συνδεδετικού αθροίσματος $4_1 \# 4_1$ στη κατοπτρική του εικόνα $4_1^* \# 4_1^*$

Δηλαδή, $4_1 \sim 4_1^* \Rightarrow 4_1 \# 4_1 \sim 4_1^* \# 4_1^*$.

Το αντίστροφο του Θεωρήματος 2.19 δεν ισχύει, αφού το συνδεδετικό άθροισμα του κόμβου trefoil, που δεν είναι αμφίχειρας, με τον εαυτό του, είναι αμφίχειρας κόμβος. Δηλαδή $3_1 \# 3_1 \sim 3_1^* \# 3_1^*$.

2.5 ΟΡΙΖΟΥΣΕΣ ΚΟΜΒΩΝ

Όπως ήδη έχουμε αναφέρει αν το πολυώνυμο HOMFLYPT ενός κόμβου δεν είναι συμμετρικό, τότε ο κόμβος δεν είναι αμφίχειρας. Το αντίστροφο όμως δεν ισχύει. Υπάρχουν έξι πρώτοι κόμβοι με αριθμό διασταυρώσεων μικρότερο του έντεκα, που δεν είναι αμφίχειρες, αλλά έχουν συμμετρικό πολυώνυμο HOMFLYPT. Αυτοί οι κόμβοι είναι οι $9_{42}, 10_{48}, 10_{71}, 10_{91}, 10_{104}$ και 10_{125} . Το γεγονός ότι οι κόμβοι 10_{48} και 10_{91} δεν είναι αμφίχειρες προκύπτει άμεσα αν υπολογίσουμε το πολυώνυμο Kauffman, που είναι λίγο πιο πολύπλοκο από το πολυώνυμο HOMFLYPT, αλλά αρκετά πιο «ασχυρό», καθώς εντοπίζει κατά 99% όλους τους μη αμφίχειρες κόμβους με αριθμό διασταυρώσεων μικρότερο του έντεκα, ενώ το πολυώνυμο HOMFLYPT εντοπίζει το 97% αυτών. Η βασική ιδέα παραμένει ίδια, δηλαδή όλοι οι αμφίχειρες κόμβοι έχουν συμμετρικά πολυώνυμα Kauffman. Για να ανιχνεύσουμε την μη αμφιχειρία των υπόλοιπων τεσσάρων χρειαζόμαστε άλλες τεχνικές.

ΟΡΙΣΜΟΣ 2.20. Ορίζουμε την *ορίζουσα* (*determinant*) ενός κόμβου K ως τον αριθμό $\det(K) = P_K(i, -2)$.

Η πληροφορία για τον αν ένας κόμβος είναι αμφίχειρας ή όχι προκύπτει από το επόμενο θεώρημα, που απέδειξε ο *Alexander Stoimenow* στην εργασία του “*Sums of two squares and determinants of achiral knots*” (University of Toronto, 2003) και το οποίο παραθέτουμε χωρίς απόδειξη.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.21.

1. Αν $\det(K) < 0$, τότε ο κόμβος K δεν είναι αμφίχειρας.
2. Αν K αμφίχειρας κόμβος και 3 διαιρεί την $\det(K)$, τότε και 9 διαιρεί την $\det(K)$.
3. Αν K αμφίχειρας κόμβος, τότε $\det(K) \pmod{36} \in \{1, 5, 9, 13, 17, 25, 29\}$.
4. Ένας περιττός φυσικός αριθμός n είναι η ορίζουσα ενός αμφίχειρα κόμβου K αν και μόνο αν ο αριθμός n γράφεται ως άθροισμα δύο τετραγώνων. Αξίζει να σημειωθεί ότι κάθε κόμβος έχει περιττή ορίζουσα και για αυτό αν ένας κόμβος είναι αμφίχειρας, τότε η ορίζουσά του γράφεται σαν άθροισμα δύο τετραγώνων. Υπάρχουν όμως κόμβοι που έχουν την ιδιότητα αυτή, αλλά δεν είναι αμφίχειρες (π.χ. $10_{48}, 10_{91}$).
5. Το τετράγωνο ενός περιττού αριθμού ($n^2 : n = 2 \cdot \kappa + 1 : \kappa \in \mathbb{N}$) είναι η ορίζουσα ενός αμφίχειρα εναλλασσόμενου πρώτου κόμβου αν και μόνο αν $n^2 \notin \{1, 9, 49\}$.

Για παράδειγμα, το πολώνυμο HOMFLYPT του κόμβου 9_{42} είναι $P(9_{42}) = -2 \cdot l^{-2} - 3 - 2 \cdot l^2 + (l^{-2} + 4 + l^2) \cdot m^2 - m^4$, το οποίο είναι συμμετρικό ως προς l .

Είναι όμως: $\det(9_{42}) = P(i, -2) = -2 \cdot i^{-2} - 3 - 2 \cdot i^2 + (i^{-2} + 4 + i^2) \cdot (-2)^2 - (-2)^4 = -7$ και

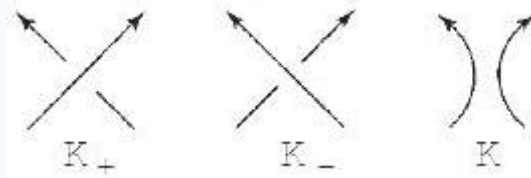
αφού $-7 < 0$ ^{1ος κανόνας} \Rightarrow ο κόμβος 9_{42} δεν είναι αμφίχειρας. Ομοίως μπορούμε να δείξουμε ότι και ο κόμβος 10_{125} δεν είναι αμφίχειρας. Το ότι οι κόμβοι $10_{71}, 10_{104}$ δεν είναι αμφίχειρες, προκύπτει από το γεγονός ότι οι ορίζουσές τους δεν είναι αποτέλεσμα αθροίσματος δύο τετραγώνων, ενώ για τον κόμβο 10_{48} , προκύπτει εναλλακτικά από τον 5^ο κανόνα και επειδή $\det(10_{48}) = 49$.

2.6 ΠΟΛΥΩΝΥΜΟ CONWAY ΚΑΙ ΥΠΟΓΡΑΦΕΣ ΚΟΜΒΩΝ

Για 58 χρόνια το πολώνυμο μιας μεταβλητής *Alexander*, $\Delta_K(t)$ ήταν η μόνη γνωστή πολωνυμική αναλλοίωτη. Ένας αμφίχειρας κόμβος έχει πάντα το ίδιο πολώνυμο Alexander με την κατοπτρική του εικόνα και γι' αυτόν τον λόγο οι μαθηματικοί πίστευαν ότι το παραπάνω πολώνυμο δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον εντοπισμό αμφίχειρων κόμβων.

Το πολώνυμο Alexander σχετίζεται με το πολώνυμο Conway, συμβολικά $\nabla_K(z)$, το οποίο μπορεί να υπολογιστεί απευθείας από το διάγραμμα ενός κόμβου με τη χρήση δύο αξιωμάτων:

1. Αν K είναι ο τετριμμένος κόμβος, τότε $\nabla_K(z) = 1$.
2. Έστω τρεις κόμβοι K_+, K_-, K οι οποίοι ταυτίζονται εκτός μιας περιοχής στην οποία έχουν την μορφή του Σχήματος 2.34 τότε τα πολυώνυμά τους συνδέονται με τη σχέση skein: $\nabla_{K_+} - \nabla_{K_-} = z\nabla_K$.



Σχήμα 2.34 Οι κόμβοι K_+, K_-, K

Η αντικατάσταση μιας διασταύρωσης με δύο τόξα τα οποία δεν διασταυρώνονται καλείται *εξομάλυνση (smoothing)*.

Για το πολυώνυμο Conway αποδεικνύονται τα παρακάτω, τα οποία παραθέτουμε χωρίς απόδειξη.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.22.

1. Αν L διαχωρίσιμος κρίκος με n συνιστώσες, τότε $\nabla_L = 0$.
2. Κάθε κόμβος έχει μία «αποσύνθεση», σύμφωνα με τη σχέση skein, σε τετριμμένους κόμβους και κρίκους, και άρα το πολυώνυμο Conway μπορεί να υπολογιστεί επαγωγικά από τα αξιώματα.
3. Ισχύει ότι $\nabla_{K_1 \# K_2} = \nabla_{K_1} \cdot \nabla_{K_2}$.
4. Ισχύει ότι $\nabla_{K'} = \nabla_K$, όπου K' ο αντίστροφος του K .
5. Ισχύει ότι, $\nabla_{K^*}(z) = \nabla_K(-z)$, όπου K^* η κατοπτρική εικόνα του K .
6. Έστω L κρίκος με n συνιστώσες. Τότε $\nabla_L(-z) = (-1)^{n+1} \nabla_L(z)$.

Τα πολυώνυμα Conway και Alexander συνδέονται με τη σχέση $\Delta_K(t) = \nabla_K\left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}}\right)$,

και γι' αυτό το λόγο το πολυώνυμο Conway συχνά καλείται πολυώνυμο Alexander – Conway. Η σχέση που συνδέει τα πολυώνυμα Conway και HOMFLYPT είναι η εξής:

$\nabla_K(z) = P_K\left(i, i\left(z^{1/2} - z^{-1/2}\right)\right)$, και επομένως η ορίζουσα ενός κόμβου K που ορίσαμε στη

προηγούμενη παράγραφο μπορεί να υπολογισθεί και από τη σχέση: $\det(K) = \nabla_K(-1)$.

Από το 5 και 6 του Θεωρήματος 2.22 προκύπτει άμεσα ότι κάθε κρίκος με άρτιο αριθμό συνιστωσών και μη μηδενικό πολυώνυμο Conway δεν μπορεί να είναι αμφίχειρας.

Ορίζουμε την υπογραφή ενός κόμβου, που αποτελεί αναλλοίωτη κόμβων, μέσω του πολυωνύμου Alexander ως εξής.

ΟΡΙΣΜΟΣ 2.23. Η υπογραφή ενός κόμβου K , $\sigma(K)$, είναι ο άρτιος, ακέραιος αριθμός που ορίζεται από τα παρακάτω αξιώματα.

1. Αν K είναι ο τετριμμένος κόμβος, τότε $\sigma(K) = 0$.
2. Αν D_+, D_-, D_0 skein διαγράμματα του κόμβου όπως ορίστηκαν παραπάνω, τότε:

$$\sigma(D_-) - 2 \leq \sigma(D_+) \leq \sigma(D_-)$$

Επειδή $\sigma(K)$ άρτιος έπεται ότι είτε $\sigma(D_+) = \sigma(D_-)$, είτε $\sigma(D_+) = \sigma(D_-) - 2$.

3. Αν $\Delta_K(t)$ είναι το πολυώνυμο Alexander του κόμβου K , τότε

$$\text{sign}(\Delta_K(-1)) = (-1)^{\sigma(K)/2}.$$

Θα υπολογίσουμε, για παράδειγμα την υπογραφή του δεξιόστροφου trefoil. Υπολογίζουμε το πολυώνυμο Conway:

$$\nabla_K(z) = 1 \cdot \nabla_O(z) + z \cdot \nabla_{\infty}(z) + z^2 \cdot \nabla_O(z) \xrightarrow[\nabla_{\infty}(z)=0]{\nabla_O(z)=1} \nabla_K(z) = 1 + z^2. \text{ Και από τη σχέση}$$

$$\Delta_K(t) = \nabla_K\left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}}\right) \text{ έπεται ότι το πολυώνυμο Alexander του δεξιόστροφου trefoil}$$

$$\text{είναι } \Delta_K(t) = 1 + \left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}}\right)^2 = t^{-1} - 1 + t. \text{ Έτσι, } \Delta_K(-1) = -3 \text{ και επομένως}$$

$\text{sign}(\Delta_K(-1)) = -1$. Από το 2 του Ορισμού 2.23 έπεται ότι:

$$\text{είτε } \sigma(L_+) = \sigma(L_-) \stackrel{L_- \sim \text{unknot}}{=} 0, \text{ είτε } \sigma(L_+) = \sigma(L_-) - 2 = -2.$$

$$\text{Και επειδή } \text{sign}(\Delta_K(-1)) = (-1)^{\sigma(D_+)/2} \Rightarrow -1 = (-1)^{\sigma(D_+)/2} \text{ έχουμε ότι } \sigma(D_+) = -2.$$

Με τον ίδιο τρόπο καταλήγουμε ότι η υπογραφή του αριστερόστροφου trefoil είναι +2. Και επειδή η υπογραφή κόμβων αποτελεί αναλλοίωτη έπεται ότι ο αριστερόστροφος και ο δεξιόστροφος κόμβος trefoil είναι διαφορετικοί.

Για τις υπογραφές κόμβων ισχύουν τα παρακάτω, τα οποία παραθέτουμε χωρίς απόδειξη.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.24.

1. Ισχύει ότι $\sigma(K_1 \# K_2) = \sigma(K_1) + \sigma(K_2)$.
2. Ισχύει ότι $\sigma(K^*) = -\sigma(K)$, όπου K^* η κατοπτρική εικόνα του K .
3. Ισχύει ότι $\sigma(K') = \sigma(K)$, όπου K' ο αντίστροφος του K .

Το παραπάνω παράδειγμα επιβεβαιώνει το 2 του Θεωρήματος 2.24.

ΠΡΟΤΑΣΗ 2.25. Αν ένας κόμβος K είναι αμφίχειρας, τότε $\sigma(K) = 0$.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Αν K αμφίχειρας, τότε $K \sim K^*$ και άρα $\sigma(K) = \sigma(K^*)$. Από το 2 του Θεωρήματος 2.24 όμως είναι $\sigma(K^*) = -\sigma(K)$ και άρα $\sigma(K) = \sigma(K^*) = -\sigma(K)$, δηλαδή $\sigma(K) = 0$. \square

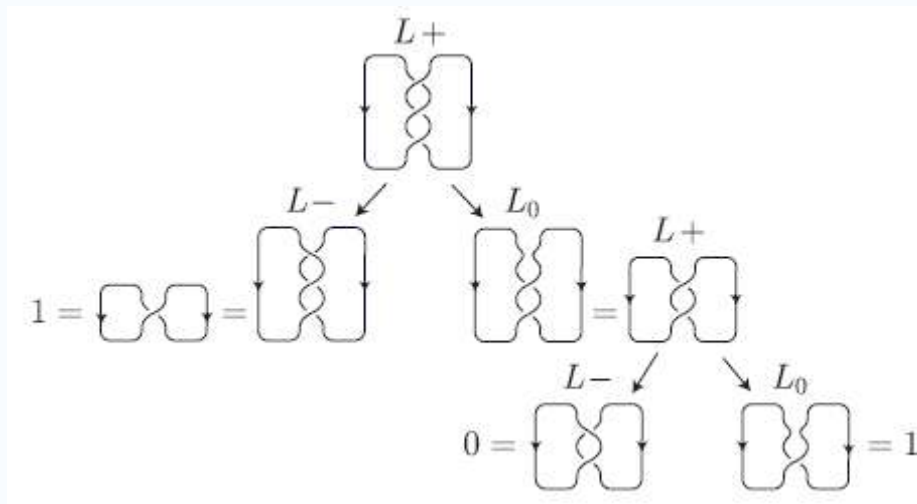
Θα υπολογίσουμε τώρα, την υπογραφή του κόμβου figure 8. Αρχικά, υπολογίζουμε το πολυώνυμο Conway του κόμβου figure 8, βλέπε Σχήμα 2.35:

$\nabla_K(z) = \nabla_o(z) + z \cdot \nabla_{oo}(z) - z^2 \cdot \nabla_{\circ\circ}(z) = 1 - z^2$ και από την σχέση

$\Delta_K(t) = \nabla_K\left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}}\right)$ υπολογίζουμε το πολυώνυμο Alexander του κόμβου figure 8:

$\Delta_K(t) = 1 - \left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}}\right)^2 \Rightarrow \Delta_K(t) = -t^{-1} + 3 - t$ και άρα $\Delta_K(-1) = 5$. Επομένως

$\text{sign}(\Delta_K(-1)) = 1$. Από το 3 του Ορισμού 2.23 είναι $\text{sign}(\Delta_K(-1)) = (-1)^{\sigma(K)/2}$, δηλαδή $1 = (-1)^{\sigma(K)/2} \Rightarrow \sigma(K) = 0$, αποτέλεσμα που ήταν αναμενόμενο αφού ο κόμβος figure 8 είναι αμφίχειρας (Πρόταση 2.25).



Σχήμα 2.35 Spanning tree του κόμβου figure 8

Υπάρχουν και άλλοι τρόποι να εντοπίζει κανείς αν ένας κόμβος είναι αμφίχειρας ή όχι, όπως οι αναλλοιώτες *Milnor* και οι αναλλοιώτες *Vassiliev* περιττού βαθμού (Jiang, Lin, Wang, Wu, *Achirality of Knots and Links*, Elsevier Science, 2002), αλλά δεν θα αναλυθούν στα πλαίσια της παρούσης εργασίας.

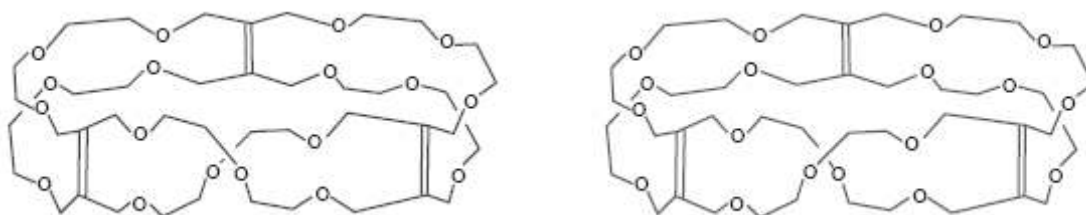
Δεν υπάρχει μέχρι και σήμερα μία μοναδική μέθοδος, η οποία να μας οδηγεί πάντα σε συμπέρασμα για το αν ένας κόμβος ή κρίκος ή εμφυτευμένο γράφημα είναι αμφίχειρας ή όχι, αλλά διάφοροι συνδυασμοί των παραπάνω τεχνικών μπορούν να χρησιμοποιηθούν και να βοηθήσουν στο να οδηγηθούμε σε ασφαλή συμπεράσματα. Όμως, οι τεχνικές που αναπτύξαμε στο κεφάλαιο αυτό, όπως για παράδειγμα το P -πολυώνυμο και η αναλλοιώτη $T(G)$, δεν εντοπίζουν την μη αμφιχειρία κάθε μη αμφίχειρου εμφυτευμένου

γραφήματος. Για παράδειγμα, η μοριακή σκάλα Moebius, M_n με n συνδέσεις και με μία διασταύρωση (Σχήμα 3.3). Το σύνολο $T(M_n)$ θα αποτελείται από τετριμμένους κόμβους και κρίκους. Άρα θα χρειαστεί να αναπτύξουμε άλλες τεχνικές για να μπορούμε να εντοπίζουμε εάν ένα τέτοιο μοριακό γράφημα έχει ή δεν έχει την ιδιότητα της αμφιχειρίας.

3

ΣΚΑΛΕΣ MOEBIUS

Αν και η θεωρία των διακλαδιζόμενων καλυμμάτων με δύο φύλλα (*twofold branched covers*) είναι γνωστή αρκετά χρόνια, η ιδέα να χρησιμοποιηθεί ώστε να αποδειχθεί εάν ένα μόριο είναι τοπολογικώς αμφίχειρας εισήχθη από τον Jon Simon το 1986 στη μελέτη του για τις μοριακές σκάλες Moebius. Το 1982 οι Walba, Richards και Haltiwanger κατασκεύασαν το πρώτο μόριο με δομή σκάλας Moebius με τρεις εγκάρσιες συνδέσεις, του οποίου το γράφημα δεν είναι επίπεδο και παρουσιάζεται στα αριστερά του Σχήματος 3.1.



Σχήμα 3.1 Μοριακή σκάλα Moebius και η κατοπτρική της εικόνα

Το 1983 ο Walba κατέληξε στο συμπέρασμα ότι το μοριακό γράφημα που αναπαριστά μια σκάλα Moebius είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο, συμπέρασμα που προέκυψε κυρίως από εργαστηριακές μελέτες. Παρ' όλα αυτά δεν μπόρεσε να το αποδείξει, και το ερώτημα παρέμεινε αναπάντητο για τρία χρόνια, μέχρι την εργασία του Jon Simon.

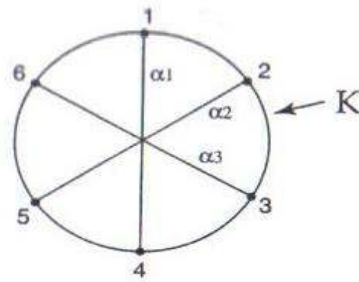
Στο παρόν κεφάλαιο θα αναλύσουμε την απόδειξη του Jon Simon, ότι δηλαδή εμφυτευμένα γραφήματα που αντιπροσωπεύουν μοριακές σκάλες Moebius με τρεις ή περισσότερες συνδέσεις δεν είναι τοπολογικώς αμφίχειρα (και άρα ούτε και χημικώς). Επίσης, θα αναφερθούμε στην τοπολογική αμφιχειρία κάποιων μοριακών γραφημάτων που σχετίζονται με τις σκάλες Moebius.

3.1 ΔΙΑΚΛΑΔΙΖΟΜΕΝΑ ΚΑΛΥΜΜΑΤΑ ΜΕ ΔΥΟ ΦΥΛΛΑ

ΟΡΙΣΜΟΣ 3.1. Μια *ταινία Moebius* είναι μια εμφύτευση του κυκλικού δακτυλίου $S^1 \times [-1, 1]$ στον \mathbb{R}^3 , έτσι ώστε ο κεντρικός κύκλος $S^1 \times \{0\}$ να παραμένει τετριμμένος στην εμφύτευση και το σύνορο της εικόνας να έχει μία διασταύρωση.

ΟΡΙΣΜΟΣ 3.2. Μια *σκάλα Moebius*, M_n , είναι το γράφημα εκείνο που αποτελείται από μία απλή κλειστή καμπύλη K με $2n$ κορυφές και n επιπλέον πλευρές a_1, a_2, \dots, a_n , τέτοιες ώστε: αν οι κορυφές του K είναι αριθμημένες $1, 2, \dots, 2n$, τότε οι κορυφές κάθε πλευράς a_i θα είναι οι $i, i+n$. Καλούμε την καμπύλη K *βρόγχο* της M_n και τις πλευρές a_1, a_2, \dots, a_n *συνδέσεις* της M_n .

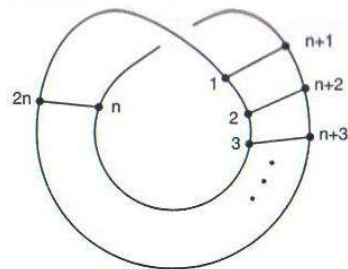
Στην παρακάτω εικόνα παρουσιάζεται η σκάλα Moebius M_3 , ως αφηρημένο γράφημα.



Σχήμα 3.2 Η σκάλα Moebius M_3

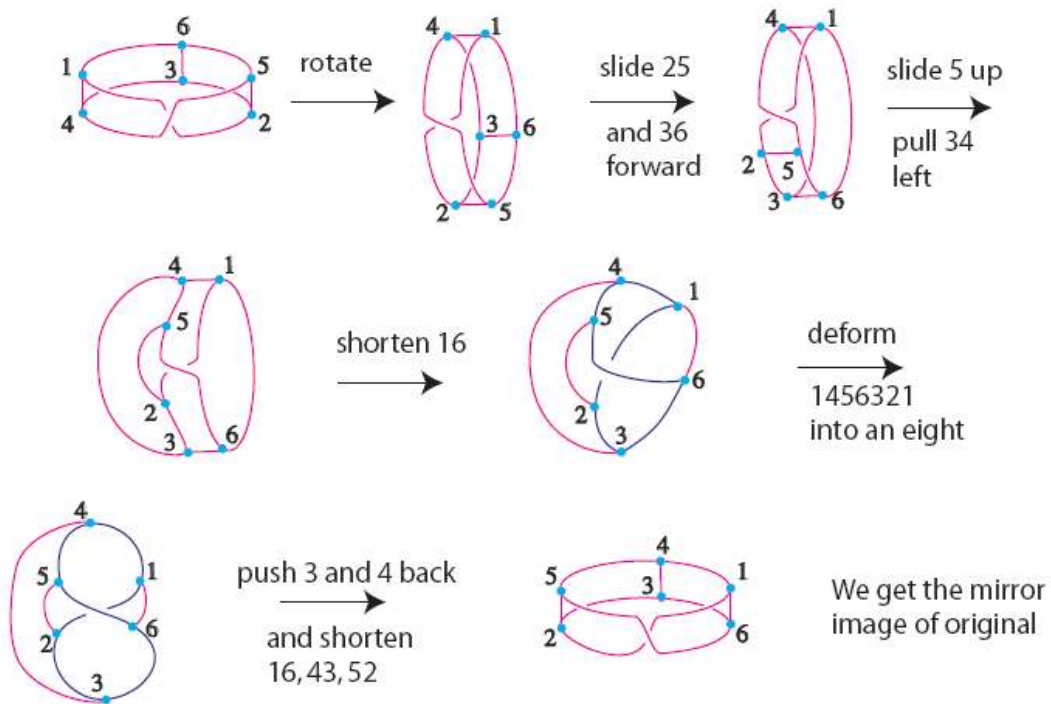
Ο ορισμός της σκάλας Moebius δεν εξαρτάται από τον τρόπο αρίθμησης των κορυφών.

