Правильные раскраски карт и комбинаторика наноструктур

В. М. Бухштабер

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

Чеченский государственный университет
г. Грозный
31 октября 2016 г.

Темы

1. Наноструктуры и их математические модели.
2. Проблема 4-красок. Постановка проблемы, история и результаты.
3. Классические и современные результаты о комбинаторике многогранников.
4. Приложения торической топологии к проблеме комбинаторной классификации наноструктур.
5. Конструкции наноструктур методами комбинаторной геометрии.

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

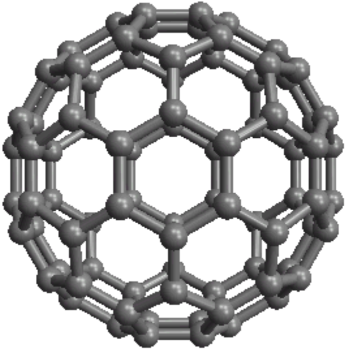
- фуллеренах,
- нанотрубках,
- нанопочках,

которые представляют собой молекулы, состоящие исключительно из атомов углерода.

Фуллерены

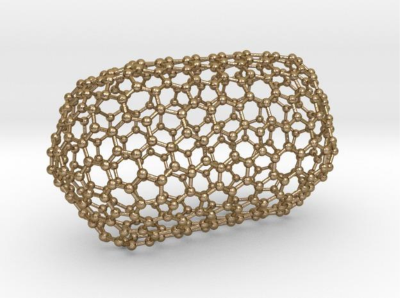
Фуллереном называется молекула углерода, которая топологически имеет форму сферы и каждый атом которой принадлежит ровно трём углеродным кольцам, состоящим из пяти и шести атомов.

Фуллерен C_{60}

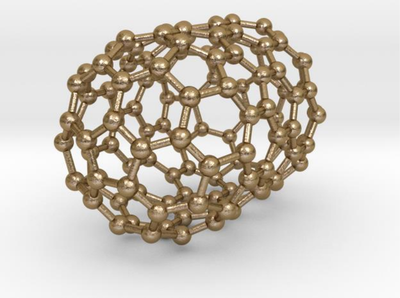


Фуллерен C_{80}

Закрытые нанотрубки



закрытая $(10, 10)$-нанотрубка



закрытая $(10, 0)$-нанотрубка

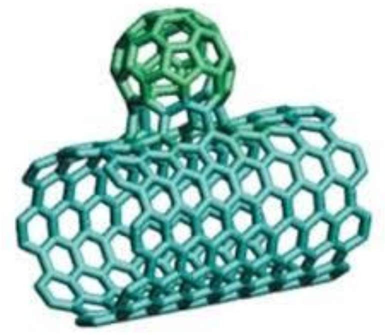
Диаметр (n, m)-нанотрубки вычисляется по формуле

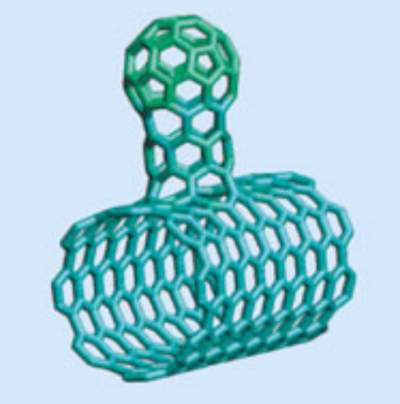
$$d = q(n^2 + m^2 + nm)^{\frac{1}{2}},$$

где $q = 0.0783$ нанометров. 1 нанометр равен 10^{-9} метров.

Углеродные нанопочки

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





Математические модели

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

Математические модели

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

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

Математические модели

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.

Математические модели

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 закрытой нанотрубки является полученный из нанотрубки конечный цилиндр, границы которого заклеены фуллереновыми шапочками.

Математические результаты

С комбинаторно-топологической точки зрения закрытые нанотрубки представляют собой частный случай фуллеренов.

Математические результаты

С комбинаторно-топологической точки зрения закрытые 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.

Математические результаты

С комбинаторно-топологической точки зрения закрытые 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.

