Выпуклые многогранники, фуллерены, графены, пентаграфены

В.М. Бухштабер

МИАН имени В.А.Стеклова,
МГУ имени М.В.Ломоносова,
ИППИ имени А.А.Харкевича

Московское математическое общество
МГУ имени М.В.Ломоносова
28 апреля, 2015

Доклад посвящён классическим и современным результатам математики, которые оказались в центре внимания физиков и химиков в связи проблемами нанотехнологий.

- фуллерены (Нобелевская премия по химии, 1996 г., Р.Кёрл (R.F.Kurl), Х.Крото (H.Kroto), Р.Смолли (R.E.Smalley)),
- графены (Нобелевская премия по физике, 2010 г, А.К.Гейм, К.С. Новосёлов),
- пентаграфены (Нобелевская премия ждёт синтеза этой модификации углерода, возможность существования которой уже обоснована).

Речь будет идти о задачах комбинаторики, геометрии и топологии молекулярных структур модификаций углерода в терминах задач о выпуклых многогранниках, разбиениях двумерных поверхностей на многоугольники и рёберных путях на этих поверхностях.

Мы обсудим связь этих задач с известными и новыми задачами теории графов и торической топологии.

Доклад подготовлен совместно с Н.Ю.Ероховцом.
Все необходимые понятия будут введены в ходе доклада.

Формула Эйлера

Пусть f_0, f_1 и f_2 – числа вершин, рёбер и двумерных граней трёхмерного выпуклого многогранника. Тогда

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2$$

	f_0	f_1	f_2
Тетраэдр	4	6	4
Куб	8	12	6
Октаэдр	6	12	8
Додекаэдр	20	30	12
Икосаэдр	12	30	20

Реализация f-вектора

Теорема (Штейниц, 1906)

Целочисленный вектор (f_0, f_1, f_2) является вектором граней трёхмерного многогранника тогда и только тогда, когда

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2, \quad f_2 \leqslant 2f_0 - 4, \quad f_0 \leqslant 2f_2 - 4$$

Следствие

$$f_2 + 4 \leqslant 2f_0 \leqslant 4f_2 - 8$$

Для многогранников размерности 4 до сих пор неизвестны условия, характеризующие вектор (f_0, f_1, f_2, f_3) его граней.

Графы трёхмерных многогранников

Рёберным графом $G(P)$ многогранника P называется его одномерный остов. Вершины графа $G(P)$ соответствуют вершинам многогранника P.

Графом граней $G(P^*)$ многогранника P называется рёберный граф двойственного многогранника P^*. Вершины графа $G(P^*)$ соответствуют гиперграням многогранника P.

Граф G называется простым, если он не имеет кратных рёбер и петель.

Простой связный граф G с не менее, чем 4 рёбрами, называется 3-связным, если удаление любых двух вершин оставляет граф связным.

Характеризация рёберных графов

Теорема (Штейниц, 1922)

Простой граф G является рёберным графом трёхмерного многогранника тогда и только тогда, когда он планарный и 3-связный.

Каждый из графов $G(P)$ и $G(P^*)$ однозначно определяет комбинаторику трёхмерного многогранника P.

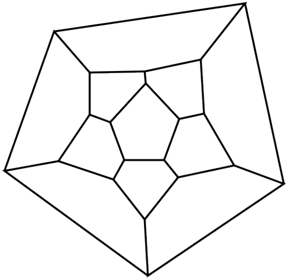
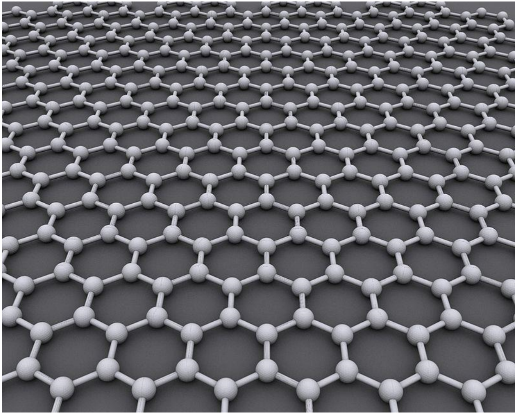


Диаграмма Шлегеля додекаэдра

Плоскую реализацию графа трёхмерного многогранника даёт диаграмма Шлегеля.

Графен

Плоскость $\mathbb{R}^2$ может быть замощена правильными шестиугольниками.



Схематическое изображение графена. Узлы – атомы углерода, а рёбра – связи, удерживающие атомы в листе графена.

Графен

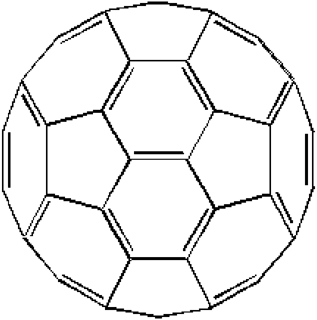
Графен (англ. graphene) – двумерная модификация углерода, образованная слоем атомов углерода толщиной в один атом. Обладает уникальными электрофизическими свойствами.