ΟΡΙΣΜΟΣ 3.3. Καλούμε μία εμφύτευση μιας σκάλας Moebius στην S^3 κανονική (*standard*), αν είναι της μορφής που παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.3 ή της κατοπτρικής της εικόνας.



Σχήμα 3.3 Κανονική εμφύτευση της M_n

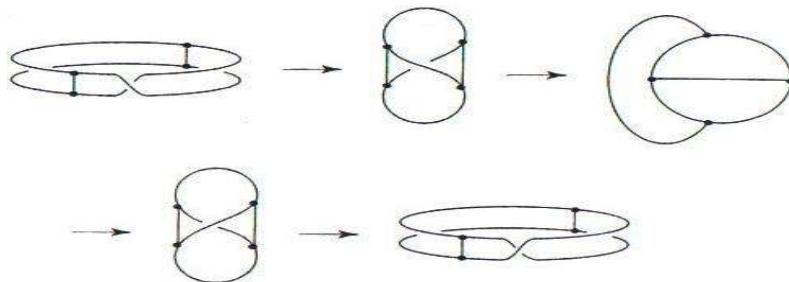
Ας θεωρήσουμε μία κανονική εμφύτευση G μιας σκάλας Moebius M_3 . Τότε, θεωρώντας τις συνδέσεις ως απλές πλευρές του γραφήματος αποδεικνύεται εύκολα ότι το γράφημα αυτό είναι ισοτοπικό με την κατοπτρική του εικόνα, βλέπε Σχήμα 3.4. Δηλαδή, υπάρχει ομοιομορφισμός h του \mathbb{R}^3 , που αντιστοιχεί πλευρές σε πλευρές και κορυφές στον εαυτό τους, τέτοιος ώστε $h(G) = G^*$.



Σχήμα 3.4 Συμμετρική αναπαράσταση της M_3

Κάτι τέτοιο όμως δεν μπορεί να εφαρμοστεί σε μοριακές σκάλες Moebius, διότι οι συνδέσεις αναπαριστούν διαφορετικού είδους χημικούς δεσμούς από τις πλευρές. Για χημικούς λοιπόν σκοπούς ξεχωρίζουμε τις συνδέσεις του γραφήματος και απαιτούμε κάθε ομοιομορφισμός μιας σκάλας Moebius να απεικονίζει συνδέσεις σε συνδέσεις. Πιο συγκεκριμένα, ένας ομοιομορφισμός θα απεικονίζει κάθε πλευρά που περιέχεται στον βρόγχο K σε πλευρά που επίσης περιέχεται στον βρόγχο K και γειτονικές πλευρές θα απεικονίζονται σε γειτονικές πλευρές. Επομένως, ο βρόγχος K διατηρείται από κάθε τέτοιο ομοιομορφισμό και αντίστροφα.

Το ερώτημα που δημιουργείται τώρα είναι αν για μία κανονική εμφύτευση σκάλας Moebius M_n υπάρχει ένας ομοιομορφισμός που να αντιστρέφει τον προσανατολισμό $h: (\mathbb{R}^3, M_n) \rightarrow (\mathbb{R}^3, M_n)$ τέτοιος ώστε $h(K) = K$. Προφανώς ένας τέτοιος ομοιομορφισμός υπάρχει για $n = 1$, αλλά και για $n = 2$, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



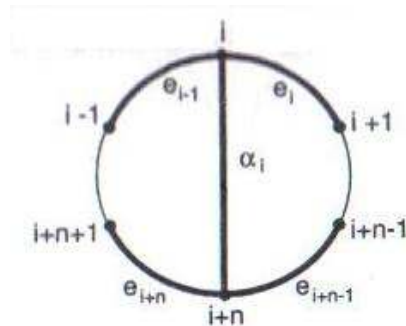
Σχήμα 3.5 Μετασχηματισμός της M_2 στη κατοπτρική της εικόνα

Ο Jon Simon απέδειξε το παρακάτω:

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.4. (Simon; 1986) Έστω M_n μία κανονική εμφύτευση μιας σκάλας Moebius στο S^3 με $n \geq 3$ και βρόγχο K . Τότε, δεν υπάρχει ομοιομορφισμός που να αντιστρέφει τον προσανατολισμό $h: (S^3, M_n) \rightarrow (S^3, M_n)$ τέτοιος ώστε $h(K) = K$.

ΛΗΜΜΑ 3.5. Για κάθε $n \geq 4$, κάθε αυτομορφισμός των κορυφών του γραφήματος M_n αφήνει τον βρόγχο K συνολοθεωρητικά αναλλοίωτο.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω ένας αυτομορφισμός A της M_n που δεν αφήνει το βρόγχο K συνολοθεωρητικά αναλλοίωτο. Τότε ο A θα απεικονίζει τον K σε μία άλλη κλειστή καμπύλη H με $2n$ κορυφές, έτσι ώστε η M_n να είναι σκάλα Moebius με βρόγχο H . Επειδή $H \neq K$, έπεται ότι υπάρχει μία πλευρά $a_i \in H$ τέτοια ώστε $a_i \notin K$. Άρα, η πλευρά a_i είναι μία σύνδεση στην εμφύτευση της σκάλας Moebius με βρόγχο K και επομένως έχει κορυφές i και $i+n$. Επειδή ο βρόγχος H είναι απλή κλειστή καμπύλη, θα υπάρχει ακριβώς μία πλευρά, διαφορετική της a_i , με κορυφή i . Η πλευρά e_{i-1} με κορυφές $i-1$ και i και η πλευρά e_i με κορυφές i και $i+1$ είναι οι μοναδικές πλευρές της M_n που περιέχουν την κορυφή i . Στο Σχήμα 3.6 παρουσιάζονται οι πλευρές αυτές σε ένα σχήμα, που για απλότητα έχουμε παραλείψει τις υπόλοιπες συνδέσεις.



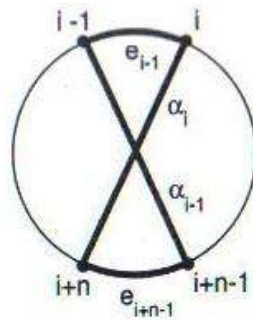
Σχήμα 3.6 Οι πλευρές που συνδέονται με την a_i

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, μπορούμε να υποθέσουμε ότι ο βρόγχος H περιλαμβάνει την πλευρά e_{i-1} αλλά όχι την e_i . Όμοια, επειδή ο βρόγχος H περιέχει την κορυφή $i+n$, θα έχει ακριβώς μία ακόμη πλευρά, διαφορετική της a_i , με κορυφή την $i+n$. Άρα, ο H θα περιλαμβάνει είτε την πλευρά e_{i+n-1} με κορυφές τις $i+n-1$ και $i+n$, είτε την πλευρά e_{i+n} με κορυφές τις $i+n$ και $i+n+1$.

Εξετάζουμε τις δύο αυτές περιπτώσεις ξεχωριστά.

1. Ο βρόγχος H περιέχει την πλευρά e_{i+n-1} .

Από την υπόθεση, ο βρόγχος H περιέχει τις ακόλουθες πλευρές: την πλευρά e_{i-1} με κορυφές $i-1$ και i , την πλευρά a_i με κορυφές την i και $i+n$ και την πλευρά e_{i+n-1} με κορυφές $i+n$ και $i+n-1$. Αν ο H περιείχε και την πλευρά a_{i-1} του γραφήματος M_n , τότε ο H θα περιείχε μία απλή κλειστή καμπύλη αποτελούμενη από τις πλευρές e_{i-1}, a_i, e_{i+n-1} και a_{i-1} , όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.7.

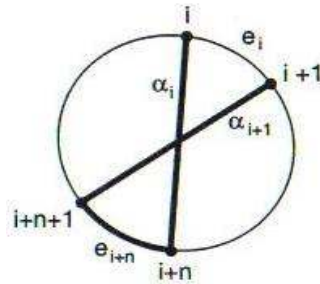


Σχήμα 3.7 Μια απλή κλειστή καμπύλη που αποτελείται από τις πλευρές $e_{i-1}, a_i, e_{i+n-1}, a_{i-1}$

Αυτό όμως είναι αδύνατο γιατί ο H είναι μία απλή κλειστή καμπύλη που περιέχει $2n$ πλευρές και $n \geq 4$. Τότε ο H δεν περιέχει την πλευρά a_{i-1} . Άρα, στη σκάλα Moebius με βρόχο H , η πλευρά a_{i-1} αποτελεί σύνδεση του γραφήματος. Αν ο βρόγχος H κοπεί σε δύο τμήματα στις κορυφές μίας σύνδεσης, τότε κάθε τμήμα θα περιέχει n το πλήθος πλευρές. Είδαμε όμως ότι οι πλευρές e_{i-1}, a_i, e_{i+n-1} και a_{i-1} ορίζουν μία απλή κλειστή καμπύλη, και άρα αφαιρώντας τις κορυφές της σύνδεσης a_{i-1} , το ένα από τα δύο τμήματα, στα οποία χωρίζεται ο H , θα περιέχει μόνο τις πλευρές e_{i-1}, a_i, e_{i+n-1} , άτοπο αφού $n \geq 4$. Άρα ο βρόγχος H δεν μπορεί να περιέχει την πλευρά e_{i+n-1} .

2. Ο βρόγχος H περιέχει την πλευρά e_{i+n} .

Εφόσον ο βρόγχος H περιέχει κάθε κορυφή του γραφήματος M_n , θα περιέχει και την κορυφή $i+1$. Ως κλειστή καμπύλη, ο H θα περιέχει δύο πλευρές με κορυφή την $i+1$. Υποθέσαμε ότι ο βρόγχος H περιέχει την πλευρά e_{i-1} , αλλά όχι την πλευρά e_i , συνεπώς θα πρέπει να περιέχει την σύνδεση a_{i+1} (Σχήμα 3.8).



Σχήμα 3.8 Οι πλευρές a_i, e_{i+n}, a_{i+1}

Επειδή ο βρόγχος H δεν περιέχει την e_i , η πλευρά αυτή θα είναι μια σύνδεση σε αυτήν την εμφύτευση της σκάλας Moebius. Όπως είδαμε, αφαιρώντας τις κορυφές της σύνδεσης e_i , ο βρόγχος H θα χωριστεί σε δύο τμήματα, καθένα από τα οποία περιέχει n πλευρές. Το ένα τμήμα $H - e_i$ θα περιέχει μόνο τις πλευρές a_i, e_{i+n} και a_{i+1} , άτοπο αφού $n \geq 4$. Άρα ο βρόγχος H δεν περιέχει ούτε την πλευρά e_{i+n} . Επομένως, δεν υπάρχει ο ομοιομορφισμός που υποθέσαμε. \square

Το Λήμμα 3.5 αποδεικνύει ότι κάθε αυτομορφισμός του M_n απεικονίζει πλευρές της σκάλας Moebius σε πλευρές και συνδέσεις σε συνδέσεις, δηλαδή για κάθε $n \geq 4$ υπάρχει ένας μόνο τρόπος επιλογής του βρόγχου K .

ΠΟΡΙΣΜΑ 3.6. Αν υπάρχει ομοιομορφισμός $h : (\mathbb{R}^3, M_n) \rightarrow (\mathbb{R}^3, M_n)$ για $n \geq 4$, τότε $h(K) = K$.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Ας υποθέσουμε ότι υπάρχει ένας τέτοιος ομοιομορφισμός h . Τότε ο h επάγει έναν αυτομορφισμό στις κορυφές του M_n και από το Λήμμα 3.5, ο αυτομορφισμός αυτός θα αφήνει το βρόγχο K συνολοθεωρητικά αναλλοίωτο. \square

Δίνουμε τώρα κάποιους ορισμούς και παραδείγματα που θα μας βοηθήσουν να ορίσουμε τα διακλαδιζόμενα καλύμματα με δύο φύλλα που απαιτούνται για την απόδειξη του Θεωρήματος 3.4.

ΟΡΙΣΜΟΣ 3.7. Έστω $M \subseteq \mathbb{R}^p$ για κάποιο $p \in \mathbb{N}$ και έστω $n \in \mathbb{N}$. Το M καλείται n -πολλαπλότητα (n -manifold) 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 (στην περίπτωση που έχει μη τετριμμένο σύνορο).

Μια n -πολλαπλότητα λοιπόν είναι ο χώρος που τοπικά μοιάζει με τον \mathbb{R}^n ή τον \mathbb{R}_+^n . Ο κύκλος και η ευθεία αποτελούν παραδείγματα 1-πολλαπλοτήτων, ο τόρος, η λωρίδα Moebius και ο κυκλικός δακτύλιος αποτελούν παραδείγματα 2-πολλαπλοτήτων (ή αλλιώς επιφανειών) και τα S^3, B^3 καθώς και ο στερεός τόρος αποτελούν παραδείγματα 3-πολλαπλοτήτων.

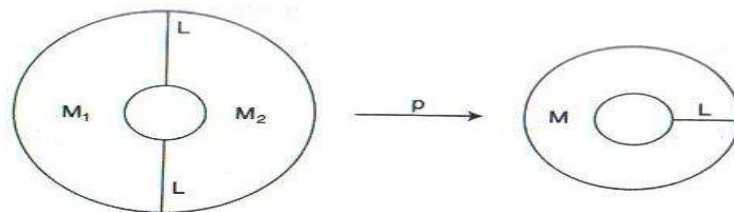
ΟΡΙΣΜΟΣ 3.8. Έστω $M \subseteq \mathbb{R}^n$ και $h: M \rightarrow M$ ομοιομορφισμός. Για κάθε φυσικό αριθμό r , ορίζουμε $h^r = h \circ h \circ \dots \circ h$, r φορές. Αν ακόμα, r είναι ο ελάχιστος φυσικός αριθμός τέτοιος ώστε ο h^r να είναι η ταυτοτική απεικόνιση, τότε λέμε ότι ο ομοιομορφισμός h έχει βαθμό ίσο με r . Αν δεν υπάρχει τέτοιος αριθμός, τότε λέμε ότι ο h δεν έχει πεπερασμένο βαθμό.

Παραθέτουμε αρχικά τρία παραδείγματα διακλαδιζόμενων καλυμμάτων στον \mathbb{R}^2 :

Έστω M ο κυκλικό δακτύλιος που προκύπτει αν αφαιρεθεί το εσωτερικό ενός μοναδιαίου δίσκου από ένα δίσκο ακτίνας 2. Τα σημεία του M εκφράζονται σε πολικές συντεταγμένες ως (r, ∂) , με $1 \leq r \leq 2$. Ορίζουμε τον βαθμού 2 ομοιομορφισμό $h: M \rightarrow M$ ως $h(r, \partial) = (r, \partial + 180^\circ)$. Ορίζουμε στη συνέχεια την απεικόνιση $p: M \rightarrow M$ ως $p(r, \partial) = (r, 2\partial)$. Οι απεικονίσεις h και p ικανοποιούν την εξής σχέση:

$$\forall x, y \in M, p(x) = p(y) \Leftrightarrow x = y \text{ ή } h(x) = y. \quad (*)$$

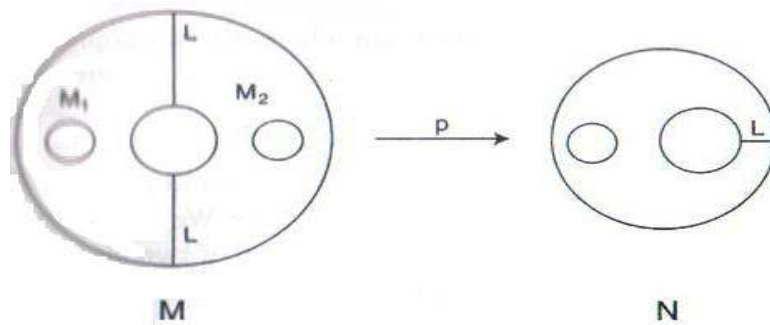
Έστω M_1 η επιφάνεια που προκύπτει αν κόψουμε τον M κατά μήκος μιας γραμμής της μορφής: $L = \{(r, 0) \text{ τ.ώ. } 1 \leq r \leq 2\}$. Μπορούμε να θεωρήσουμε την M_1 ως το μισό κυκλικό δακτύλιο M και έστω M_2 ένα αντίγραφο της. Η M προκύπτει με την ένωση των M_1 και M_2 κατά μήκος των συνόρων τους στο L . Παρατηρούμε ότι ο ομοιομορφισμός h εναλλάσσει τα M_1 και M_2 , ενώ η απεικόνιση p τα απεικονίζει στον M , βλ. Σχήμα 3.9. Σ' αυτό το παράδειγμα, ο M είναι το κάλυμμα με δύο φύλλα του εαυτού του.



Σχήμα 3.9 Η απεικόνιση p απεικονίζει τα M_1 και M_2 στον M

Έστω τώρα M, N κυκλικοί δίσκοι, από τους οποίους έχουν αφαιρεθεί τρεις, αντίστοιχα δύο κυκλικοί δίσκοι, όπως απεικονίζονται Σχήμα 3.10. Ο κεντρικός δίσκος του M έχει ακτίνα 1. Έστω (r, ∂) σύστημα πολικών συντεταγμένων και έστω ο ομοιομορφισμός $h: M \rightarrow M$, με $h(r, \theta) = (r, \theta + 180^\circ)$, $1 \leq r \leq 2$. Ο h είναι βαθμού δύο και προκαλεί μία περιστροφή 180° γύρω από το κέντρο του μεσαίου δίσκου. Έστω τώρα M_1 η επιφάνεια που προκύπτει αν κόψουμε την M κατά μήκος μιας κεντρικής γραμμής L και M_2 ένα αντίγραφο αυτής, όπως παρουσιάζεται παρακάτω. Ορίζουμε $p: M \rightarrow M$ με $p(r, \theta) = (r, 2\theta)$, την απεικόνιση μη

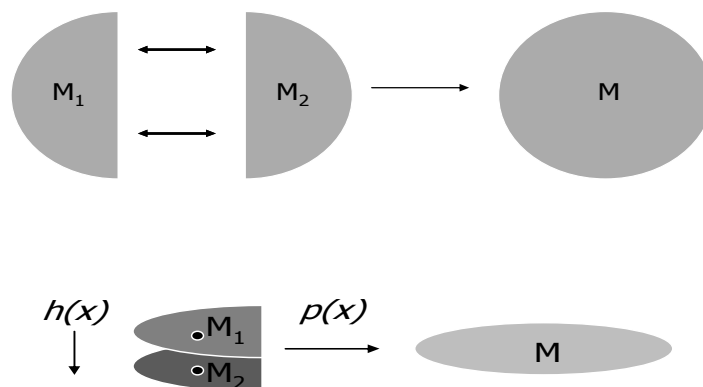
πεπερασμένου βαθμού, που στέλνει κάθε ένα από τα M_1 και M_2 στο N . Η p είναι συνεχής απεικόνιση 2-1, όμως ο περιορισμός της στο M_1 είναι ομοιομορφισμός.



Σχήμα 3.10 Η απεικόνιση p στέλνει τα M_1 και M_2 στο N

Οι απεικονίσεις h και p ικανοποιούν την σχέση (*). Αυτό είναι ένα παράδειγμα 2-πολλαπλοτήτων όπου το M είναι κάλυμμα με δύο φύλλα του N .

Έστω, τέλος, M ένας μοναδιαίος κυκλικός δίσκος και, όπως πριν, έστω ο ομοιομορφισμός $h(r, \theta) = (r, \theta + 180^\circ)$ και η απεικόνιση $p(r, \theta) = (r, 2\theta)$, οι οποίες ικανοποιούν την σχέση (*). Έστω, τώρα, M_1 η επιφάνεια που προκύπτει αν κοπεί ο M κατά μήκος μίας ακτίνας του και εφαρμόσουμε πάνω του την απεικόνιση $q(r, \theta) = (r, \frac{1}{2}\theta)$, και έστω M_2 ένα αντίγραφο αυτής. Ο κυκλικός δίσκος M προκύπτει από την ένωση των M_1 και M_2 , βλέπε Σχήμα 3.11. Ο ομοιομορφισμός h εναλλάσσει τα M_1 και M_2 , διατηρώντας σταθερό το κέντρο του κυκλικού δίσκου, ενώ η απεικόνιση p απεικονίζει τα M_1 και M_2 στον M . Ο M εδώ είναι διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα του εαυτού του με σύνολο διακλάδωσης το κέντρο του.

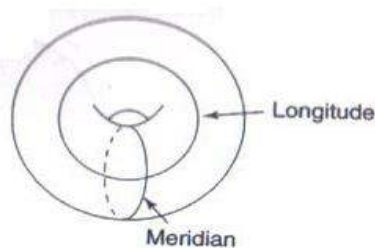


Σχήμα 3.11 Διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα του M με σύνολο διακλάδωσης το κέντρο του

Δίνουμε τώρα τον ορισμό για 3-πολλαπλότητες:

ΟΡΙΣΜΟΣ 3.9. Έστω M και N 3-πολλαπλότητες και έστω $h: M \rightarrow M$ ομοιομορφισμός που διατηρεί τον προσανατολισμό βαθμού δύο. Έστω ακόμα $p: M \rightarrow N$ απεικόνιση τέτοια ώστε $p(x) = p(y) \Leftrightarrow x = y$ ή $h(x) = y$. Υποθέτουμε ότι η απεικόνιση p είναι συνεχής και απεικονίζει ανοιχτά σύνολα σε ανοιχτά σύνολα. Έστω A το σύνολο $A = \{x \in M \text{ τ.ώ. } h(x) = x\}$. Αν το σύνολο A είναι το κενό σύνολο, τότε λέμε ότι το M είναι κάλυμμα με δύο φύλλα (*twofold cover*) του N . Αν $B = p(A)$ είναι μία 1-πολλαπλότητα, τότε λέμε ότι το M είναι διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα (*twofold branched cover*) του N διακλαδιζόμενο πάνω στο B . Το B λέγεται σύνολο διακλάδωσης (*branching set*) και βρίσκουμε ένα μόνο αντίγραφο του στο κάλυμμα M . Σε κάθε περίπτωση η p καλείται προβολική απεικόνιση (*projection map*), το N χώρος βάσης (*base space*) και η h ενέλιξη κάλυψης (*covering involution*).

Για παράδειγμα θα κατασκευάσουμε το διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα της $N = S^3$ διακλαδιζόμενο πάνω στον τετριμμένο κόμβο K . Ονομάζουμε *μεσημβρινό* (*meridian*) ενός στερεού τόρου μία απλή κλειστή καμπύλη στο σύνορο του στερεού τόρου, η οποία αποτελεί σύνορο ενός δίσκου στο εσωτερικό του, αλλά δεν αποτελεί σύνορο δίσκου στην επιφάνεια του. Ονομάζουμε *παράλληλο* (*longitude*) ενός στερεού τόρου μία απλή κλειστή καμπύλη στο σύνορο του στερεού τόρου, η οποία αποτελεί σύνορο μιας προσανατολισμένης επιφάνειας στο συμπληρωματικό του στερεού τόρου, αλλά δεν αποτελεί σύνορο δίσκου στην επιφάνεια του (Σχήμα 3.12). Ορίζουμε τώρα ως *μεσημβρινή περιστροφή* (*meridian rotation*) ενός στερεού τόρου την περιστροφή που απεικονίζει κάθε μεσημβρινό δίσκο στον εαυτό του, διατηρώντας σταθερό το κέντρο, ενώ απεικονίζει κάθε παράλληλο σε κάποιον άλλο παράλληλο. Αντίστοιχα ορίζουμε ως *παράλληλη περιστροφή* (*longitudinal rotation*) ενός στερεού τόρου την περιστροφή εκείνη που απεικονίζει κάθε παράλληλο στον εαυτό της, ενώ κάθε μεσημβρινό δίσκο σε έναν άλλο μεσημβρινό δίσκο.



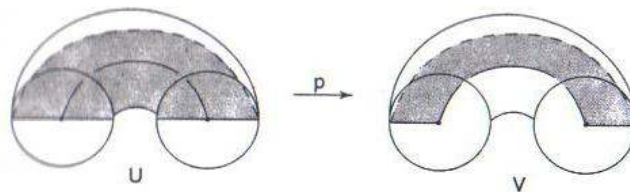
Σχήμα 3.12 Ο μεσημβρινός και ο παράλληλος ενός στερεού τόρου

Για την κατασκευή του διακλαδιζόμενου καλύμματος με δύο φύλλα της S^3 διακλαδιζόμενο πάνω στον τετριμμένο κόμβο K θα χρησιμοποιήσουμε το γεγονός ότι η S^3 προκύπτει από την ένωση δύο τετριμμένων στερεών τόρων, έτσι ώστε ο παράλληλος του ενός να ενώνεται με τον μεσημβρινό του άλλου. Ο ένας στερεός

τόρος απεικονίζεται στο Σχήμα 3.12, ενώ ο άλλος είναι ο συμπληρωματικός του στην S^3 .

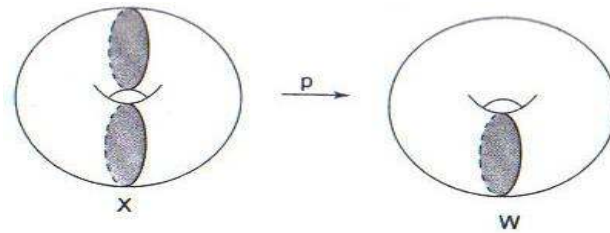
Έστω V ένας στερεός τόρος με κεντρική καμπύλη τον τετριμμένο κόμβο K , και W ο συμπληρωματικός του V στην S^3 . Ο κύκλος K θα είναι το σύνολο διακλάδωσης του διακλαδιζόμενου καλύμματος με δύο φύλλα, και επειδή ο K είναι η κεντρική καμπύλη του V , το διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα της S^3 διακλαδιζόμενο πάνω στον τετριμμένο κόμβο K θα προκύπτει από την ένωση του καλύμματος με δύο φύλλα του W και του διακλαδιζόμενου καλύμματος με δύο φύλλα του V διακλαδιζόμενο πάνω στον K .

