

О КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКЕ ХИРАЛЬНОСТИ: ПРАВСТОРОННИЕ И ЛЕВОСТОРОННИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ОБЪЕКТЫ

© 2024 г. Ю. А. Криксин^{1, *}, член-корреспондент РАН В. Ф. Тишкин^{1, **}

Поступило 20.02.2024 г.
После доработки 04.04.2024 г.
Принято к публикации 04.04.2024 г.

Рассмотрены два способа количественной оценки хиральности множества, первый из которых использует в качестве меры несовпадения двух множеств вычисление площади их симметрической разности, а второй – расстояние Хаусдорфа между ними. Показано, что эти способы, вообще говоря, не обеспечивают правильную количественную оценку для достаточно широкого класса множеств, такого как ограниченные борелевские множества. На примере плоских треугольников и выпуклых четырехугольников рассмотрена проблема разделения геометрических объектов на правосторонние и левосторонние. На плоскости угловых параметров для треугольников построены линии уровня двух версий меры хиральности. Для пространственной спирали найдены значения двух версий индекса хиральности, опирающихся соответственно на вычисление смешанного произведения векторов и расстояния Хаусдорфа между двумя множествами.

Ключевые слова: хиральность, мера и индекс хиральности, левосторонние и правосторонние объекты

DOI: 10.31857/S2686954324030038, EDN: YBRYDC

1. Под хиральностью множества евклидова пространства понимают невозможность его со-вмещения со своим зеркальным отражением с помощью трансляций и вращений. Напротив, ахиральное множество допускает такое совмещение. По-видимому, первая попытка количественной оценки хиральности была предпринята в конце XIX века в связи с потребностями химии распространить ее структурные формулы на трехмерное пространство [1]. Так как почти все биомолекулы являются хиральными, то исследование хиральности имеет ключевое значение для наук о жизни и, в частности, для фармакологии, когда синтезируются сложные соединения. С хиральностью связаны понятия “правостороннего” и “левостороннего” геометрического объекта (множества). В то время как степень или мера хиральности множества во многих случаях допускает количественную оценку с помощью различных числовых функций множества [2–13], степень “правого” или

“левого” не всегда возможно количественно оценить, так как соответствующая числовая величина не может быть корректно определена для всех хиральных объектов универсальным образом. С одной стороны она должна принимать отличные от нуля и противоположные значения на хиральном множестве и его отражении, иметь нулевое значение на ахиральных множествах, а с другой стороны в общем случае псевдоскаляр может принимать нулевые значения на хиральных множествах [14]. Однако, простейшая плоская геометрическая фигура – треугольник допускает непротиворечивое определение такой псевдоскалярной функции его геометрических параметров (индекса хиральности треугольника), которая может быть использована для измерения степени “правого” или “левого” на множестве всех плоских треугольников [11, 13]. Также как и мера хиральности, индекс хиральности может быть построен не единственным образом. В работе [15] показано, что мера хиральности треугольника как и любого хирального множества может быть выбрана таким образом, что любой разносторонний треугольник будет обладать максимальным значением меры хиральности. На наш взгляд, такие меры хиральности носят искусственный характер, в

¹ *Институт прикладной математики имени М. В. Келдыша Российской академии наук, Москва, Россия*

* *E-mail: kriksin@imamod.ru*

** *E-mail: v.f.tishkin@mail.ru*

чем-то схожий с выбором предпочитаемой системы отсчета, хотя определенный произвол в выборе меры хиральности все же остается. Так, например, некоторые версии меры хиральности треугольника имеют неправильную асимптотику в случаях, когда треугольник вырождается в одномерный отрезок [15], который, очевидно, является ахиральным множеством на плоскости, т.е. он должен иметь нулевое значение меры хиральности. В отношении выбора меры (индекса) хиральности должны выполняться некоторые естественные ограничения, в определенной степени сужающие его произвольность. В настоящей работе показано, что такие популярные способы количественной оценки хиральности, основанные на вычислении меры перекрытия общей части множества и его отражения или хаусдорфова расстояния между множеством и его отражением, имеют существенный недостаток: соответствующие оценки принимают нулевые значения на некоторых борелевских хиральных множествах. В то же время для достаточно простых геометрических объектов, таких как многоугольники, многогранники и другие множества, данные оценки хиральности можно оценить как удовлетворительные. Для плоских треугольников авторами построены линии уровня мер хиральности, использующих вычисление меры перекрытия общей части треугольников и хаусдорфова расстояния между ними. Отметим, что среди трехмерных объектов, являющихся предметом практического интереса химиков и биологов, следует выделить пространственную спираль. Различные варианты количественных оценок степени “правого” или “левого” с помощью псевдоскалярных функций неоднократно предлагались ранее для пространственной спирали в разнообразных прикладных областях [16, 17]. Авторами найдены численные значения двух версий индекса хиральности пространственной спирали, как функции ее геометрических параметров. В заключение обсуждаются условия, позволяющие корректно разделить хиральные геометрические объекты определенного класса на непересекающиеся множества правосторонних и левосторонних объектов.