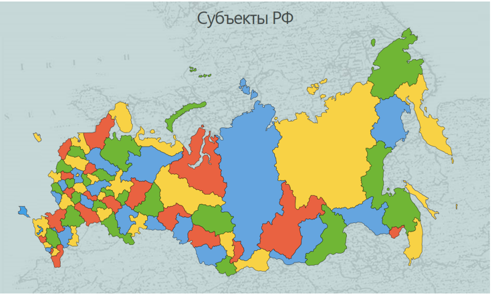
Методами выпуклой геометрии нетрудно показать, что число шестиугольников p_6 может быть любым, за исключением $p_6 = 1$.

Математические результаты

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

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

- Картой области на плоскости будем называть разбиение области на подобласти, каждая из которых имеет ненулевую площадь.
- Раскраска карты называется правильной, если любые две области, имеющие границу ненулевой длины, раскрашены в разные цвета.



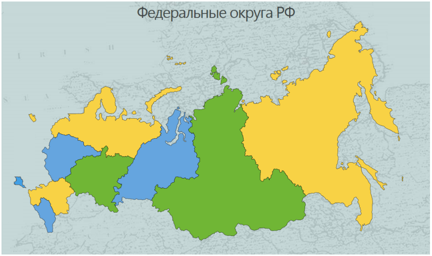
Карта на сфере

Картой на двумерной сфере будем называть разбиение ее поверхности на области, каждая из которых имеет ненулевую площадь.

Решение проблемы правильной раскраски любой области на плоскости в k цветов дает решение аналогичной проблемы раскраски области на двумерной сфере.

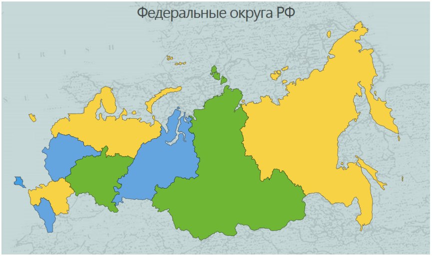
Задача

Дана карта на сфере. Найдите условие, при котором ее можно правильно раскрасить в три цвета.



Задача

Дана карта на сфере. Найдите условие, при котором ее можно правильно раскрасить в три цвета.



Задача

Докажите, что любую карту на сфере можно правильно раскрасить в пять цветов.

Проблема четырех красок

Теорема

Любую карту на плоскости можно правильно раскрасить в четыре цвета.

Проблема четырех красок

Теорема

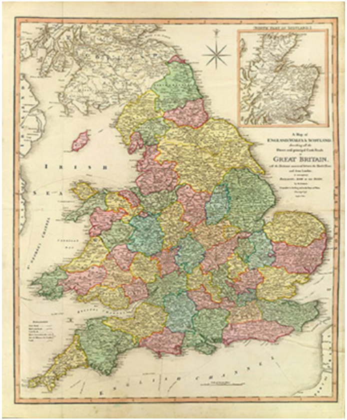
Любую карту на плоскости можно правильно раскрасить в четыре цвета.

Следствие

Любую карту на двумерной сфере можно правильно раскрасить в четыре цвета.

История проблемы

Проблема четырех красок была впервые сформулирована 23 октября 1852 года математиком и ботаником Франциском Гутри (Francis Guthrie), который заметил, что ему удалось раскрасить карту графств Англии только в четыре цвета так, что никакие два графства, имеющие общий отрезок границы, не были раскрашены в один цвет.



История проблемы

Проблема четырех красок получила широкое признание в 1878 году, когда знаменитый английский математик Артур Кэли (Arthur Cayley) выступил на заседании Лондонского математического общества с докладом, в котором он заявил, что ему не удалось её решить.

Проблема была решена в 1976 математиками Кеннетом Аппелем (Kenneth Appel) и Вольфгангом Хакеном (Wolfgang Haken).

Это была первая крупная проблема, решение которой существенно использовало возможности компьютера.

Ссылки по проблеме четырёх красок

Часть информации и иллюстрации к проблеме взяты с сайта Математических Этюдов:
http://www.etudes.ru/ru/sketches/#iarea.

Ссылки по проблеме четырёх красок

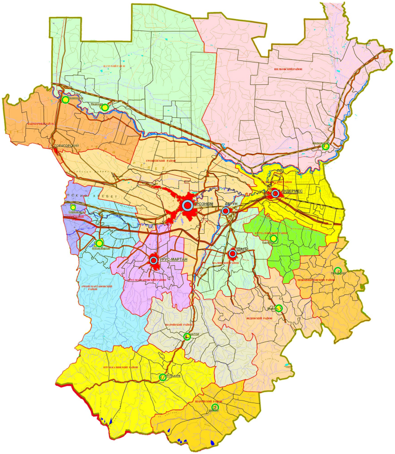
Часть информации и иллюстрации к проблеме взяты с сайта Математических Этюдов:
http://www.etudes.ru/ru/sketches/#iarea.

