Фуллерены, нанотрубки и комбинаторные структуры на поверхностях.

В.М. Бухштабер
МИАН имени В.А. Стеклова,
МГУ имени М.В. Ломоносова

buchstab@mi.ras.ru

СТУДЕНЧЕСКИЕ ЧТЕНИЯ

2 марта, 2016

Аннотация

Актуальные направления в материаловедении, нанотехнологии, наноэлектронике, прикладной химии опираются на теоретические и экспериментальные результаты о

- фуллеренах

и

- нанотрубках,

которые представляют собой гигантские молекулы, состоящие исключительно из атомов углерода.

Аннотация

Математической моделью фуллерена является поверхность выпуклого трёхмерного многогранника, составленная из пяти- и шестиугольников.

Математической моделью графена является двумерная плоскость, правильно разбитая на шестиугольники.

Математической моделью нанотрубки является бесконечный цилиндр, разбитый на шестиугольники, представляющий собой свёрнутую в цилиндр математическую модель графена.

Математической моделью замкнутой нанотрубки является полученный из нанотрубки конечный цилиндр, границы которого заклеены фуллереновыми шапочками.

Аннотация

С комбинаторно-топологической точки зрения замкнутые нанотрубки представляют собой частный случай фуллеренов. Принципиально важным в модели фуллерена является требование, чтобы в каждой его вершине сходилось ровно три ребра. В этом случае из формулы Эйлера легко следует, что число пятиугольников равно двенадцати. Более того, можно показать, что число пятиугольников в каждой шапочке, заклеивающей конечную нанотрубку, равно шести.

Методами выпуклой геометрии нетрудно показать, что число шестиугольников p_6 может быть любым, за исключением $p_6 = 1$.

Методами гиперболической геометрии получено, что число комбинаторно неэквивалентных фуллеренов с данным p_6 растёт как p_6 в степени 9.

Аннотация

В наших работах с Н.Ю.Ероховцом развита теория операций усечения многогранников, позволившая конструктивно описать важные классы многогранников.

В основном мы будем говорить о задачах построения фуллеренов и замкнутых нанотрубок.

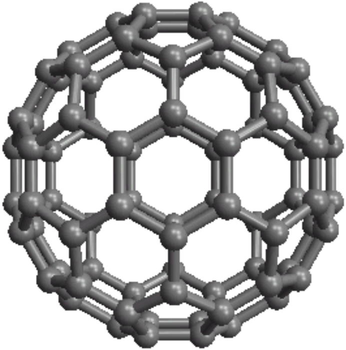
В центре внимания будет следующий результат: комбинаторный тип любого фуллерена может быть построен из додекаэдра при помощи комбинации всего семи операций усечения. Этот неожиданный результат оказался возможным благодаря тому, что в процессе построения допускаются многогранники с одной особой гранью: четырёхугольной или семиугольной.

Длина каждой комбинации равна числу шестиугольников в фуллерене.

Фуллерены

Фуллереном называется молекула углерода, которая топологически имеет форму сферы и каждый атом которой принадлежит ровно трём углеродным кольцам, состоящим из пяти и шести атомов.

Фуллерен C_{60}



Фуллерен C_{80}

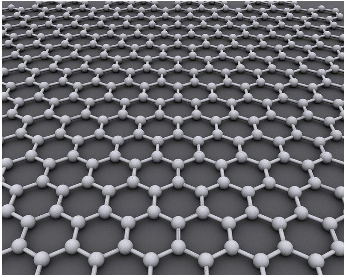
Бакминстерфуллерен C_{60} был открыт химиками-теоретиками Робертом Кёрлом, Гарольдом Крото и Ричардом Смолли в 1985 (Нобелевская премия 1996 года по химии «за открытие фуллеренов»).

Биосфера Фуллера
Павильон США, Экспо-67
Монреаль, Канада

Фуллерены были названы в честь Ричарда Бакминстера Фуллера (1895-1983) – известного американкого архитектора и философа.
В 1954 году он запотентовал архитектурную конструкцию в форме многогранного купола для перекрытия больших площадей.

Графен

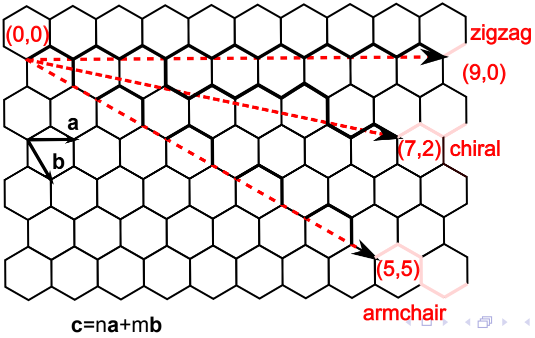
Нобелевская премия 2010 года по физике А. К. Гейму и К. С. Новосёлову «за передовые эксперименты с двумерным материалом графеном».



Схематическое изображение графена. Узлы – атомы углерода, рёбра – связи, удерживающие атомы в листе графена. С математической точки зрения графен представляет собой замощение двумерной плоскости $\mathbb{R}^2$ правильными шестиугольниками.

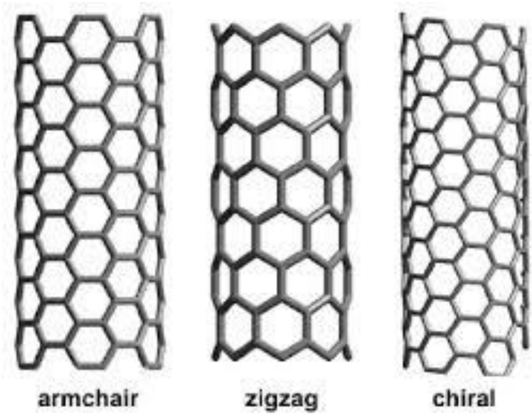
Углеродные нанотрубки получаются сворачиваением графенового листа в бесконечный цилиндр. Они характеризуются хиральным вектором $\mathrm{c} = \mathrm{na} + \mathrm{mb}$, поэтому называются также (n, m)-нанотрубками.

Сдвиг на вектор c переводит решётку в себя. Узлы, отличающиеся на сдвиг, отождествляются при сворачивании.



Углеродные нанотрубки

$(n, 0)$-нанотрубки называются нанотрубками типа «зигзаг», в то время как (n, n)-нанотрубки называются «зубчатыми» нанотрубками (или нанотрубками типа «кресло»). Они обладают зекальной симметрией. Остальные нанотрубки называются хиральными, так как они не совпадают с зеркальным образом.



Диаметром (n, m)-нанотрубки называется величина

$$d = q(n^2 + m^2 + nm)^{\frac{1}{2}},$$

где $q = 0.0783$ нанометров. 1 нанометр равен 10^{-9} метров.
Хиральным углом θ углеродной (n, m)-нанотрубки называется величина

$$\cos\theta = \frac{(2n + m)}{2(n^2 + m^2 + nm)^{\frac{1}{2}}},$$

Тип «зигзаг» — $\theta = 0$,
«Зубчатый» тип — $\theta = 30°$,
Хиральные — $0 < \theta < 30°$.