А.К. Гейму и К.С. Новосёлову была присуждена Нобелевская премия по физике за 2010 год с формулировкой «за передовые опыты с двумерным материалом – графеном» .

Модификации углерода: алмаз, графит, фуллерен, карбин, графен, углеродные нанотрубки, лонсдейлит и др. Наиболее многочисленны молекулярные структуры фуллеренов и нанотрубок.

Бакминстерфуллерен (Баки-болл)

Фуллерен C_{60}



Усечённый икосаэдр

Справа – усечённый икосаэдр со структурой Кекуле, описывающей одинарные и двойные связи атомов углерода. Здесь двойные связи отвечают рёбрам, соединяющим пары шестиугольников.

$$(f_0, f_1, f_2) = (60, 90, 32), \quad (p_5, p_6) = (12, 20)$$

Фуллерены

Атомы углерода, испарившиеся с разогретой поверхности графита, соединяясь друг с другом, могут образовывать молекулы, представляющие собой выпуклые многогранники. В этих молекулах атомы углерода расположены в вершинах правильных шести- и пятиугольников.

Биосфера Фуллера
Павильон США, Экспо-67
Монреаль, Канада

Эти молекулярные соединения атомов углерода названы фуллеренами по имени американского инженера, дизайнера и архитектора Р. Бакминстера Фуллера, применявшего для постройки куполов зданий пяти- и шестиугольники.

Фуллерены

Фуллерены были открыты химиками-теоретиками Р.Кёрлом, Х. Крото и Р. Смолли в 1985 г. – Нобелевская премия по химии 1996 г. с формулировкой «за открытие фуллеренов».

Нобелевская лекция Р.Ф.Кёрла «Истоки открытия фуллеренов: эксперимент и гипотеза» открывается фразой: «Несколько учёных в далеко отстоящих друг от друга частях света предвидели возможность существования класса каркасных соединений углерода, известного теперь как фуллерены, и в частности C_{60}, ... Наиболее ранняя ссылка в этой области относится, по видимому, к 1966 г.».

Астрономы обнаружили заранее предсказанные характерные спектральные линии фуллеренов в космосе – в атмосферах углеродных звезд.
Затем и на Земле удалось их получить в пламени электрической дуги.
Долгое время фуллерены получали только в лабораториях научных центров.

К 1992 году стало известно, что фуллерены содержатся в водорастворимой части шунгита.

Шунгит-фуллерены

Образцы шунгитовой породы

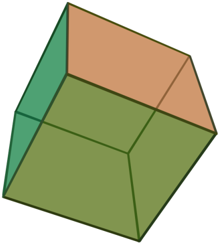
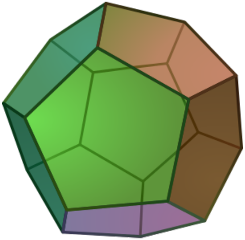
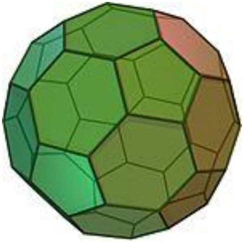
В 1877 году профессор геологии Петербургского университета А.А.Иностранцев определил новый крайний член в ряду природных некристаллических углеродов, не являющихся каменным углём. Он дал этой породе имя шунгит по названию заонежского села Шуньга, где она впервые была обнаружена.

Эта порода присутствует в качестве примеси в шунгитовых сланцах и доломитах, распространённых по всему Заонежью от Гирваса на западе до Толвуи и Шуньги на востоке.

Простые многогранники

Определение

Трёхмерный многогранник называется простым, если каждая его вершина простая, то есть в ней сходится ровно три ребра.

Из 5 Платоновых тел 3 простых.
Из 13 Архимедовых тел 7 простых.

Формула Эйлера и простые многогранники

Пусть p_k – число k-угольных граней многогранника.

Для простого многогранника P

$$3p_3 + 2p_4 + p_5 = 12 + \sum_{k \geqslant 7} (k-6)p_k \qquad (*)$$

Следствие

Если $p_k = 0$ для $k \neq 5, 6$, то $p_5 = 12$.
Не существует простого многогранника только с шестиугольными гранями.

$$f_0 = 2\Big(\sum_k p_k - 2\Big) \quad f_1 = 3\Big(\sum_k p_k - 2\Big) \quad f_2 = \sum_k p_k \Longrightarrow f_0 = 2(f_2 - 2)$$

Разбиение двумерной поверхности (замкнутой или с краем) на многоугольники называется правильным, если пересечение любых двух многоугольников либо пусто, либо вершина, либо ребро.

Обозначим через ν_k число всех вершин валентности k, через μ_k число вершин валентности k, лежащих на границе.

Положим $\mu = \sum_{k\geqslant 2} \mu_k$. Тогда $\nu_2 = \mu_2$ и

$$2\nu_2 + \nu_3 + p_3 = 4\chi(M^2) + \mu + \sum_{k\geqslant 5}(k-4)(\nu_k + p_k)$$

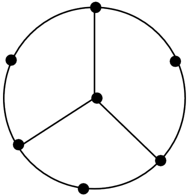
$$\sum_{k\geqslant 2} k\nu_k = \sum_{k\geqslant 3} kp_k + \mu$$

Здесь $\chi(M^2) = f_0 - f_1 + f_2$ – Эйлерова характеристика.