Δείχνουμε αρχικά ότι το διακλαδιζόμενο κάλυμμα του στερεού τόρου V διακλαδιζόμενο πάνω στον τετριμμένο κόμβο K είναι ένας άλλος στερεός τόρος, έστω U . Για να το δούμε αυτό, έστω l ένας παράλληλος στην επιφάνεια του V . Ο l και η K ορίζουν ένα κυκλικό δακτύλιο στο εσωτερικό του V . Κόβουμε τον V κατά μήκος αυτό του δακτυλίου και εφαρμόζουμε στις εγκάρσιες τομές την αντίστοιχη κατασκευή της δισδιάστατης περίπτωσης, όπου M ήταν ένας κυκλικός δίσκος. Το αποτέλεσμα στον V θα είναι να ανοίξει σαν να είχε κοπεί στη μέση από ένα οριζόντιο επίπεδο. Παίρνοντας δύο αντίγραφα από αυτά και κολλώντας τα μεταξύ τους, προκύπτει ο U . Επομένως, ο U είναι το διακλαδιζόμενο κάλυμμα του στερεού τόρου V διακλαδιζόμενο πάνω στον τετριμμένο κόμβο K .



Σχήμα 3.13 Η απεικόνιση p τυλίγει μεσημβρινούς δίσκους του U γύρω από μεσημβρινούς δίσκους του V

Δείχνουμε τώρα ότι το κάλυμμα με δύο φύλλα του στερεού τόρου W είναι ένας άλλος στερεός τόρος, έστω X . Παίρνοντας το οριζόντιο επίπεδο που κόβει τον V και προεκτείνοντάς το σε ολόκληρο το χώρο, αυτό θα τέμνει τον W σε δύο μεσημβρινούς δίσκους. Κόβουμε τον W , λοιπόν, κατά μήκος του ενός μεσημβρινού δίσκου και ο X θα αποτελείται από δύο αντίγραφα του. Έστω η ενέλιξη κάλυψης h να είναι μία παράλληλη περιστροφή κατά 180° του στερεού τόρου, η οποία απεικονίζει κάθε μεσημβρινό δίσκο σε έναν άλλο αντιδιαμετρικά. Η προβολική απεικόνιση $p: X \rightarrow W$ είναι μία $2-1$ απεικόνιση, η οποία τυλίγει κάθε ένα από τα αντίγραφα που αποτελούν τον X στον W , και η οποία ενώνει τους δύο μεσημβρινούς δίσκους που ήταν στο σύνορο του X , βλέπε Σχήμα 3.14. Η απεικόνιση p είναι συνεχής, επί και απεικονίζει ανοικτά σύνολα σε ανοικτά. Επομένως, ο X είναι το κάλυμμα με δύο φύλλα του στερεού τόρου W .

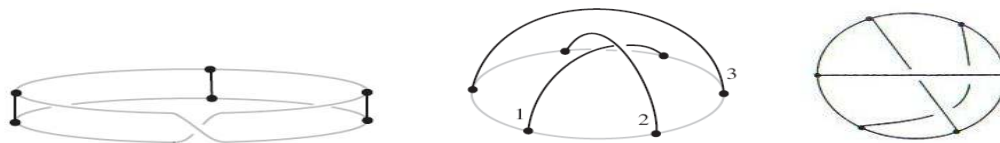


Σχήμα 3.14 Η απεικόνιση p τυλίγει τον X γύρω από τον W δύο φορές

Θα κολλήσουμε τώρα τα X και U με τρόπο ανάλογο με εκείνον που αρχικά είχαμε κολλήσει τα W και V , ώστε να προκύψει η S^3 . Για να είναι καλά ορισμένη η απεικόνιση p στην τομή των X και U , πρέπει να τα κολλήσουμε έτσι ώστε αν το $a \in X$ κολλήσει με το $b \in U$, τότε και το $p(a) \in W$ να κολλάει με το $p(b) \in V$. Θα πρέπει τέλος, η παράλληλη περιστροφή της p στο σύνορο του X να ταιριάζει με την μεσημβρινή περιστροφή της p στο σύνορο του U . Έτσι, η προβολική απεικόνιση και η ενέλιξη κάλυψης θα είναι καλά ορισμένες στο τόρο που είναι η τομή των X και U . Επομένως, κάθε μεσημβρινός του ενός στερεού τόρου θα ενώνεται με ένα παράλληλο του άλλου στερεού τόρου. Κολλώντας τα X και U λοιπόν, καταλήγουμε στην S^3 , και άρα η S^3 είναι το διακλαδιζόμενο κάλυμμα της S^3 διακλαδιζόμενο πάνω στον τετριμμένο κόμβο K .

Για να δούμε πως συνδέεται η παραπάνω κατασκευή με τις δισδιάστατες περιπτώσεις, ας πάρουμε ένα επίπεδο στην S^3 που να κόβει τον V εγκάρσια κατά μήκος ενός μεσημβρινού δίσκου και άρα θα κόβει το συμπληρωματικό του W κατά μήκος ενός κυκλικού δακτυλίου με σύνορο δύο παράλληλους του W . Όπως είπαμε, το κάλυμμα με δύο φύλλα μιας τέτοιας τομής του V είναι πάλι ένας κυκλικός δίσκος διακλαδιζόμενος πάνω στο κέντρο του, ενώ το κάλυμμα με δύο φύλλα μιας τομής του W είναι πάλι ένας κυκλικός δακτύλιος.

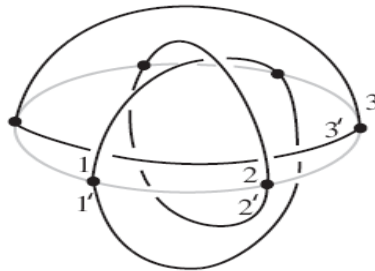
Θα κατασκευάσουμε τώρα το διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα της S^3 , διακλαδιζόμενο πάνω στο βρόγχο K μιας κανονικής σκάλας Moebius. Έστω η σκάλα Moebius M_3 , όπου οι συνδέσεις διαχωρίζονται από τις πλευρές.



Σχήμα 3.15 Η σκάλα Moebius M_3

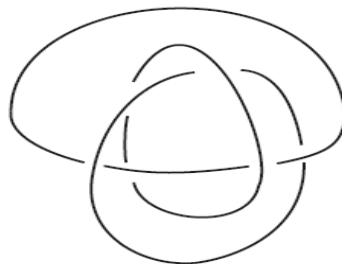
Υποθέτοντας ότι το παραπάνω γράφημα είναι εύκαμπτο, μπορούμε να ισοτοπήσουμε τις πλευρές της σκάλας σε έναν κύκλο που κείται στο επίπεδο. Έχοντας αριθμήσει τις συνδέσεις της σκάλας, το γράφημα θα έχει τη μορφή που απεικονίζεται δεξιά στο Σχήμα 3.15. Η κατασκευή του διακλαδιζόμενου καλύμματος επιτυγχάνεται ακολουθώντας τη διαδικασία του προηγούμενου παραδείγματος, όπου ο τετριμμένος

κόμβος είναι ο βρόγχος K . Επειδή ο K είναι ο τετριμμένος κόμβος, αυτό το διακλαδιζόμενο κάλυμμα είναι η ίδια η S^3 . Οι τρεις συνδέσεις της M_3 θεωρούμε ότι περικλείονται στον στερεό τόρο V . Κάνοντας μία μεσημβρινή περιστροφή του V κατά 180° παίρνουμε το δεύτερο αντίγραφο του που χρειαζόμαστε για την κατασκευή του διακλαδιζόμενου καλύμματος με δύο φύλλα. Ενώνοντας τα δύο αντίγραφα του V παίρνουμε έναν στερεό τόρο που περιέχει τον κρίκο L του Σχήματος 3.16. Αυτός ο τόρος μαζί με τον W δίνουν την S^3 . Άρα, το διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα του (S^3, M_3) είναι το (S^3, L) . Για να δούμε στην πράξη πως προκύπτει ο κρίκος L , ενώνουμε δύο αντίγραφα της τελευταίας εικόνας του Σχήματος 3.15 το ένα πάνω στο άλλο, κατά μήκος του K .



Σχήμα 3.16 Διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα της M_3

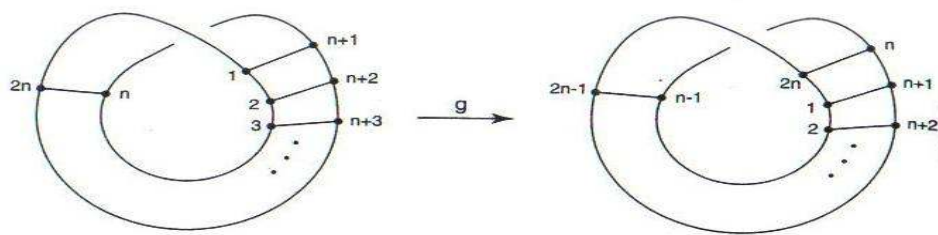
Παρατηρούμε ότι η σύνδεση 1 με την νέα σύνδεση $1'$, καθώς και οι συνδέσεις 2 με τη $2'$ και η 3 με τη $3'$, έχουν τα ίδια άκρα και άρα αν αγνοήσουμε τον γκρι κύκλο θα προκύψει ένας κρίκος με τρεις συνιστώσες, για τον οποίο ισχύει ότι κάθε συνιστώσα του συνδέεται με τις υπόλοιπες δύο.



Σχήμα 3.17 Κρίκος με τρεις συνιστώσες

Ο Jon Simon έδειξε ότι ο παραπάνω κρίκος είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρας και ότι η ιδιότητα της μη αμφιχειρίας του οδηγεί στο συμπέρασμα ότι και η σκάλα Moebius M_3 θα είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρη.

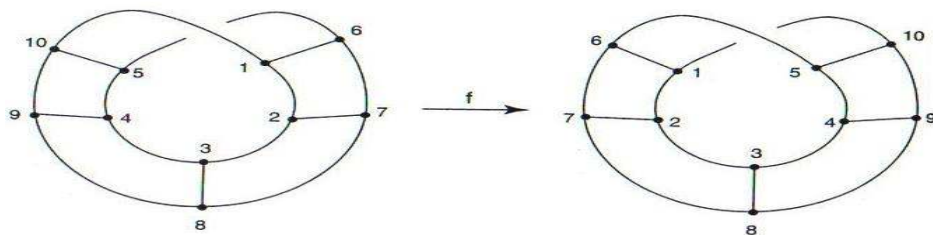
ΑΠΟΔΕΙΞΗ ΘΕΩΡΗΜΑΤΟΣ 3.4. (Simon; 1986) Παρατηρούμε κατ' αρχάς ότι για μία κανονική εμφύτευση M_n σκάλας Moebius στην S^3 υπάρχει ένας ομοιομορφισμός $g: (S^3, M_n) \rightarrow (S^3, M_n)$ που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου και απεικονίζει κάθε κορυφή i του K στην επόμενη της $i+1$.



Σχήμα 3.18 Ο ομοιομορφισμός g απεικονίζει κάθε κορυφή του K στην επόμενη της

Πράγματι, μπορούμε εύκολα να δούμε τον g περιστρέφοντας το γράφημα M_n γύρω από έναν κάθετο στο επίπεδο του άξονα και περιστρέφοντας τη σκάλα, ώστε να μετατοπιστεί η διασταύρωση στην άλλη μεριά της τελευταίας σύνδεσης, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.18.

Υπάρχει ακόμα ένας ομοιομορφισμός $f : (S^3, M_n) \rightarrow (S^3, M_n)$ που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου, ο οποίος αντιστρέφει τον προσανατολισμό του βρόγχου K , δηλαδή αντιστρέφει τη σειρά των κορυφών του K , όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.19.



Σχήμα 3.19 Ο ομοιομορφισμός f περιστρέφει τη σκάλα Moebius

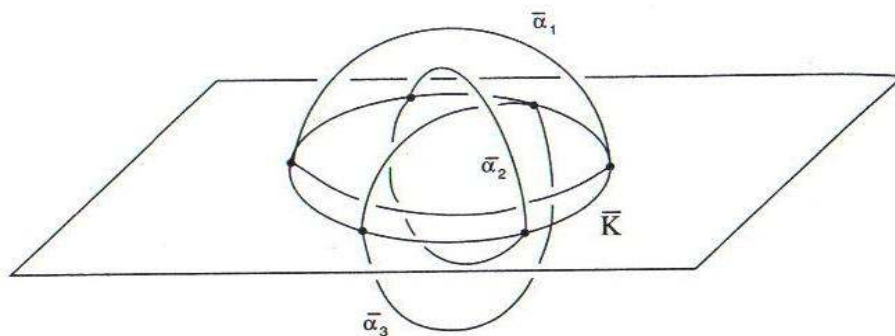
Μπορούμε να δούμε τον f περιστρέφοντας τη σκάλα Moebius κατά 180° στον χώρο ως προς κατακόρυφο άξονα. Αν υπάρχουν περιττού πλήθους συνδέσεις, τότε ο ομοιομορφισμός αυτός θα αφήσει σταθερή μία σύνδεση, ενώ αν οι συνδέσεις είναι άρτιου πλήθους, τότε καμία σύνδεση δεν θα μείνει σταθερή μέσω του ομοιομορφισμού f .

Θα δείξουμε τώρα ότι δεν υπάρχει ομοιομορφισμός $h : (S^3, M_n) \rightarrow (S^3, M_n)$ που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, τέτοιος ώστε $h(K) = K$. Έστω ότι υπάρχει. Η συνεχώς αύξουσα αρίθμηση των κορυφών του βρόγχου K δίνει έναν προσανατολισμό στον K . Γνωρίζουμε ότι ο h απεικονίζει κορυφές σε κορυφές, έτσι ώστε γειτονικές κορυφές να αντιστοιχούν σε γειτονικές κορυφές. Άρα, εφόσον $h(K) = K$, ο ομοιομορφισμός h είτε περιστρέφει τον βρόγχο K γύρω από έναν άξονα κάθετο στο επίπεδο και μεταθέτει έτσι τις κορυφές του, είτε αντιστρέφει τον προσανατολισμό του K . Συνθέτοντας, αν χρειαστεί, τον h με τον f , προκύπτει ένας

ομοιομορφισμός του (S^3, M_n) , που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου και διατηρεί τον προσανατολισμό του K . Αν στη συνέχεια συνθέσουμε τον h με κάποια δύναμη του g , προκύπτει ένας ομοιομορφισμός του (S^3, M_n) , που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου και διατηρεί σταθερές τις κορυφές του M_n . Θα καλούμε και πάλι αυτόν τον ομοιομορφισμό h . Θεωρούμε τώρα την σκάλα Moebius M_3 που προκύπτει από την M_n αν αφαιρέσουμε όλες εκτός από τρεις συνδέσεις. Επειδή ο h αφήνει αμετάβλητη κάθε κορυφή της M_n , έχουμε ότι $h(M_3) = M_3$. Άρα, ο h είναι ένας ομοιομορφισμός του (S^3, M_3) που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, αφήνει αμετάβλητες και τις έξι κορυφές της M_3 και $h(K) = K$.

Επειδή η M_3 είναι κανονικά εμφυτευμένη στο S^3 σε μορφή λωρίδας Moebius, ο βρόγχος K είναι ο τετριμμένος κόμβος. Για ευκολία μετασχηματίζουμε τον K σε επίπεδο κύκλο και η M_3 πλέον φαίνεται στο Σχήμα 3.15.

Θεωρούμε τώρα το διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα της S^3 , το οποίο διακλαδίζεται πάνω στον K , το οποίο όπως είδαμε είναι η ίδια η S^3 . Έστω τώρα $p: S^3 \rightarrow S^3$ η προβολική απεικόνιση και έστω \overline{M}_3 , \overline{K} , \overline{a}_1 , \overline{a}_2 και \overline{a}_3 οι αντίστροφες εικόνες των M_3, K και των συνδέσεων a_1, a_2 και a_3 αντίστοιχα, μέσω της απεικόνισης p . Είναι δηλαδή $\overline{M}_3 = p^{-1}(M_3) = \{a \in S^3 \mid p(a) \in M_3\}$ και $\overline{K} = p^{-1}(K) = \{a \in S^3 \mid p(a) \in K\}$. Όπως είδαμε, η ενέλιξη κάλυψης περιστρέφει μεσημβρινά κατά 180° έναν στερεό τόρο γύρω από το \overline{K} , σταθεροποιώντας κάθε σημείο του \overline{K} . Οι συνδέσεις a_1, a_2 και a_3 έχουν τα άκρα τους στο διακλαδιζόμενο σύνολο K και άρα η αντίστροφη εικόνα $\overline{a}_1, \overline{a}_2, \overline{a}_3$ κάθε σύνδεσης είναι μια απλή κλειστή καμπύλη στο διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.20 ή στη κατοπτρική του εικόνα. Ο αριθμός περιέλιξης κάθε ζευγαριού από αυτές τις καμπύλες ισούται με ± 1 , ανάλογα με τον προσανατολισμό τους.



Σχήμα 3.20 Οι \overline{a}_1 , \overline{a}_2 και \overline{a}_3

Ο ομοιομορφισμός h , που υποθέσαμε ότι υπάρχει, αφήνει το διακλαδιζόμενο σύνολο K συνολοθεωρητικά αναλλοίωτο και άρα μπορεί να οριστεί ομοιομορφισμός

\bar{h} του διακλαδιζόμενου καλύμματος με δύο φύλλα που να αντιστοιχεί στον h , με την έννοια ότι ο $\bar{h} : S^3 \rightarrow S^3$ έχει την ιδιότητα ότι η σύνθεση $p \circ \bar{h}$ να ισούται με τη σύνθεση $h \circ p$. Έτσι, δοθέντων δύο σημείων a και b στο κάλυμμα, τα οποία απεικονίζονται μέσω του p στο ίδιο σημείο c του χώρου βάσης, τα $\bar{h}(a)$ και $\bar{h}(b)$ θα απεικονίζονται μέσω του p στο ίδιο σημείο $h(c)$. Από τις ιδιότητες του h προκύπτει ότι $\bar{h}(\overline{M_3}) = \overline{M_3}$, $\bar{h}(\overline{K}) = \overline{K}$, ο \bar{h} αφήνει σταθερές τις κορυφές στο $\overline{M_3}$ και ότι ο \bar{h} αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Άρα θα ισχύει ότι $\bar{h}(\overline{a_i}) = \overline{a_i}$, για κάθε i .

Επιλέγουμε προσανατολισμό στις καμπύλες $\overline{a_1}$, $\overline{a_2}$ και $\overline{a_3}$ έτσι ώστε $Lk(\overline{a_1}, \overline{a_2}) = 1$ και $Lk(\overline{a_1}, \overline{a_3}) = 1$. Από το Σχήμα 3.20 βλέπουμε ότι θα είναι και $Lk(\overline{a_2}, \overline{a_3}) = 1$. Όπως όμως είδαμε στο Κεφάλαιο 2 θα είναι $Lk[\bar{h}(\overline{a_i}), \bar{h}(\overline{a_j})] = -Lk(\overline{a_i}, \overline{a_j})$, αφού ο $\bar{h} : S^3 \rightarrow S^3$ είναι ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Επομένως, $Lk[\bar{h}(\overline{a_i}), \bar{h}(\overline{a_j})] = -1$, για κάθε $i \neq j$. Υποθέτουμε αρχικά ότι ο \bar{h} διατηρεί τον προσανατολισμό της $\overline{a_1}$ και άρα θα ισχύουν οι σχέσεις $Lk[\bar{h}(\overline{a_1}), \bar{h}(\overline{a_2})] = -Lk[\overline{a_1}, \bar{h}(\overline{a_2})] = -1$, $Lk[\bar{h}(\overline{a_1}), \bar{h}(\overline{a_3})] = -Lk[\overline{a_1}, \bar{h}(\overline{a_3})] = -1$. Επομένως ο \bar{h} θα πρέπει να αντιστρέφει τον προσανατολισμό των $\overline{a_2}$, $\overline{a_3}$ και άρα θα ισχύει ότι $Lk[\bar{h}(\overline{a_2}), \bar{h}(\overline{a_3})] = Lk(-\overline{a_2}, -\overline{a_3})$. Από τις ιδιότητες όμως του αριθμού περιέλιξης έχουμε ότι $Lk(-\overline{a_2}, -\overline{a_3}) = Lk(\overline{a_2}, \overline{a_3})$ και όπως είδαμε παραπάνω $Lk(\overline{a_2}, \overline{a_3}) = 1$. Άτοπο, εφόσον $Lk[\bar{h}(\overline{a_2}), \bar{h}(\overline{a_3})] = -1$. Με παρόμοιο τρόπο καταλήγουμε σε άτοπο αν θεωρήσουμε ότι ο ομοιομορφισμός \bar{h} αντιστρέφει τον προσανατολισμό της $\overline{a_1}$. Επομένως δεν μπορεί να υπάρχει ο ομοιομορφισμός h που θεωρήσαμε στην αρχή της απόδειξης. \square

Επομένως το γράφημα κάθε μοριακής σκάλας Moebius με τρεις ή περισσότερες συνδέσεις είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο στην S^3 (και άρα και στον \mathbb{R}^3), άρα και χημικώς μη αμφίχειρο. Επομένως, τα μόρια με μοριακό γράφημα που περιλαμβάνει μια κανονική εμφύτευση μιας σκάλας Moebius, μαζί με την κατοπτρική τους εικόνα, αποτελούν τοπολογικά ισομερή.

3.2 ΕΓΓΕΝΩΣ ΜΗ ΑΜΦΙΧΕΙΡΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ

Όπως θα δούμε σε αυτή τη παράγραφο, το θεώρημα του Simon γενικεύτηκε από την Flapan για κάθε εμφύτευση μιας σκάλας Moebius M_n , με $n \geq 3$ περιττό αριθμό.

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.10. (Flapan; 1989) Έστω M_n μια τυχαία εμφύτευση με n συνδέσεις μιας σκάλας Moebius, όπου $n \geq 3$. Έστω ακόμα ο $h : (S^3, M_n) \rightarrow (S^3, M_n)$ ένας

ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, τέτοιος ώστε $h(K) = K$, όπου K ο βρόγχος της M_n . Τότε, δεν υπάρχει σύνδεση a_i τέτοια ώστε $h(a_i) = a_i$.

Η απόδειξη του Θεωρήματος 3.10 χρησιμοποιεί το διακλαδιζόμενο κάλυμμα με δύο φύλλα της S^3 , διακλαδιζόμενο πάνω στο βρόγχο K , ο οποίος μπορεί να είναι οποιοσδήποτε κόμβος αντί του τετριμμένου.

Σε αντίθεση με το Θεώρημα 3.4, στο Θεώρημα 3.10 δεν υπάρχει καμία υπόθεση για τον τρόπο με τον οποίο το γράφημα M_n είναι εμφυτευμένο και άρα ο βρόγχος K , καθώς και οποιαδήποτε σύνδεση μπορεί να περιέχει κόμβους.

Από το Λήμμα 3.5 προκύπτει ότι ανεξάρτητα από τον τρόπο που η M_n είναι εμφυτευμένη, αν $n > 3$, τότε κάθε ομοιομορφισμός $h: (S^3, M_n) \rightarrow (S^3, M_n)$ θα έχει την ιδιότητα ότι $h(K) = K$. Άρα, όπως και στο Θεώρημα 3.10, η υπόθεση ότι $h(K) = K$ απαιτείται μόνο στην περίπτωση $n = 3$.

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.11. (*Flapan; 1989*) Έστω σκάλα Moebius M_n τυχαία εμφυτευμένη στην S^3 , όπου $n \geq 3$ περιττός φυσικός αριθμός. Τότε δεν υπάρχει ομοιομορφισμός $h: (S^3, M_n) \rightarrow (S^3, M_n)$ που να αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου τέτοιος ώστε $h(K) = K$.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω ότι υπάρχει τέτοιος ομοιομορφισμός h τέτοιος ώστε $h(K) = K$. Τότε, όπως είδαμε παραπάνω, ο h είτε περιστρέφει είτε κατοπτρίζει τις κορυφές του K .

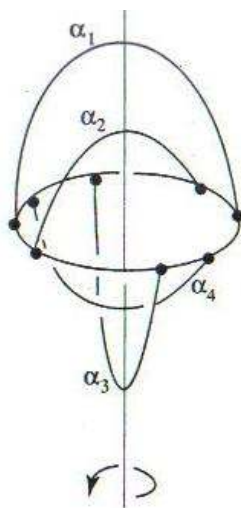
Έστω ότι ο h περιστρέφει τις κορυφές του K . Τότε ο h θα περιστρέφει και τις συνδέσεις του K και θα υπάρχει ελάχιστος αριθμός r τέτοιος ώστε ο h^r να απεικονίζει κάθε σύνδεση στον εαυτό της. Επειδή ο h περιστρέφει τις συνδέσεις, ο αριθμός r θα διαιρεί τον αριθμό των συνδέσεων n και επομένως ο ομοιομορφισμός h^n θα απεικονίζει επίσης κάθε σύνδεση στον εαυτό της. Επειδή τώρα n περιττός, ο h^n είναι ομοιομορφισμός του (S^3, M_n) που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, τέτοιος ώστε $h^n(K) = K$ και $h^n(a_i) = a_i, \forall i$, άτοπο από Θεώρημα 3.10.