2. Для двух ограниченных борелевских множеств P и Q двумерного евклидова пространства, определим степень их несовпадения друг с другом [18]

$$L(P, Q) = \text{mes}(P \Delta Q) = \text{mes}(P \cup Q) - \text{mes}(P \cap Q), \quad (1)$$

где mes обозначает меру Лебега (площадь) плоского множества.

Еще одним способом определения степени несовпадения тех же самых множеств P и Q является расстояние Хаусдорфа между ними [12]

$$H(P, Q) = \max\{\sup_{p \in P} d(p, Q), \sup_{q \in Q} d(q, P)\}, \quad (2)$$

где $d(q, P) = \inf_{p \in P} \|p - q\|$ ($\|\cdot\|$ – евклидова норма), q – произвольная точка двумерного евклидова пространства.

Для множества P определим его зеркальное отражение – множество P_1 , координаты которого в некоторой правой декартовой системе координат $ХОУ$ на плоскости определяются правилом: если $(x, y) \in P$, то $(-x, y) \in P_1$. Длину диаметра множества P обозначим как a . Введем меру хиральности по Китайгородскому

$$\mu_K(P) = a^{-2} \inf_{P_1'} L(P, P_1'), \quad (3)$$

и меру хиральности по Хаусдорфу

$$\mu_H(P) = a^{-1} \inf_{P_1'} H(P, P_1'), \quad (4)$$

где P_1' – всевозможные сдвиги и вращения множества P_1 .

Замечание 1. В работах [2, 10, 13] мера хиральности, использующая меру несовпадения множеств (1) вводится несколько иным образом. В отличие от (3) в качестве нормировочного множителя используется число $[\text{mes}(P)]^{-1}$ вместо a^{-2} . При таком выборе нормировочного множителя мера хиральности в некоторых случаях имеет неправильное предельное поведение: при непрерывной трансформации исходного хирального множества в ахиральное (в смысле введенной меры (1) несовпадения множеств друг с другом) она стремится к конечному значению, а не к нулю. Именно с учетом этого обстоятельства был выбран нормировочный множитель a^{-2} в выражении (3).

Замечание 2. Для хиральных множеств n -мерного евклидова пространства мера хиральности по Китайгородскому модифицируется следующим образом: вместо нормировочного множителя a^{-2} в правой части (3) используется нормировочный множитель a^{-n} .

Меры хиральности (3) и (4) инвариантны относительно преобразования подобия, примененного к множеству P . Поэтому совокупность всех множеств, полученных применением к P преобразований трансляции, поворота и подо-

бия или их произвольных комбинаций, рассматривается в настоящей работе как один и тот же геометрический объект, относительно которого и определяется мера хиральности.

Несмотря на популярность мер хиральности (3) и (4) и близких к ним, использующих меры несовпадения множеств (1) и (2) [2, 12, 13], они не являются мерами хиральности на борелевских множествах в строгом смысле слова, так как могут обращаться в нуль на хиральных множествах. Покажем это на следующих примерах. На рис. 1а изображено множество, включающее равнобедренный треугольник ABC и изолированную точку O , располагающуюся на продолжении его основания AB . Очевидно, такое множество является хиральным, однако его мера хиральности по Китайгородскому (3) обращается в нуль, в то время как его мера хиральности по Хаусдорфу (4) является положительной. Возможна и противоположная ситуация, когда мера (3) для хирального объекта положительна, а мера (4) для него же обращается в нуль. Соответствующий пример такого множества показан на рис. 1б, где левая закрашенная половина равнобедренного треугольника ABC – треугольник AOC состоит из точек с рациональными координатами, а правая половина – треугольник OBC содержит все точки, в нее входящие. Таким образом, проблема построения мер хиральности для достаточно широкого класса множеств все еще остается актуальной.

Замечание 3. Для рассмотренного на рис. 1 примера можно построить еще одну меру хиральности, являющуюся линейной комбинацией с положительными весами мер (3) и (4),

например, $\mu_{KH}(P) = \mu_K(P) + \mu_H(P)$. Мера хиральности $\mu_{KH}(P)$ положительна для обоих хиральных множеств, показанных на рис. 1, но она и любая сложная функция мер (3) и (4) не представляют универсальный критерий хиральности на классе борелевских множеств. В самом деле, пусть левая (серая) половина равнобедренного треугольника ABC на рис. 1б включает в себя все точки за исключением точек с рациональными координатами, а правая не закрашенная половина по-прежнему содержит все входящие в нее точки. Тогда обе меры (3) и (4) обращаются в нуль для такого хирального геометрического объекта. Следовательно, мера хиральности, представляющая собой сложную функцию мер (3) и (4), также обращается в нуль, так как в противном случае она отлична от нуля на ахиральных геометрических объектах.