Простые разбиения поверхностей

Правильное разбиение двумерной поверхности называется **простым**, если

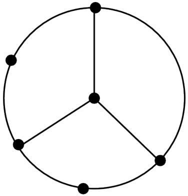
- в каждой внутренней вершине сходится ровно три ребра;
- в каждой вершине на границе сходится либо три, либо два ребра.



$p_4 = 3$

$\mu_2 - \mu_3 = 0$, $\chi(M) = 1$

$2 \cdot 3 = 6 \cdot 1 + 0$



$p_3 = 1, p_4 = 2$

$\mu_2 - \mu_3 = -1$, $\chi(M) = 1$.

$3 \cdot 1 + 2 \cdot 2 = 6 \cdot 1 + 1$

Простые разбиения поверхностей

Для простого разбиения двумерной поверхности

$$3p_3 + 2p_4 + p_5 = 6\chi(M^2) - \delta + \sum_{k \geqslant 7} (k-6)p_k, \quad (**)$$

где $\delta = \mu_2 - \mu_3$

- *Пусть* M^2 *– замкнутая ориентируемая поверхность, т.е. сфера с* g *ручками. Тогда* $\chi(M^2) = 2 - 2g$.
- *Пусть* M^2 *– замкнутая неориентируемая поверхность, т.е. сфера с* k *листами Мёбиуса. Тогда* $\chi(M^2) = 2 - k$.
- *Пусть* M^2 *– диск с* r *дырками. Тогда* $\chi(M^2) = 1 - r$.
- *Пусть* M^2 *– лист Мёбиуса. Тогда* $\chi(M^2) = 0$.

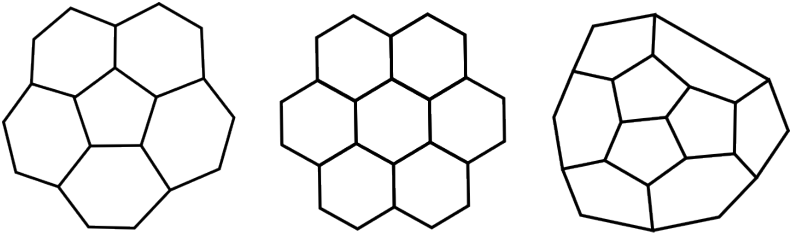
Простые разбиения диска на пяти- и шестиугольники

Диском D^2 мы называем двумерную поверхность с краем, гомеоморфную кругу на плоскости.

Для диска $\chi(D^2) = 1$ и формула $(**)$ принимает вид

$$p_5 = 6 - \delta.$$

- $p_5 = 0 \Leftrightarrow \delta = 6$; $p_5 = 6 \Leftrightarrow \delta = 0$.
- Существует разбиение диска с любыми числами p_5 и p_6.



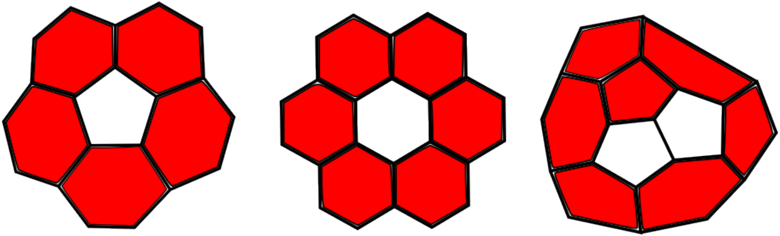
$p_5 = 1, p_6 = 5, \delta = 5$; $p_5 = 0, p_6 = 7, \delta = 6$; $p_5 = 7, p_6 = 2, \delta = -1$

Простые разбиения цилиндра на пяти- и шестиугольники

Для цилиндра $\chi(M^2) = 0$ и формула $(**)$ принимает вид

$$p_5 = -\delta$$

- Существует разбиение диска с любыми $p_5 + p_6 \geqslant 3$.



$p_5 = 0, p_6 = 5, \delta = 0$; $p_5 = 0, p_6 = 6, \delta = 0$; $p_5 = 5, p_6 = 2, \delta = -5$

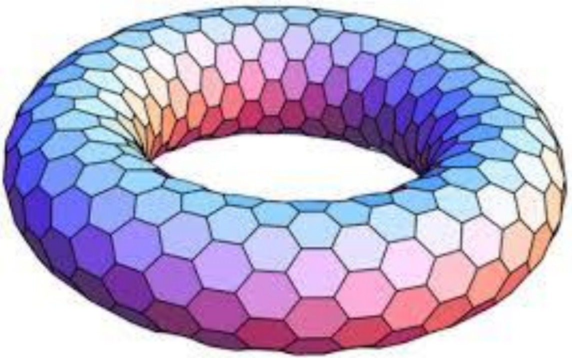
Простые разбиения замкнутых поверхностей

Следствие

Пусть M^2 *– замкнутая поверхность и только одно* $p_k \neq 0$.