Άρα λοιπόν ο ομοιομορφισμός h κατοπτρίζει τις κορυφές του K και επάγει έτσι έναν αυτομορφισμό τάξης δύο στις κορυφές του K και στις συνδέσεις. Επειδή n περιττός, θα υπάρχει τουλάχιστον μία σύνδεση a_i τέτοια ώστε $h(a_i) = a_i$, άτοπο από Θεώρημα 3.10.

Επομένως δεν υπάρχει ομοιομορφισμός $h: (S^3, M_n) \rightarrow (S^3, M_n)$ που να αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου τέτοιος ώστε $h(K) = K$, όταν $n \geq 3$ περιττός φυσικός αριθμός. \square

Από το Θεώρημα 3.11 έπεται ότι τα μόρια με μοριακό γράφημα που περιλαμβάνει μία οποιαδήποτε εμφύτευση μιας σκάλας Moebius είναι χημικά μη αμφίχειρο, και συνεπώς μαζί με την κατοπτρική τους εικόνα, αποτελούν τοπολογικά ισομερή.

Σε αντίθεση με το αποτέλεσμα του Θεωρήματος 3.11, αν μία σκάλα Moebius έχει άρτιο αριθμό συνδέσεων, τότε υπάρχει εμφύτευσή της που είναι αμφίχειρη [12]. Στο Σχήμα 3.21 παρουσιάζεται μία αμφίχειρη εμφύτευση της M_4 . Η κατοπτρική της εικόνα προκύπτει με περιστροφή γύρω από τον κατακόρυφο άξονα κατά 90° . Μπορούμε να προσθέσουμε συμμετρικά ζευγάρια συνδέσεων στο πάνω και κάτω μέρος του γραφήματος με τέτοιο τρόπο ώστε, για κάθε άρτιο αριθμό n , να έχουμε μία αμφίχειρη εμφύτευση της M_n .



Σχήμα 3.21 Τοπολογικός αμφίχειρη εμφύτευση της M_4

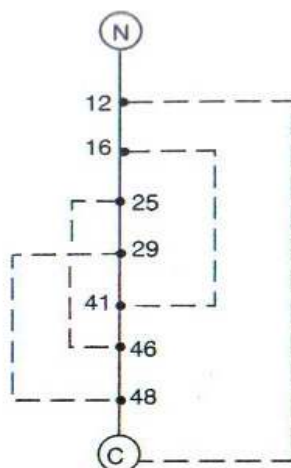
Τα παραπάνω μας οδηγούν στον ορισμό της εγγενούς μη αμφιχειρίας.

ΟΡΙΣΜΟΣ 3.12. Ένα αριθμημένο ή μη γράφημα G καλείται *εγγενώς μη αμφίχειρο* (*intrinsically chiral*) αν κάθε εμφύτευση του G στον \mathbb{R}^3 είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρη.

ΠΑΡΑΤΗΤΡΗΣΗ 3.13. Συνοψίζοντας, αν χρωματίσουμε τις πλευρές της M_3 έτσι ώστε να ξεχωρίζουν από τις συνδέσεις, τότε από το Θεώρημα 3.11 έχουμε ότι η M_3 είναι εγγενώς μη αμφίχειρη. Αν τώρα $n > 3$ περιττός και χρωματίσουμε τις πλευρές, τότε από το Λήμμα 3.5 και το Θεώρημα 3.11, έχουμε πάλι ότι η M_n είναι εγγενώς μη αμφίχειρη.

3.3 ΣΥΓΓΕΝΙΚΑ ΜΟΡΙΑΚΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ

Υπάρχουν πολλά είδη μορίων που το μοριακό τους γράφημα σχετίζεται με κάποιο τρόπο με το γράφημα μιας σκάλας Moebius. Οι Liang και Mislow το 1994 παρατήρησαν ότι κάποιες πρωτεΐνες έχουν τη μορφή της M_3 (Liang, C., Mislow, “*Topological chirality of proteins*”, *J. Am. Chem. Soc.* **116**, (1994b), 3588-3592). Για παράδειγμα, στο Σχήμα 3.22 παρουσιάζεται η πρωτεΐνη *variant-3 scorpion neurotoxin* από τις *Centruroides sculpturatus* Ewing.

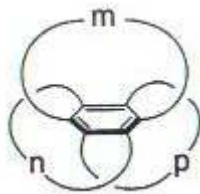


Σχήμα 3.22 Η πρωτεΐνη αυτή είναι εγγενώς μη αμφίχειρας

Οι πρωτεΐνες είναι μεγάλα οργανικά μόρια, αποτελούμενα από αμινοξέα, τα οποία σχηματίζουν μια γραμμική αλυσίδα και ενώνονται μεταξύ τους με πεπτιδικούς δεσμούς. Μια αλυσίδα αμινοξέων που ενώνονται με πεπτιδικούς δεσμούς καλείται πολυπεπτιδική αλυσίδα, η οποία από τη μία μεριά καταλήγει σε NH_3^+ ενώ από την άλλη σε CO_2^- . Για να ξεχωρίζουμε τα δύο τελευταία στοιχεία μιας πολυπεπτιδικής αλυσίδας, καλούμε το πρώτο N τελικό και το δεύτερο C τελικό. Στο παραπάνω σχήμα, η πολυπεπτιδική αλυσίδα είναι το ευθύγραμμο τμήμα με άκρα τα N και C . Οι διακεκομμένες γραμμές δηλώνουν δεσμούς διθειούχου άλατος, δηλαδή δεσμούς που συνδέουν ένα αμινοξύ της πολυπεπτιδικής αλυσίδας με ένα άλλο αμινοξύ της αλυσίδας. Οι αρίθμηση επάνω στην αλυσίδα μας βοηθά να καταλαβαίνουμε ποιο αμινοξύ συνδέεται με ποιο με δεσμούς διθειούχου άλατος. Εδώ βλέπουμε ότι το δέκατο έκτο και το τεσσαρακοστό πρώτο αμινοξύ ενώνονται με δεσμούς διθειούχου άλατος.

Έστω K η κλειστή πολυγωνική γραμμή που ξεκινά από τη κορυφή με αρίθμηση 12, μέσα από τις διακεκομμένες γραμμές να φτάνει στο C τελικό και τέλος, μέσω της πολυπεπτιδικής αλυσίδας και διερχόμενη από όλες τις αριθμημένες κορυφές να καταλήγει στη κορυφή 12. Οι εναπομείναντες δεσμοί διθειούχου άλατος αντιπροσωπεύουν τις συνδέσεις μιας σκάλας Moebius. Στη πραγματικότητα, αυτή η πρωτεΐνη είναι η M_3 με μία ακόμα κορυφή (N τελικό) και μία ακόμα πλευρά που ενώνει το N τελικό με το υπόλοιπο γράφημα. Οι συνδέσεις διαφέρουν χημικά από τον βρόγχο K , καθώς οι συνδέσεις είναι ακριβώς εκείνοι οι τρεις δεσμοί διθειούχου άλατος οι οποίοι δεν περιέχουν το τελικό C . Κάθε ομοιομορφισμός, τέλος, αυτού του γραφήματος στον εαυτό του θα απεικονίζει την M_3 συνολοθεωρητικά και το N τελικό στον εαυτό του. Από το Θεώρημα 3.11 προκύπτει ότι η πρωτεΐνη του Σχήματος 3.22 είναι εγγενώς μη αμφίχειρη.

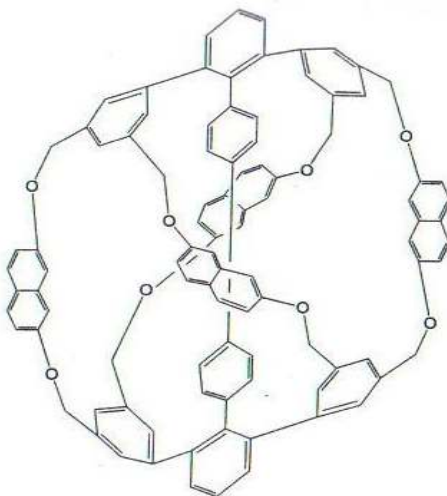
Ένα άλλο παράδειγμα μοριακού γραφήματος που σχετίζεται με σκάλα Moebius με τρεις συνδέσεις είναι η $[m][n][p]$ -*paracyclophane*, που προτάθηκε από τον Nakazaki το 1984.



Σχήμα 3.23 Η $[m][n][p]$ -paracyclophane είναι εγγενώς μη αμφίχειρη

Εδώ, τα m, n και p δηλώνουν τον αριθμό που εμφανίζεται μια συγκεκριμένη χημική ουσία, για παράδειγμα CH_2 , στη μοριακή αλυσίδα. Το παραπάνω μοριακό γράφημα είναι μια εμφύτευση της M_3 , όπου οι πλευρές της σκάλας είναι ο δακτύλιος βενζολίου και οι συνδέσεις οι m, n και p αλυσίδες. Αυτό σημαίνει ότι οι πλευρές είναι διαφορετικές από τις συνδέσεις και άρα η $[m][n][p]$ -paracyclophane είναι εγγενώς μη αμφίχειρη.

Πρέπει να σημειωθεί ότι ως μοριακό γράφημα, μία σκάλα Moebius M_n με n περιττό δεν είναι απαραίτητα χημικά εγγενώς μη αμφίχειρη. Για παράδειγμα, στο Σχήμα 3.24 παρουσιάζεται το γράφημα του μορίου Kuratowski cyclophane, που έχει τη γενική μορφή της M_3 .

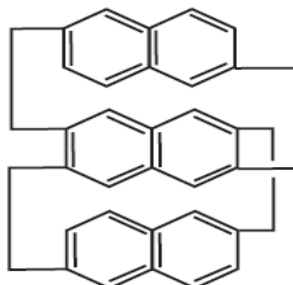


Σχήμα 3.24 Το μόριο Kuratowski cyclophane είναι τοπολογικώς αμφίχειρας

Μόνο η κεντρική σύνδεση είναι διαφορετική από τις πλευρές της σκάλας, ενώ οι δύο διαγώνιες συνδέσεις δεν ξεχωρίζουν από τις πλευρές. Το παραπάνω γράφημα μπορεί να μετασχηματιστεί έτσι ώστε να είναι σαν το τοπολογικά αμφίχειρο γράφημα του Σχήματος 3.24, και άρα και αυτό το μοριακό γράφημα θα είναι τοπολογικά αμφίχειρο. Το 1995 συντέθηκε το μόριο Kuratowski cyclophane και αποδείχθηκε ότι είναι και χημικώς αμφίχειρο (Chen, C.-T., P. Gantzel, J. S. Siegel, K. K. Baldbridge, R. B. English, D. M. Ho, "Synthesis and structure of the nanodimensional

multicyclophane “Kuratowski Cyclophane,” an achiral molecule with non-planar $K_{3,3}$ topology”, Angew. Chem. Int. Ed. Eng. 34, (1995), 2657-2660).

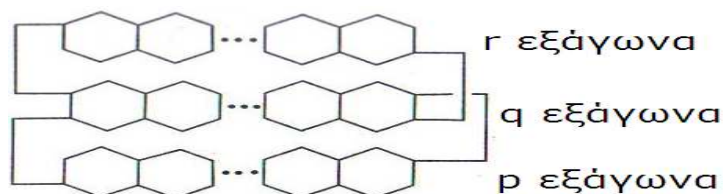
Η *naphthalenophane* τριών στρωμάτων είναι ένα ακόμα παράδειγμα μορίου με μοριακό γράφημα συγγενές με τη σκάλα Μοebius. Συντέθηκε για πρώτη φορά το 1983 από τους Otsubo, Ogura και Misumi και παρουσιάζεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 3.25 Η *naphthalenophane* τριών στρωμάτων

Τα εξάγωνα ως συνήθως αντιπροσωπεύουν δακτυλίους βενζολίου. Δύο δακτύλιοι βενζολίου που είναι προσκολλημένοι ο ένας στον άλλο φτιάχνουν τη ναφθαλίνη. Το γράφημα αυτό έχει δομή παρόμοια με τη δομή της σκάλας Μοebius M_3 , με τις δέκα πλευρές γύρω από την κεντρική ναφθαλίνη να παίζουν το ρόλο του βρόγχου K , τη πλευρά που συνδέει τα δύο εξάγωνα στη κεντρική ναφθαλίνη να παίζει το ρόλο μιας σύνδεσης της M_3 και τέλος η πρώτη και η τρίτη ναφθαλίνη, οι οποίες συνδέονται με τον βρόγχο K με πλευρές, παίζουν το ρόλο των δύο άλλων συνδέσεων της M_3 . Οι Liang και Mislow παρατήρησαν ότι αν αντικαταστήσουμε την πρώτη και τρίτη ναφθαλίνη με μια απλή πλευρά αντίστοιχα, τότε το γράφημα που προκύπτει είναι η M_3 με περισσότερες πλευρές και κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι το παραπάνω γράφημα είναι εγγενώς μη αμφίχειρο. Η παραπάνω διαδικασία όμως δεν μπορεί να θεωρηθεί ως απόδειξη της εγγενούς μη αμφιχειρίας του γραφήματος, γιατί ο ορισμός της τοπολογικής αμφιχειρίας δεν επιτρέπει την αντικατάσταση απλών κλειστών καμπυλών με μια απλή πλευρά και γιατί το Θεώρημα 3.10 δεν μπορεί να εφαρμοστεί άμεσα στο γράφημα. Χρησιμοποιώντας όμως το Θεώρημα 3.11 μπορούμε να αποδείξουμε την εγγενώς μη αμφιχειρία της *naphthalenophane* τριών στρωμάτων και μπορούμε, μάλιστα, να αποδείξουμε κάτι πολύ ισχυρότερο:

Θεωρούμε το γράφημα $G(p,q,r)$, που κατασκευάζεται από το γράφημα της *naphthalenophane* τριών στρωμάτων αν αντί για τις τρεις ομάδες των δύο εξαγώνων που υπήρχαν στο αρχικό γράφημα, τοποθετήσουμε αντίστοιχα p, q, r εξαγωνα.



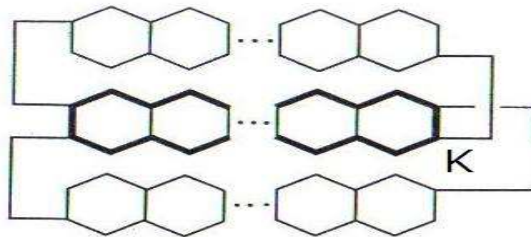
Σχήμα 3.26 Το γράφημα $G(p,q,r)$

Παρατηρούμε ότι κάθε γωνία στο γράφημα αντιπροσωπεύει μια κορυφή και ότι η *naphthalenophane* τριών στρωμάτων είναι η $G(2,2,2)$. Θα αποδείξουμε ότι όταν οι αριθμοί p, q, r είναι άρτιοι, τότε το γράφημα $G(p, q, r)$ είναι εγγενώς μη αμφίχειρο.

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.14. (*Flapan and Forcum; 1998*) Αν p, q, r άρτιοι αριθμοί, τότε το γράφημα $G(p, q, r)$ είναι εγγενώς μη αμφίχειρο.

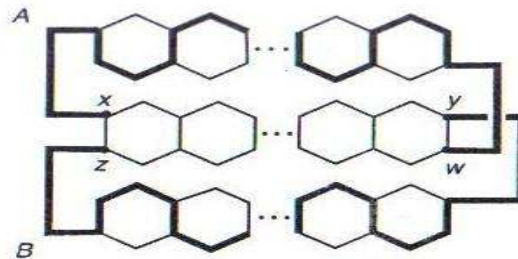
ΑΠΟΔΕΙΞΗ Θα αποδείξουμε το ζητούμενο δια της άτοπου απαγωγής. Έστω p, q, r άρτιοι αριθμοί και έστω ότι υπάρχει τοπολογικώς αμφίχειρη εμφύτευση του γραφήματος $G(p, q, r)$ στην S^3 . Θα δείξουμε ότι από τη παραπάνω υπόθεση συνεπάγεται ότι υπάρχει εμφύτευση της M_3 στην S^3 τέτοια ώστε να υπάρχει ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου $h: S^3 \rightarrow S^3$ τέτοιος ώστε $h(M_3) = M_3$ και $h(K) = K$.

Από την υπόθεσή μας υπάρχει ένας ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου $h: S^3 \rightarrow S^3$ τέτοιος ώστε $h[G(p, q, r)] = G(p, q, r)$. Η εμφύτευση του $G(p, q, r)$ μπορεί να είναι διαφορετική από αυτή του παραπάνω σχήματος, αλλά χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε το γράφημα του παραπάνω σχήματος ως την συγκεκριμένη εμφύτευση του $G(p, q, r)$. Ο ομοιομορφισμός h απεικονίζει κάθε απλή, κλειστή καμπύλη με έξι κορυφές σε απλή, κλειστή καμπύλη με έξι κορυφές και επειδή οι μοναδικές απλές, κλειστές καμπύλες με έξι κορυφές είναι τα εξάγωνα, έπεται ότι ο h απεικονίζει κάθε εξάγωνο στον εαυτό του ή σε κάποιο άλλο εξάγωνο του γραφήματος. Ακόμα, ο ομοιομορφισμός h θα απεικονίζει γειτονικά εξάγωνα σε γειτονικά εξάγωνα και άρα ο h θα απεικονίζει κάθε αλυσίδα εξαγώνων σε αλυσίδα με τον ίδιο αριθμό εξαγώνων. Η αλυσίδα που αποτελείται από q εξάγωνα είναι η μόνη αλυσίδα εξαγώνων στην οποία τα δύο εξωτερικά εξάγωνα έχουν τέσσερις κορυφές βαθμού τρία και άρα ο h θα πρέπει να απεικονίζει την αλυσίδα αυτή στον εαυτό της (πιθανώς στρέφοντάς την). Έστω τώρα K η περιμετρική καμπύλη της αλυσίδας. Ο κύκλος K περιέχει $4q+2$ πλευρές, γιατί κάθε εξάγωνο στην αλυσίδα συνεισφέρει στον K τις τέσσερις εξωτερικές πλευρές εκτός από τα δύο εξωτερικά εξάγωνα που συνεισφέρουν στο K από πέντε πλευρές. Ο ομοιομορφισμός h θα απεικονίζει το σύνολο K στον εαυτό του, χωρίς βέβαια αυτό να σημαίνει ότι το K μένει σημειακά αναλλοίωτο. Ο h μπορεί να εναλλάσσει τη δεξιά πλευρά του K με την αριστερή ή την πάνω με την κάτω.



Σχήμα 3.27 Ο κλειστός κύκλος K

Αν, επιπλέον, $p \neq r$, τότε ο ομοιομορφισμός h θα απεικονίζει την p -αλυσίδα στον εαυτό της και την q -αλυσίδα στον εαυτό της. Αν $p = q$ είτε ο h απεικονίζει τη κάθε αλυσίδα στον εαυτό της, είτε απεικονίζει τη μία αλυσίδα στην άλλη. Έστω τώρα x, y, z, w οι κορυφές που φαίνονται στο Σχήμα 3.28.

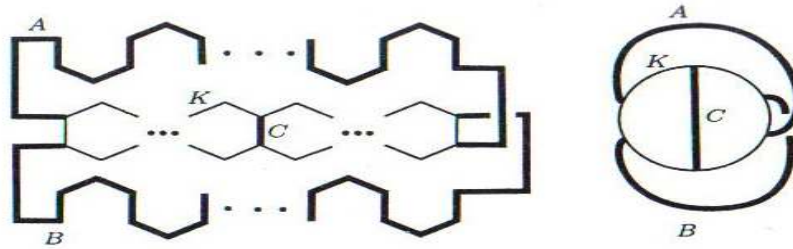


Σχήμα 3.28 Τα τόξα A και B

Επειδή ο h απεικονίζει το K στον εαυτό του και τις άλλες αλυσίδες είτε στους εαυτούς τους, είτε τη μία στην άλλη, έπεται ότι ο h θα απεικονίζει το σύνολο των σημείων $\{x, y, w, z\}$ στον εαυτό του, είτε αφήνοντας τα $\{x, w\}$ και $\{y, z\}$ συνολοθεωρητικά αναλλοίωτα, είτε εναλλάσσοντάς τα. Από την υπόθεσή μας, ο αριθμός r είναι άρτιος και άρα τα r εξάγωνα στην αλυσίδα εμφανίζονται σε ζευγάρια. Το τόξο λοιπόν που απεικονίζεται να διαγράφει την αλυσίδα από αριστερά προς τα δεξιά και που κατευθύνεται αρχικά προς τα κάτω και μετά προς τα πάνω, θα περιέχει δύο περισσότερες πλευρές από το τόξο της ίδιας αλυσίδας από αριστερά προς τα δεξιά, που αρχικά κατευθύνεται προς τα πάνω και μετά προς τα κάτω. Πιο συγκεκριμένα, και επειδή ο αριθμός r είναι άρτιος, υπάρχει μοναδικό τόξο A στο $G(p, q, r) - K$ χωρίς αυτοτομές και με άκρα τα x και w , τέτοιο ώστε το A να περιέχει $7 + 3r$ πλευρές. Με τον ίδιο τρόπο και επειδή ο αριθμός p είναι άρτιος, υπάρχει μοναδικό τόξο B στο $G(p, q, r) - K$ χωρίς αυτοτομές και με άκρα τα y και z , τέτοιο ώστε το B να περιέχει $7 + 3p$ πλευρές. Ο ομοιομορφισμός h είτε θα απεικονίζει το κάθε τόξο A, B στον εαυτό του, είτε θα τα εναλλάσσει εάν $r = p$.

Επιπλέον, επειδή q άρτιος, θα υπάρχει μοναδική πλευρά C που χωρίζει την q -αλυσίδα στη μέση, δηλαδή έτσι ώστε κάθε συνιστώσα του $K - C$ να περιέχει ακριβώς τις μισές πλευρές του $K - C$. Λόγω του ότι η C είναι η μοναδική πλευρά με αυτήν ιδιότητα και $h(K) = K$, έπεται ότι $h(C) = C$.

Έστω τώρα M το γράφημα που προκύπτει αν θεωρήσουμε την ένωση των K, A, B και C . Ισχύει ότι $h(K) = K$, $h(C) = C$ και ο h είτε εναλλάσσει τα A και B , είτε τα απεικονίζει κάθε ένα στον εαυτό του. Σε κάθε περίπτωση έπεται ότι $h(M) = M$. Στο Σχήμα 3.29 παρουσιάζεται το M .



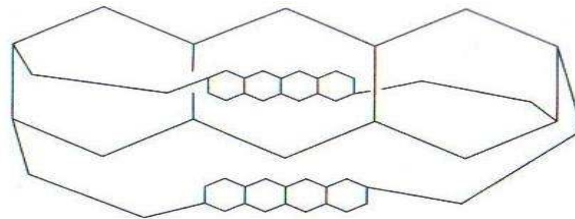
Σχήμα 3.29 Το γράφημα $G(p, q, r)$ περιέχει μία σκάλα Moebius με τρεις συνδέσεις

Στα δεξιά παρουσιάζεται το M ως εμφυτευμένη σκάλα Moebius με τρεις συνδέσεις, με βρόγχο K και συνδέσεις τα A, B και C .

Επομένως, ο $h : (S^3, M) \rightarrow (S^3, M)$ είναι ένας ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου τέτοιος ώστε $h(K) = K$. Άτοπο από Θεώρημα 3.11. Άρα, όταν οι αριθμοί p, q, r είναι άρτιοι, το γράφημα $G(p, q, r)$ είναι εγγενώς μη αμφίχειρο.

□

Στην περίπτωση που τουλάχιστον ένας από τους αριθμούς p, q, r είναι περιττός, αποδεικνύεται (Flapan) ότι το γράφημα $G(p, q, r)$ έχει τοπολογικώς αμφίχειρη εμφύτευση και άρα δεν είναι εγγενώς μη αμφίχειρο. Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται μια τοπολογικώς αμφίχειρη εμφύτευση του γραφήματος $G(4, 3, 4)$. Για να το δούμε αυτό περιστρέφουμε κατ' αρχάς το γράφημα κατά 180° στο επίπεδό του και στη συνέχεια ισοτοπούμε το πάνω τόξο στην αρχική του θέση.



Σχήμα 3.30 Μία τοπολογικώς αμφίχειρη εμφύτευση του γραφήματος $G(4, 3, 4)$

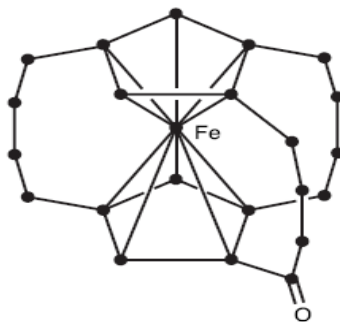
Στην απόδειξη του Θεωρήματος 3.14 η Flapan ανέλυσε μάλλον τη δομή του γραφήματος $G(p, q, r)$ και όχι μία συγκεκριμένη εμφύτευσή του. Όπως είδαμε στο Κεφάλαιο 1, ένας ομοιομορφισμός ενός γραφήματος επάγει έναν αυτομορφισμό του γραφήματος και αυτομορφισμός ενός γραφήματος είναι μια μετάθεση των κορυφών του έτσι ώστε γειτονικές κορυφές να απεικονίζονται σε γειτονικές κορυφές και μη γειτονικές κορυφές σε μη γειτονικές. Υπενθυμίζουμε ακόμα ότι κάθε αυτομορφισμός ενός γραφήματος θα απεικονίζει κορυφές βαθμού k σε κορυφές του ίδιου βαθμού. Για παράδειγμα, ο ομοιομορφισμός της σκάλας Moebius στην απόδειξη του Θεωρήματος 3.14, που εναλλάσσει το σύνολο $\{x, w\}$ με το σύνολο $\{y, z\}$, επάγει έναν αυτομορφισμό της σκάλας Moebius με την ίδια ιδιότητα, βαθμού δύο.

