Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М.-М. Деза, М. И. Штогрин, Новые примеры обобщенных фуллеренов, *УМН*, 2009, том 64, выпуск 1, 145–146

DOI: <https://doi.org/10.4213/rm9268>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.166.219.16

26 апреля 2023 г., 02:11:18

Новые примеры обобщенных фуллеренов

М. Деза, М. И. Штогрин

Фуллерен – простой (3-валентный) полиэдр, грани которого суть пентагоны и гексагоны; а значит, число пентагонов равно 12. Лишь 4 фуллерена не имеют смежных гексагонов – это додекаэдр F_{20} , гексагональная бочка F_{24} (чья два гексагона разделены двумя поясами из пентагонов), фуллерен F_{26} (единственный с 26 вершинами) и фуллерен F_{28} (один из двух с 28 вершинами); они имеют соответственно 0, 2, 3 и 4 несмежных гексагонов, 20, 24, 26 и 28 вершин и называются *фуллеренами Франка–Каспера*, сокращенно FK-фуллеренами. *Удлиненная бочка* F_{36} получается из F_{24} добавлением пояса из 6 гексагонов между поясами из пентагонов. *Удлиненный додекаэдр* F_{30} получается из F_{20} добавлением пояса из 5 гексагонов. *Скрученный додекаэдр* F'_{20} (родственный простой полиэдр с тройной осью, но не фуллерен) имеет пояс из чередующихся трех гексагонов и трех квадратов; остальные 6 граней суть пентагоны.

$\mathbb{R}^3$ -*фуллереном* (space fullerene) называется простое (т. е. 4-валентное) нормальное разбиение пространства $\mathbb{R}^3$ на фуллерены. $\mathbb{R}^3$ -фуллерен называется *кристаллическим*, если его группа симметрии является кристаллографической – обладает трансляциями в трех некопланарных направлениях. FK- $\mathbb{R}^3$ -фуллерены (или *фазы Франка–Каспера*) – это кристаллические $\mathbb{R}^3$ -фуллерены, чьи ячейки суть FK-фуллерены (все 4 или их часть), см. [1]–[3]. Ровно 24 FK-фазы известны как металлические сплавы. В [2], [3] было замечено, что пропорции ячеек F_{20} , F_{24} , F_{26} , F_{28} в каждом из 24 случаев являются линейными комбинациями пропорций для основных примеров A_{15} , C_{15} и Z с пропорциями $2 : 6 : 0 : 0$, $16 : 0 : 0 : 8$, $3 : 2 : 2 : 0$. Однако в 2008 г. М. Дютур, М. Деза и О. Дельгадо-Фридрихс нашли все FK- $\mathbb{R}^3$ -фуллерены с не более чем 16 ячейками в фундаментальной области, из них 3 с пропорциями $3 : 4 : 2 : 0$, $7 : 4 : 2 : 2$, $6 : 6 : 4 : 0$ суть контрпримеры к нерешенной в то время общей гипотезе.

Единственный известный кристаллический $\mathbb{R}^3$ -, но не FK- $\mathbb{R}^3$ -фуллерен построен в [4]; он был рассмотрен затем в [5] в деталях как *разбиение Деза–Штогрин*. Назовем его DS- $\mathbb{R}^3$ -фуллереном; он состоит из F_{20} , F_{24} , F_{36} в пропорции $7 : 2 : 1$ и имеет группу симметрии $P6/mmm$. Все кристаллические $\mathbb{R}^3$ -фуллерены с не более чем 7 орбитами вершин суть A_{15} , C_{15} , Z , C_{14} и DS- $\mathbb{R}^3$ -фуллерен, имеющие соответственно 3, 3, 5, 7 и 7 орбит, см. [5]. DS- $\mathbb{R}^3$ -фуллерен оказался лучшим среди известных в смысле среднего числа сторон его граней, $56/11$, ближайшего к недостижимому минимуму 5.

C $\mathbb{R}^3$ -фуллеренами тесно связано разбиение с группой $P6/mmm$, соответствующее клатрату H . Его фундаментальная область имеет 34 вершины (молекулы воды), образующие ячейки F_{20} , F_{20} , F_{36} в пропорции $3 : 2 : 1$, см. [6]. *Клатраты* – это кристаллические твердые субстанции, основанные на кристаллической воде (они похожи на лед), в которой неполярные молекулы (обычно газы) пойманы внутри ячеек молекул воды с водородными связями. Базовые клатраты типа I (A_{15} в кристаллографической терминологии; они имеют группу $Pm\bar{3}n$) и типа II (C_{15} в кристаллографической терминологии; они имеют группу $Fd\bar{3}m$) соответствуют FK- $\mathbb{R}^3$ -фуллеренам A_{15} и C_{15} . Кристаллический FK- $\mathbb{R}^3$ -фуллерен C_{14} имеет группу $P6_3/mmc$, чья фундаментальная область состоит из восьми F_{20} и четырех F_{28} . По существу C_{14} – это гексагональная версия C_{15} , с той же самой пропорцией $2 : 0 : 0 : 1$, но с 12 ячейками в фундаментальной области группы $P6_3/mmc$. Фуллерены F_{28} образуют структуру алмаза (diamond) в C_{15} и структуру гексагонального алмаза (lonsdaleite) в C_{14} .