- $k = 3$. *Тогда* M^2 *– сфера – поверхность тетраэдра.*
- $k = 4$. *Тогда* M^2 *– сфера – поверхность куба.*
- $k = 5$. *Тогда* M^2 *– сфера – поверхность додекаэдра или проективная плоскость с разбиением, двойственным минимальной триангуляции.*
- $k = 6$. *Тогда* M^2 *– тор или бутылка Клейна.*

Разбиения тора на шестиугольники



Реализация p-вектора

Теорема (Эберхард, 1891)

Для любого набора $(p_k | 3 \leqslant k \neq 6)$ неотрицательных целых чисел, удовлетворяющих соотношению $(^*)$ между числами p_k, существует число p_6 и простой трёхмерный многогранник P^3, так что $p_k = p_k(P^3)$ для всех $k \geqslant 3$.

Пусть дан простой трёхмерный многогранник P. Определена операция одновременной срезки всех его рёбер, в результате которой получается простой многогранник $\widehat{P}$, такой что $p_k(\widehat{P}) = \begin{cases} p_k(P), & k \neq 6 \\ p_6(P) + f_1(P), & k = 6 \end{cases}$

Определение

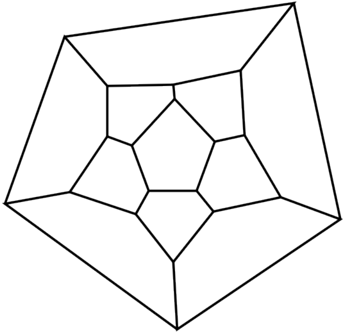
(Математическим) фуллереном называется простой трёхмерный многогранник, у которого все двумерные грани являются пятиугольниками или шестиугольниками.

У любого фуллерена $p_5 = 12$*,*

$$f_0 = 2(10 + p_6), \quad f_1 = 3(10 + p_6), \quad f_2 = (10 + p_6) + 2$$

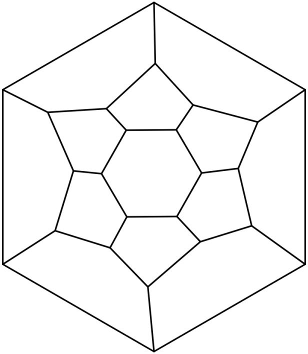
$$\Longrightarrow f_0 = 2(f_2 - 2), \qquad f_2 \geqslant 12.$$

Диаграммы Шлегеля фуллеренов



Додекаэдр

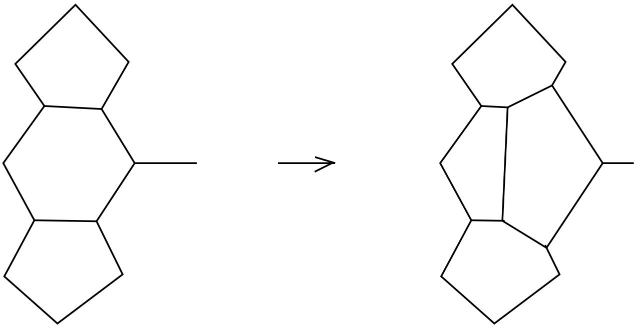
$p_6 = 0$



Бочка

$p_6 = 2$

Перестройка Эндо-Крото



При помощи последовательности перестроек Эндо-Крото из бочки можно получить фуллерен с любым $p_6 = k$, $k \geqslant 2$.

Пусть $F(p_6)$ – число комбинаторных типов фуллеренов. Функция $F(p_6)$ быстро растёт с ростом p_6.

Оценка скорости её роста $O(p_6^9)$.

Имеется эффективный алгоритм перечисления комбинаторных типов фуллеренов (Бринкман, Дресс, 1997).

p_6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...	75
$F(p_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6	15	...	46.088.148

IPR-фуллерены

Определение

Фуллерен называется *IPR-фуллереном* (Isolated Pentagon Rule), если у него нет пятиугольников с общим ребром.

Пусть P – некоторый IPR-фуллерен. Тогда $p_6 \geqslant 20$. IPR-фуллерен с $p_6 = 20$ комбинаторно эквивалентен бакминстерфуллерену C_{60}.

Число $F_{IPR}(p_6)$ комбинаторных типов *IPR*-фуллернов также быстро растёт с ростом p_6.

p_6	20	21	22	23	24	25	26	27	28	...	97
F_{IPR}	1	0	0	0	0	1	1	1	2	...	36.173.081

Конструкция *IPR*-фуллеренов

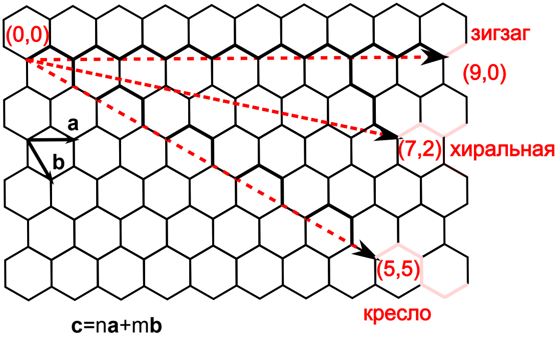
Перестройка Эндо-Крото не может дать *IPR*-фуллерен.