Углеродные нанотрубки

В связи с симметрией и уникальной электронной структурой графена, структура нанотрубки сильно влияет на её электрические свойства.

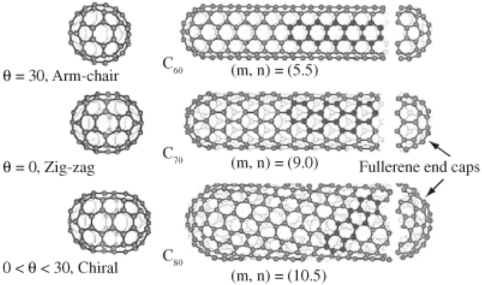
(n, m)-нанотрубка,

- с $n = m$ обладает металлическими свойствами;
- с $n - m$ делящимся на 3 обладает полупроводниковыми свойствами с очень малой шириной запрещённой зоны,
- остальных типов является умеренным полупроводником.

Чтобы получить конечную нанотрубку, нужно разрезать цилиндр вдоль двух непересекающихся простых рёберных циклов, каждый из которых разделяет цилиндр на две бесконечные части.

Углеродные нанотрубки

Закрытой нанотрубкой называется поверхность, полученная заклеиванием конечной нанотрубки двумя шапочками, представляющими собой диски, разбитые на пятиугольники и шестиугольники.



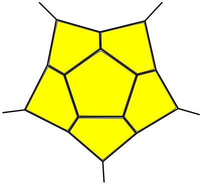
Для фиксированных граничных рёберных циклов конечной нанотрубки существует конечное число комбинаторных типов дисков с выходящим на границу пятиугольником, подходящих для заклеивания вдоль циклов.

$(5,0)$-нанотрубки

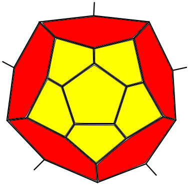
Определим комбинаторные многогранники $\mathcal{D}_{5\mathrm{k}}$, $\mathrm{k} \geqslant 0$:

- $\mathcal{D}_0$ – додекаэдр;
- поверхность $\partial\mathcal{D}_{5\mathrm{k}}$ получается разрезанием $\partial\mathcal{D}_0$ на две «шапки» (Рис. а) и вставкой между ними k поясов из пяти шестиугольников, граничащих с соседними по противоположным граням (Рис. б).

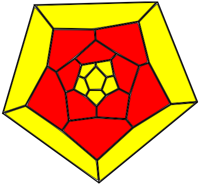
1. $(5,0)$-нанотрубки $=$ многогранники $\mathcal{D}_{5\mathrm{k}}$, $\mathrm{k} \geqslant 1$.
2. Фуллерен имеет комбинаторный тип $\mathcal{D}_{5\mathrm{k}}$, $\mathrm{k} \geqslant 0$, тогда и только тогда, когда он содержит фрагмент а).



а)



б)



$\mathcal{D}_{10}$

Выпуклые многогранники

Выпуклым многогранником P называется **ограниченное** множество вида

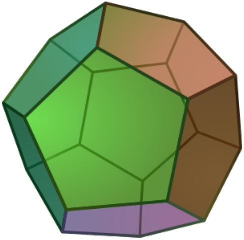
$$P = \{x \in \mathbb{R}^n \colon a_i x + b_i \geqslant 0, i = 1, \ldots, m\}$$

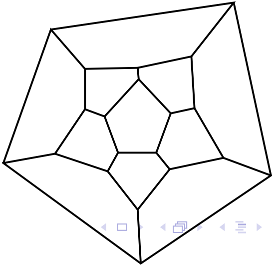
По определению $\dim P = \dim \operatorname{aff}(P)$. Если $\dim P = n$ и представление **неизбыточно**, то есть удаление каждого неравенства изменяет множество P, то каждая гиперплоскость $\mathcal{H}_i = \{x \in \mathbb{R}^n \colon a_i x + b_i = 0\}$ определяет **гипергрань** $F_i = P \cap \mathcal{H}_i$.

Архимедово тело – курносый додекаэдр

Диаграммой Шлегеля (1886) выпуклого трёхмерного многогранника P называется его проекция на плоскость выбранной двумерной грани из точки вне многогранника, близкой к этой грани. Диаграмма зависит от выбора грани.

- Диаграмма Шлегеля представляет собой разбиение выбранной грани на многоугольники.
- Граф рёбер на диаграмме является полным комбинаторным инвариантом многогранника P.





Формула Эйлера (Леонард Эйлер, 1707-1783)

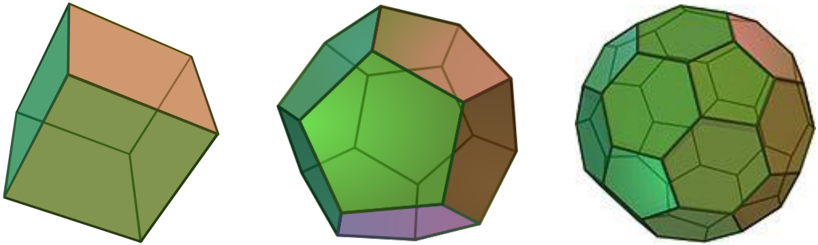
Пусть f_0, f_1 и f_2 – числа вершин, рёбер и двумерных граней трёхмерного многогранника. Тогда

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2$$

	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

Простые многогранники

n-мерный многогранник называется **простым**, если каждая его вершина содержится ровно в n гипергранях.



3 из 5 платоновых тел простые.
7 из 13 архимедовых тел простые.

Для любого простого трёхмерного многогранника

$$f_0 = 2(f_2 - 2), \quad f_1 = 3(f_2 - 2).$$

Следствие формулы Эйлера для простых трёхмерных многогранников

Пусть p_k – число k-угольных двумерных граней.

Для любого простого трёхмерного многогранника P

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

Следствие

- Если $p_k = 0$ для $k = 3, 4$, то $p_5 = 12 + \sum_{k \geqslant 7}(k-6)p_k$.
- Если $p_k = 0$ для $k \neq 5, 6$, то $p_5 = 12$.
- Не существует простого трёхмерного многогранника только с шестиугольными гранями.
- $3p_3 + 2p_4 + p_5 \geqslant 12$.

Теоремы реализации

Теорема (Эберхард, 1891)

Для любого набора $(p_k | 3 \leqslant k \neq 6)$ неотрицательных целых чисел, удовлетворяющий формуле

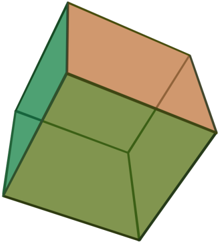
$$3p_3 + 2p_4 + p_5 = 12 + \sum_{k \geqslant 7} (k-6)p_k,$$

существует простой 3-многогранник P^3 с $p_k = p_k(P^3)$, $k \neq 6$.