Драматическая история решения проблемы четырёх красок и проверки правильности доказательства изложены в книге:

Robert A. Wilson, «Graphs, Colourings and the Four-Colour Theorem», 24 January 2002, Oxford university press.

В этой книге описаны различные подходы к решению проблемы и проанализированы используемые логико-компьютерные методы.

Карта Чеченской республики



Задача

Найти раскраску карты ЧР в четыре цвета.

Трёхмерные выпуклые многогранники

Выпуклым трёхмерным многогранником называется ограниченное множество вида

$$P = \{x \in \mathbb{R}^3 \colon a_i x + b_i \geqslant 0, i = 1, \dots, m\}$$

Будем считать, что такое описание неизбыточно, т. е. удаление любого неравенства изменяет множество P. В этом случае каждая гиперплоскость $\mathcal{H}_i = \{x \in \mathbb{R}^3 \colon a_i x + b_i = 0\}$ определяет двумерную грань $F_i = P \cap \mathcal{H}_i$.

Мы будем отождествлять комбинаторно эквивалентные многогранники.

Формула Эйлера

Пусть f_0 — число вершин, f_1 — число рёбер и f_2 — число двумерных граней трёхмерного многогранника.

Имеет место формула Эйлера (1707–1783):

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2$$

Реализация f-вектора

Теорема (Эрнст Штейниц, 1906 г.)

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

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

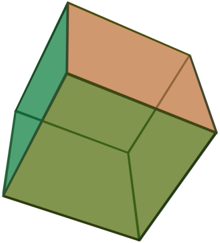
Проблема

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

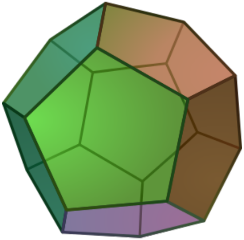
Простые многогранники

Определение

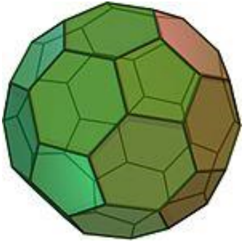
Трёхмерный многогранник называется простым, если в каждой его вершине сходится ровно три ребра.



Куб



Додекаэдр



Усечённый икосаэдр

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

Следствия формулы Эйлера для простых мн-ков

Пусть p_k — число k-угольных граней многогранника.

Для любого простого многогранника P выполняется соотношение между числами k-угольников

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

Следствия формулы Эйлера для простых мн-ков

Пусть p_k — число k-угольных граней многогранника.

Для любого простого многогранника P выполняется соотношение между числами k-угольников

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

Следствие

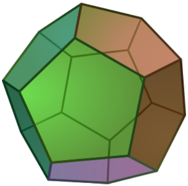
- Если $p_k = 0$ для $k = 3, 4$, то $p_5 = 12 + \sum_{k \geqslant 7}(k-6)p_k$.
- Если $p_k = 0$ для $k \neq 5, 6$, то $p_5 = 12$.
- Не существует простого трёхмерного многогранника только с шестиугольными гранями.
- $3p_3 + 2p_4 + p_5 \geqslant 12$.

Определение (Виктор Шлегель, 1843–1905)

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.

Примеры диаграмм Шлегеля



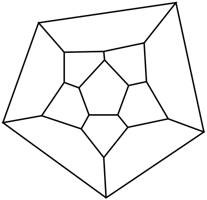
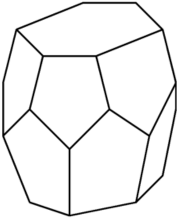


Диаграмма Шлегеля додекаэдра



Фуллерен «бочка»

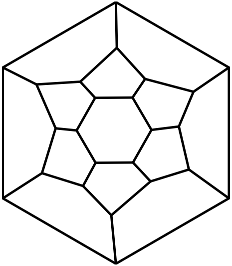


Диаграмма Шлегеля «бочки»

Двойственность Гейла

Набор векторов в $\mathbb{R}^n$ имеет ранг r, если порожденное ими линейное подпространство имеет размерность r.