Обратим внимание, что введенные меры хиральности (3) и (4) могут быть использованы для более узкого, но все же еще достаточно широкого класса ограниченных геометрических объектов, таких как геометрические фигуры и тела, ограниченные достаточно регулярной границей, и их конечные объединения и пересечения. Для такого рода объектов какая-либо из мер хиральности (3) или (4) обращается в нуль тогда и только тогда, когда соответствующий объект является ахиральным. В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением плоских треугольников, выпуклых четырехугольников и пространственной спирали.

В дальнейшем в целях уменьшения вычислительных затрат для введенного выше класса геометрических объектов воспользуемся центриро-

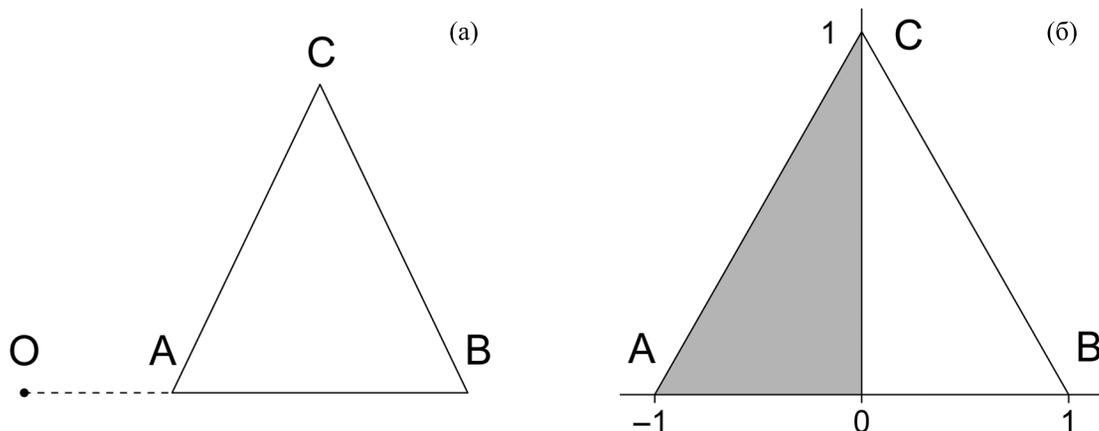


Рис. 1. Примеры хиральных множеств: а) равнобедренный треугольник ABC ($AC = BC$) и изолированная точка O на продолжении OA стороны AB ; б) левая половина равнобедренного треугольника ABC ($AC = BC$) (закрашена серым цветом) состоит из точек с рациональными координатами, а правая не закрашенная половина содержит все входящие в нее точки.

ванными мерами хиральности, отличающимися от приведенных в (3) и (4) только тем, что геометрический центр множества-отражения P'_1 помещается в геометрический центр множества P – точку $O(x_0, y_0)$, а вращения происходят вокруг точки O

$$x_0 = \int_P x dx dy / \int_P dx dy,$$

$$y_0 = \int_P y dx dy / \int_P dx dy. \quad (5)$$

Очевидно, центрированные меры хиральности принимают положительные значения на хиральных объектах выбранного выше класса и обращаются в нуль на ахиральных объектах. В дальнейшем для центрированных мер хиральности, когда это не вызывает недоразумений, сохраним прежние обозначения.

3. Помимо хиральных геометрических объектов в естественнонаучных и технических приложениях рассматривают левосторонние и правосторонние объекты. Одним из примеров таких объектов является винт с правой или левой резьбой. Очевидно, самым простым способом разделения всех хиральных объектов на правосторонние и левосторонние является произвольное отнесение объекта и его зеркального отражения к той или другой стороне. Этот способ может быть оправдан в отношении конечной совокупности разнородных и не связанных друг с другом объектов, но он вряд ли уместен для бесконечного множества в чем то сходных объектов. Для сходных объектов, использующих меры несовпадения друг с другом (1) или (2), предпочтительнее иметь другой способ разделения множеств на “правые” и “левые” версии.

В качестве такого примера рассмотрим совокупность треугольных объектов. Треугольный объект представляет собой множество треугольников, совпадающих друг с другом после соответствующих преобразований сдвигов, вращений и подобия. Для однозначного описания треугольного объекта воспользуемся рис. 2а, где в треугольнике ABC угол A равен α , угол B равен β , а угол C равен $\gamma = \pi - \alpha - \beta$. Треугольник $A_1B_1C_1$ является его отражением относительно оси, проходящей через общий геометрический центр O обоих треугольников перпендикулярно стороне AB . На рис. 2б отраженный треугольник $A_1B_1C_1$ повернут вокруг точки O против часовой стрелки на угол φ .