Η Flapan γενίκευσε αυτή τη τεχνική στο παρακάτω θεώρημα:

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.15 (*Flapan*) Αν ένα γράφημα περιέχει είτε το K_5 είτε το $K_{3,3}$ ως υπογράφημα και δεν έχει αυτομορφισμό βαθμού δύο, τότε το γράφημα είναι εγγενώς μη αμφίχειρο.

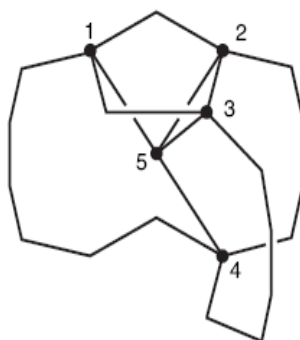
Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, κάθε γράφημα που περιέχει ένα εκ των K_5 , $K_{3,3}$ δεν μπορεί να παρασταθεί στο επίπεδο (Θεώρημα Kuratowski), ενώ κάθε γράφημα που είναι επίπεδο αποτελεί την κατοπτρική εικόνα του εαυτού του και άρα είναι τοπολογικώς αμφίχειρο. Το Θεώρημα 3.15 μας επιτρέπει να δείξουμε ότι πολλά γραφήματα είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρα. Αυτό το αποτέλεσμα δεν έχει να κάνει με το πως αυτό το γράφημα είναι εμφυτευμένο στο χώρο. Έτσι, αν εφαρμόζεται σε μία εμφύτευση του γραφήματος, τότε θα εφαρμόζεται και σε κάθε άλλη εμφύτευσή του.

Θα εφαρμόσουμε το παραπάνω θεώρημα στο μόριο *ferrocenophane*, που αποτελείται από άτομα άνθρακα, ένα άτομο σιδήρου και ένα άτομο οξυγόνου.



Σχήμα 3.31 Το μόριο *ferrocenophane*

Το μόριο *ferrocenophane* περιέχει το πλήρες γράφημα K_5 , όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 3.32 Το πλήρες γράφημα K_5 ως υπογράφημα του μοριακού γραφήματος της *ferrocenophane*

Για να αποδείξουμε ότι δεν υπάρχει αυτομορφισμός βαθμού δύο για το μοριακό γράφημα *ferrocenophane* εργαζόμαστε ως εξής. Υποθέτουμε ότι ο ϕ είναι ένας αυτομορφισμός

της *ferrocenophane*. Ο ϕ θα πρέπει να απεικονίζει το άτομο του οξυγόνου στον εαυτό του και αφού διατηρεί τις γειτνιάσεις, θα πρέπει να απεικονίζει και την γειτονική κορυφή στο άτομο του οξυγόνου, επίσης στον εαυτό της. Υπάρχουν δύο γειτονικές κορυφές στην κορυφή που γειτνιάζει με το άτομο του οξυγόνου και επειδή η μια έχει βαθμό δύο ενώ η άλλη τέσσερα, ο αυτομορφισμός ϕ θα απεικονίζει κάθε μία κορυφή στον εαυτό της. Συνεχίζοντας με τον ίδιο τρόπο αποδεικνύεται ότι κάθε κορυφή της *ferrocenophane* απεικονίζεται στον εαυτό της, μέσω του αυτομορφισμού ϕ και άρα ο ϕ έχει βαθμό ένα. Για το μοριακό γράφημα της *ferrocenophane* δηλαδή, δεν υπάρχει αυτομορφισμός βαθμού δύο και άρα, από το Θεώρημα 3.15, έπεται ότι το παραπάνω μοριακό γράφημα είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο.

3.4 ΣΚΑΛΕΣ ΜΟΕBIUS ΜΕ ΠΕΡΙΣΣΟΤΕΡΕΣ ΣΤΡΟΦΕΣ

Οι μοριακές σκάλες Moebius όπως είδαμε, είναι κλειστές σκάλες με μία μισή στροφή. Ο Walba προσπάθησε να συνθέσει κλειστές σκάλες με περισσότερες από μία μισή στροφή με την πρόθεση να αφαιρέσει έπειτα τους διπλούς δεσμούς μεταξύ των ατόμων άνθρακα ώστε να προκύψει ένας κόμβος. Στο Σχήμα 3.33 παρουσιάζεται ο κόμβος trefoil σε μορφή σκάλας Moebius με τρεις μισές στροφές, όπου έχουμε αφαιρέσει τις συνδέσεις.



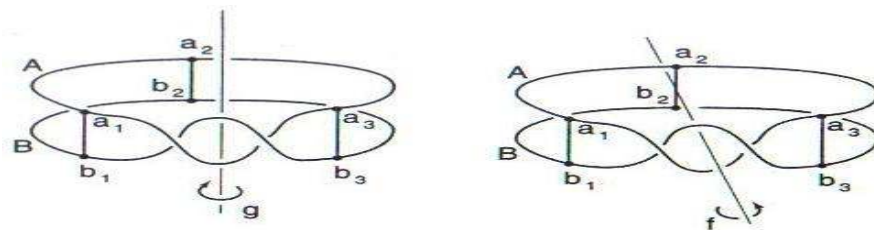
Σχήμα 3.33 Οι πλευρές μιας σκάλας Moebius με τρεις μισές στροφές σχηματίζουν τον trefoil κόμβο

Αν και ο Walba δεν κατάφερε να συνθέσει κλειστές σκάλες με περισσότερες από μία μισές στροφές, η προσπάθειά του αυτή τον οδήγησε στην εικασία ότι κάθε κλειστή σκάλα Moebius με τουλάχιστον τρεις συνδέσεις, η οποία είναι εμφυτευμένη σε μορφή λωρίδας και η οποία έχει περισσότερες από μία μισές στροφές, είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρη αν ξεχωρίσουμε τις συνδέσεις από τις πλευρές. Η εικασία του Walba είναι γνωστό ότι ισχύει για σκάλες με μία μισή στροφή (Θεώρημα Simon), ενώ για σκάλες χωρίς καμία μισή στροφή, σκάλες που έχουν δηλαδή τη μορφή κυλίνδρου, είναι γνωστό ότι είναι τοπολογικώς αμφίχειρες. Κάθε κλειστή σκάλα με περιττό πλήθος μισών στροφών αποτελεί μια εμφύτευση μιας σκάλας Moebius και έτσι, αν ξεχωρίσουμε τις πλευρές από τις συνδέσεις τότε, από Θεώρημα 3.11 κάθε κλειστή σκάλα με περιττό αριθμό μισών στροφών και περιττό αριθμό συνδέσεων είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρας. Η εικασία του Walba είναι σωστή και για κάθε κλειστή σκάλα με τουλάχιστον τρεις μισές στροφές και ανεξάρτητα από το πλήθος των συνδέσεών της. Για να το δείξουμε αυτό ας παρατηρήσουμε αρχικά ότι οι πλευρές σε τέτοιες σκάλες αποτελούν ένα torus-κόμβος, κόμβος δηλαδή που μπορεί να εμφυτευτεί στην επιφάνεια ενός τόρου. Κάθε torus-κόμβος και μη προσανατολισμένος torus-κρίκος όμως, με τουλάχιστον τρεις διασταυρώσεις είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρας (Murasugi, “Jones polynomial and classical conjectures in knot theory”, *Topology* **26**, 1987, 187-194). Έστω τώρα G μια κλειστή σκάλα, η οποία είναι εμφυτευμένη σαν λωρίδα με τουλάχιστον τρεις μισές στροφές και οι συνδέσεις είναι διαφορετικές από τις πλευρές. Έστω L η απλή κλειστή καμπύλη που αντιπροσωπεύει τις πλευρές της σκάλας. Τότε η L είναι torus-κόμβος ή torus-κρίκος με τουλάχιστον τέσσερις διασταυρώσεις, ανάλογα με τον αριθμό των μισών

στροφών της σκάλας (περιττό ή άρτιο πλήθος αντίστοιχα). Έστω ότι υπάρχει ομοιομορφισμός h του (S^3, G) , ο οποίος αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου τέτοιος ώστε $h(L) = L$. Αποπο, αφού έρχεται σε αντίφαση με την τοπολογική μη αμφιχειρία των torus κόμβων και κρίκων. Άρα, κάθε κλειστή σκάλα, εμφυτευμένη ως λωρίδα με τουλάχιστον τρεις μισές στροφές θα είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρη.

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.16 (Simon; 1987) Μία κλειστή σκάλα με δύο μισές στροφές και τουλάχιστον τρεις συνδέσεις είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρη.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω $n > 2$ και έστω C_n κλειστή σκάλα με n συνδέσεις, εμφυτευμένη σε μορφή κυλίνδρου με δύο μισές στροφές και με διακεκριμένες πλευρές και συνδέσεις, βλέπε Σχήμα 3.34. Παρατηρούμε ότι οι πλευρές της C_n αποτελούνται από δύο απλές κλειστές καμπύλες, τις οποίες θα συμβολίζουμε με A, B . Έστω τώρα a_1, \dots, a_n και b_1, \dots, b_n οι κορυφές των πλευρών A, B αντίστοιχα, έτσι ώστε κάθε σύνδεση a_i να ενώνει τις κορυφές a_i, b_i . Ας υποθέσουμε ότι υπάρχει ομοιομορφισμός $h : (\mathbb{R}^3, C_n) \rightarrow (\mathbb{R}^3, C_n)$ που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, τέτοιος ώστε $h(A \cup B) = A \cup B$, δηλαδή τέτοιος ώστε να απεικονίζει τις πλευρές σε πλευρές και τις συνδέσεις σε συνδέσεις. Λόγω της συγκεκριμένης εμφύτευσης της C_n υπάρχει ομοιομορφισμός g , που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου και που περιστρέφει τη C_n απεικονίζοντας κάθε a_i στο a_{i+1} και κάθε b_i στο b_{i+1} . Υπάρχει, ακόμα, ένας ομοιομορφισμός f που διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου και που περιστρέφει τη C_n γύρω από έναν οριζόντιο άξονα, εναλλάσσοντας τις πλευρές A και B . Οι ομοιομορφισμοί f και g παρουσιάζονται παρακάτω για την C_3 .



Σχήμα 3.34 Οι ομοιομορφισμοί g και f

Συνθέτοντας τον h με τον f ή με κάποια δύναμη του g , μπορούμε να λάβουμε έναν ομοιομορφισμό j που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, τέτοιοι ώστε $j(A) = A, j(B) = B, j(a_i) = a_i$ και $j(b_i) = b_i$. Έστω ότι η C_n έχει τουλάχιστον τρεις συνδέσεις. Τότε, είτε $j(a_i) = a_i, j(b_i) = b_i, \forall i$, είτε $j(a_2) = a_n, j(b_2) = b_n$. Δίνοντας προσανατολισμό στις πλευρές A και B (με φορά την αύξουσα αρίθμηση των κορυφών), είτε ο j διατηρεί τον προσανατολισμό των A και B , είτε τον αντιστρέφει. Σε κάθε περίπτωση όμως είναι $Lk(A, B) = Lk[j(A), j(B)]$. Αυτό οδηγεί σε αντίφαση γιατί ο

ομοιομορφισμός j αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου και $Lk(A, B) \neq 0$. Άρα, αν η C_n έχει τουλάχιστον τρεις συνδέσεις, τότε αυτή η εμφύτευση της C_n είναι τοπολογικά μη αμφίχειρη. \square

Για $n=1$ και για $n=2$, υπάρχει τοπολογικά αμφίχειρη εμφύτευση της C_n ως λωρίδα με δύο μισές στροφές. Πιο συγκεκριμένα, μπορούμε να μετασχηματίσουμε τη C_2 στο Σχήμα 3.35, όπου το κατοπτρικό επίπεδο θα περιλαμβάνει τη καμπύλη A και η καμπύλη B είναι εμφυτευμένη σε κάθετο επίπεδο.



Σχήμα 3.35 Τοπολογικά αμφίχειρη αναπαράσταση της C_2

Η κατοπτρική εικόνα της C_2 είναι η ίδια η C_2 , ενώ μια τοπολογικά αμφίχειρη εμφύτευση της C_1 προκύπτει από τα προηγούμενα, παραλείποντας μια σύνδεση από τη C_2 του σχήματος.

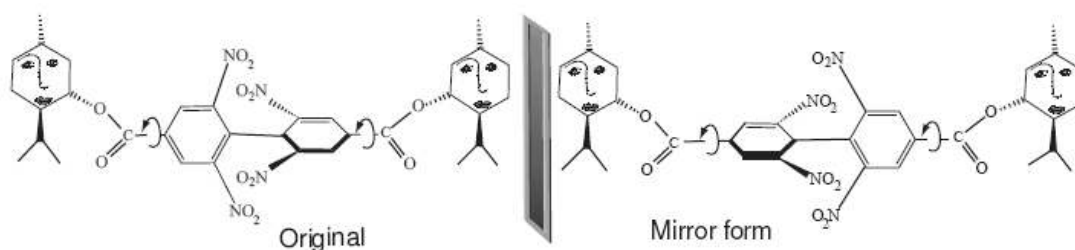
4

ΕΙΔΗ ΑΜΦΙΧΕΙΡΙΑΣ

Όπως αναφέραμε, υπάρχουν διαφορετικά είδη αμφιχειρίας. Υπάρχει το εργαστηριακό σενάριο, κατά το οποίο ένα μόριο είναι αμφίχειρο αν μπορεί χημικώς να μετασχηματιστεί στη κατοπτρική του εικόνα. Υπάρχει το γεωμετρικό σενάριο, κατά το οποίο ένα άκαμπτο γράφημα είναι αμφίχειρο αν μπορεί να υπερτεθεί στη κατοπτρική του εικόνα, και υπάρχει και το τοπολογικό σενάριο, κατά το οποίο ένα εμφυτευμένο γράφημα είναι τοπολογικώς αμφίχειρο αν είναι ισοτοπικό με την κατοπτρική του εικόνα. Είδαμε επίσης, ότι τοπολογική μη αμφιχειρία συνεπάγεται χημική μη αμφιχειρία. Όπως θα δούμε στο παρόν κεφάλαιο, δεν συμβαίνει το ίδιο με τη γεωμετρική μη αμφιχειρία.

ΟΡΙΣΜΟΣ 4.1. Καλούμε *συμμετρική αναπαράσταση (symmetry presentation)* ενός γραφήματος μια εμφύτευση του γραφήματος που είναι γεωμετρικά αμφίχειρη.

Βασιζόμενος σε μια εργασία του Van Gulick, που γράφτηκε το 1960 αλλά δημοσιεύτηκε μόλις το 1993, ο Walba (1983) ονόμασε ένα μόριο *ευκλείδεια ελαστικό γάντι (Euclidean rubber glove)* αν μπορούσε χημικώς να μετασχηματιστεί στη κατοπτρική του εικόνα (δηλαδή είναι ένα αμφίχειρο μόριο), αλλά χημικώς δεν είχε συμμετρική αναπαράσταση. Το 1954 ο Mislow επέδειξε το πρώτο μόριο που χημικώς είναι αμφίχειρο, αλλά που το μοριακό του γράφημα είναι γεωμετρικά μη αμφίχειρο χρησιμοποιώντας ένα παράγωγο διφαινυλίου (Mislow, K., R. Bolstad, "Molecular dissymmetry and optical inactivity", *J. Am. Chem. Soc.* 77, 1955, 6712-6713).



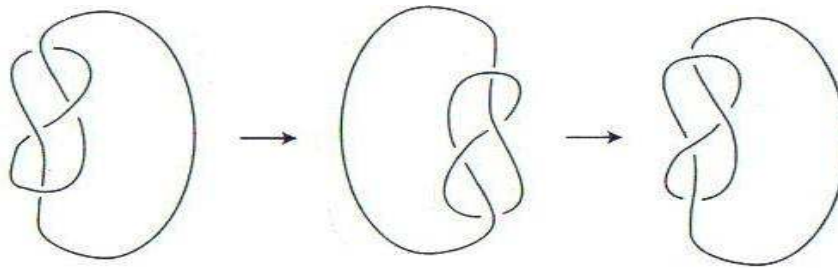
Σχήμα 4.1 Ευκλείδεια ελαστικό γάντι με τη κατοπτρική του εικόνα

Η χημική αμφιχειρία του παραπάνω μορίου φαίνεται ως εξής: Αν στρέψουμε το μόριο κατά 90° γύρω από έναν οριζόντιο άξονα και στη συνέχεια περιστρέψουμε τις προπέλες στην αρχική τους θέση, θα προκύψει η κατοπτρική εικόνα του μορίου. Για τη γεωμετρική μη αμφιχειρία παρατηρούμε τα εξής: Αν θεωρήσουμε το μόριο άκαμπτο, τότε δεν μπορούμε να περιστρέψουμε τις προπέλες διατηρώντας σταθερό το υπόλοιπο μόριο. Στο αρχικό μόριο η αριστερή προπέλα είναι παράλληλη με το γειτονικό της εξάγωνο, ενώ στη κατοπτρική της εικόνα η αριστερή προπέλα είναι κάθετη προς το γειτονικό της εξάγωνο. Με μία περιστροφή κατά 180° ως προς κάθετο άξονα, τα μόρια θα φαινότανσαν να συμφωνούν και η αριστερή προπέλα θα φαινόταν σαν δεξιά προπέλα. Όμως, στη πραγματικότητα ο δεσμός που ενώνει τη προπέλα με το υπόλοιπο μόριο βρισκόταν στο πίσω μέρος του επιπέδου, τώρα θα βρίσκεται μπροστά από το επίπεδο.

4.1 ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΑ ΕΛΑΣΤΙΚΑ ΓΑΝΤΙΑ

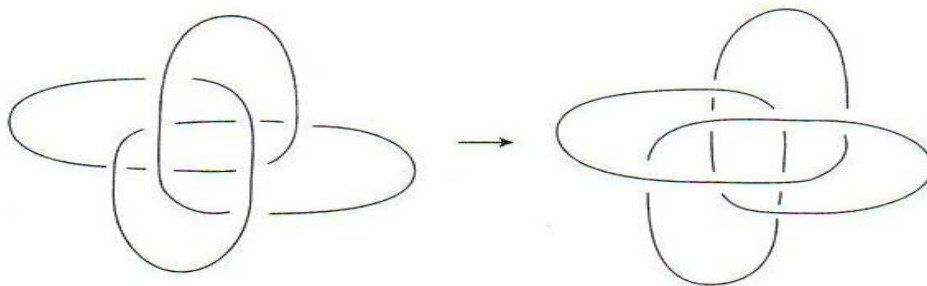
Ο Walba αναρωτήθηκε αν υπάρχει τέτοια δομή όταν το γράφημα είναι εύκαμπτο και όταν η συμμετρική αναπαράσταση του μορίου, που χημικώς δεν υπάρχει για τα ευκλείδεια ελαστικά γάντια, υπάρχει τοπολογικώς. Πιο συγκεκριμένα: υπάρχει μοριακό γράφημα στον τρισδιάστατο χώρο, χημικά μη αμφίχειρο, τέτοιο ώστε, ακόμα και αν ήταν τελείως εύκαμπτο να μη μπορούσε να ισοτοπηθεί σε συμμετρική αναπαράσταση. Ονόμασε τέτοιες δομές ως *τοπολογικά ελαστικά γάντια* (*topological rubber gloves*). Το μόριο του Mislow δεν είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι, εφόσον αν ήταν εύκαμπτο θα μπορούσε να μετασχηματιστεί σε επίπεδο γράφημα και άρα θα αποτελούσε κατοπτρική εικόνα του εαυτού του.

Ο Walba είκασε ότι ο κόμβος figure 8 ήταν τοπολογικά ελαστικό γάντι, αφού μπορούσε να τον μετασχηματίσει στη κατοπτρική του εικόνα, αλλά δεν μπορούσε να βρει συμμετρική αναπαράσταση. Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται ο μετασχηματισμός του figure 8 στη κατοπτρική του εικόνα.



Σχήμα 4.2 Ο figure 8 είναι αμφίχειρας

Αν περιστρέψουμε το πρώτο διάγραμμα της εικόνας κατά 180° ως προς ένα κατακόρυφο άξονα θα προκύψει το δεύτερο διάγραμμα και αν στρέψουμε πάλι κατά 180° το μεγάλο τόξο, διατηρώντας ακίνητο τον υπόλοιπο κόμβο, θα καταλήξουμε στο τρίτο διάγραμμα του Σχήματος 4.2, που είναι και η κατοπτρική εικόνα του πρώτου διαγράμματος. Δεν είναι δυνατόν να υπερτεθεί ο figure 8 στη κατοπτρική του εικόνα κατά τον παραπάνω μετασχηματισμό, αλλά υπάρχει διαφορετικό διάγραμμα του κόμβου figure 8 που μπορεί να υπερτεθεί στη κατοπτρική του εικόνα, όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 4.3 Συμμετρική αναπαράσταση του figure 8 κόμβου

Καταλήγουμε στο δεύτερο διάγραμμα αν στρέψουμε το πρώτο κατά 90° γύρω από έναν κάθετο στο επίπεδο που κείται ο κόμβος άξονα, ο οποίος διέρχεται από το κέντρο του σχήματος. Επομένως ο κόμβος figure 8 επίσης δεν αποτελεί παράδειγμα τοπολογικά ελαστικού γαντιού.

Οι ορισμοί και οι παρατηρήσεις που ακολουθούν σκοπεύουν στη παρουσίαση κόμβων που είναι τοπολογικά ελαστικά γάντια. Το παραπάνω παράδειγμα μας οδηγεί στον ακόλουθο ορισμό.

ΟΡΙΣΜΟΣ 4.2. Ένα εμφυτευμένο γράφημα καλείται *άκαμπτα αμφίχειρο* (*rigidly achiral*) όταν, θεωρούμενο εύκαμπτο, μπορεί να ισοτοπηθεί σε μία θέση από την οποία μπορεί να περιστραφεί στην κατοπτρική του εικόνα. Άρα, ένα άκαμπτα αμφίχειρο γράφημα έχει συμμετρική αναπαράσταση.

Πράγματι, ο κόμβος figure 8 είναι άκαμπτα αμφίχειρας. Σύμφωνα με τον ορισμό, κάθε εμφυτευμένο γράφημα το οποίο μπορεί να περιστραφεί στη κατοπτρική του εικόνα ή το οποίο είναι συμμετρικό ως προς ένα επίπεδο, θα είναι άκαμπτα αμφίχειρο. Ο παραπάνω ορισμός είναι κάπου ανάμεσα στη τοπολογική αμφιχειρία και στη γεωμετρική αμφιχειρία.

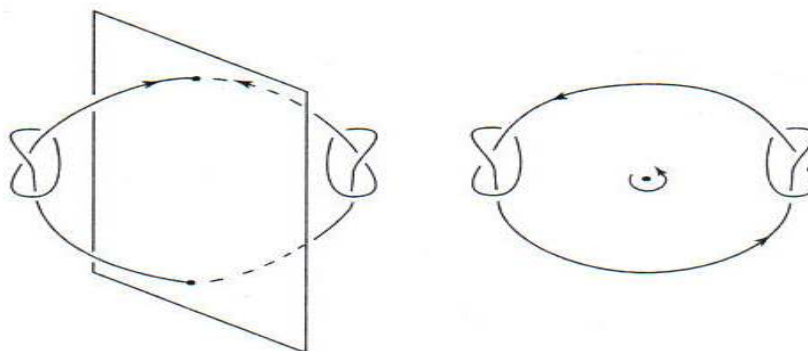
Ας θεωρήσουμε τα μόρια L-αλανίνη και D-αλανίνη, τα οποία είναι άκαμπτα και αποτελούν εναντιομερή (Σχήμα 1.20). Αν το μόριο της L-αλανίνης ήταν εύκαμπτο, θα μπορούσε να παραστεί στο επίπεδο και το διάγραμμα αυτό θα μπορούσε να οδηγήσει σε επίπεδη παράσταση του μορίου της D-αλανίνης. Σύμφωνα με τον Ορισμό 4.2, τα μόρια του Σχήματος 1.20 θα είναι άκαμπτα αμφίχειρα.

Ένα εμφυτευμένο γράφημα το οποίο μπορεί να υπερτεθεί στη κατοπτρική του εικόνα είναι άκαμπτα αμφίχειρο και ένα εμφυτευμένο γράφημα που είναι άκαμπτα αμφίχειρο μπορεί να μετασχηματιστεί στη κατοπτρική του εικόνα και άρα είναι τοπολογικώς αμφίχειρο.

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, ένας ομοιομορφισμός είτε θα αντιστρέφει, είτε θα διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου και ανεξάρτητα από αυτό, είτε θα διατηρεί είτε θα αντιστρέφει τον προσανατολισμό ενός κόμβου. Χαρακτηρίζουμε την ιδιότητα της αμφιχειρίας ενός κόμβου ανάλογα με το πως επηρεάζει ένας ομοιομορφισμός τον προσανατολισμό του.