Операция одновременной срезки всех рёбер фуллерена P даёт *IPR*-фуллерен $\widehat{P}$ с $p_6(\widehat{P}) = p_6(P) + f_1(P)$.

Для додекаэдра соответствующий *IPR*-фуллерен C_{80} имеет 80 вершин и обладает большой симметрией.

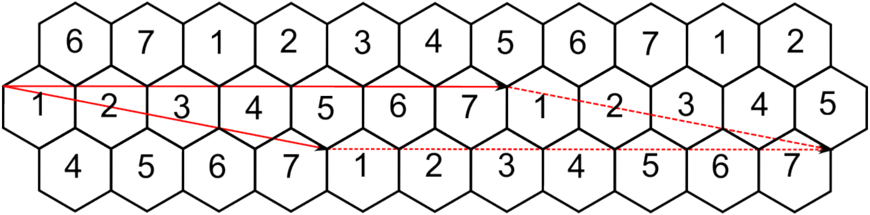
Углеродные нанотрубки

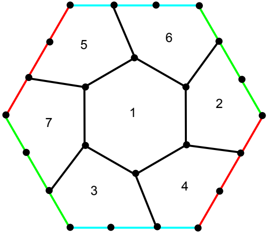
Углеродные нанотрубки получаются в результате свёртки графенового листа в бесконечный цилиндр. Свёртка характеризуется хиральным вектором $\boldsymbol{c} = n\boldsymbol{a} + m\boldsymbol{b}$. При сдвиге на вектор $\boldsymbol{c}$ решётка переходит в себя. При свёртке отождествляются узлы, которые переходят друг в друга.

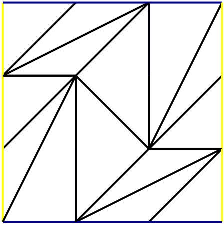


Минимальное разбиение тора на шестиугольники

получается $(7,0)$, $(4,1)$-факторизацией графеновой плоскости и двойственно минимальной триангуляции.







Нумерация на графеновой плоскости соответствует нумерации на разбиении тора.

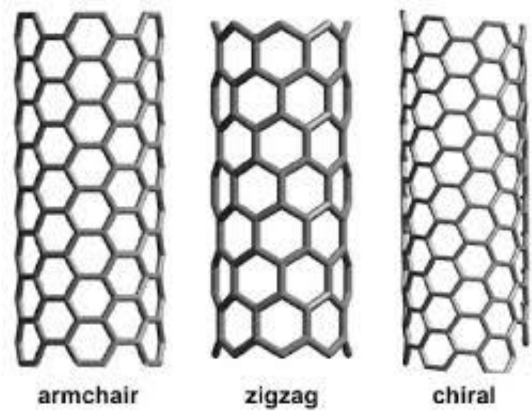
Углеродные нанотрубки

В зависимости от n и m электронные свойства нанотрубок существенно различаются: нанотрубки, для которых $n - m$ делится на 3, проявляют металлические свойства, а все прочие – полупроводниковые.
С ростом диаметра нанотрубки ширина запрещённой зоны в любом случае приближается к 0.

Для получения конечной нанотрубки необходимо обрезать бесконечный цилиндр вдоль двух замкнутых рёберных путей. Каждый из этих путей должен разбивать цилиндр на две бесконечные части. Пути должны не пересекаться и не самопересекаться.

Углеродные нанотрубки

Выделяют нанотрубки типа зигзаг (zigzag) $(n, 0)$ и кресло (armchair) (n, n). Эти трубки обладают зеркальной симметрией. Все остальные типы являются хиральными, то есть не совпадающими со своим зеркальным отражением.



Углеродные нанотрубки

Для простого разбиения цилиндра на шестиугольники:

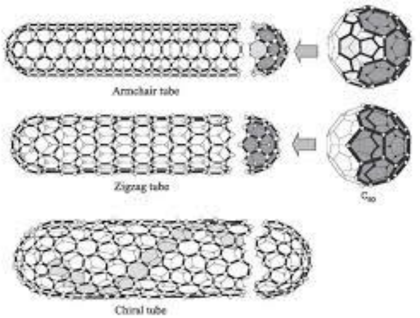
- $\mu_2 = \mu_3$;
- $f_0 = \mu_2 + 2p_6$, $f_1 = \mu_2 + 3p_6$, $f_2 = p_6$.

Для конечной нанотрубки имеет место более сильный результат. На каждой компоненте её границы число вершин валентности 2 равно числу вершин валентности 3.

Углеродные нанотрубки

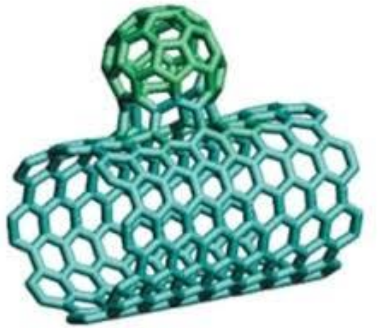
Закрытой нанотрубкой мы называем поверхность, которая получается заклеиванием концов конечной нанотрубки дисками, разбитыми на пяти- и шестиугольники.