В целях удобства примем, что сторона AB является наибольшей. В этом случае положительные числа α и β удовлетворяют неравенствам

$$0 < \alpha \leq \beta \leq \pi / 2 - \alpha / 2 \quad (6)$$

и

$$0 < \beta < \alpha \leq \pi - 2\alpha. \quad (7)$$

Области (6) и (7) значений угловых параметров α и β исчерпывают всевозможные треугольные объекты. Прямые $\beta = \alpha$, $\beta = \pi / 2 - \alpha / 2$ и $\beta = \pi - 2\alpha$ соответствует всевозможным равнобедренным треугольникам ABC и $A_1B_1C_1$, которые являются ахиральными и характеризуются нулевыми значениями мер хиральности (3) и (4), непрерывно зависящими от α и β . Любой точке (α, β) области (6), обозначающей некоторый треугольник ABC , соответствует точка (β, α) области (7), отвечающая отраженному треугольнику $A_1B_1C_1$. Такое взаимно однозначное соответствие точек областей (6) и (7) позволяет вве-

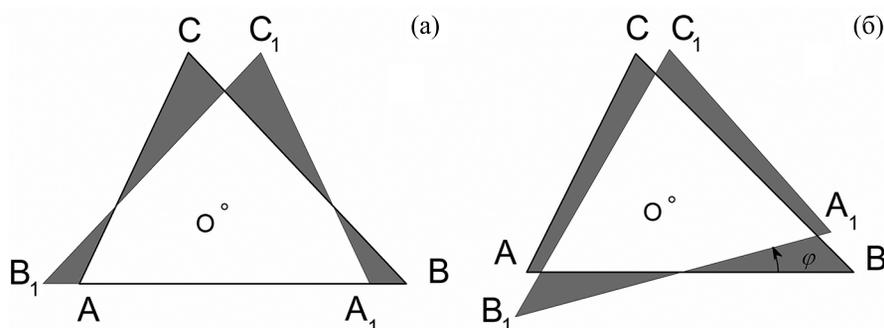


Рис. 2. Треугольник ABC и его отражение – треугольник $A_1B_1C_1$ (серым цветом покрашено множество, образующее симметрическую разность этих треугольников): а) стороны AB и A_1B_1 лежат на одной прямой, а треугольник $A_1B_1C_1$ является отражением треугольника ABC относительно перпендикуляра к стороне AB , проходящего через геометрический центр O обоих треугольников; б) отраженный треугольник $A_1B_1C_1$ повернут вокруг точки O против часовой стрелки на угол φ .

сти понятие левостороннего треугольника, если его угловые параметры (α, β) лежат в области (6), и правостороннего треугольника, если они принадлежат области (7). Любая непрерывная кривая, соединяющая точку области (6) с точкой области (7) проходит через нули мер хиральности (3) и (4). Такое положение дел позволяет ввести индекс хиральности треугольника

$$\chi(\beta, \alpha) = -\chi(\alpha, \beta), \quad |\chi(\alpha, \beta)| = \mu(\alpha, \beta), \quad (8)$$

где μ обозначает одну из мер хиральности (3) или (4), считая индекс положительным ($\chi(\alpha, \beta) > 0$), например, если точка (α, β) лежит в области (7) правосторонних треугольников, и отрицательным, когда она находится в области (6) левосторонних треугольников.

Полная картина распределения значений знака индекса хиральности треугольника для всех возможных значений угловых параметров треугольника $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\alpha + \beta < \pi$ представлена на рис. 3

Обратим внимание, что подобласти “6” и “1” на рис. 3 соответствуют неравенствам (6) и (7). Для определения значений индекса во всей области, показанной на рис. 3, достаточно знать его значения в подобласти “1” и получить оставшиеся значения в остальных подобластях, воспользовавшись равенствами

$$\begin{aligned} \chi(\beta, \alpha) &= -\chi(\alpha, \beta) = \\ &= \chi(\beta, \pi - \alpha - \beta) = \chi(\pi - \alpha - \beta, \alpha), \end{aligned} \quad (9)$$

вытекающими из тождества $\alpha + \beta + \gamma = \pi$.

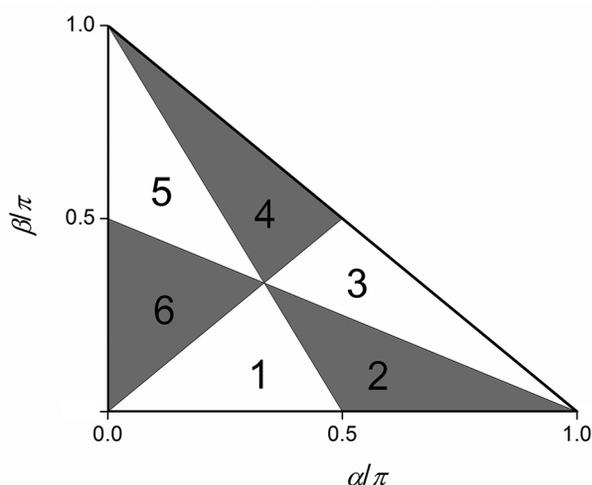


Рис. 3. Область допустимых значений угловых параметров треугольника $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\alpha + \beta < \pi$. Светлые подобласти “1”, “3” и “5” соответствуют положительным, а темные подобласти “2”, “4” и “6” отрицательным значениям индекса хиральности треугольника.