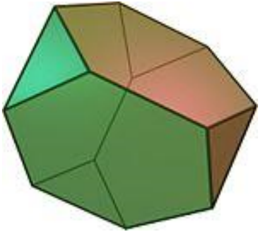
Для фиксированного набора $(p_k | 3 \leqslant k \neq 6)$

- существует бесконечно много реализуемых значений p_6.
- существует реализуемое $p_6 \leqslant 3 \left(\sum_{k \neq 6} p_k \right)$ (Фишер, 1974).
- если $p_3 = p_4 = 0$, то каждое значение $p_6 \geqslant 8$ реализуемо (Грюнбаум, 1968).

Простой многогранник называется **флаговым**, если любой его набор попарно пересекающихся гиперграней $F_{i_1}, \dots, F_{i_k}$: $F_{i_s} \cap F_{i_t} \neq \varnothing$, $s, t = 1, \dots, k$, имеет непустое пересечение $F_{i_1} \cap \dots \cap F_{i_k} \neq \varnothing$.



Флаговый многогранник

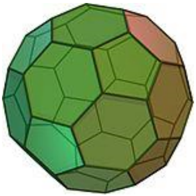


Нефлаговый многогранник

Фуллерены

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

Фуллерен C_{60}



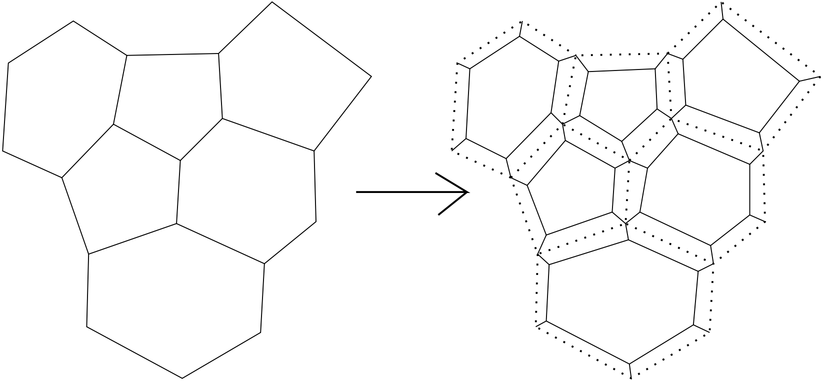
Усечённый икосаэдр

Для любого фуллерена $p_5 = 12$,

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

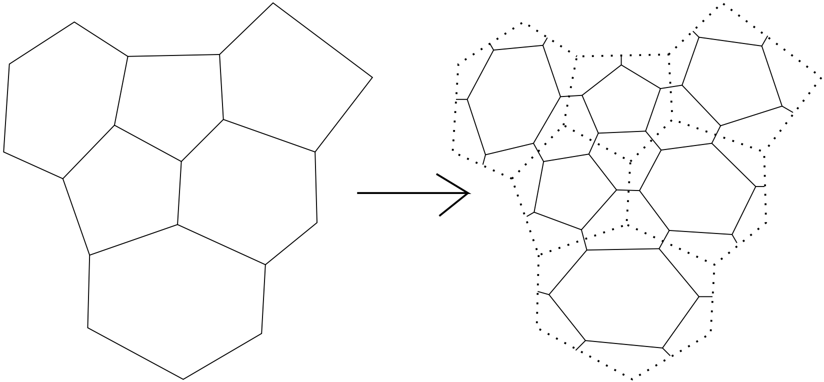
Существуют фуллерены с любым значением $p_6 \neq 1$.

Первая итерационная процедура



$$p_k(P') = \begin{cases} p_k(P), & k \neq 6; \\ p_6(P) + f_1(P), & k = 6. \end{cases}$$

Вторая итерационная процедура



$$p_k(P') = \begin{cases} p_k(P), & k \neq 6; \\ p_6(P) + f_0(P), & k = 6. \end{cases}$$

Итерационные процедуры

Первая итерационная процедура увеличивает f_0 в 4 раза, вторая – в 3 раза. Процедуры перестановочны между собой.

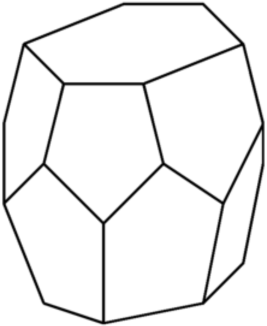
Применяя первую итерационную процедуру к додекаэдру, мы получаем фуллерен C_{80} с $p_6 = 30$.
Всего есть 31924 комбинаторных типов фуллеренов с $p_6 = 30$.

Применяя вторую итерационную процедуру к додекаэдру, мы получаем бакминстерфуллерен C_{60} с $p_6 = 20$.
Всего есть 1812 комбинаторных типов фуллеренов с $p_6 = 20$.

Фуллерен, имеющий группу (комбинаторных) симметрий икосаэдра, называется икосаэдральным.

Можно показать, что икосаэдральные фуллерены – это в точности те фуллерены, которые получаются из додекаэдра многократным применением итерационных процедур.

Диаграммы Шлегеля фуллеренов



Фуллерен «бочка»

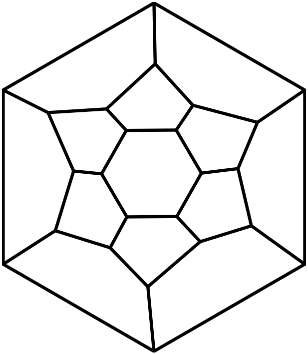
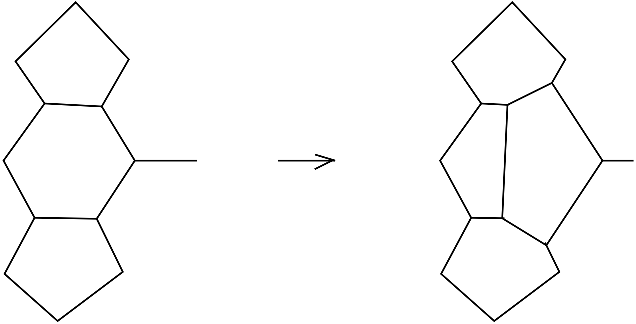


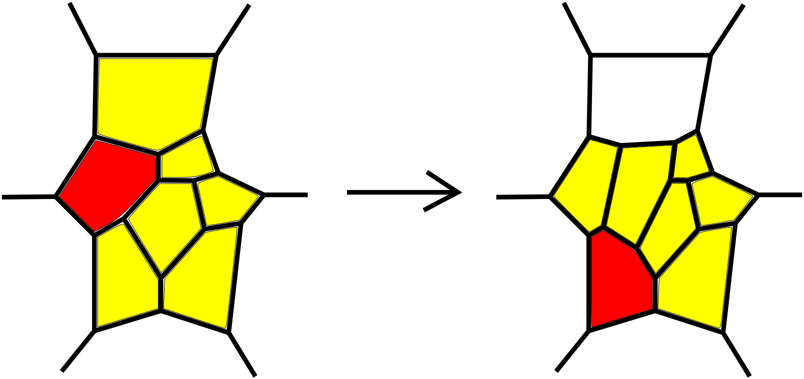
Диаграмма Шлегеля «бочки»