ΟΡΙΣΜΟΣ 4.3. Έστω κόμβος K στον \mathbb{R}^3 και έστω ότι υπάρχει ομοιομορφισμός $h : (\mathbb{R}^3, K) \rightarrow (\mathbb{R}^3, K)$, ο οποίος αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Δίνουμε προσανατολισμό στον κόμβο K και αν ο h διατηρεί τον προσανατολισμό του K , τότε ο K καλείται *θετικά αμφίχειρας* (*positive achiral*). Αν ο h αντιστρέφει τον προσανατολισμό του K , τότε ο K καλείται *αρνητικά αμφίχειρας* (*negative achiral*).

Κάθε τοπολογικά αμφίχειρας κόμβος θα είναι είτε θετικά, είτε αρνητικά αμφίχειρας. Ένας κόμβος μπορεί να είναι και θετικά και αρνητικά αμφίχειρας, χρησιμοποιώντας δύο διαφορετικούς ομοιομορφισμούς, όπως για παράδειγμα στο Σχήμα 4.4.

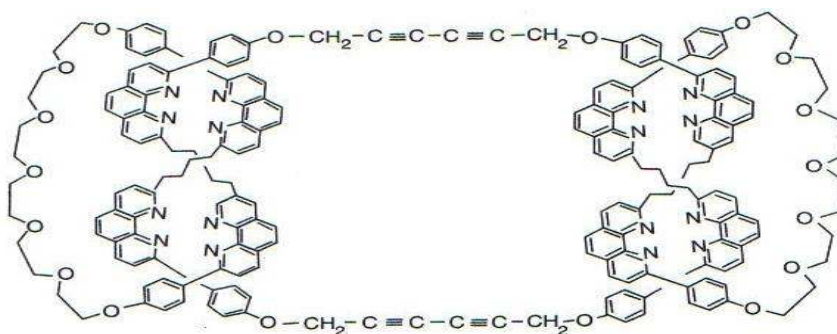


Σχήμα 4.4 Κόμβος θετικά και αρνητικά αμφίχειρας

Στην αριστερή εικόνα του σχήματος φαίνεται ότι ο αμφίχειρας κόμβος έχει μια ανάκλαση ως προς κατακόρυφο επίπεδο, η οποία αντιστρέφει τον προσανατολισμό του και η οποία αποτελεί ομοιομορφισμό που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Άρα ο κόμβος είναι αρνητικά αμφίχειρας. Στη δεξιά εικόνα του σχήματος φαίνεται ότι μπορούμε να περιστρέψουμε τον ίδιο κόμβο κατά 180° γύρω από ένα κεντρικό άξονα, κάθετο στο επίπεδό του, στη συνέχεια να τον κατοπτρίσουμε ως προς το επίπεδο της σελίδας και να προκύψει έτσι ο αρχικός κόμβος. Αυτή η σύνθεση περιστροφής – αντανάκλασης αποτελεί ομοιομορφισμό που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου και που απεικονίζει τον κόμβο στον εαυτό του διατηρεί τον προσανατολισμό του. Άρα ο κόμβος είναι και θετικά αμφίχειρας.

Καλούμε ένα κόμβο *θετικά άκαμπτα αμφίχειρο* ή *αρνητικά άκαμπτα αμφίχειρο* στον \mathbb{R}^3 αν ο ομοιομορφισμός του Ορισμού 4.3 έχει πεπερασμένο βαθμό. Ο παραπάνω κόμβος είναι και θετικά άκαμπτα αμφίχειρας και αρνητικά άκαμπτα αμφίχειρας, αφού και οι δύο ομοιομορφισμοί έχουν βαθμό ίσο με δύο.

Ας παρατηρήσουμε τώρα ότι ο κόμβος του Σχήματος 4.4 είναι συνδετικό άθροισμα ενός δεξιόστροφου και ενός αριστερόστροφου trefoil. Οι Carina, Dietrich-Buchecker και Sauvage (1996) συνέθεσαν το πρώτο μοριακό συνδετικό άθροισμα, το οποίο αποτελείται από δύο κόμβους trefoil όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.5



Σχήμα 4.5 Μοριακό συνδετικό άθροισμα

Θέλουμε να αποδείξουμε ότι κάθε αρνητικά άκαμπτα αμφίχειρος κόμβος στον \mathbb{R}^3 είναι συνδετικό άθροισμα και για να το δείξουμε αυτό θα χρειαστούμε τη θεωρία ταξινόμησης

των συνόλων σταθερών σημείων ομοιομορφισμών πεπερασμένου βαθμού, η οποία αναπτύχθηκε το 1939 από τον P.A. Smith.

Το σύνολο των σταθερών σημείων ενός ομοιομορφισμού $h : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ είναι το σύνολο που αποτελείται από εκείνα τα σημεία x για τα οποία ισχύει $h(x) = x$. Για παράδειγμα, κάθε ανάκλαση του \mathbb{R}^3 θα έχει σύνολο σταθερών σημείων ένα επίπεδο, ενώ κάθε περιστροφή στον \mathbb{R}^3 θα έχει σύνολο σταθερών σημείων τον άξονα, γύρω από τον οποίο γίνεται η περιστροφή. Η σύνθεση μιας ανάκλασης και μιας περιστροφής γύρω από έναν άξονα κάθετο στο επίπεδο της ανάκλασης, θα αφήνει σταθερό μόνο το σημείο που ο άξονας περιστροφής τέμνει το επίπεδο της ανάκλασης. Έστω $h : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ ομοιομορφισμός πεπερασμένου βαθμού. Αν ο h διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου, τότε, σύμφωνα με τη θεωρία του Smith, το σύνολο των σταθερών σημείων του h θα είναι ομοιομορφικό με μια ευθεία και άρα ο h θα προκύπτει μετασχηματίζοντας, μετά περιστρέφοντας και μετά αντιστρέφοντας τον προηγούμενο μετασχηματισμό. Αν ο h αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, τότε, το σύνολο των σταθερών σημείων του h είτε θα αποτελείται από ένα σημείο, είτε θα είναι ομοιομορφικό με ένα επίπεδο και άρα ο h θα προκύπτει μετασχηματίζοντας, μετά περιστρέφοντας και αντανακλώντας ή μόνο ανακλώντας και μετά αντιστρέφοντας τον αρχικό μετασχηματισμό.

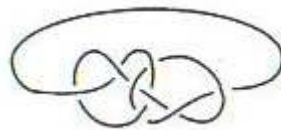
Ας υποθέσουμε τώρα ότι ο ομοιομορφισμός h έχει πεπερασμένο βαθμό και ότι ο K είναι μια απλή κλειστή καμπύλη τέτοια ώστε $h(K) = K$. Το ερώτημα είναι εάν κάποια από τα σημεία του K είναι σταθερά σημεία του h . Αν ο h διατηρεί τον προσανατολισμό του K , τότε το σύνολο σταθερών σημείων του h , που ανήκουν στο K θα είναι το κενό, ενώ αν ο h αντιστρέφει τον προσανατολισμό του K , τότε το σύνολο των σταθερών σημείων του h , που ανήκουν στο K θα αποτελείται από δύο ακριβώς σημεία του K .

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.4. (Flapan; 1987) Αν ένας μη τετριμμένος κόμβος είναι αρνητικά άκαμπτα αμφίχειρας στον \mathbb{R}^3 , τότε είναι συνδετικό άθροισμα.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Έστω K ένας προσανατολισμένος μη τετριμμένος κόμβος που είναι αρνητικά άκαμπτα αμφίχειρος στον \mathbb{R}^3 . Τότε υπάρχει $h : (\mathbb{R}^3, K) \rightarrow (\mathbb{R}^3, K)$ ομοιομορφισμός πεπερασμένου βαθμού, ο οποίος αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου και τον προσανατολισμό του κόμβου. Αφού ο h αντιστρέφει τον προσανατολισμό του κόμβου και έχει πεπερασμένο βαθμό, έπεται ότι ο h θα αφήνει αμετάβλητα δύο σημεία του K , έστω τα p και q . Ακόμα, αφού ο h είναι ομοιομορφισμός του \mathbb{R}^3 που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου και έχει πεπερασμένο βαθμό, από τη θεωρία του Smith έπεται ότι το σύνολο των σταθερών σημείων του h θα είναι είτε ένα σημείο, είτε θα είναι ομοιομορφικό με ένα επίπεδο. Γνωρίζουμε όμως ότι τα σημεία p και q ανήκουν στο σύνολο των σταθερών σημείων του h , και άρα το σύνολο των σταθερών σημείων του h θα είναι ένα σύνολο F , το οποίο είναι ομοιομορφικό με το επίπεδο. Ο h θα εναλλάσσει τις δύο συνιστώσες του $\mathbb{R}^3 - F$, εφόσον είναι ομοιομορφισμός που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου και εφόσον αφήνει αμετάβλητα τα σημεία του συνόλου F . Έστω B ένα οποιοδήποτε τόξο στο F με άκρα τα σημεία p , q και έστω K_1, K_2 οι δύο απλές κλειστές καμπύλες που προκύπτουν αν ενώσουμε κάθε συνιστώσα του $K - \{p, q\}$ με το τόξο B . Ο ομοιομορφισμός h εναλλάσσει τις δύο συνιστώσες του $K - \{p, q\}$ και αφήνει αμετάβλητο κάθε σημείο του τόξου B . Άρα ο h

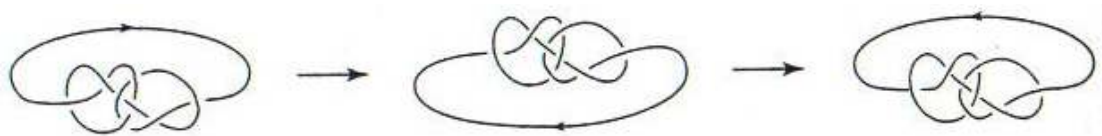
εναλλάσσει τις καμπύλες K_1 και K_2 . Επομένως, είτε και οι δύο K_1, K_2 θα είναι μη τετριμμένοι κόμβοι και μάλιστα ο ένας κόμβος θα είναι η κατοπτρική εικόνα του άλλου, είτε και οι δύο θα είναι ο τετριμμένος κόμβος. Αν και οι δύο ήταν ο τετριμμένος κόμβος, τότε ο K θα ήταν ο τετριμμένος κόμβος, που είναι άτοπο από την υπόθεση και άρα η καμπύλη K_1 και η καμπύλη K_2 θα είναι μη τετριμμένοι κόμβοι. Επομένως ο K είναι ένα συνδετικό άθροισμα. \square

Το Θεώρημα 4.4 μας βοηθάει να κατασκευάσουμε ένα παράδειγμα τοπολογικά ελαστικού γαντιού στον \mathbb{R}^3 . Για να το πετύχουμε αυτό, αρχικά θεωρούμε ένα κόμβο που δεν είναι συνδετικό άθροισμα και ο οποίος είναι αρνητικά αμφίχειρας και όχι θετικά αμφίχειρας. Ο πιο απλός κόμβος με τις παραπάνω ιδιότητες είναι ο κόμβος 8_{17} .



Σχήμα 4.6 Ο κόμβος 8_{17}

Ο Kawauchi απέδειξε ότι ο κόμβος 8_{17} δεν είναι θετικά αμφίχειρας (A. Kawauchi, "The invertibility problem on amphicheiral excellent knots", *Proc. Japan Acad. Series A* **55**, 1979 p. 399-402). Από το Σχήμα 4.7 και τον μετασχηματισμό του κόμβου στη κατοπτρική του εικόνα φαίνεται ότι ο κόμβος αυτός είναι αρνητικά αμφίχειρας και άρα τοπολογικά αμφίχειρας.



Σχήμα 4.7 Μετασχηματισμός του κόμβου στη κατοπτρική εικόνα που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του

Αρχικά περιστρέφουμε τον κόμβο κατά 180° γύρω από έναν άξονα κάθετο στο επίπεδο της σελίδας και στη συνέχεια μεταφέρουμε το μεγάλο τόξο που βρίσκεται κάτω από τον κόμβο από πάνω, διατηρώντας τον κόμβο αμετάβλητο. Αφού ο κόμβος 8_{17} δεν είναι συνδετικό άθροισμα, έπεται από το Θεώρημα 4.4 ότι δεν είναι αρνητικά άκαμπτα αμφίχειρας και αφού δεν είναι θετικά αμφίχειρας δεν θα είναι και θετικά άκαμπτα αμφίχειρας. Άρα ο κόμβος 8_{17} είναι τοπολογικά αμφίχειρας αλλά όχι άκαμπτα αμφίχειρας, δηλαδή είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι στον \mathbb{R}^3 . Αξίζει να σημειωθεί ότι ο κόμβος 8_{17} δεν είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι στην S^3 , εφόσον έχει συμμετρική αναπαράσταση, που φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 4.8 Συμμετρική αναπαράσταση του κόμβου 8_{17} στην S^3

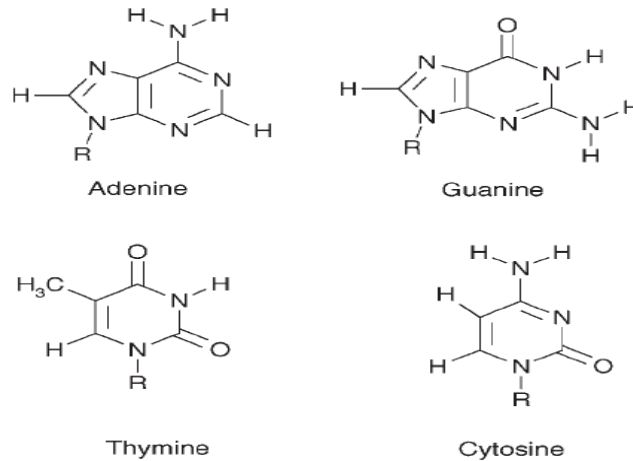
4.2 ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΑ ΕΛΑΣΤΙΚΑ ΓΑΝΤΙΑ

Ο κόμβος 8_{17} αποτελεί ένα παράδειγμα τοπολογικά ελαστικού γαντιού στον \mathbb{R}^3 , αλλά δεν αποτελεί μοριακό γράφημα. Το 1992 οι Du και Seeman συνέθεσαν ένα μονού νήματος DNA σε μορφή κόμβου figure 8 (*S. Du and N. Seeman "Synthesis of DNA knot containing both positive and negative nodes", J. Am. Chem. Soc. 114, 1992, p.9652-9655*), του οποίου το γράφημα απεδείχθη το 1995 ότι είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι. Τοπικά, το παραπάνω μοριακό γράφημα αποτελείται από 66 έως 104 νουκλεοτίδια, τα οποία περιέχουν φωσφορικό άλας, ζάχαρη και μία από τις τέσσερις βάσεις, κυτοσίνη, θυμίνη, αδερίνη και γουανίνη, ενώ γενικά έχει τη μορφή του figure 8.

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.5. (*Flapan, Seeman*) Το γράφημα του μονού νήματος DNA κόμβου figure 8 είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι.

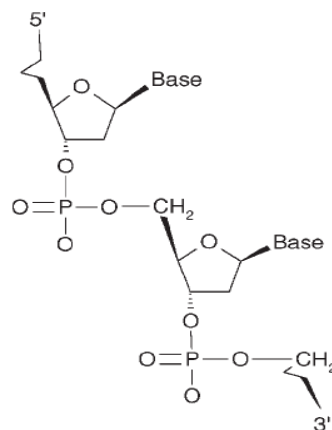
ΑΠΟΔΕΙΞΗ Αρχικά θα δείξουμε ότι το μοριακό γράφημα είναι τοπολογικά αμφίχειρο. Θεωρώντας το ότι είναι εύκαμπτο, μετασχηματίζουμε το γράφημα έτσι ώστε τα μόρια ζάχαρης και οι βάσεις να ανήκουν στο ίδιο επίπεδο της σελίδας, το οποίο περιέχει και τα φωσφορικά άλατα. Στα Σχήματα 4.2, 4.3 φαίνεται ο μετασχηματισμός του figure 8 σε συμμετρική αναπαράσταση, την οποία μπορούμε να περιστρέψουμε κατά 90° και να καταλήξουμε στη κατοπτρική του εικόνα. Η περιστροφή του μοριακού γραφήματος έχει την «παρενέργεια» να μετακινούνται οι βάσεις σε νέες θέσεις. Παρ' όλ' αυτά, μπορούμε να ολισθήσουμε τις βάσεις ώστε να αποκτήσουν τις αρχικές τους θέσεις και να γείρουμε τα μόρια ζάχαρης και τις βάσεις έτσι ώστε οι γωνίες τους να γίνουν οι κατοπτρικές από τις αρχικές τους. Άρα, το μοριακό γράφημα του DNA σε μορφή κόμβου figure 8 είναι τοπολογικώς αμφίχειρο. Σημειώνουμε ότι στην πραγματικότητα οι ζάχαρες και οι βάσεις δεν μπορούν να γείρουν στις ζητούμενες θέσεις, άρα το μόριο είναι χημικώς μη αμφίχειρο. Στη συνέχεια θα δείξουμε ότι το παραπάνω μόριο δεν έχει συμμετρική αναπαράσταση. Γι' αυτό, αρκεί να δείξουμε ότι είναι άκαμπτα μη αμφίχειρο.

Έστω K το αρχικό μοριακό γράφημα του DNA και ας υποθέσουμε ότι υπάρχει ένας πεπερασμένου βαθμού ομοιομορφισμός $h : (\mathbb{R}^3, K) \rightarrow (\mathbb{R}^3, K)$, που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.9, όλες οι βάσεις έχουν διαφορετικά μοριακά γραφήματα (το γράμμα R στο σχήμα καθορίζει το σημείο που κάθε βάση ενώνεται με το υπόλοιπο μόριο).



Σχήμα 4.9 Τα μοριακά γραφήματα των βάσεων

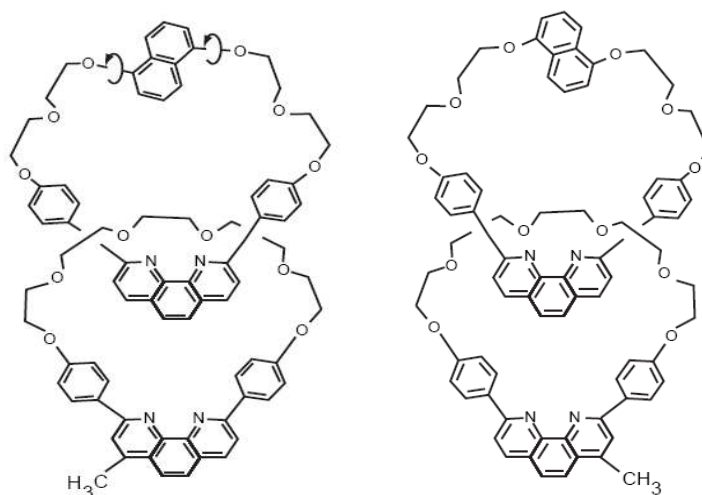
Προκύπτει άμεσα ότι ο ομοιομορφισμός h θα πρέπει να απεικονίζει κάθε βάση σε βάση ίδιου τύπου. Για απλότητα μπορούμε να θεωρούμε το γράφημα K σαν τον κόμβο figure 8 με ονόματα κορυφών C, T, A και G , και τον ομοιομορφισμό h να απεικονίζει τον K στον εαυτό του, απεικονίζοντας ακόμα κάθε κορυφή σε κορυφή με την ίδια ονομασία. Ο κόμβος figure 8 όμως, είναι ομοιομορφικός με ένα κύκλο και επειδή ο h έχει πεπερασμένο βαθμό, έπεται ότι ο h είτε ανακλά, είτε περιστρέφει τις κορυφές γύρω από τον κόμβο figure 8. Οι βάσεις όμως στον DNA κόμβο figure 8 δεν επαναλαμβάνονται συμμετρικά από πάνω προς τα κάτω και άρα ο ομοιομορφισμός h δεν μπορεί να ανακλά τις βάσεις στο μόριο. Ακόμα, οι βάσεις δεν επαναλαμβάνονται συστηματικά στο μόριο του DNA κόμβου figure 8 και άρα ο ομοιομορφισμός h δεν μπορεί να περιστρέφει τις κορυφές γύρω από τον κόμβο. Άρα, ο h προκαλεί περιστροφή κατά 0° και απεικονίζει έτσι κάθε βάση στον εαυτό της. Παρατηρώντας το Σχήμα 4.9 και το Σχήμα 4.10, όπου παρουσιάζεται η «ραχοκοκαλιά» του DNA, βλέπουμε ότι ο ομοιομορφισμός h θα αφήνει αμετάβλητο κάθε σημείο του μοριακού γραφήματος, εκτός ίσως από κάποια άτομα υδρογόνου.



Σχήμα 4.10 Δύο νουκλεοτίδια

Από τη θεωρία του Smith και αφού ο h είναι πεπερασμένου βαθμού ομοιομορφισμός του \mathbb{R}^3 που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, το σύνολο των σταθερών σημείων του h είτε θα αποτελείται από ένα σημείο, είτε θα είναι ομοιομορφικό με ένα επίπεδο. Και αφού όπως είδαμε ο h θα αφήνει αμετάβλητο κάθε σημείο του μοριακού γραφήματος, εκτός ίσως από κάποια άτομα υδρογόνου, έπεται ότι το σύνολο των σταθερών σημείων του h δεν μπορεί να αποτελείται από ένα σημείο. Το μοριακό γράφημα λοιπόν, θα περιέχεται σε ένα σύνολο ομοιομορφικό του επιπέδου. Αυτό όμως είναι αδύνατο, γιατί το μοριακό γράφημα έχει τη δομή του κόμβου figure 8 και μόνο ο τετριμμένος κόμβος μπορεί να παρασταθεί στο επίπεδο. Άρα δεν υπάρχει τέτοιος ομοιομορφισμός h και άρα το γράφημα του μονού νήματος DNA κόμβου figure 8 είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι. \square

Σε αντίθεση με το παραπάνω, το 1997 οι Chambron, Sauvage Mislow συνέθεσαν ένα νέο είδος τοπολογικά ελαστικών γαντιών (Chambron, J.-C., J.-P. Sauvage, K. Mislow, "A chemically achiral molecule with no rigid achiral presentations", *J. Am. Chem. Soc.* **114**, 1997, p.9558-9559). Το μόριο αυτό αποτελείται από έναν μη τετριμμένο κρίκο, ο οποίος είναι χημικώς αμφίχειρας (και άρα και τοπολογικώς), αλλά όχι άκαμπτα αμφίχειρας. Το μόριο αυτό αποτελεί το πρώτο τοπολογικά ελαστικό γάντι που δεν σχετίζεται με το DNA και είναι το πρώτο τοπολογικά ελαστικό μόριο που είναι και χημικώς αμφίχειρας (Σχήμα 4.11).



Σχήμα 4.11 Μοριακό τοπολογικά ελαστικό γάντι που είναι χημικώς αμφίχειρας

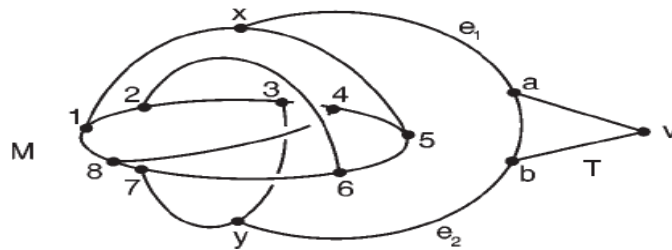
4.3 ΕΓΓΕΝΩΣ ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΑ ΕΛΑΣΤΙΚΑ ΓΑΝΤΙΑ

Οι συγκεκριμένες εμφυτεύσεις των γραφημάτων στα παραδείγματα τοπολογικά ελαστικών γαντιών που είδαμε έως τώρα, αποτελούν το λόγο που τα γραφήματα αυτά δεν είναι άκαμπτα αμφίχειρα. Αν θεωρούσαμε εμφυτεύσεις των γραφημάτων αυτών στο επίπεδο, τότε τα γραφήματα θα ήταν άκαμπτα αμφίχειρα και άρα δεν θα ήταν τοπολογικά ελαστικά γάντια. Είδαμε στο Κεφάλαιο 3 ότι οι σκάλες Moebius με περιττό αριθμό συνδέσεων είναι εγγενώς μη αμφίχειρες, δηλαδή ότι κάθε εμφύτευση του γραφήματος είναι μη αμφίχειρη. Δεν υπάρχει όμως γράφημα που να είναι εγγενώς τοπολογικά ελαστικό γάντι με την έννοια ότι κάθε εμφυτεύσή του είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι. Πράγματι, κάθε γράφημα που περιέχει απλές κλειστές καμπύλες έχει εμφυτεύσεις που

είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρες και άρα δεν είναι τοπολογικά ελαστικά γάντια, ενώ κάθε γράφημα που δεν περιέχει απλές κλειστές καμπύλες θα έχει εμφύτευση που είναι επίπεδη, θα είναι δηλαδή και τοπολογικά και άκαμπτα αμφίχειρο και άρα δεν είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι.

Θα κατασκευάσουμε ένα εμφυτευμένο γράφημα που είναι τοπολογικώς αμφίχειρο και που δεν υπάρχει εμφύτευσή του στην S^3 που να είναι άκαμπτα αμφίχειρη.

Θεωρούμε το εμφυτευμένο γράφημα G μιας σκάλας Moebius M με τέσσερις συνδέσεις, που είναι εμφυτευμένη στην S^3 ώστε να είναι τοπολογικώς αμφίχειρη, και που συνδέεται με ένα επίπεδο τρίγωνο T μέσω πλευρών e_1 και e_2 .