В соответствии с (9) каждому хиральному треугольному объекту в области угловых параметров на рис. 3 соответствует ровно три различных точки в нечетных подобластях для правосторонних треугольников и в четных подобластях для левосторонних треугольников.

Линии уровня численных значений центрированных мер (индексов) хиральности по Кийгородскому $\mu_K(\alpha, \beta)$ и по Хаусдорфу $\mu_H(\alpha, \beta)$ для области (7) показаны на рис. 4

На границах области (7) (линия 1 на рис. 4а и 4б)) обе меры хиральности могут быть доопределены по непрерывности нулем. Точка максимума “ \odot ” отвечает “наиболее хиральному” треугольнику для соответствующей меры хиральности. Параметры “наиболее хиральных” треугольников для других мер хиральности приведены в работе [15].

Таким образом, треугольник является наиболее простым плоским геометрическим объектом среди многоугольников. Для него проблема выбора стороны хиральности (правой или левой) решается исчерпывающим образом.

Для сравнения со случаем треугольных объектов рассмотрим плоские выпуклые четырехугольные объекты (множество выпуклых четырехугольников на плоскости, которые можно наложить друг на друга в результате применения к ним преобразований сдвига, поворота и подобия). В отличие от двумерного пространства угловых параметров треугольника соответствующее пространство угловых параметров выпуклого четырехугольного элемента четырехмерно (см. рис. 5).

Ахиральные выпуклые четырехугольники составлены из двух равнобедренных треугольников с общим основанием AC ($\alpha = \beta$, $\gamma = \delta$) или представлены всевозможными равнобедренными трапециями ($\beta = \delta$, $\alpha + 2\beta + \gamma = \pi$ или $\alpha = \gamma$, $\beta + 2\gamma + \delta = \pi$).

Отметим, что множество хиральных выпуклых четырехугольных объектов является связным: любая точка четырехмерного пространства угловых параметров, соответствующая хиральному четырехугольнику, может быть соединена непрерывной кривой с точкой, описывающей отраженный четырехугольник, без пересечения с точками множества ахиральных четырехугольных объектов. Одним из мыслимых способов разделения выпуклых четырехугольников на “правые” и “левые” является построение гиперповерхностей-перегородок, запрещающих

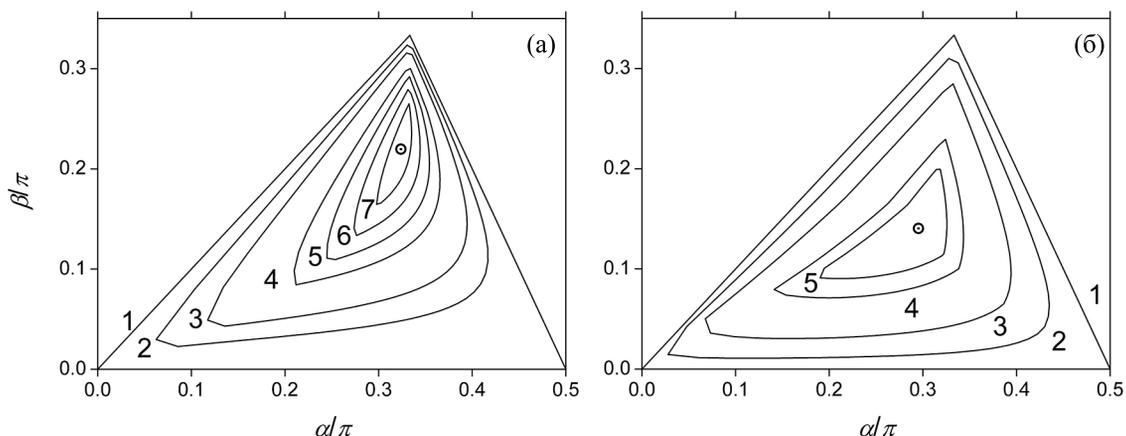


Рис. 4. Линии уровня численных значений центрированных мер (индексов) хиральности в области (7): а) по Китайгородскому $\mu_K(\alpha, \beta)$: 1 – граница области (7); 2 – $\mu_K = 0.01$; 3 – $\mu_K = 0.02$; 4 – $\mu_K = 0.020$; 5 – $\mu_K = 0.05$; 6 – $\mu_K = 0.06$; 7 – $\mu_K = 0.07$; “о” обозначает точку глобального максимума $\alpha / \pi = 0.32384$, $\beta / \pi = 0.21973$, $\mu_K = 0.079222$; б) по Хаусдорфу $\mu_H(\alpha, \beta)$: 1 – граница области (7); 2 – $\mu_H = 0.02$; 3 – $\mu_H = 0.05$; 4 – $\mu_H = 0.10$; 5 – $\mu_H = 0.12$; “о” обозначает точку глобального максимума $\alpha / \pi = 0.29528$, $\beta / \pi = 0.14043$, $\mu_H = 0.15484$.