Операция Эндо-Крото

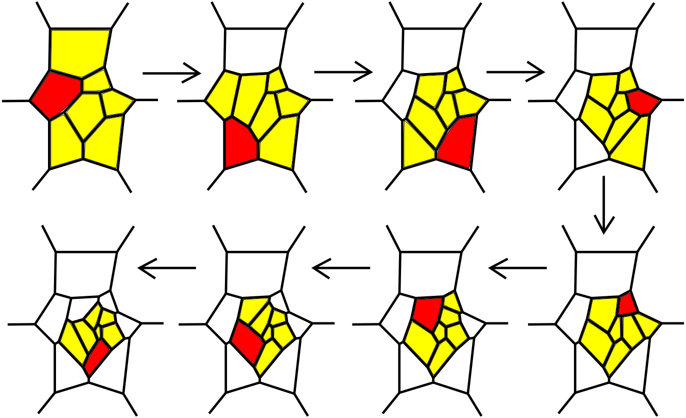


- Операция Эндо-Крото увеличивает число p_6 на 1.

Фрагмент для бесконечной серии операций Эндо-Крото

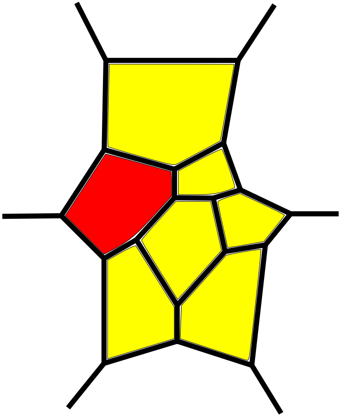


- Операция Эндо-Крото превращает фрагмент слева во фрагмент с такой же границей, состоящий из предыдущего фрагмента и дополнительного (белого) шестиугольника.



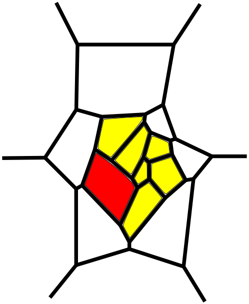
- Начиная с «бочки» $\mathcal{B}_2$ ($p_6 = 2$) и применяя последовательность операций Эндо-Крото к выбранному фрагменту, мы получаем серию фуллеренов $\mathcal{B}_k$, $k = p_6 \geqslant 2$.
- Новые шестиугольники образуют спираль.

Серия фуллеренов, полученных из «бочки»



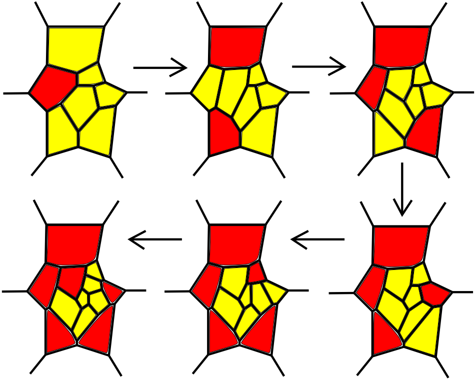
- Фуллерен P комбинаторно эквивалентен многограннику $\mathcal{B}_{\mathrm{k}}$ для некоторого $\mathrm{k} \geqslant 2$ тогда и только тогда, кода он содержит этот фрагмент.

$(5,1)$-нанотрубки



$(5,1)$-нанотрубки – это в точности многогранники $\mathcal{B}_{\mathrm{k}}$, $\mathrm{k} \geqslant 8$.

(5, 1)-нанотрубки



- Применяя меньше шести операций Эндо-Крото к фрагменту слева вверху, мы получаем все возможные диски с выходящим на границу пятиугольником, которыми можно заклеить простой рёберный цикл – границу этого фрагмента – на конечной нанотрубке .

Число комбинаторных типов фуллеренов

Комбинаторно неэквивалентные фуллерены с одинаковым числом p_6 называются комбинаторными изомерами.

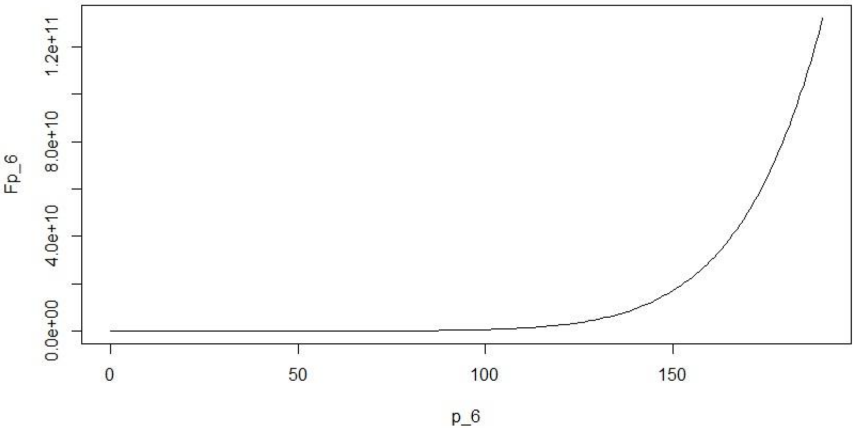
Пусть $F(p_6)$ – число комбинаторных изомеров с данным p_6. Известно, что $F(p_6) = O(p_6^9)$.

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

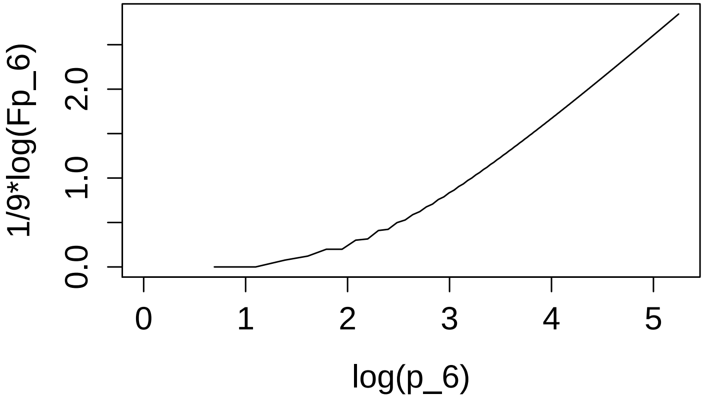
Следующая информация взята из источника
House of Graphs, Fullerenes (http://hog.grinvin.org/Fullerenes)

p_6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	…	75
$F(p_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6	15	…	46.088.157

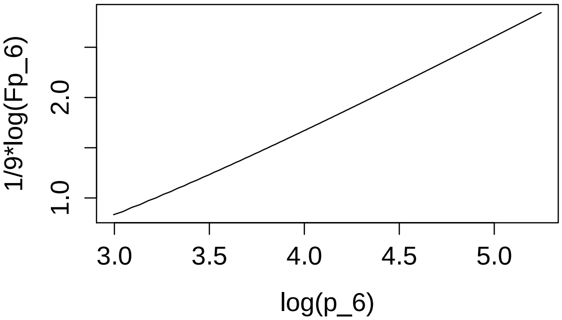
Функция $F(p_6)$.