Пусть $\mathcal{A} = \{a_1, \ldots, a_m\} \subset \mathbb{R}^n$ набор ранга n и $\mathcal{G} = \{\gamma_1, \ldots, \gamma_m\} \subset \mathbb{R}^{m-n}$ набор ранга $m - n$.

Запишем набор $\mathcal{A}$ в виде $(n \times m)$-матрицы A и набор $\mathcal{G}$ в виде $((m-n) \times m)$-матрицы Γ.

Определение

Наборы $\mathcal{A}$ и $\mathcal{G}$ такие, что

$$\Gamma A^{\top} = 0,$$

называются двойственными по Гейлу.

Каждый из наборов $\mathcal{A}$ и $\mathcal{G}$ определяет двойственный ему набор с точностью до линейного изоморфизма пространства $\mathbb{R}^{m-n}$ и $\mathbb{R}^n$ соответственно.

От многогранников к многообразиям

Конструкция (В.М. Бухштабер, Т.Е. Панов, N. Ray)

Представление простого многогранника

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

задает момент-угол многообразие

$$\mathcal{Z}_P = \{z \in \mathbb{C}^m \ : \ \sum_{i=1}^{m} (|z_i|^2 - b_i)\gamma_i = 0\},$$

где набор $\mathcal{G} = \{\gamma_i\}$ из m векторов размерности $m - n$ двойственен по Гейлу набору $\mathcal{A} = \{a_i\}$ из m векторов размерности n.

Действие стандартного тора T^m на $\mathbb{C}^m$ задаёт каноническое действие тора на $\mathcal{Z}_P$.

Теорема

- Каждому фуллерену $P \subset \mathbb{R}^3$ соответствует момент-угол многообразие $\mathcal{Z}_P \subset \mathbb{C}^m$ размерности $(15 + p_6)$ с каноническим действием стандартного тора $\mathbb{T}^m$, где $m = 12 + p_6$.
- Каждой раскраске Λ карты ∂P в четыре цвета, где P – фуллерен, соответствует тор $K \subset \mathbb{T}^m$, $\dim K = 9 + p_6$, свободно действующий на многообразии $\mathcal{Z}_P$, и шестимерное квазиторическое многообразие

$$M(P, \Lambda) = \mathcal{Z}_P / K.$$

Из теоремы о четырёх красках следует, что каждый фуллерен имеет как минимум одно квазиторическое многообразие.

От фуллеренов к многообразиям

Теорема (В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец, Т.Е. Панов, M. Masuda (Japan), S. Park (South Korea), 2016)

Фуллерен P_1 с раскраской Λ_1 комбинаторно эквивалентен фуллерену P_2 с раскраской Λ_2 тогда и только тогда, когда существует диффеоморфизм многообразий $M(P_1, \Lambda_1)$ и $M(P_2, \Lambda_2)$.

См. Victor Buchstaber, Nikolay Erokhovets, Mikiya Masuda, Taras Panov and Seonjeong Park
«Cohomological rigidity of manifolds defines by right-angled 3-dimensional polytopes».
ArXiv: 1610.07575v1 [math.AT] 24 Oct 2016.

Бакминстерфуллерен C_{60} был открыт химиками-теоретиками Робертом Кёрлом (Robert Curl), Гарольдом Крото (Harold Kroto) и Ричардом Смолли (Richard Smalley)

Биосфера Фуллера
Павильон США, Экспо-67
Монреаль, Канада

в 1985 (Нобелевская премия 1996 года по химии «за открытие фуллеренов»).

Фуллерены названы в честь Ричарда Бакминстера Фуллера (1895-1983) — знаменитого американского архитектора и философа.

Фундаментальный принцип

Р. Бакминстер Фуллер в 1954 году запатентовал архитектурную конструкцию в форме многогранного купола для перекрытия больших площадей.

Купол был составлен из пятиугольников и шестиугольников.

Принцип

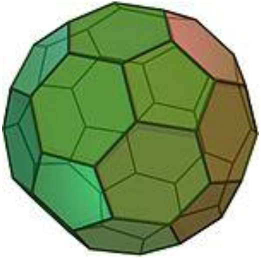
Минимальная поверхность при заданном объёме.

Определение

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

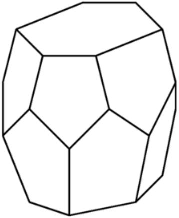
Одно из 13 архимедовых тел

Фуллерен C_{60}



Усечённый икосаэдр

Для любого фуллерена $p_5 = 12$,
Существуют фуллерены с любым значением $p_6 \neq 1$.