непрерывные пути, не пересекающие точки ахиральных объектов. Однако число возникающих при этом “почти изолированных” областей в пространстве угловых параметров может достигать нескольких сотен, что очевидным образом затруднит классификацию объектов на право- и левосторонние и сделает ее неудобной для практических применений. С повышением размерности пространства параметров выбранного класса геометрических объектов ситуация с разделением последних на “левые” и “правые” еще более драматически усложняется. Тем не менее на некоторых сужениях класса выпуклых четырехугольных объектов разделение последних на “левые” и “правые” производится достаточно просто, если речь идет о классе трапеций или о классе четырехугольников, содержащих равнобедренный треугольник, основание которого является диагональю этого четырехугольника. Пространства угловых параметров указанных объектов трехмерны. В них существует двумерные поверхности, соответствующие ахиральным объектам и разделяющие хиральные объекты и их отражения, что позволяет относить такие объекты к правосторонним или левосторонним.

4. Рассмотрим пространственную спираль, описываемую винтовой линией в некоторой правой декартовой системе координат OXYZ

$$\begin{aligned} x &= r \cos \phi, & y &= r \sin \phi, & z &= h\phi, \\ r &\in (0, +\infty), & h &\in (-\infty, +\infty), & \phi &\in [-\pi, \pi]. \end{aligned} \quad (10)$$

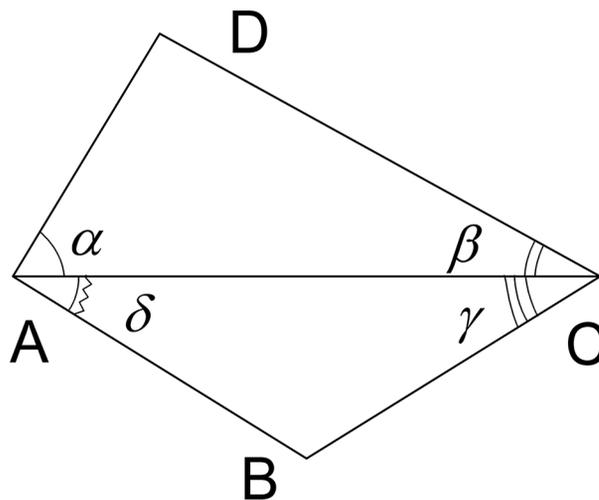


Рис. 5. Параметризация выпуклого четырехугольника с помощью четырех независимых положительных угловых параметров $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$: $\alpha + \beta < \pi$, $\delta + \gamma < \pi$, $\beta + \gamma < \pi$, $\alpha + \delta < \pi$.

Все спирали, для которых отношение $\lambda = h / r$ имеет одно и то же численное значение, будем рассматривать как один и тот же геометрический объект. В случае $\lambda = 0$ спираль (10) вырождается в окружность радиуса r , лежащую в плоскости XOY с центром в начале координат – точке O и являющуюся плоским ахиральным объектом. Параметрическое пространство, описывающее пространственную спираль как геометрический объект, является одномерной прямой

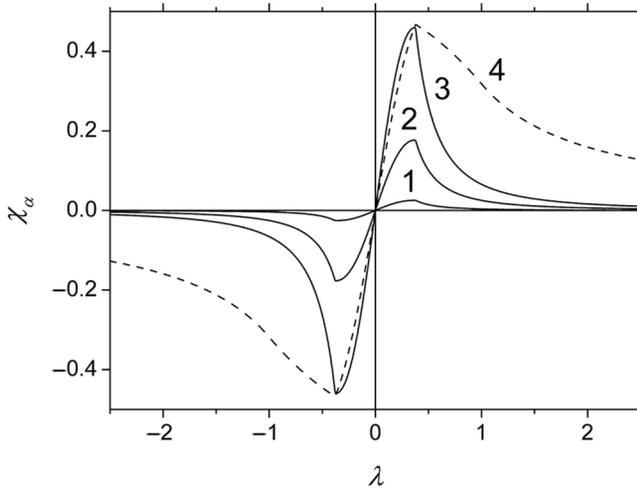


Рис. 6. Зависимости различных версий индексов хиральности пространственной спирали (10) от безразмерного параметра $\lambda = h/r$: 1 – $\chi_P(\lambda, \pi/3)$; 2 – $\chi_P(\lambda, \pi/2)$; 3 – $\chi_P(\lambda, 2\pi/3)$; 4 – $\chi_H(\lambda)$ (пунктирная линия).