$\frac{1}{9}\ln F(p_6)$ как функция от $\ln(p_6)$



$\frac{1}{9}\ln F(p_6)$ как функция от $\ln(p_6)$



$\frac{1}{9}\ln F(p_6) \approx 0.9\ln(p_6) - 1.8$

Определение

IPR-фуллереном (Isolated Pentagon Rule) называется фуллерен, у которого нет смежных пятиугльников.

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

Все икосаэдральные фуллерены, кроме додекаэдра, являются IPR-фуллеренами.

Число $F_{IPR}(p_6)$ комбинаторных изомеров IPR-фуллеренов как функция от p_6.

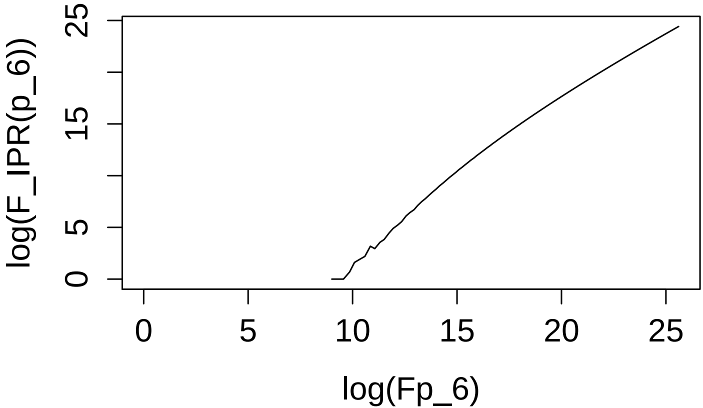
p_6	20	21	22	23	24	25	26	27	28	...	97
F_{IPR}	1	0	0	0	0	1	1	1	2	...	36.173.081

Гипотеза (Бринкман, Дресс)

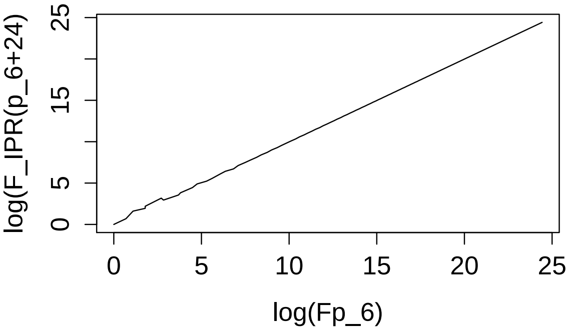
Функции $F(p_6)$ и $F_{\mathrm{IPR}}(p_6 + 24)$ в некотором смысле являются хорошими асимптотическими приближениями друг друга.

p_6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...	73
$F(p_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6	15	...	36.798.433
$F_{\mathrm{IPR}}(p_6 + 24)$	0	1	1	1	2	5	7	9	24	...	36.173.081

$\ln F_{\mathrm{IPR}}(p_6)$ как функция от $\ln F(p_6)$



$\ln F_{IPR}(p_6 + 24)$ как функция от $\ln F(p_6)$



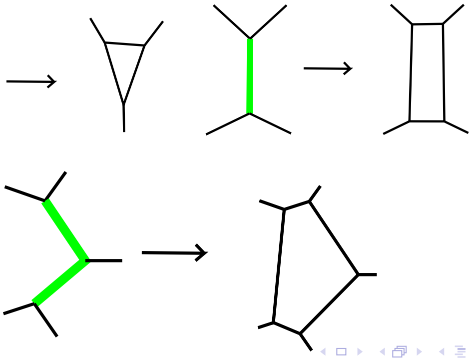
Начиная со значения $\ln F(p_6) = 5$ график выглядит как прямая линия, заданная уравнением

$$\ln F_{IPR}(p_6 + 24) \approx 1 * \ln F(p_6) - 0.07$$

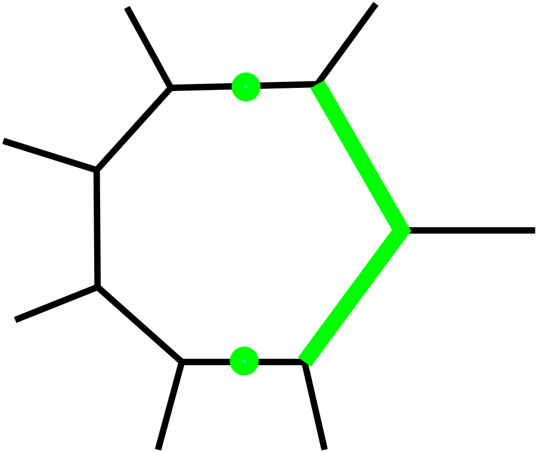
Построение простых трёхмерных многогранников

Теорема (Эберхард (1891), Брюкнер (1900))

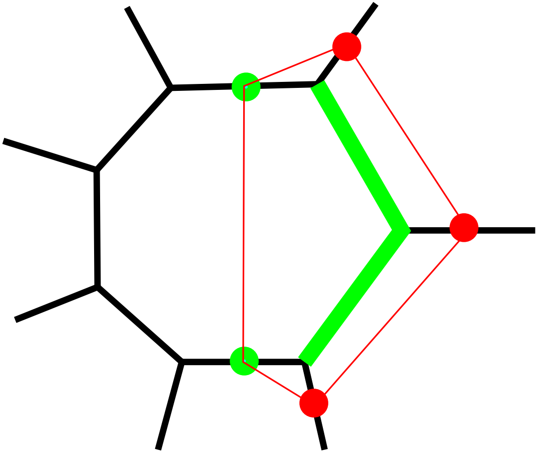
Каждый трёхмерный простой многогранник комбинаторно эквивалентен многограннику, полученному из тетраэдра последовательностью срезок вершин, срезок рёбер и $(2, k)$-усечений.



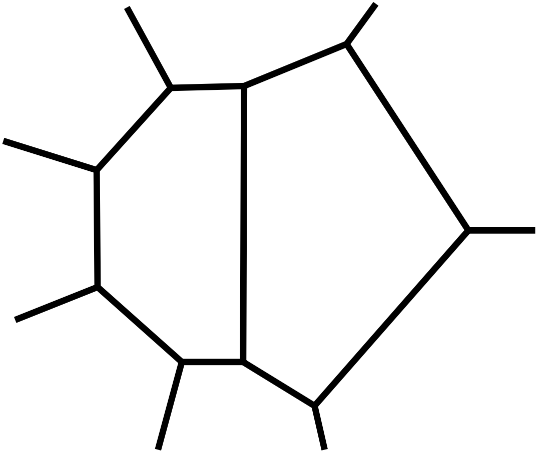
$(2, 7)$-усечение

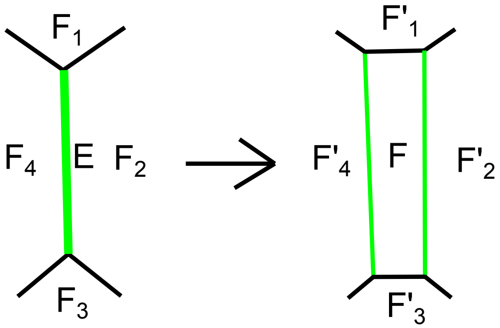


(2, 7)-усечение



$(2,7)$-усечение

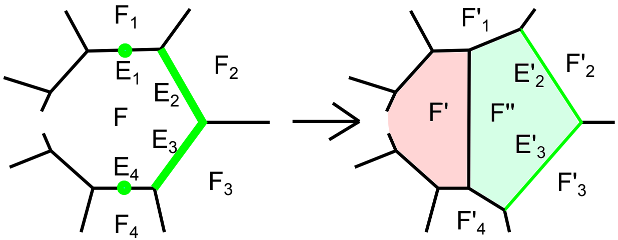




Срезка ребра – локальная операция.