Каждый диск, закрывающий конец конечной нанотрубки, содержит ровно 6 пятиугольников.



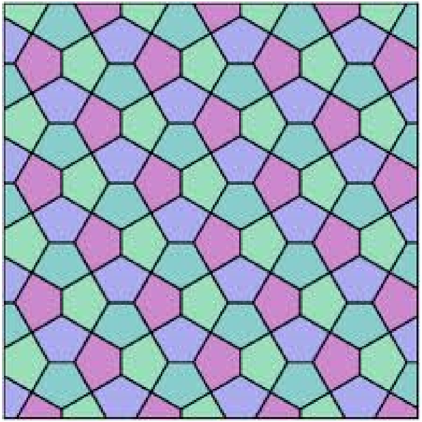
Нанопочки (Nanobuds)

Нанопочка – сцепление фуллерена с нанотрубкой. Нанотрубки химически нейтральны, поэтому их тяжело сочетать с другими материалами. Фуллерены химически активны и создают условия для хорошего сцепления.



На рисунке видны семиугольники. Добавление семиугольников позволяет компенсировать наличие пятиугольников у фуллерена.

Пентаграфен



На рисунке изображён «Каирский коврик» – разбиение плоскости на пятиугольники. Каждая вершина либо простая, либо имеет валентность 4. Исследования по пентаграфену начались в Virginia Commonwealth Univ. (США) и Пекинском университете.

Считается, что толчком послужило наблюдение проф. Qian Wang во время ужина в ресторане, где она обратила внимание на панно с изображением замощения пятиугольниками улицы в Каире.

Qian Wang сфотографировала это панно и послала одному из студентов со словами: «Думаю, мы сможем это сделать. Материал может оказаться стабильным. Но это нужно тщательно проверить.» Студент выполнил задание, и оказалось, что смоделированная структура замечательна и очень проста.

Оказалось, что по механическим свойствам новый материал может превзойти графен, поскольку будет механически стабильным, будет обладать очень высокой прочностью и выдерживать температуру до 1000 K.

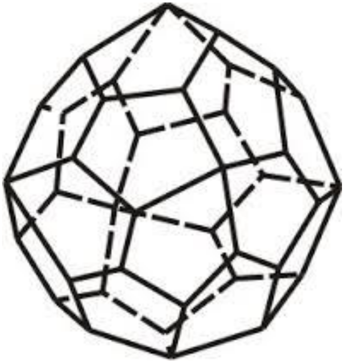
Пентаграфен будет иметь отрицательный коэффициент Пуассона – отношение относительного поперечного сжатия к относительному продольному растяжению – то есть его поперечное сечение будет расти при растяжении в продольном направлении.

У графена коэффициент Пуассона положительный, то есть при растяжении в продольном направлении его поперечное сечение уменьшается, как у большинства материалов.

Графен прекрасный проводник (ширина запрещенной зоны равна 0). Пентаграфен будет широкозонным полупроводником (по расчетам, запрещенная зона будет равна 3,5 эв., т.е. почти как у диэлектриков).

Кристалл кубической сингонии

Все грани – пятиугольники.

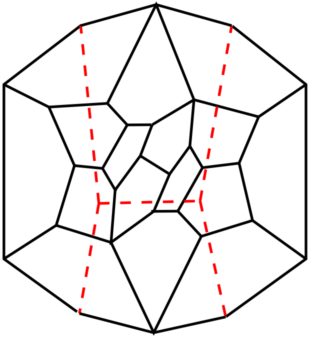


Пентагонтриоктаэдр

$(38, 60, 24)$

32 простые вершины, 6 вершин валентности 4

Разбиение сферы на пятиугольники



Перестройка фуллерена «бочка»
(32,50,20)
28 простых вершин, 4 вершины валентности 4.

Пента $(3,4)$-многогранники

Определение

Трёхмерный многогранник называется пента-$(3,4)$-многогранником, если все его грани – пятиугольники, а вершины либо простые, либо имеют валентность 4.

Пусть $f_{0,k}$ – число вершин валентности k.

Для пента-$(3,4)$-многогранника имеем

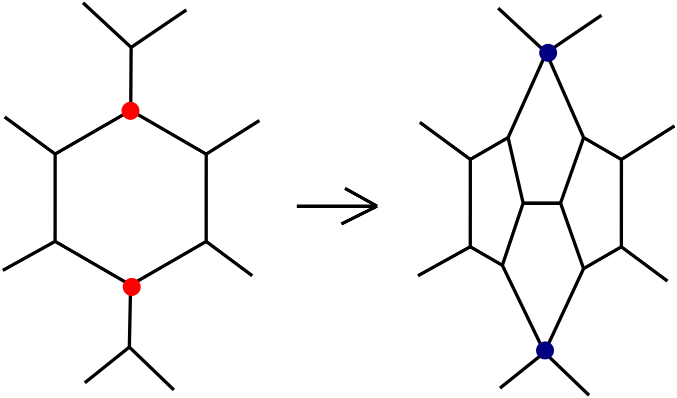
$$f_{0,3} = 8 + p_5, \qquad f_{0,4} = \frac{1}{2}p_5 - 6 \quad \Longrightarrow \quad f_{0,3} = 2(10 + f_{0,4})$$

$f_2 = p_5 \geqslant 12$ – *чётное число, и* $2f_0 = 3f_2 + 4$, $2f_1 = 5f_2$

При $p_5 = 12$ имеем $f_{0,4} = 0$ и разбиение комбинаторно эквивалентно поверхности додекаэдра.
Не существует пента $(3,4)$-многогранника с $f_{0,4} = 1$.