$\lambda \in (-\infty, +\infty)$, на которой точка $\lambda = 0$, соответствующая окружности, разделяет правосторонние спирали ($\lambda > 0$) и левосторонние спирали ($\lambda < 0$) друг от друга. При $|\lambda| \rightarrow +\infty$ пространственная спираль непрерывно трансформируется в пределе в геометрический объект “отрезок прямой”, принадлежащий классу ахиральных множеств. Поэтому мера хиральности $\mu(\lambda)$ для спирали должна обращаться в нуль при $\lambda = 0$ и стремиться к нулю при $|\lambda| \rightarrow +\infty$. Помимо меры хиральности $\mu(\lambda)$ для спирали можно ввести индекс хиральности $\chi(\lambda)$ с помощью равенств

$$\chi(-\lambda) = -\chi(\lambda), |\chi(\lambda)| = \mu(\lambda), \tag{11}$$

который принимает положительные значения для правосторонних спиралей и отрицательные значения для левосторонних спиралей.

Существует также альтернативный способ определения индекса хиральности с использованием некоторой псевдоскалярной функции [16, 17].

Введем псевдоскалярный индекс хиральности, зависящий от двух числовых параметров λ и ϕ , как смешанное произведение

$$\chi_P(\lambda, \phi) = a^{-3} ([\mathbf{r}(\phi) - \mathbf{r}(0), \mathbf{r}(2\phi) - \mathbf{r}(\phi)], \mathbf{r}(3\phi) - \mathbf{r}(2\phi)), \tag{12}$$

где координаты радиуса вектора $\mathbf{r}(\phi)$ определяются равенствами (10), а параметр a является диаметром множества (в рассматриваемом случае спирали (10)).

Индекс хиральности по Хаусдорфу $\chi_H(\lambda)$ определим с помощью равенств (11) с использованием централизованной меры хиральности (4), т.е. полагая $\mu(\lambda) = \mu_H(P)$, где множество P состоит из точек спирали (10), а все вращения происходят относительно начала координат – точки $O(0, 0, 0)$, где расположен геометрический центр кривой (10).

На рис. 6 показаны зависимости псевдоскалярного индекса хиральности (12) от параметра λ для различных значений параметра ϕ и аналогичная зависимость индекса хиральности по Хаусдорфу $\chi_H(\lambda)$. Все представленные зависимости обращаются в нуль при $\lambda = 0$ и стремятся к нулю при $|\lambda| \rightarrow +\infty$, т.е. имеют правильное асимптотическое поведение. Псевдоскалярный индекс хиральности $\chi_P(\lambda, \phi)$ характеризуется более быстрым стремлением к нулю с ростом $|\lambda|$ по сравнению с индексом хиральности по Хаусдорфу $\chi_H(\lambda)$ из-за присутствия нормировочного множителя a^{-3} в правой части (12), а не a^{-1} , как это имеет место в правой части (4). Положения максимумов индексов хиральности находятся близко друг от друга и достигаются при $\lambda \approx 0.37$ для кривых (12) и при $\lambda \approx 0.38$ в случае индекса хиральности по Хаусдорфу (см. рис. 6). Таким образом, “наиболее хиральным” спиральям отвечают значения параметра $|\lambda| \in [0.37, 0.38]$ для используемых на рис. 6 версий индексов хиральности.