- ребро E превращается в четырёхугольник F;
- число сторон граней F_1 и F_3 увеличивается на 1;
- число сторон граней F_2 и F_4 не изменяется;

Пусть s_i – число сторон грани F_i. Операцию срезки ребра будем называть $(1; s_1, s_3)$-усечением или, более детально, $(1, s_2, s_4; s_1, s_3)$-усечением.

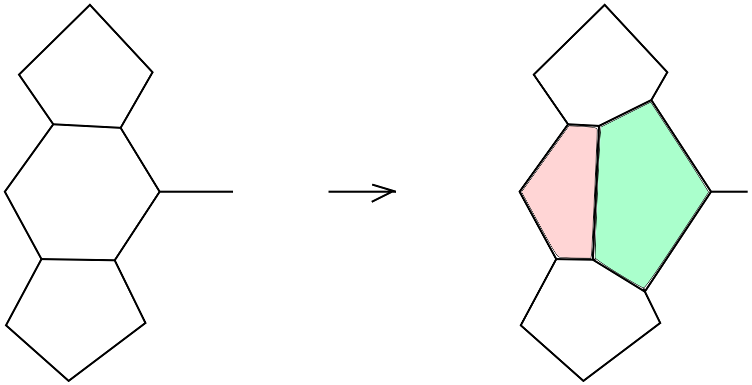


(2, k)-усечение – локальная операция.

- k-угольник F распадается на $(k-1)$-угольник F' и 5-угольник F'';
- каждое из рёбер E_1 и E_4 разделяется точкой на два ребра;
- число сторон граней F_1 и F_4 увеличивается на 1.
- комбинаторика граней F_2, F_3 и рёбер E_2, E_3 не изменяется.

Мы также называем эту операцию более детально $(2, k; s_1, s_4)$-усечением.

Операция Эндо-Крото как $(2, 6)$-усечение



Операция Эндо-Крото является единственным $(2, \mathrm{k})$-усечением, переводящим фуллерен в фуллерен. В этом случае $\mathrm{k} = 6$ и F_1, F_4 – пятиугольники, то есть операция является (2,6;5,5)-усечением.

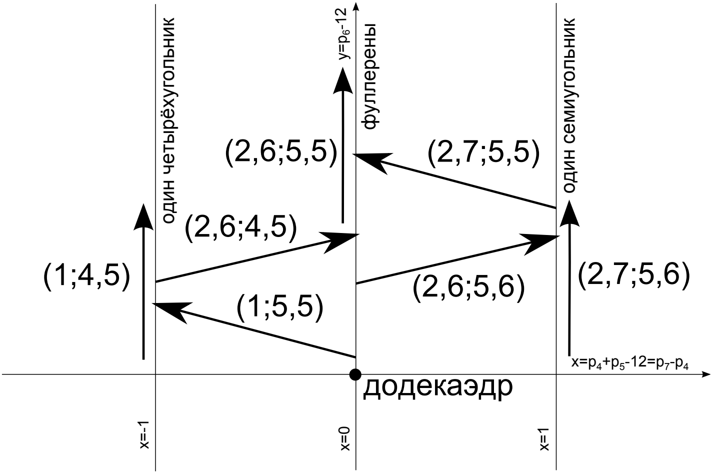
Построение комбинаторных фуллеренов

Теорема (Бухштабер-Ероховец, 2015)

Каждый фуллерен комбинаторно эквивалентен многограннику, получаемому из додекаэдра при помощи последовательности усечений из следующего списка:

- $(1;4,5)$, $(1;5,5)$;
- $(2,6;4,5)$, $(2,6;5,5)$, $(2,6;5,6)$;
- $(2,7;5,5)$, $(2,7;5,6)$.

Схема операций усечений

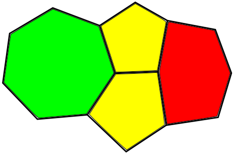


- Каждая операция увеличивает число двумерных граней на один, поэтому число операций в последовательности равно p_6.
- Последовательность операций определена не однозначно.
- Первая операция всегда является $(1; 5, 5)$-усечением;
- Последняя операция может быть $(2, 6; 4, 5)$-, $(2, 6; 5, 5)$-, или $(2, 7; 5, 5)$-усечением.
- Операции $(1; 4, 5)$- и $(1; 5, 5)$-усечения могут принимать следующий вид:
  - $(1, 5, 5; 4, 5)$, $(1, 5, 6; 4, 5)$, $(1, 6, 6; 4, 5)$;
  - $(1, 5, 5; 5, 5)$, $(1, 5, 6; 5, 5)$, $(1, 6, 6; 5, 5)$.
- Можно обойтись без операции $(1, 6, 6; 4, 5)$-усечения.

Построение комбинаторных фуллеренов

Введём три семейства простых многогранников:

- $\mathfrak{F}_{-1}$ – фуллерены с особенностью – четырёхугольной гранью;
- $\mathfrak{F}_0$ – фуллерены;
- $\mathfrak{F}_1$ – фуллерены с особенностью – семиугольной гранью, смежной с пятиугольником, причём либо многогранник содержит фрагмент



либо из любых двух смежных пятиугольников ровно один смежен с семиугольником.

Теорема (Бухштабер-Ероховец, 2016)

Каждый многогранник из $\mathfrak{F} = \mathfrak{F}_{-1} \cup \mathfrak{F}_0 \cup \mathfrak{F}_1$ комбинаторно эквивалентен многограннику, получаемому из додекаэдра при помощи последовательности $(1;4,5)$-, $(1;5,5)$-, $(2,6;4,5)$-, $(2,6;5,5)$-, $(2,6;5,6)$-, $(2,7;5,5)$- и $(2,7;5,6)$-усечений, так что каждый промежуточный многогранник принадлежит $\mathfrak{F}$. Более точно,

- Каждый многогранник из $\mathfrak{F}_{-1}$ комбинаторно получается из фуллерена последовательностью усечений, из которых первое – $(1;5,5)$, а остальные – $(1;4,5)$;
- Каждый многогранник из $\mathfrak{F}_1$ комбинаторно получается из фуллерена последовательностью усечений, из которых первое – $(2,6;5,6)$, а остальные – $(2,7;5,6)$;
- Каждый фуллерен комбинаторно получается из фуллерена или многогранника из $\mathfrak{F}_{-1}$ или $\mathfrak{F}_1$ при помощи $(2,6;5,5)$-, $(2,6;4,5)$- или $(2,7;5,5)$-усечения соответственно.