Фуллерен «бочка» с $p_6 = 2$

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

$$f_0(C_{60}) = 60, \quad p_6(C_{60}) = 20.$$

Комбинаторные типы 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 (G. Brinkmann, A.W.M. Dress, 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

$F(20) = 1812$ — Бакминстерфуллерен один из 1812 комбинаторных изомеров C_{60}

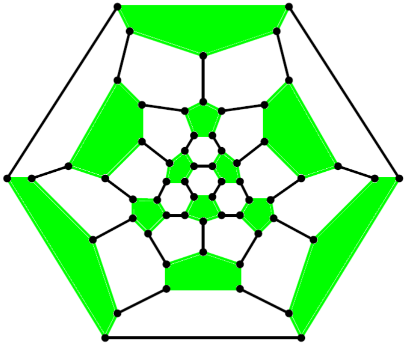
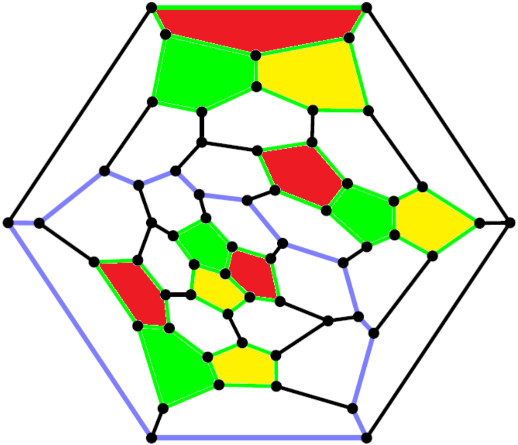


Диаграмма Шлегеля Бакминстерфуллерена

Диаграмма Шлегеля одного из изомеров C_{60}



Синий рёберный путь (зигзаг) разрезает фуллерен на две части, в каждой из которых по 6 пятиугольников.

IPR-фуллерены

Определение

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

- Пусть P – IPR-фуллерен. Тогда $p_6 \geqslant 20$.

Бакминстерфуллерен C_{60} – единственный IPR-фуллерен с $p_6 = 20$.

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

Гипотеза (G. Brinkmann, A.W.M. Dress)

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

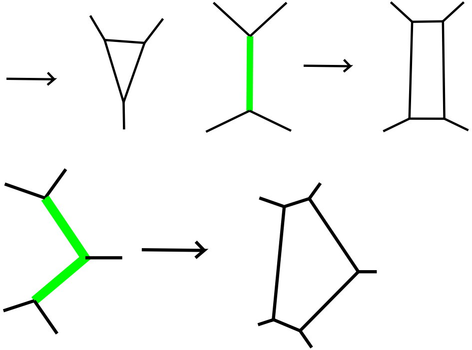
Гипотеза (J. Cioslowski)

Выполнено неравенство $F(p_6 - 1) \leqslant F_{IPR}(p_6 + 24) \leqslant F(p_6)$.

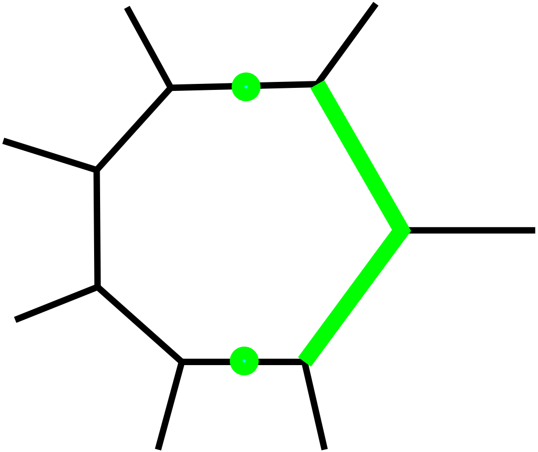
p_6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...	73
$F(p_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6	15	...	36.798.433
$F_{IPR}(p_6 + 24)$	0	1	1	1	2	5	7	9	24	...	36.173.081

Теорема (V. Eberhard (1891), M. Brückner (1900))