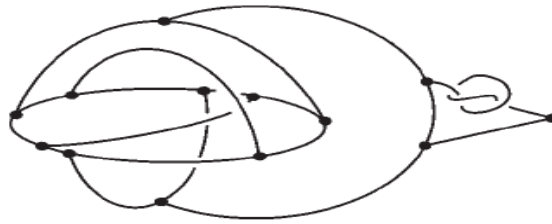
Σχήμα 4.12 Τοπολογικά αμφίχειρο γράφημα G που καμία εμφύτευσή του δεν είναι άκαμπτα αμφίχειρη

Ένας ομοιομορφισμός αυτής της εμφύτευσης $h : (S^3, G) \rightarrow (S^3, G)$, που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου, προκύπτει αν περιστρέψουμε τη σκάλα Moebius κατά 90° ως προς άξονα που διέρχεται από τα x, y , αφήνοντας ταυτόχρονα αμετάβλητα τα T, e_1 και e_2 , και στη συνέχεια ανακλώντας ολόκληρο το γράφημα μέσω ενός οριζοντίου επιπέδου που έχει τη κορυφή v και τον κεντρικό κύκλο της M . Ο ομοιομορφισμός h ανακλά ολόκληρο το γράφημα, αλλά περιστρέφει μόνο την αριστερή του πλευρά και άρα ο h δεν έχει πεπερασμένο βαθμό.

Υποθέτουμε ότι το γράφημα G είναι εμφυτευμένο στην S^3 έτσι ώστε να υπάρχει ένας πεπερασμένου βαθμού ομοιομορφισμός $h : (S^3, G) \rightarrow (S^3, G)$, που αντιστρέφει τον προσανατολισμό του χώρου. Λόγω της δομής του γραφήματος, θα πρέπει $h(M) = M$, $h(T) = T$ και $h(v) = v$. Ακόμα ο h θα πρέπει να επάγει έναν αυτομορφισμό στις κορυφές του T βαθμού ένα ή δύο (λόγω της δομής του T). Σε κάθε περίπτωση ο h^2 θα αφήνει αμετάβλητο κάθε σημείο του T και άρα και κάθε σημείο των πλευρών e_1 και e_2 που συνδέουν το T με τη M . Γνωρίζουμε ακόμα ότι ο h^2 έχει πεπερασμένο βαθμό. Από τη θεωρία του Smith και επειδή ο h^2 πρέπει να διατηρεί τον προσανατολισμό του χώρου, αν ο h^2 δεν είναι η ταυτοτική απεικόνιση, τότε το σύνολο των σταθερών σημείων του είναι είτε το κενό, είτε ομοιομορφικό με έναν κύκλο. Όμως, το τμήμα $e_1 T e_2$ δεν είναι ομοιομορφικό με κύκλο. Άρα ο h^2 θα είναι η ταυτοτική απεικόνιση. Για τη συγκεκριμένη σκάλα Moebius M με τέσσερις συνδέσεις και με βρόγχο K ισχύει $h(K) = K$, από Λήμμα 3.5 και επειδή ο h έχει βαθμό δύο, θα πρέπει $h(a_i) = a_i$, για κάθε σύνδεση a_i . Αυτό έρχεται σε αντίθεση με το Θεώρημα 3.10 και άρα δεν υπάρχει τέτοιος ομοιομορφισμός h .

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι κανένα τοπολογικό ισομερές του γραφήματος G δεν μπορεί να περιστραφεί στη κατοπτρική του εικόνα και άρα δεν έχει συμμετρική αναπαράσταση, και ότι το γράφημα G είναι τοπολογικά ελαστικό γάντι.

Όπως αναφέραμε και παραπάνω, δεν υπάρχει γράφημα που να είναι εγγενώς τοπολογικά ελαστικό γάντι. Για παράδειγμα, όπως δείξαμε, κάθε εμφύτευση του παραπάνω γραφήματος G δεν έχει συμμετρική αναπαράσταση. Υπάρχουν όμως εμφυτεύσεις του G που είναι τοπολογικά μη αμφίχειρες. Πράγματι, στο Σχήμα 4.13 παρουσιάζεται το γράφημα G με έναν κόμβο trefoil στην πλευρά του τριγώνου T , άρα το γράφημα είναι μη αμφίχειρο. Επομένως, το γράφημα του Σχήματος 4.12 δεν είναι εγγενώς τοπολογικά ελαστικό γάντι.



Σχήμα 4.13 Τοπολογικώς μη αμφίχειρη εμφύτευση του γραφήματος G

5

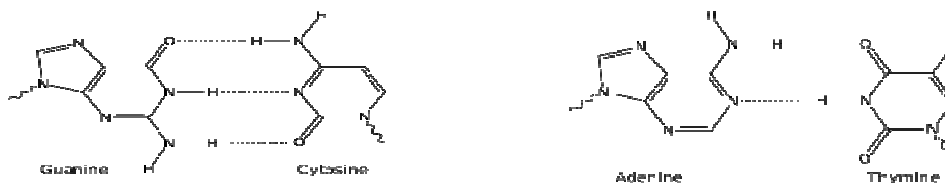
Η ΤΟΠΟΛΟΓΙΑ ΤΟΥ DNA

Η Τοπολογία αποτελεί χρήσιμο εργαλείο στη μελέτη του DNA, καθώς τα μόρια DNA είναι πολύ μεγαλύτερα από τα μόρια της Οργανικής Χημείας, που μελετήσαμε στα προηγούμενα κεφάλαια και γι' αυτό το λόγο έχουν μεγαλύτερη ευελιξία. Η πιο γνωστή μορφή DNA είναι η *B* μορφή, την οποία πρότειναν οι Watson και Crick το 1953. Το μοντέλο αυτό τους χάρισε το Nobel Ιατρικής το 1962 και παρουσιάζεται παρακάτω.

5.1 Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ DNA

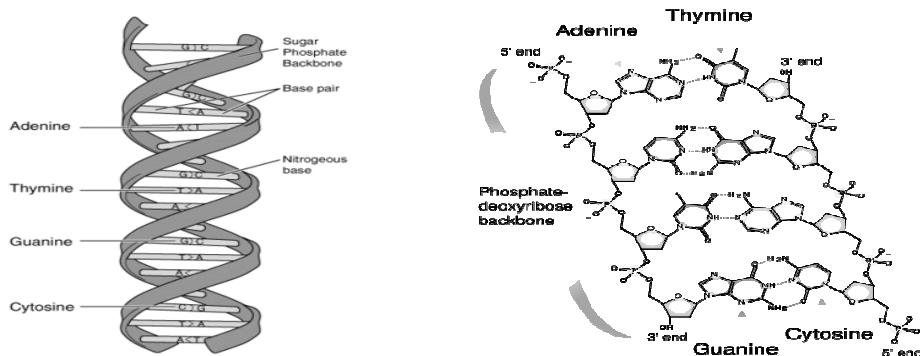
Οι Watson και Crick πρότειναν ένα μοντέλο διπλής έλικας για το DNA, το οποίο βασίστηκε σε όλες τις χημικές και φυσικές ιδιότητες που είχαν παρατηρηθεί ως τότε. Το DNA αποτελείται από δύο δεξιόστροφες πολυνουκλεοτιδικές έλικες, που περιελίσσονται γύρω από τον ίδιο άξονα ώστε να σχηματίζουν μια διπλή έλικα. Οι δύο έλικες ενώνονται με χημικούς δεσμούς και ονομάζονται σήμερα Watson (*W*) και Crick (*C*) προς τιμήν τους.

Κάθε έλικα αποτελείται από μόρια ζάχαρης και φωσφορικού άλατος και κάθε μόριο ζάχαρης συνδέεται με μία από τις τέσσερις βάσεις, αδενίνη (*A*), θυμίνη (*T*), γουανίνη (*G*), κυτοσίνη (*C*) (Σχήμα 4.9). 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, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 5.1. Προκύπτει άμεσα ότι η ακολουθία των βάσεων στη μία έλικα καθορίζει την ακολουθία των βάσεων στην άλλη.



Σχήμα 5.1 Δεσμοί μεταξύ βάσεων

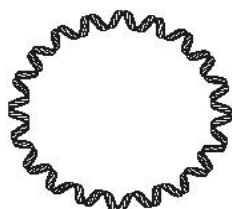
Οι βάσεις τοποθετούνται η μια επάνω από την άλλη και η απόσταση των επιπέδων τους είναι $3,4^{\text{Å}}$. Σε μια πλήρη περιστροφή της έλικας αντιστοιχούν περίπου 10.5 επίπεδα βάσεων και κάθε ζεύγος βάσεων στρέφεται περίπου κατά 34° σχετικά με το γειτονικό του.



Σχήμα 5.2 Η γεωμετρία του DNA

Οι δύο πολυνουκλεοτιδικές έλικες επιπλέον, είναι αντιπαράλληλες με την έννοια ότι οι 3', 5' φωσφοδιεστερικοί δεσμοί (η μια θέση δεσμού ζάχαρης ονομάζεται 3' και η άλλη 5') διατρέχουν προς αντίθετες κατευθύνσεις, δηλαδή η μία άκρη της έλικας θα τελειώνει σε 3' και η άλλη σε 5' (Σχήμα 4.10).

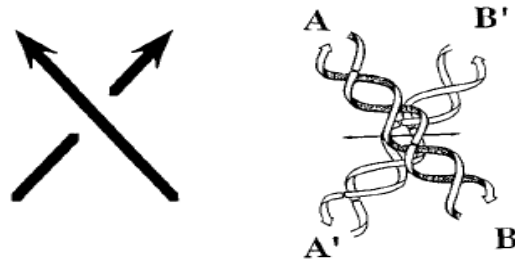
Η διπλή έλικα DNA, που περιγράψαμε βρίσκεται στη φύση σε γραμμική μορφή ή σε κυκλική μορφή. Από το γεγονός ότι οι δύο πολυνουκλεοτιδικές έλικες είναι αντιπαράλληλες προκύπτει ότι όταν το μόριο του DNA ενωθεί κυκλικά με φωσφοδιεστερικούς δεσμούς, δεν θα υπάρχει περίπτωση να προσκολληθούν οι δύο έλικες *W* και *C* μεταξύ τους, παρά μόνο η κάθε μία με τον εαυτό της. Επομένως, ένα κλειστό κυκλικό μόριο DNA έχει τη μορφή ενός στρεβλωμένου κυκλικού δακτυλίου και όχι τη μορφή σκάλας Μοebius, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.3.



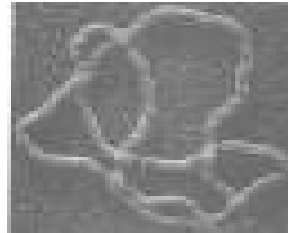
Σχήμα 5.3 Κυκλικό μόριο DNA

5.2 ΑΜΦΙΧΕΙΡΙΑ ΤΟΥ DNA

Ένα (κλειστό) μόριο DNA μπορεί να έχει τοπικά τη μορφή κόμβου και δύο ή περισσότερα μόρια μπορούν να δημιουργούν κρίκους. Στο Σχήμα 5.4 παρουσιάζεται μία διασταύρωση ενός τέτοιου μορίου, το οποίο συναντάται συχνά στη φύση και κυρίως στις μεμβράνες ανθρωπίνων κυττάρων, και στο Σχήμα 5.5 φαίνεται ένα τέτοιο μόριο.

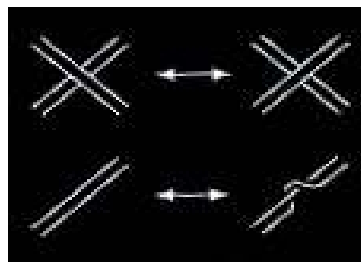


Σχήμα 5.4 Μία διασταύρωση μορίου DNA

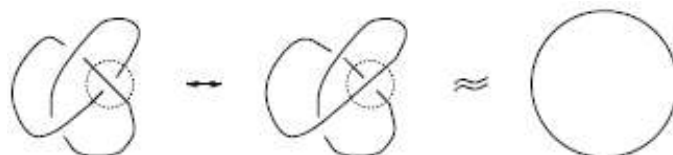


Σχήμα 5.5 Μόριο DNA σε μορφή κόμβου

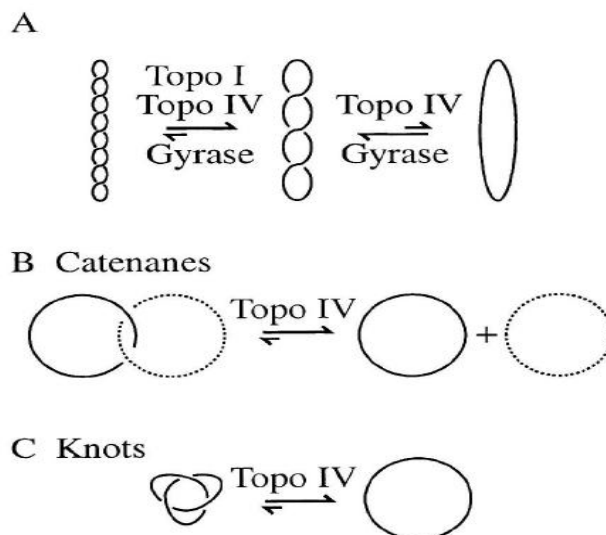
Στο Κεφάλαιο 4 αναφέραμε κυκλικό μόριο DNA σε μορφή κόμβου figure 8. Η δημιουργία κόμβων μπορεί να προκληθεί από τη δράση κάποιων ενζύμων στο DNA, κατά τη διάρκεια της αναδιάταξης. Στο Σχήμα 5.6 παρουσιάζεται η δράση των ενζύμων *Toro I* και *Toro II* στο DNA, στο Σχήμα 5.7 η δράση του ενζύμου *Toro I* στο μόριο DNA σε μορφή κόμβου trefoil. Τέλος, στο Σχήμα 5.8 παρουσιάζεται η δράση του ενζύμου *Toro IV* και της *γυράσης*, τα οποία αποτελούν δύο είδη *Toro II* και εμφανίζονται κατά την αναπαραγωγή του DNA.



Σχήμα 5.6 Δράση των ενζύμων *Toro I* και *Toro II*



Σχήμα 5.7 Δράση του ενζύμου *Toro I*



Σχήμα 5.8 Η δράση του ενζύμου Topo IV και της γυράσης

Για να μελετήσουμε τη τοπολογία του DNA μπορούμε να θεωρήσουμε τη συνέλιξη των δύο ελίκων μέσα σε ένα κλειστό μόριο. Αν το κλειστό μόριο DNA δεν περιπλέκεται (είναι δηλαδή απλά κυκλικό), τότε οι δύο έλικες έχουν τη μορφή ενός $(2, n)$ - torus κρίκου, όπου n μεγάλος φυσικός αριθμός. Όπως αναφέραμε όμως στο Κεφάλαιο 3, για κάθε $n > 1$, ένας $(2, n)$ - torus κρίκος είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρας και επομένως κάθε κλειστό κυκλικό μόριο DNA είναι τοπολογικώς μη αμφίχειρο και άρα και χημικώς.

Κάποιες από τις τεχνικές που αναφέραμε στα προηγούμενα κεφάλαια φαίνεται να βρίσκουν εφαρμογή και στα μόρια του DNA. Πιο συγκεκριμένα και χρησιμοποιώντας τον αριθμό συνέλιξης (linking number) που ορίσαμε στο Κεφάλαιο 2 για παράδειγμα, μπορούμε να ξεχωρίσουμε δύο μόρια DNA. Πράγματι, αν δύο μόρια έχουν την ίδια ακολουθία ζευγών βάσεων, αλλά τα ζεύγη των διπλών ελίκων έχουν διαφορετικό αριθμό συνέλιξης, τότε τα μόρια είναι τοπολογικά στερεοϊσομερή, και επομένως χημικά στερεοϊσομερή.

Μία κατηγορία κόμβων που συναντάται συχνά σε πειράματα αναδιάταξης του DNA είναι οι *ρητοί κόμβοι*. Οι ρητοί κόμβοι είναι οι πιο απλοί κόμβοι που υπάρχουν, είναι όλοι εναλλασσόμενοι και είναι από τις ελάχιστες κατηγορίες κόμβων που έχουν ταξινομηθεί πλήρως (Schubert; 1956). Ένας ρητός κόμβος μπορεί να παρασταθεί από ένα ρητό αριθμό $\frac{p}{q}$, όπου $(p, q) = 1$ (και ένα συνεχές κλάσμα, που μπορούμε να φτιάξουμε από αυτόν τον αριθμό). Ισχύει το εξής θεώρημα:

ΘΕΩΡΗΜΑ 5.1. (Schubert; 1956) Δύο ρητοί κόμβοι K_1, K_2 , που αντιστοιχούν σε δύο ρητούς αριθμούς $\frac{p}{q}$ και $\frac{p'}{q'}$ είναι ισοτοπικοί αν και μόνο αν:

1. $p = p'$
2. $q \equiv q' \pmod{p}$ ή $qq' \equiv 1 \pmod{p}$.

Για την αμφιχειρία ρητών κόμβων έχουμε το παρακάτω θεώρημα:

ΘΕΩΡΗΜΑ 5.2. (Siebenmann) Ένας ρητός κόμβος, που αναπαρίσταται από έναν ρητό $\frac{p}{q}$ είναι αμφίχειρας αν και μόνο αν $q^2 \equiv (-1) \pmod{p}$.

Στο άρθρο “*A simple topological method for describing stereoisomers of DNA catenanes and knots*” των J.H. White και N.R. Cozzarelli (1984) παρατίθενται όλα τα πιθανά στερεοϊσομερή ενός υπερελικωμένου μορίου DNA και γίνεται ταξινόμηση αυτών χρησιμοποιώντας το Θεώρημα 5.1.

5.3 ΥΠΕΡΕΛΙΚΩΣΗ ΤΟΥ DNA

Η ύπαρξη 10,5 ζευγών βάσεων σε μία πλήρη στροφή της διπλής έλικας ενός γραμμικού μορίου DNA προκαλεί τη μικρότερη δυνατή τάση στην διπλή έλικα. Αν ενώσουμε τα δύο άκρα του μορίου, τότε προκύπτει ένα κυκλικό μόριο DNA, το οποίο εξακολουθεί να έχει 10,5 ζεύγη βάσεων σε κάθε βήμα της έλικας. Η μορφή αυτή καλείται *χαλαρωμένη μορφή* (*relaxed state*) του μορίου DNA.

Αν όμως κρατήσουμε αρχικά σταθερά το γραμμικό μόριο DNA από το ένα του άκρο, το ξετυλίξουμε από το άλλο του άκρο και μετά ενώσουμε τις έλικες με φωσφοδιεστερικούς δεσμούς, τότε προκαλούμε τάση στο κυκλικό μόριο που θα προκύψει, η οποία έχει ως αποτέλεσμα η διπλή έλικα του DNA να συστρέφεται, δηλαδή ο άξονας της διπλής έλικας να στρεβλώνεται ελικοστά. Σε αυτή τη μορφή λέμε ότι το μόριο DNA είναι *υπερελικωμένο* και το φαινόμενο το χαρακτηρίζουμε με τον όρο *υπερελίκωση* (*supercoiling*), βλέπε Σχήμα 5.9. Το μόριο DNA υπερελικώνεται με φυσικό τρόπο, όταν τυλίγεται γύρω από ένα μόριο πρωτεΐνης ή όταν δράση σε αυτό κάποιος ένζυμο.



Σχήμα 5.9 Χαλαρωμένο και υπερελικωμένο κλειστό μόριο DNA

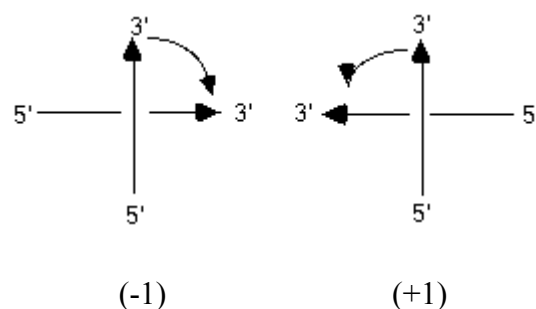
Ο κύριος λόγος που συμβαίνει το φαινόμενο της υπερελίκωσης στο μόριο του DNA είναι γιατί με αυτόν τον τρόπο γίνεται πιο συμπαγές και καταλαμβάνει λιγότερο χώρο. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να μπορεί πιο εύκολα να αποθηκευτεί στα κύτταρα των ζωντανών οργανισμών. Όπως αναφέραμε και παραπάνω, τα μη υπερελικωμένα μόρια DNA έχουν πολύ μεγάλο μήκος. Για παράδειγμα, τα ανθρώπινα γονίδια περιλαμβάνουν περίπου 3×10^9 ζευγάρια βάσεων. Γίνεται λοιπόν σαφές, ότι θα ήταν σχεδόν αδύνατον το μόριο μη υπερελικωμένου DNA να αποθηκευτεί σε ένα κύτταρο. Όταν το φαινόμενο της υπερελίκωσης παρατηρήθηκε για πρώτη φορά θεωρήθηκε ότι είναι χαρακτηριστικό των μικρών διπλών κυκλικών DNA και μερικοί μάλιστα το χαρακτήρισαν ως τεχνητής προελεύσεως. Σήμερα πιστεύουμε ότι η διαδικασία αυτή έχει πολύ μεγάλη σημασία και είναι χαρακτηριστική για όλα τα μόρια του DNA, όχι μόνο τα κυκλικά αλλά και τα γραμμικά, όταν τα άκρα των τελευταίων είναι καθηλωμένα.

5.4 Η ΘΕΜΕΛΙΩΔΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗ

Κλείνουμε με τη θεμελιώδη εξίσωση του DNA, η οποία αποδεικνύει ότι το μόριο του DNA δεν είναι ούτε τελείως εύκαμπτο, αλλά ούτε τελείως άκαμπτο. Η γεωμετρία του οφείλεται στην ακαμπτότητα των βάσεων, ενώ η τοπολογία του οφείλεται στο μεγάλο μήκος του μορίου.

Η υπερελίκωση ενός κυκλικού DNA μπορεί να περιγραφεί με τη βοήθεια του αριθμού συνέλιξης Lk , που δηλώνει πόσες φορές οι δύο έλικες του DNA διαπλέκονται στο χώρο. Δίνουμε προσανατολισμό στο γράφημα του κλειστού κυκλικού μορίου DNA, ο οποίος επάγει παράλληλο προσανατολισμό στις δύο έλικες του μορίου και στον κεντρικό άξονα κατά φυσιολογικό τρόπο, και στη συνέχεια προβάλλουμε τις δύο έλικες στο επίπεδο. Στο Σχήμα 5.10 παρουσιάζονται τα είδη των διασταυρώσεων που εμφανίζονται στο μόριο. Σε ένα DNA σχεδιασμένο σε ένα επίπεδο ο αριθμός συνέλιξης υπολογίζεται από το άθροισμα των διασταυρώσεων της μιας έλικας με την άλλη:

$$Lk = \frac{1}{2} \sum (\text{αριθμός διασταυρώσεων})$$



Σχήμα 5.10 Είδη διασταυρώσεων

Ο αριθμός συνέλιξης αποτελεί τοπολογική αναλλοίωτη κρίκων, και επομένως δεν μεταβάλλεται ανεξάρτητα από την παραμόρφωση του μορίου αυτού. Για να αλλάξει, θα πρέπει να κοπεί η μία έλικα του DNA, να περιστραφεί γύρω από την άλλη και

μετά να ενωθούν τα δύο άκρα ξανά. Το κυκλικό DNA που παράγεται έτσι θα έχει διαφορετικό αριθμός συνέλιξης. Όπως είδαμε παραπάνω, οι προσανατολισμοί των δύο ελίκων DNA έχουν παράλληλες κατευθύνσεις και επομένως όλες οι διασταυρώσεις σε μία δεξιόστροφη διπλή έλικα θα είναι θετικές, και άρα ο αριθμός συνέλιξης θα είναι θετικός αριθμός, ενώ σε μία αριστερόστροφη οι διασταυρώσεις είναι αρνητικές, και επομένως ο αριθμός συνέλιξης θα είναι αρνητικός αριθμός. Σε ένα χαλαρωμένο κυκλικό DNA το βήμα της έλικας περιέχει 10,5 ζεύγη βάσεων και επομένως ένα μόριο (με δεξιόστροφη διπλή έλικα) που περιέχει 1050 ζεύγη βάσεων θα έχει αριθμό συνέλιξης ίσο με 100. Αν όμως ο αριθμός συνέλιξης ενός χαλαρωμένου μορίου DNA δεν διαιρείται τέλεια με τον αριθμό 10,5, τότε τα άκρα του μορίου περιστρέφονται ώστε να ευθυγραμμιστούν και να είναι εφικτή η ένωση μεταξύ τους.

Σε ένα χαλαρωμένο λοιπόν μόριο DNA, με N το πλήθος ζεύγη βάσεων, ο αριθμός συνέλιξης, Lk_0 , είναι ίσος με τον κοντινότερο ακέραιο αριθμό της τιμής $N/10,5$. Αν ο αριθμός συνέλιξης είναι μικρότερος από την τιμή αυτή, τότε το DNA είναι αρνητικά υπερελικωμένο, ενώ αν είναι μεγαλύτερο από την τιμή αυτή, τότε το DNA είναι θετικά υπερελικωμένο. Η διαφορά $\Delta L = Lk - Lk_0$ προκύπτει από τον αριθμό των στροφών που έχουν αφαιρεθεί ή εισαχθεί στο μόριο.