Направленный граф связей

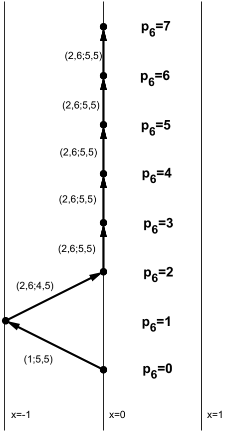
Первый узел графа соответствует додекаэдру.
Все последующие узлы соответствуют получаемым многогранникам. Ребро соединяет узлы, такие что многогранник, соответствующий концу ребра, получается одной из семи указанных операций путём модификации фрагмента многогранника, соответствующего началу ребра.

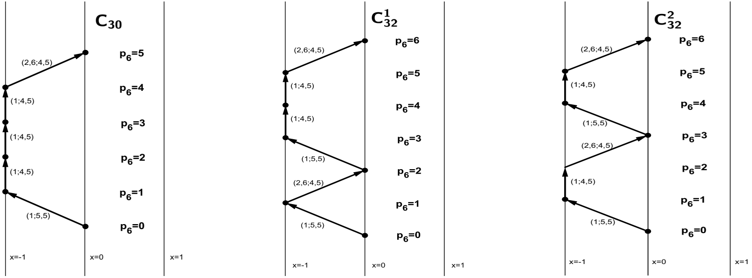
Важное следствие:

> Начало любого ребра в графе связей соответствует модификации одного из 7 фрагментов, каждый из которых содержит пятиугольник.

Граф связей (по работе Н.В.Прудниковой)

Имеется 20 комбинаторных типов фуллеренов с $p_6 \leq 7$.
15 из них получаются из «бочки» C_{24} при помощи операции Эндо-Крото ($(2, 6; 5, 5)$-усечения).





a) b) c)

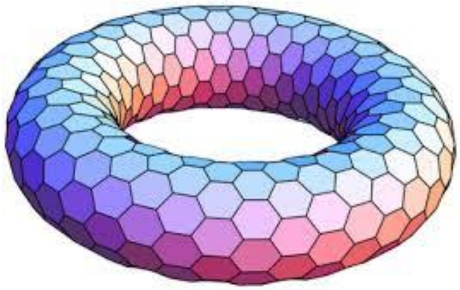
Направленный путь из додекаэдра, состоящий их операций:

a) $C_{20} \mapsto (1;5,5) \mapsto (1;4,5) \mapsto (1;4,5) \mapsto (1;4,5) \mapsto (2,6;4,5) \mapsto C_{30}$

b) $C_{20} \mapsto (1;5,5) \mapsto (2,6;4,5) \mapsto (1;5,5) \mapsto (1;4,5) \mapsto (1;4,5) \mapsto (2,6;4,5) \mapsto C^1_{32}$

c) $C_{20} \mapsto (1;5,5) \mapsto (1;4,5) \mapsto (2,6;4,5) \mapsto (1;5,5) \mapsto (1;4,5) \mapsto (2,6;4,5) \mapsto C^2_{32}$

Разбиение компактной двумерной поверхности M^2 (замкнутой или с краем) на многоугольники называется простым, если пересечение любых двух многоугольников либо пусто, либо является их общим ребром.



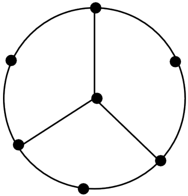
Простые разбиения двумерных поверхностей

Вершина простого разбиения имеет валентность

- 3, если это внутренняя точка поверхности;
- 2 или 3, если это точка границы.

Пусть

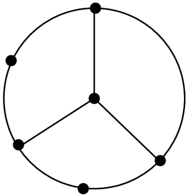
- p_k – число k-угольников в простом разбиении,
- μ_i – число граничных вершин валентности $i = 2, 3$.



$p_4 = 3$

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

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



$p_3 = 1, p_4 = 2$

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

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

Простые разбиения двумерных поверхностей

Для любого простого разбиения поверхности M^2

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

где $\delta = \mu_2 - \mu_3$

- Не существует простого разбиения замкнутой поверхности на шестиугольники, если $\chi(M^2) \neq 0$.
- Существуют простые разбиения тора и бутылки Клейна на шестиугольники.

Простые разбиения диска на 5- и 6-угольники

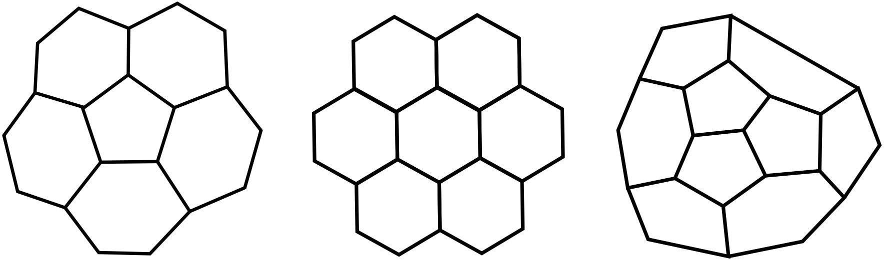
Диском D^2 называется двумерная поверхность, гомеоморфная $\{z \in \mathbb{C} \colon |z| \leqslant 1\}$.

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

$$p_5 = 6 - \delta \Longrightarrow -\infty < \delta \leqslant 6$$

- $p_5 = 0 \Leftrightarrow \delta = 6$; $p_5 = 6 \Leftrightarrow \delta = 0$.
- Существуют простые разбиения диска D^2 для любых значений p_5 и p_6.

Реализация простых разбиений диска



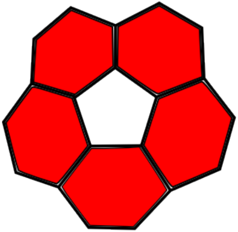
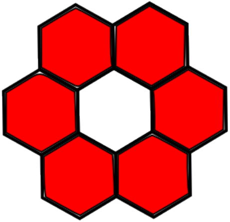
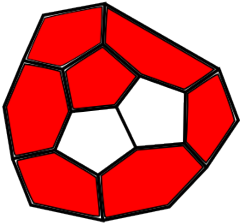
$p_5 = 1, p_6 = 5, \delta = 5$; $p_5 = 0, p_6 = 7, \delta = 6$; $p_5 = 7, p_6 = 2, \delta = -1$

Простые разбиения цилиндра на 5- и 6-угольники

Для цилиндра $\chi(M^2) = 0$ и $p_5 = -\delta \Longrightarrow \delta \leqslant 0.$

Существуют простые разбиения цилиндра для любых p_5, p_6, таких что

$$p_5 + p_6 \geqslant 3 \Longrightarrow p_6 \geqslant 3 + \delta.$$

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

Для простого разбиения цилиндра на шестиугольники:

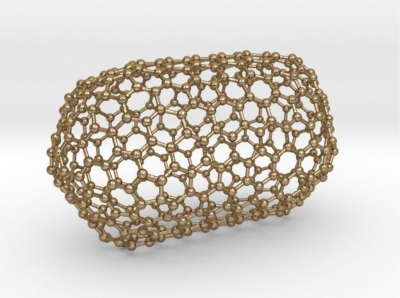
- $\mu_2 = \mu_3$;
- $f_0 = \mu_2 + 2p_6$, $f_1 = \mu_2 + 3p_6$, $f_2 = p_6$.