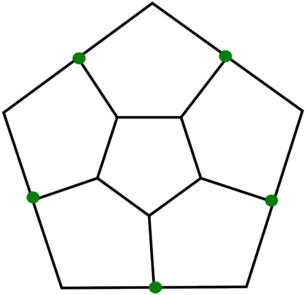
Перестройка шестиугольной грани

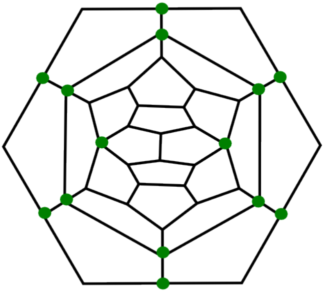
Пусть дан трёхмерный многогранник с шестиугольной гранью, у которой имеется две противоположные простые вершины. Тогда определена перестройка



Перестройка даёт многогранник, у которого вместо шестиугольной грани появились 4 пятиугольные грани. Все другие грани сохраняют свой комбинаторный тип. Возникают 6 новых простых вершин вместо 2 старых. Валентность двух старых вершин увеличивается на один.

Универсальное разбиение фуллерена



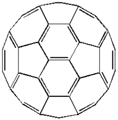


Теорема

Пусть дан фуллерен. Разобьём каждый его пятиугольник по схеме, изображённой слева, а каждый его шестиугольник по схеме, изображённой справа. Тогда в результате получится пента-$(3,4)$*-разбиение сферы.*

Структуры Кекуле

Структурой Кекуле *фуллерена называется набор рёбер без общих вершин, такой что каждая вершина принадлежит хотя бы одному ребру. Эти рёбра указывают на двойные связи атомов углерода.*



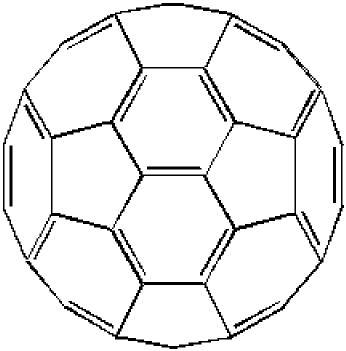
Для любого фуллерена существует хотя бы одна структура Кекуле (Следствие результата Петерсона, 1891).

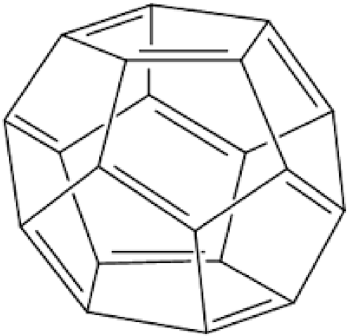
Согласно теории, чем больше структур Кекуле имеет фуллерен, тем более химически стабильным он является.

Любой фуллерен имеет экспоненциально много структур Кекуле ($\geqslant 2^{\frac{2p_6-360}{61}}$). (Ф. Кардош, 2010).

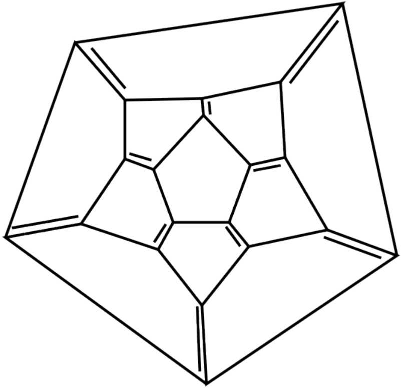
Совершенные паросочетания

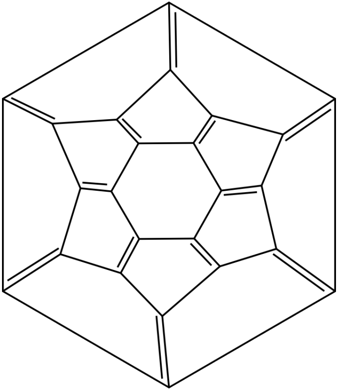
В теории графов структуры Кекуле отвечают совершенным паросочетаниям.





Совершенные паросочетания





Структуры Кекуле пента-$(3,4)$-многогранников

Структурой Кекуле пента-$(3,4)$-многогранника называется совершенное паросочетание индуцированного подграфа всех его простых вершин.

Не каждый пента-$(3,4)$-многогранник обладает структурой Кекуле.