Όταν το μόριο του DNA είναι αρνητικά υπερελικωμένο, $\Delta L < 0$ (Σχήμα 5.11), τότε:

1. Παρουσιάζει λιγότερες στροφές από τις αναμενόμενες.
2. Έχει περισσότερα ζεύγη βάσεων ανά στροφή (π.χ. 11 bp / turn).
3. Έχει μειωμένη γωνία μεταξύ των γειτονικών ζευγών βάσεων (π.χ. 20°).
4. Έχει δεξιόστροφη υπερελίκωση.
5. Μπορεί να επανέλθει σε κατάσταση χαλαρώσεως μέσω των Τορο Ι ή της γυράσης.



Σχήμα 5.11 Αρνητική υπερελίκωση

Όταν το μόριο του DNA είναι θετικά υπερελικωμένο, $\Delta L > 0$ (Σχήμα 5.12), τότε:

1. Παρουσιάζει περισσότερες στροφές από τις αναμενόμενες.
2. Έχει λιγότερα ζεύγη βάσεων ανά στροφή (π.χ. 9 bp / turn).
3. Έχει αυξημένη γωνία μεταξύ των γειτονικών ζευγών βάσεων (π.χ. 50°).
4. Έχει αριστερόστροφη υπερελίκωση.
5. Μπορεί να επανέλθει σε κατάσταση χαλαρώσεως της γυράσης.



Σχήμα 5.12 Θετική υπερέλικωση

Η τάση που προκαλείται στο μόριο του DNA όταν η τιμή του αριθμού συνέλιξης είναι διαφορετική από αυτή της καταστάσεως χαλαρώσεως μπορεί να οδηγήσει:

1. Σε μεταβολή του βήματος της έλικας του DNA χωρίς να επηρεαστεί ο άξονας της έλικας. Αυτή η μεταβολή μπορεί να κατανέμεται ομαλά σε όλο το μήκος του μορίου ή να παρατηρείται σε ορισμένες μόνο περιοχές και στην πιο ακραία περίπτωση, να παρατηρείται σε μία περιοχή του (τέλεια εκτύλιξη).
2. Σε συστροφή του άξονα της έλικας χωρίς μεταβολής του βήματός της.
3. Σε συνδυασμό των δύο παραπάνω.

Κατά τη διάρκεια της αναπαραγωγής του κυττάρου θα πρέπει ο αριθμός συνέλιξης να γίνει μηδέν για να μπορέσει να αποχωριστεί η μία έλικα από την άλλη. Αυτή είναι η λειτουργία των ενζύμων Topo I, τα οποία καθ' όλη τη διάρκεια της αναπαραγωγής αναλαμβάνουν να μειώνουν κατ' απόλυτη τιμή τον αριθμό συνέλιξης, σε βήματα των 1 ή 2 κάθε φορά .

Ο James White (1969) απέδειξε ότι ο αριθμός συνέλιξης του DNA αποσυντίθεται σε δύο συνιστώσες, οι οποίες σχετίζονται με τη γεωμετρία του μορίου και όχι με την τοπολογία του. Η μία αφορά το τοπικό τύλιγμα της έλικας γύρω από τον κεντρικό της άξονα και η άλλη το γενικότερο σχήμα και τις διασταυρώσεις του κεντρικού άξονα στο χώρο.

Τη στρέβλωση του άξονα της έλικας στο χώρο περιγράφουμε με τον αριθμό συστροφής Wr (writhing number), τον οποίο ορίσαμε στο Κεφάλαιο 2. Στον υπολογισμό του αριθμού συστροφής μας ενδιαφέρει μόνο ο κεντρικός άξονας και άρα θεωρούμε όλο το μόριο σαν μία καμπύλη στο χώρο. Επιλέγουμε προσανατολισμό, προβάλλουμε την καμπύλη σε ένα τυχαίο επίπεδο E και υπολογίζουμε τον αριθμό συστροφής της προβολής:

$$Wr(E) = \sum (\text{αριθμός διασταυρώσεων})$$

Γνωρίζουμε ότι ο αριθμός συστροφής δεν αποτελεί τοπολογική αναλλοίωτη, όπως ο αριθμός συνέλιξης. Η τιμή του αριθμού συστροφής εξαρτάται από το επίπεδο E που έχουμε επιλέξει για να κάνουμε την προβολή, και γι' αυτό ορίζουμε ως Wr το μέσο αριθμό συστροφής όλων των προβολών! Προφανώς, οι προβολές αυτές θα είναι άπειρες και άρα ο αριθμός συστροφής υπολογίζεται ως το παρακάτω ολοκλήρωμα, που δεν είναι γενικά ακέραιος αριθμός.

$$\bar{Wr} = \frac{\int (\text{signed_crossover_number}) dA}{\int dA} = \frac{\int (\text{signed_crossover_number}) dA}{4\pi}, \text{ αφού}$$

$\int dA$ είναι απλά η επιφάνεια της σφαίρας.

Τέλος, σημειώνουμε ότι στην κατάσταση ηρεμίας του DNA είναι $Wr = 0$.

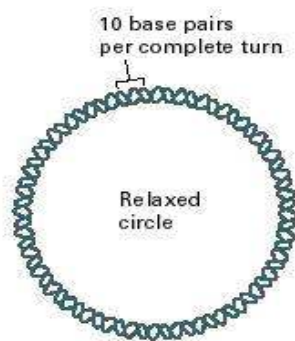
Το βήμα της έλικας περιγράφουμε με τον *αριθμό περιέλιξης* Tw (*twisting number*), που δηλώνει πόσες φορές η μία έλικα του DNA στρέφεται γύρω από την άλλη. Ο αριθμός αυτός ορίζεται στην κατάσταση χαλαρώσεως του DNA φυσιολογικά ως το πηλίκο του αριθμού των βάσεων δια 10,5. Δηλώνει δηλαδή τον αριθμό των βάσεων σε κάθε στροφή της έλικας, και όπως είδαμε και παραπάνω ισούται με τον αριθμό συνέλιξης στη κατάσταση χαλαρώσεως του μορίου. Αν ο αριθμός αυτός είναι διαφορετικός, τότε έχουμε μεταβολή στο βήμα της έλικας του DNA.

Ο αριθμός περιέλιξης γενικά δεν είναι ακέραιος αριθμός και όπως και ο αριθμός συστροφής, δεν είναι τοπολογικό χαρακτηριστικό του DNA παρά μόνο γεωμετρικό (είναι δηλαδή ένα τοπικό «μέτρο» και αλλάζει σε τυχούσες μεταβολές του DNA).

Το 1969 λοιπόν, ο White απέδειξε ότι οι αριθμοί συστροφής, συνέλιξης και περιέλιξης συνδέονται με τη παρακάτω σχέση, η οποία είναι γνωστή ως η *θεμελιώδης εξίσωση* του DNA:

$$Lk = Tw + Wr$$

Ας φανταστούμε, για παράδειγμα, ένα κυκλικό DNA σε κατάσταση χαλαρώσεως με 1000 ζεύγη βάσεων (1000 bp) και ας υποθέσουμε ότι σε κάθε στροφή του DNA υπάρχουν 10 ζεύγη βάσεων (10 bp), δηλαδή το DNA περιέχει 100 στροφές, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 5.13.



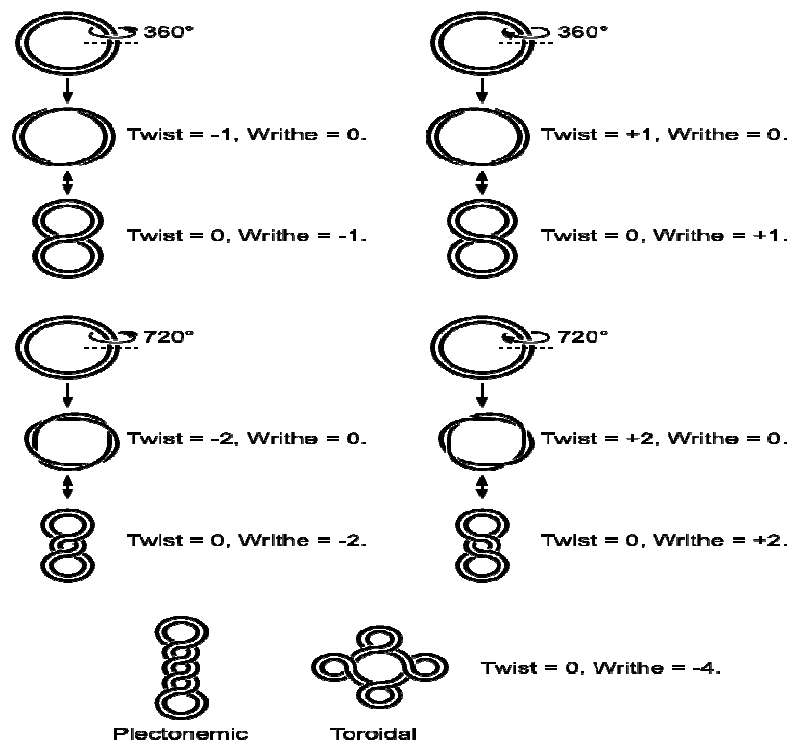
Σχήμα 5.13 Ένα κυκλικό DNA σε κατάσταση χαλαρώσεως με 1000 ζεύγη βάσεων

Όπως αναφέραμε παραπάνω, θα είναι $Lk_0 = 100$ και θα ισχύει ότι $Lk = Wr + Tw$. Όταν το μόριο του DNA είναι σε χαλαρωμένη μορφή, ισχύει ότι $Wr = 0$ και άρα $Lk_0 = Tw + 0 = 100$. Ας αφαιρέσουμε 20 στροφές από το μόριο του DNA (κόβοντας τη μία έλικα και απελευθερώνοντάς τη). Υπάρχουν πλέον 80 στροφές στο μόριο και άρα $Lk = 80$ και $Lk = 80 = Wr + Tw$. Αν υποθέσουμε ότι ο κεντρικός άξονας δεν

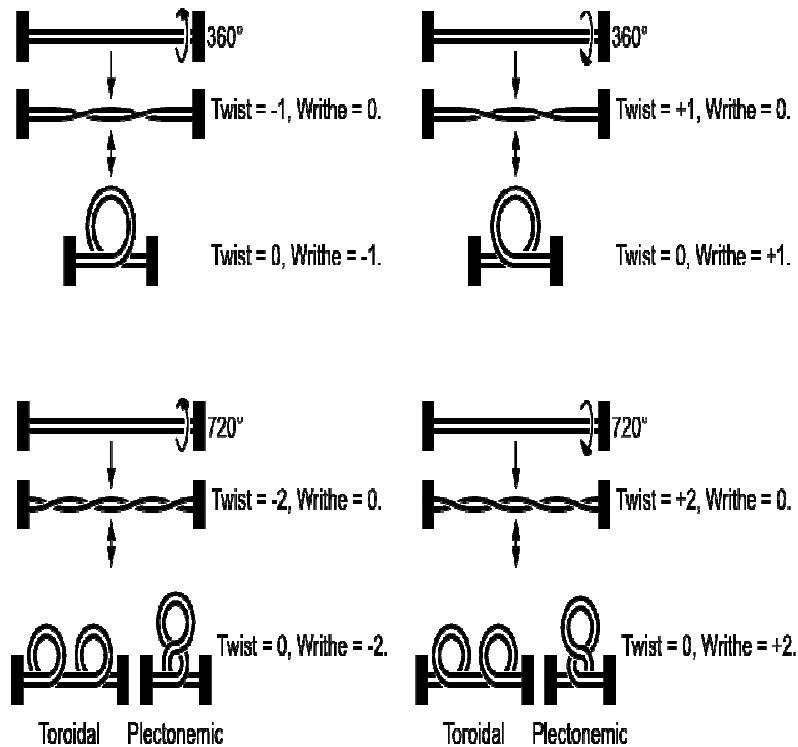
στρεβλώνει στο χώρο, ότι δηλαδή $Wr = 0$. Τότε: $80 = Tw + 0$. Ο αριθμός περιέλιξης είναι ίσος με 80 και γι' αυτό ο βαθμός της έλικας αλλάζει από 10 bp σε $\frac{1000}{80} = 12,5 \text{ bp} / \text{στροφή}$.

Ας κρατήσουμε τώρα τον αριθμό περιέλιξης σταθερό (1000 στροφές, 10 bp / στροφή) και ας θεωρήσουμε ότι η αρνητική υπερελίκωση επηρεάζει εξ' ολοκλήρου τον αριθμό συστροφής. Τότε: $Lk = 80 = 100 + Wr \Rightarrow Wr = 80 - 100 \Rightarrow Wr = -20$, ή αλλιώς ο κεντρικός άξονας στριφογυρίζει γύρω από τον εαυτό του 20 φορές. Αν επαναλάβουμε τη παραπάνω διαδικασία προσθέτοντας αυτή τη φορά 20 στροφές, τότε θα καταλήγαμε σε θετική υπερελίκωση.

Στα Σχήματα 5.14 και 5.15 φαίνεται η σχέση μεταξύ των αριθμών περιέλιξης και συστροφής σε κυκλικό και γραμμικό μόριο DNA αντίστοιχα.



Σχήμα 5.14 Οι αριθμοί περιέλιξης και συστροφής σε κυκλικό μόριο DNA



Σχήμα 5.15 Οι αριθμοί περιέλιξης και συστροφής σε γραμμικό μόριο DNA

ΒΑΘΜΟΙ ΥΠΕΡΕΛΙΚΩΣΗΣ ΤΟΥ DNA

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε δύο διαφορετικού μεγέθους μόρια DNA και ας προσθέσουμε ή ας αφαιρέσουμε τον ίδιο αριθμό στροφών και στα δύο μόρια. Τότε προφανώς το μικρό μόριο DNA είναι πιο «ευαίσθητο» από το μεγάλο στην διαδικασία αυτή. Αυτό μας οδηγεί στο να ορίσουμε τη *σχετική διαφορά του Lk* (*specific linking difference / superhelical density*) ως $\sigma = \frac{\Delta Lk}{Lk_0}$, η τιμή της οποίας

εξαρτάται από το μέγεθος του μορίου. Η σ αντιπροσωπεύει τον αριθμό των στροφών που προστέθηκαν ή αφαιρέθηκαν συναρτήσει του συνολικού αριθμού των στροφών σε κατάσταση χαλαρώσεως, υποδηλώνοντας τον βαθμό υπερελίκωσης του μορίου. Η σ είναι θετική όταν το μόριο του DNA είναι θετικά υπερελίκωμένο και αρνητική όταν το μόριο του DNA είναι αρνητικά υπερελίκωμένο. Έχει βρεθεί ακόμα ότι για το DNA οργανισμών που ζουν σε θερμοκρασίες κοντά στους 37° , ισχύει ότι $\sigma \approx -0.06$, ενώ γενικότερα σε απομονωμένα φυσιολογικά μόρια DNA είναι $-0.05 \leq \sigma \leq -0.07$.

Με ανάλογο τρόπο, όπως εκείνον που ορίσαμε το ΔLk , ορίζουμε τα μεγέθη $Tw_0 = Lk_0$, και $Wr_0 = 0$, που εκφράζουν τα Tw και Wr σε κατάσταση ηρεμίας αντίστοιχα, καθώς και τα $\Delta Tw = Tw - Tw_0$ και $\Delta Wr = Wr - Wr_0$. Η θεμελιώδης λοιπόν εξίσωση του DNA έχει μία νέα μορφή: $\Delta Lk = \Delta Tw + \Delta Wr$.

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ ΠΑΝΩ ΣΤΗ ΝΕΑ ΜΟΡΦΗ ΤΗΣ ΘΕΜΕΛΙΩΔΟΥΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ

1. Όπως αναφέραμε, ο αριθμός συνέλιξης είναι μια τοπολογική ιδιότητα του DNA και δεν αλλάζει, ανεξάρτητα από το αν προσθέτουμε ή αφαιρούμε στροφές στο μόριο του DNA. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να έχουμε $\Delta Lk = 0$ και άρα: $0 = \Delta Lk = \Delta Tw + \Delta Wr \Rightarrow \Delta Tw = -\Delta Wr$.

2. Οι Boles, White και Cozzarelli το 1990 έδειξαν πειραματικά ότι $\frac{\Delta Wr}{\Delta Tw} \cong 2.57$

σε όλα σχεδόν τα μόρια DNA και με αρκετά μεγάλη ακρίβεια. Έπεται τώρα ότι: $\frac{\Delta Wr}{\Delta Tw} \cong 2.57 \Rightarrow \Delta Wr \cong 2.57\Delta Tw$ και αν το εφαρμόσουμε στη θεμελιώδη εξίσωση έχουμε:

$$\Delta Lk \cong \Delta Tw + 2.57\Delta Tw \Rightarrow \Delta Lk \cong 3.57\Delta Tw \Rightarrow \Delta Tw \cong \frac{1}{3.57}\Delta Lk \Rightarrow$$

$$\Delta Tw \cong 0.28\Delta Lk \text{ και}$$

$$\Delta Lk \cong \frac{\Delta Wr}{2.57} + \Delta Wr \Rightarrow \Delta Lk \cong \frac{3.57}{2.57}\Delta Wr \Rightarrow \Delta Wr \cong \frac{2.57}{3.57}\Delta Lk \Rightarrow$$

$$\Delta Wr \cong 0.72\Delta Lk .$$

Από τα παραπάνω γίνεται σαφές ότι, αν προσθαφαιρέσουμε στροφές στο μόριο του DNA, αυτό θα έχει μεγαλύτερη επίδραση στον αριθμό συστροφής παρά στον αριθμό περιέλιξης.

Εργαστηριακές τεχνικές για την μέτρηση της υπερελίκωσης στο μόριο του DNA περιλαμβάνουν και την κίνηση κλειστών και κυκλικών μορίων DNA μέσα από μια πλάκα γέλης, στις οποίας τα δύο άκρα εφαρμόζουμε διαφορά δυναμικού (στην παρακάτω περίπτωση από αριστερά προς τα δεξιά).



Σχήμα 5.16 Ηλεκτροφόρηση

Επειδή τα περισσότερο υπερελικωμένα μόρια DNA είναι πιο συμπαγή, κινούνται γρηγορότερα μέσα στη γέλη και αυτό έχει ως αποτέλεσμα να δημιουργούνται ομάδες μορίων DNA που έχουν τον ίδιο αριθμό συνέλιξης, ενώ οι αριθμοί συνέλιξης γειτονικών ομάδων διαφέρουν κατά 1. Η μέθοδος που περιγράψαμε καλείται *ηλεκτροφόρηση*.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Adams C. C., *The Knot Book*, W. H. Freeman and Company, New York, 1994.
2. Alexander J. W., *Topological invariants of knots and links*, Trans. Am. Math. Soc. **30**, 275-306, 1928.
3. Bates A.D., Maxwell A., *DNA Topology*, Oxford University Press, Oxford, England, 1993.
4. Burde G., Zieschang H., *Knots*, W. de Gruyter, Berlin, 1986.
5. Bollobas Bela, *Modern Graph Theory*, Springer-Verlag, New York, Inc., 1998.
6. Cerf C., *Nullification writhe and chirality of alternating links*, J. Knot Theory Ramif. **6**, 621-632, 1997.
7. Carina R. F., Buchecker C. D., Sauvage J. P., *Molecular composite knots*, J. Am. Chem. Soc. **118**, 9110-9116, 1996.
8. Ernst C.D., Sumners W., *A calculus for rational tangles: applications to DNA recombination*, Math. Proc. Camb. Phil. Soc. **108**, 489-515, 1990.
9. Flapan E., *When Topology meets Chemistry*, Cambridge University Press, 2000.
10. Flapan E., *Rigid and non rigid achirality*, Pac. J. Math. **129**, 1, 57-66, 1987.
11. Flapan E., *Topological rubber gloves*, J. Math. Chem. **23**, 31-49, 1998.
12. Flapan E., *Symmetries of Moebius ladders*, Math. Ann. **283**, 271-283, 1989.
13. Flapan E., *Symmetries of knotted hypothetical molecular graphs*, Discrete Applied Math. **19**, 157-166, North Holland, 1988.
14. Flapan E., *Techniques to prove topological chirality*, Lectures on the internet.
15. Freyd P., Yetter D., Hoste J., Lickorish W., Millett K., Ocneanu A., *A new polynomial invariant of knots and links*, Bull. Am. Math. Soc. **12**, 239-246, 1985.
16. Fulton W., *Algebraic Topology*, Springer-Verlag, New York, Inc., 1995.
17. Gilbert N. D., Porter T., *Knots and Surfaces*, Oxford University Press, 1994.
18. Gross J. L., Tucker T. W., *Topological Graph Theory*, Dover Publications, Inc., Mineola, New York 2003.
19. Grossley M. D., *Essential Topology*, Springer-Verlag, New York, Inc., 2007.
20. Hatcher A., *Algebraic Topology*, Cambridge University Press, 2001.
21. Hatcher A., *Notes on Basic 3-Manifold Topology*, Available from [www.http://www.math.cornell.edu/~hatcher](http://www.math.cornell.edu/~hatcher).
22. Jiang B., Lin X-S., Wang S., Wu Y-D., *Achirality of knots and links*, Topology and its Application, preprint 1998.
23. Jaffe H. H., Orchin M., *Symmetry in Chemistry*, Dover Publications, Inc., Mineola, New York 2002.
24. Kauffman L. H., *Formal Knot Theory*, Dover Publications, Inc., Mineola, New York 2006.
25. Kauffman L. H., *Invariants of graphs in three-space*, Trans. Am. Math. Soc. **311**, 2, 1989.
26. Kauffman L. H., *Knots and functional integration*, Course notes 1997-1998.
27. Kawauchi A., *A survey of knot theory*, Bulletin Am. Math. Soc. **36**, No 4, 539-549, 1999.
28. Kawauchi A., *Survey on Knot Theory*, Birkhauser, 1996.
29. Kelvin W. T., *Baltimore Lectures on Molecular Dynamics and the Wave Theory of Light*, C. J. Clay, London, 1904.

30. Λαμπροπούλου Σ., *Σημειώσεις Μεταπτυχιακού Μαθήματος «Θεωρία Κόμβων και Εφαρμογές»*, Αθήνα, 2006, 2007.
31. Liang C., Mislow K., *Classification of topologically chiral molecules*, J. Math. Chem. **15**, 245-260, 1994.
32. Liang C., Mislow K., *On amphicheiral knots*, J. Math. Chem. **15**, 1-34, 1994.
33. Liang C., Cerf C., Mislow K., *Specification of chirality for links and knots*, J. Math. Chem. **19**, 241-263, 1996.
34. Liang C., Mislow K., Flapan E., *Amphicheiral links with odd crossing number*, J. Knot Theory Ramif. **7**, 87-91, 1998.
35. Lickorish W. B. R., *An Introduction to Knot Theory*, Springer-Verlag, New York, Inc., 1997.
36. Mao B., *Topological chirality of proteins*, Protein Sci. **2**, 1057-1059, 1993.
37. Morris D. G., *Stereochemistry*, John Wiley and Sons Ltd, 2003.
38. Murasugi K., *Knot Theory & its Applications*, Birkhäuser, Boston 1996.
39. Μουσιάδης Χ. Θ., *Συνδυαστική Απαρίθμηση*, Εκδόσεις Ζήτη, Θεσσαλονίκη, 2002.
40. Ogden J. S., *Introduction to Molecular Symmetry*, Oxford University Press, 2002.
41. Otsubo T., Mizogami S., Misumi S., *Triple-layered [2.2] naphthalenophane*, Tetrahedron Lett. **24**, 4851-4854, 1983.
42. Πάλλα Ν., *Σημειώσεις Μεταπτυχιακού Μαθήματος «[0-1] Πίνακες, Θεωρία Γραφημάτων και Εφαρμογές»*, Αθήνα, 2005.
43. Παντελίδης Γ. Ν., Κραββαρίτης Δ. Χ., *Λεξικό Μαθηματικών*, Εκδόσεις Πατάκη, Αθήνα, 1997.
44. Παπαϊωάννου Α., *Θεωρία Γραφημάτων*, Έκδοση Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, Αθήνα, 2004.
45. Rolfsen D., *Knots and Links*, Publish or Perish Press, Berkeley Calif., 1976.
46. Simon J., *Topological chirality of certain molecules*, Topology **25**, 2, 229-235, 1986.
47. Smith P. A., *Transformations of finite period II*, Ann. Math. **40**, 690-711, 1939.
48. Sossinsky A., *Knots*, Harvard University Press, 1999.
49. Sumners D. W., *The knot theory of molecules*, J. of Math. Chem. **1**, 1-14, 1987.
50. Tait P. G., *On knots I, II, III*, Scientific Papers Vol. I, Cambridge University Press, London, 273-347, 1898.
51. Van Gulick N., *Theoretical aspects of the linked ring problem*, New J. Chem. **17**, 645-653, 1993.
52. Walba D. W., *A topological hierarchy of molecular chirality and other tidbits in topological stereochemistry*, Kluwer Ac. Publishers **5**, 119-129, Boston, 1991.
53. Walba D. W., *Topological stereochemistry*, Tetrahedron **41**, No 16, 3161-3212, 1985.
54. White J.H., Cozzarelli N.R., *A simple topological method for describing stereoisomers of DNA catenanes and knots*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, Vol. **81**, 3322-3326, 1984.
55. Yamada S., *An invariant of spatial graphs*, J. Graph Theory **13**, 537-551, 1989.