Приложения к нанотрубкам

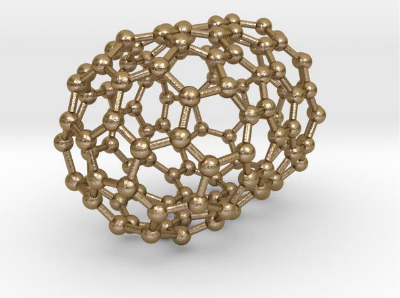
На каждой компоненте границы конечной нанотрубки число 2-валентных вершин равно числу 3-валентных вершин.

Следствие

Каждый диск, используемый для получения закрытой нанотрубки, содержит ровно 6 пятиугольников.



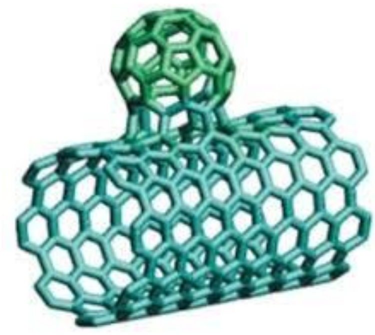
закрытая $(10, 10)$-нанотрубка

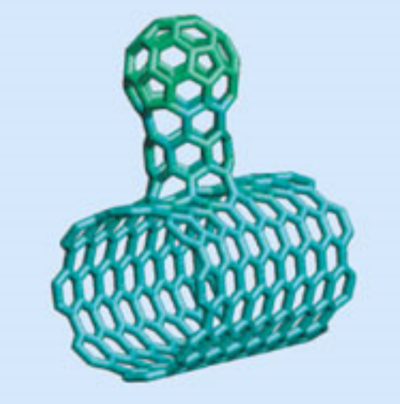


закрытая $(10, 0)$-нанотрубка

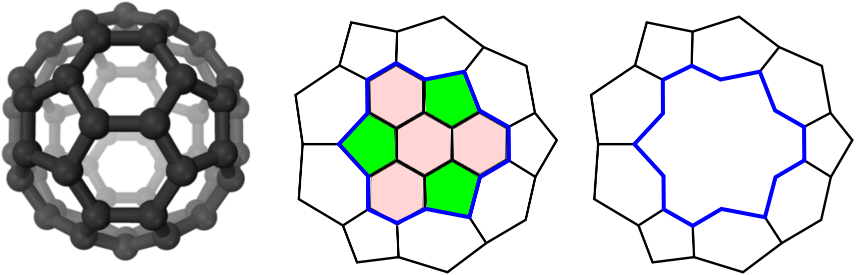
Углеродные нанопочки

Нанопочка являестя соединением фуллерена и нанотрубки. Нанотрубки химически нейтральны, поэтому их трудно сочетать с другими материалами. Фуллерены химически активны и дают хорошие условия для этого.





Конструкция нанопочки



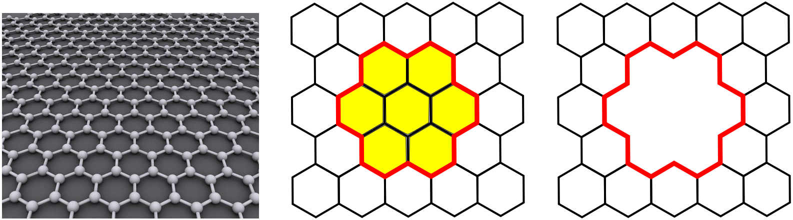
a) b) c)

a) – бакминстерфуллерен C_{60}

b) – диск на его поверхности, разбитый на 3 пятиугольника и 4 шестиугольника.

c) – вырезание.

Конструкция нанопочки



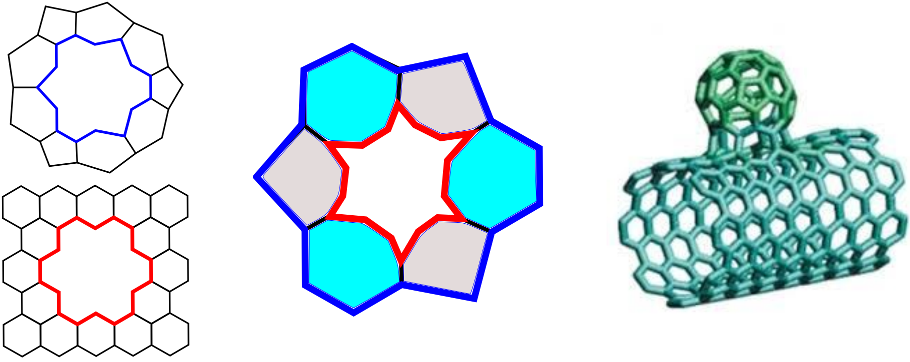
d) e) f)

d) – лист графена;

e) – диск на его поверхности, разбитый на 7 шестиугольников.

f) – вырезание.

Конструкция нанопочки



g) h) i)

g) – C_{60} и лист графена с дырками;

h) – цилиндр, разбитый на 3 семиугольника и 3 восьмиугольника, с граничными компонентами, совместимыми с граничными компонентами на рисунке g).

i) – нанопочка.

Результат

Построена нанопочка N с

- 9 пятиугольниками;
- 3 семиугольниками;
- 3 восьмиугольниками;
- $\chi(\mathrm{N}) = 0$.

Эти числа удовлетворяют уравнению

$$p_5 = p_7 + 2p_8$$

Литература

V. M. Buchstaber, N. Yu. Erokhovets,
Construction of fullerenes
arXiv: 1510.02948v1[math.CO], 10 Oct 2015.

В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец,
Усечения простых многогранников и приложения
Труды МИАН им. В.А.Стеклова, 289(2015): 115–144.

М.Деза, М.Дютур Сикирич, М.И. Штогрин,
Фуллерены и диск-фуллерены
УМН, 68:4(412) (2013), 69–128.

Н.Ю. Ероховец,
k-пояса и рёберные циклы трёхмерных простых многогранников с не более чем шестиугольными гранями
Дальневост. матем. журн., 15:2 (2015), 197–213.

Е.А. Кац,
Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры
URSS, Москва, 2009.

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

Н.В. Прудникова,
Конструкции фуллеренов с числом шестиугольников не больше 7
Дальневост. матем. журн., 15:2 (2015), 247–263.