Ниже из любого кристаллического $\mathbb{R}^3$ -фуллерена с осью 6-го порядка и плоскостями зеркальной симметрии вдоль нее построено бесконечное множество некристалли-

---

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 08-01-90102-Мол), программы “Ведущие научные школы” (проект НШ-4182.2006.1) и государственной программы фундаментальных исследований ОМН РАН “Современные проблемы теоретической математики”.

ческих $\mathbb{R}^3$ -фуллеренов. Этот способ построения $\mathbb{R}^3$ -фуллеренов является трехмерным аналогом представленного ниже метода получения $\mathbb{R}^2$ -фуллеренов.

Обобщенный фуллерен (конкретнее, $\mathbb{M}^n$ -фуллерен, см. [4]) – это простое разбиение многообразия $\mathbb{M}^n$ любой размерности n (замкнутого или неограниченного), чьи двумерные грани суть пентагоны и гексагоны. Обычный фуллерен есть $\mathbb{S}^2$ -фуллерен. Обобщенный $\mathbb{P}^2$ -фуллерен, где $\mathbb{P}^2$ – проективная плоскость, имеет 6 пентагонов.

Теперь дадим способ построения $\mathbb{R}^2$ -фуллеренов, гомеоморфных плоскости, которые имеют не более 6 пентагонов. Возьмем стандартное разбиение плоскости $\mathbb{R}^2$ на гексагоны. Центр одного из гексагонов примем за вершину угла $\pi/3$, чьи граничные лучи направим по осям зеркальной симметрии. Сделаем следующую операцию: удалим внутренность угла $\pi/3$, а граничные лучи отождествим поворотом на угол $\pi/3$. После этой операции одни половины гексагонов удалятся вместе с внутренностью угла, а другие половины гексагонов склеятся в целый гексагон. Лишь один гексагон, в центре которого выбрана вершина угла $\pi/3$, превратится после удаления его шестой части в пентагон. В итоге получится простое нормальное разбиение плоскости на гексагоны и один пентагон. Этот простейший $\mathbb{R}^2$ -фуллерен имеет группу $5m$. Точно так же в этом $\mathbb{R}^2$ -фуллере любой гексагон можно опять заменить на пентагон. Для этого нужно удалить тот угол $\pi/3$ с вершиной в центре гексагона, внутри которого не лежит уже имеющийся пентагон. Так получится бесконечное множество $\mathbb{R}^2$ -фуллеренов с двумя пентагонами; группой каждого из этих $\mathbb{R}^2$ -фуллеренов является $2m$ или 2 . Операцию можно повторить шесть раз, так как из разбиения евклидовой плоскости на гексагоны можно удалить шесть попарно непересекающихся плоских углов $\pi/3$, но не более, что следует из равенства $6 \cdot \pi/3 = 2\pi$.

$DS\text{-}\mathbb{R}^3$ -фуллерен имеет группу $P6/mmm$. Построим двугранный угол $\pi/3$, составленный плоскостями зеркальной симметрии. Сделаем следующую операцию: удаляем внутренность угла, а грани отождествляем (поворотом на $\pi/3$). После этой операции одни половины фуллеренов удалятся, а другие половины склеятся в целые фуллерены. Лишь те фуллерены, которые пронизывает ребро двугранного угла $\pi/3$, после удаления шестой части из каждого превратятся в другие фуллерены: F_{36} в F_{30} , F_{24} в F_{20} . Получится простое нормальное разбиение пространства $\mathbb{R}^3$ на фуллерены F_{36} , F_{30} , F_{24} и F_{20} . Это новый $\mathbb{R}^3$ -фуллерен. Его группа симметрии уже не кристаллографическая, а стержневая, $p5/mmm$, с одним трансляционным периодом. В новом $\mathbb{R}^3$ -фуллере вдоль произвольной локальной оси 6-го порядка можно опять заменить F_{36} на F_{30} , а F_{24} на F_{20} . Для этого нужно удалить тот двугранный угол $\pi/3$ с ребром вдоль локальной оси 6-го порядка, внутри которого не лежит возникший фуллерен F_{30} . Так получим бесконечное множество $\mathbb{R}^3$ -фуллеренов с двумя локальными стержневыми группами с осью 5-го порядка; каждый имеет стержневую группу $pmmm$ или $p2/m11$. Операцию можно повторить 6 раз. Это и есть трехмерный аналог.

ТЕОРЕМА. *Так строятся $\mathbb{R}^3$ -фуллерены из всех других с группой $P6/mmm$.*

Список литературы

- [1] F. C. Frank, J. S. Kasper, *Acta Cryst.*, **11**:3 (1958), 184–190; **12**:7 (1959), 483–499.
 [2] Я. П. Ярмолюк, П. И. Крипякевич, *Кристаллография*, **19** (1974), 539–545. [3] D. P. Shoemaker, B. Shoemaker, *Acta Cryst.*, **B42** (1986), 3–11. [4] M. Deza, M. I. Shtogrin, *Southeast Asian Bull. Math.*, **23**:1 (1999), 9–18. [5] O. Delgado-Friedrichs, M. O’Keeffe, *Acta Cryst.*, **A62**:3 (2006), 228–229. [6] E. D. Sloan, Jr., *Clathrate hydrates of natural gases*, Dekker, New York, 1998.

М. Де́за (M. Deza)
 École Normale Supérieure, Paris; JAIST, Japan
 E-mail: Michel.Deza@ens.fr

Представлено В. М. Бухштабером
 Принято редколлегией
 07.12.2008

М. И. Што́грин (M. I. Shtogrin)
 Математический институт им. В. А. Стеклова РАН
 E-mail: stogrin@mi.ras.ru