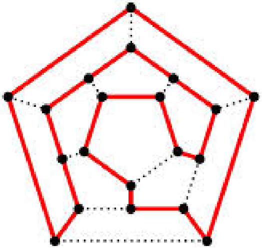
- *Каирский коврик и пентагонтриоктаэдр имеют структуры Кекуле.*
- *Пента-$(3,4)$-разбиение сферы, получаемое как универсальное разбиение фуллерена, не имеет структур Кукуле.*

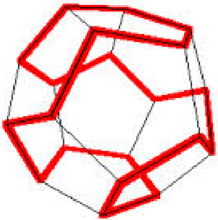
Гамильтоновы циклы

Гамильтоновым циклом называется цикл графа, проходящий через каждую его вершину один только один раз.

Теорема (Кардош, 2014)

Рёберный граф любого фуллерена имеет гамильтонов цикл.





Каждый гамильтонов цикл определяет структуру Кекуле.

Зигзаги на простых разбиениях

Пусть M^2 – поверхность с фиксированным простым разбиением.
Путём Петри называется рёберный путь, такой что никакие три последовательных ребра не лежат в одной грани.
Зигзагом называется замкнутый путь Петри.
Простым называется зигзаг без самопересечений.

Следствие формулы (**)

Простой зигзаг разбивает поверхность фуллерена на два простых разбиения диска, каждое из которых содержит ровно 6 пятиугольников.

Каждому простому многограннику P с гипергранями $F_1, \dots, F_m$ сопоставляется кольцо Стенли-Райснера

$$\mathbb{Z}[P] = \mathbb{Z}[v_1, \dots, v_m]/(v_{i_1} \dots v_{i_k} = 0, \text{ если } F_{i_1} \cap \dots \cap F_{i_k} = \varnothing).$$

Это кольцо является полным комбинаторным инвариантом многранника P. Важные инварианты даёт его биградуированная Tor-алгебра $Tor_{\mathbb{Z}[v_1,\dots,v_m]}(\mathbb{Z}[P], \mathbb{Z})$.

Простой многогранник называется флаговым, если любой набор его попарно пересекающихся гиперграней $F_{i_1}, \dots, F_{i_k}$: $\forall a, b \quad F_{i_a} \cap F_b \neq \varnothing$, имеет непустое пересечение $F_{i_1} \cap \dots \cap F_{i_k} \neq \varnothing$.

Кольцо Стенли-Райснера флагового многогранника является квадратичным: соотношения имеют вид $v_i v_j = 0$: $F_i \cap F_j = \varnothing$.

Квадратично двойственная алгебра фуллерена

Каждый фуллерен является простым флаговым многогранником

Квадратичная алгебра Стенли-Райснера является кошулевой.

Квадратично двойственной алгеброй фуллерена называется квадратично двойственная алгебра его кольца Стенли-Райснера.

Структура квадратично-двойственно алгебры фуллерена полностью описывается матрицей инциденций графа граней фуллерена, которая в физике и химии называется его «топологической матрицей».

На основе этой матрицы в квантовой химии проводится расчёт физико-химических свойств фуллерена.

Литература I

Э.Э. Лорд, А.Л. Маккей, С. Ранганатан,
Новая геометрия для новых материалов,
М., Физматлит, 2010.

M. Endo, H.W. Kroto,
Formation of Carbon Nanofibers,
Journal of Physical Chemistry, Vol. 96, No. 17, 6941–6944 (1992).

G. Brinkman, A.W.Dress,
A constructive enumaretation of fullerens,
J.Algorithms, 23:2(1997), 345-358.

Victor Buchstaber, Taras Panov,
Toric Topology,
Mathematical Surveys and Monographs, Volume 204, AMS, Providence, RI, 2015.

Литература II

- V.M. Buchstaber, V.D. Volodin,
  Combinatorial 2-truncated cubes and applications,
  Associahedra, Tamari Lattices, and Related Structures, Tamari Memorial Festschrift, Progress in Mathematics, 299, Birkhaüser,Basel, 2012, 161-186.
- М. Деза, М. Дютур Сикирич, М.И. Штогрин,
  Фуллерены и диск-фуллерены,
  УМН, 68:4(412) (2013), 69-128.
- В.М.Бухштабер, Н.Ю.Ероховец,
  Усечения простых многогранников и приложения,
  Труды МИАН им. В.А.Стеклова, т. 289, 2015.

Nasibulin Albert G. et al.,
A novel hybrid carbon material,
Nature Nanotechnology 2 (3): 156–161 (2007).

Frantisek Kardos, Daniel Kral, Jozef Miskufa, Jean-Sebastien Serenic,
Fullerene graphs have exponentially many perfect matchings,
Nature arXiv.

Frantisek Kardos,
A computer-assisted proof of a Barnette's conjecture: Not only fullerene graphs are hamiltonian,
arXiv 1409.2440.

Литература IV

Tomislav Doslic,
Fullerene graphs with exponentially many perfect matchings,
Journal of Mathematical Chemistry, Vol. 41, No. 2 (2007).

S.J. Cyvin and I. Gutman,
Kekule Structures in Benzenoid Hydrocarbons,
Lec. Notes in Chemistry 46 (Springer, Heidelberg, 1988).