В заключение отметим, что в общем случае разделение геометрических объектов заданного класса в евклидовом пространстве, характеризуемых некоторой мерой несовпадения их друг с другом (например, (1) или (2)) на правосторонние и левосторонние возможно, если существует их непрерывное (в отношении одной из указанных выше мер несовпадения (1) или (2)) параметрическое описание, в котором каждому такому объекту отвечает некоторая точка (или несколько точек) в соответствующем метрическом пространстве числовых параметров. При этом все пространство параметров может быть разбито на четное число непересекающихся связных частей, в одной половине из которых находятся прообразы хиральных геометрических объектов, а в другой – их отражения. В качестве простейшего примера такого параметрического описания служит область угловых параметров треугольника, показанная на рис. 3.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Guye P.-A.* Influence de la constitution chimique des dérivés du carbone sur le sens et les variations de leur pouvoir rotatoire // *Compt. Rend. (Paris)* 1890. V. 110. P. 714–716.
<http://visualiseur.bnf.fr/CadresFenetre?O=NUMM-3066&I=766&M=tdm>
2. *Gilat G.* Chiral coefficient—a measure of the amount of structural chirality // *J. Phys. A Math. Gen.* 1989. V. 22. P. L545–L550.
<https://doi.org/10.1088/0305-4470/22/13/003>
3. *Gilat G.* On quantifying chirality – Obstacles and problems towards unification // *J. Math. Chem.* 1994. V. 15. P. 197–205.
<https://doi.org/10.1007/BF01277559>
4. *Zimpel Z.* A geometrical approach to the degree of chirality and asymmetry // *J. Math. Chem.* 1993. V. 14. P. 451–465.
<https://doi.org/10.1007/bf01164481>
5. *Zabrodsky H., Avnir D.* Continuous Symmetry Measures. 4. Chirality // *J. Am. Chem. Soc.* 1995. V. 117. P. 462–473.
<https://doi.org/10.1021/ja00106a053>
6. *Petitjean M.* About second kind continuous chirality measures. 1. Planar sets // *J. Math. Chem.* 1997. V. 22. P. 185–201.
<https://doi.org/10.1023/A:1019132116175>
7. *Petitjean M.* Chirality and Symmetry Measures: A Transdisciplinary Review // *Entropy* 2003. V. 5. № 3. P. 271–312.
<https://doi.org/10.3390/e5030271>
8. *Petitjean M.* Chirality in metric spaces // *Optim Lett.* 2020. V. 14. P. 329–338.
<https://doi.org/10.1007/s11590-017-1189-7>
9. *Dryzun C., Avnir D.* Chirality Measures for Vectors, Matrices, Operators and Functions // *ChemPhysChem.* 2011. V. 12. P. 197–205.
<https://dx.doi.org/10.1002/cphc.201000715>
10. *Mezey P.G.* Chirality Measures and Graph Representations // *Coputers Math. Applic.* 1997. V. 34. № 11. P. 105–112.
[https://doi.org/10.1016/S0898-1221\(97\)00224-1](https://doi.org/10.1016/S0898-1221(97)00224-1)
11. *Buda A.B., Auf der Heyde T.P.E., Mislow K.* On Quantifying Chirality // *Angewandte Chemie.* 1992. V. 31. № 8. P. 989–1007.
<https://doi.org/10.1002/anie.199209891>
12. *Buda A.B., Mislow K.A.* Hausdorff chirality measure // *J. Am. Chem. Soc.* 1992. V. 114. № 15. P. 6006–6012.
<https://doi.org/10.1021/ja00041a016>
13. *Buda A.B., Mislow K.* On Geometric Measures of Chirality // *J. Mol. Struct.* 1991. V. 232. P. 1–12.
[https://doi.org/10.1016/0166-1280\(91\)85239-4](https://doi.org/10.1016/0166-1280(91)85239-4)
14. *Fowler P.W.* Quatification of chirality: attempting the impossible // *Symmetry: Culture and Science.* 2005. V. 16. № 4. P. 321–334.
<https://symmetry.hu/oldsite/content/fowler-05-4.pdf>
15. *Rassat A., Fowler P.W.* Any Scalene Triangle Is the Most Chiral Triangle // *Helvetica Chimica Acta.* 2003. V. 86. P. 1728–1740.
<https://doi.org/10.1002/hlca.200390143>
16. *Osipov M.A., Pickup B.T., Fehervari M., Dunmur D.A.* Chirality measure and chiral order parameter for a two-dimensional system // *Molecular Physics* 1998. V. 94. № 2. P. 283–287.
<https://dx.doi.org/10.1080/002689798168150>
17. *Kriksin Y.A., Potemkin I.I., Khalatur P.G.* Chirality in Self-Assembling Rod-Coil Copolymers: Macroscopic Homochirality Versus Local Chirality // *Polymer Science, Series C.* 2018. V. 60. Suppl. 1. P. S135–S147.
<https://dx.doi.org/10.1134/S1811238218020133>
18. *Kitaigorodskii A.I.* *Organic Chemical Crystallography*, NY: Consultants Bureau, 1961. 541 p.

ON QUANTITATIVE ASSESSMENT OF CHIRALITY: RIGHT-SIDED AND LEFT-SIDED GEOMETRIC OBJECTS

Yu. A. Kriksin^a and Corresponding Member of the RAS V. F. Tishkin^a

^a *Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

Two methods for quantitatively assessing the chirality of a set are considered, the first of which uses the calculation of the area of their symmetric difference of two sets as a measure of the discrepancy between them, and the second uses the Hausdorff distance between them. It is shown that these methods, generally speaking, do not provide a correct quantitative estimate for a fairly wide class of sets, such as bounded Borel sets. Using the example of flat triangles and convex quadrangles, the problem of dividing geometric objects into right-handed and left-handed is considered. For triangles, level lines of two versions of the chirality measure were calculated on the plane of the angular parameters. For a spatial spiral, the values of two versions of the chirality index are found, based respectively on the calculation of the mixed product of vectors and the Hausdorff distance between two sets.

Keywords: chirality, measure and index of chirality, left-handed and right-handed objects