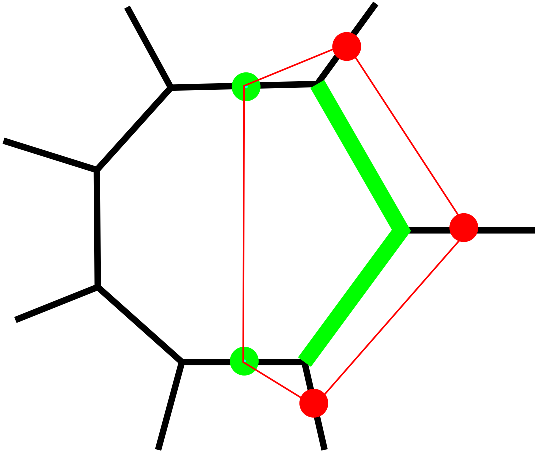
Каждый трёхмерный простой многогранник комбинаторно эквивалентен многограннику, полученному из тетраэдра последовательностью срезок вершин, срезок рёбер и $(2,k)$-усечений.



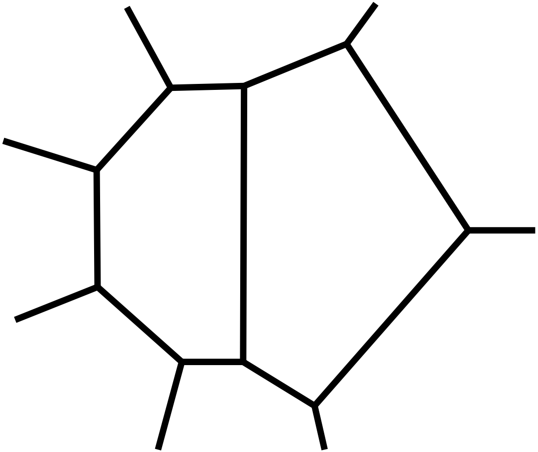
$(2,7)$-усечение



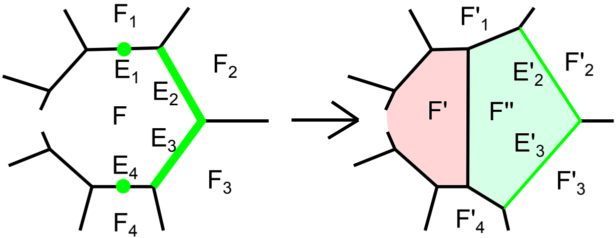
$(2, 7)$-усечение



$(2,7)$-усечение

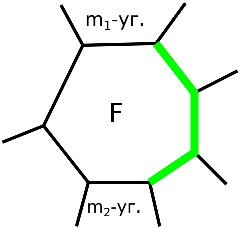


Свойства $(2, k)$-усечения



$(2, k)$-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 и F_3 не изменяется.



Если грань F смежна с m_1 и m_2-угольниками по рёбрам, соседним со срезаемыми, то назовём соответствующую операцию $(s, k; m_1, m_2)$-усечением.

Для $s = 1$ срезаемое ребро принадлежит двум граням, поэтому будем называть соответствующую операцию просто $(1; m_1, m_2)$-усечением.

Построение комбинаторных фуллеренов

Теорема (В.М. Бухштабер – Н.Ю. Ероховец, 2015)

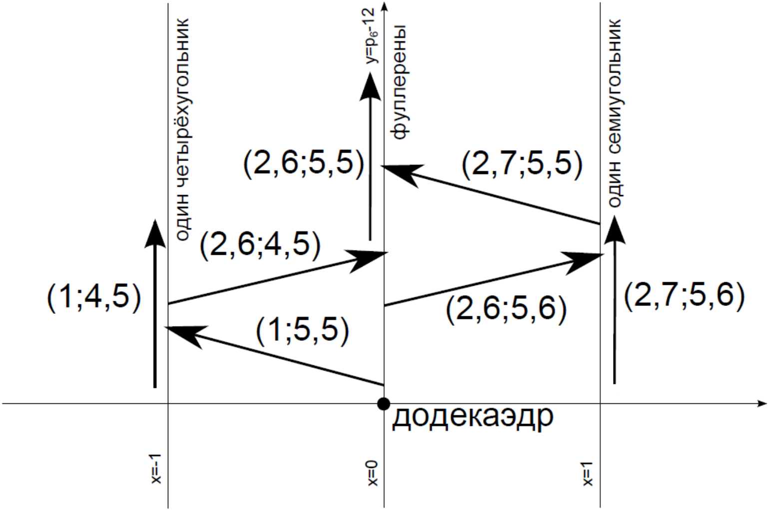
Каждый фуллерен комбинаторно эквивалентен многограннику, получаемому из додекаэдра при помощи последовательности усечений из следующего списка:

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

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

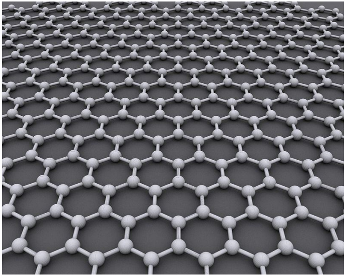
См. V. M. Buchstaber, N. Yu. Erokhovets.
«Fullerenes, Polytopes and Toric Topology»,
Lecture note series IMS, National University of Singapore, to appear; arXiv: 1609.02949

Схема операций усечений



Графен

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

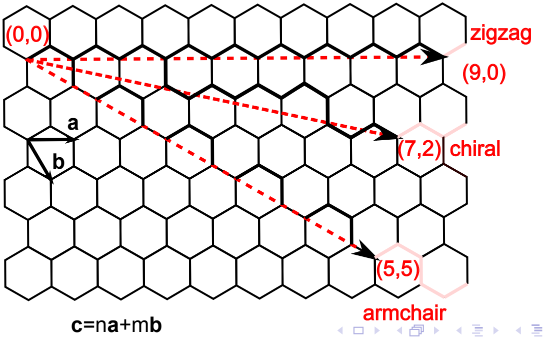


Схематическое изображение графена. Узлы – атомы углерода, рёбра – связи, удерживающие атомы в листе графена. С математической точки зрения графен представляет собой замощение двумерной плоскости $\mathbb{R}^2$ правильными шестиугольниками.

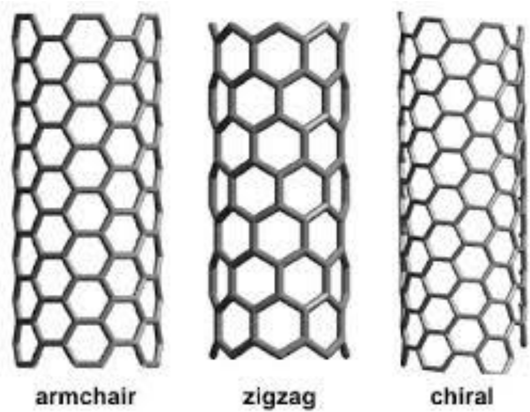
Углеродные нанотрубки

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

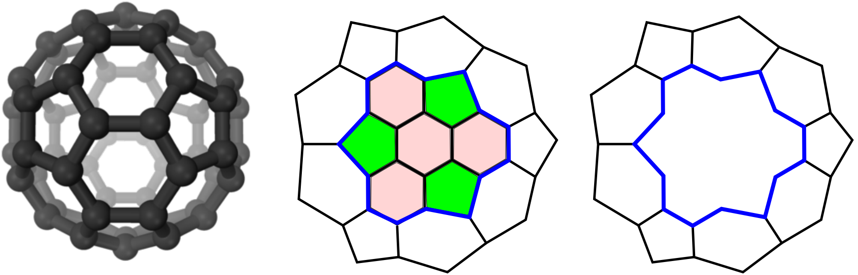
Сдвиг на вектор c переводит замощение в себя. Узлы, отличающиеся на сдвиг, отождествляются при сворачивании.



«зигзаг» (zigzag) – (n, 0)-нанотрубки,
«зубчатые» (armchair) («кресло») – (n, n)-нанотрубки,
обладают зеркальной симметрией. В остальных случаях (n, m)-нанотрубки являются хиральными (chiral), они не совпадают со своим образом при зеркальной симметрии.



Конструкция нанопочки



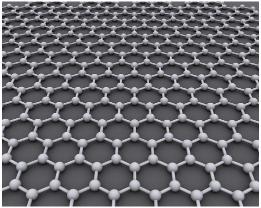
a) b) c)

a) – бакминстерфуллерен C_{60}

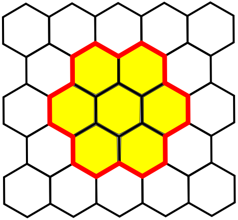
b) – диск на его поверхности, разбитый на 3 пятиугольника и 4 шестиугольника.

c) – вырезание.

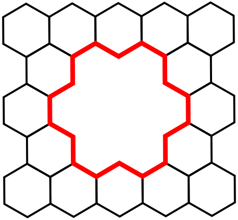
Конструкция нанопочки



d)



e)



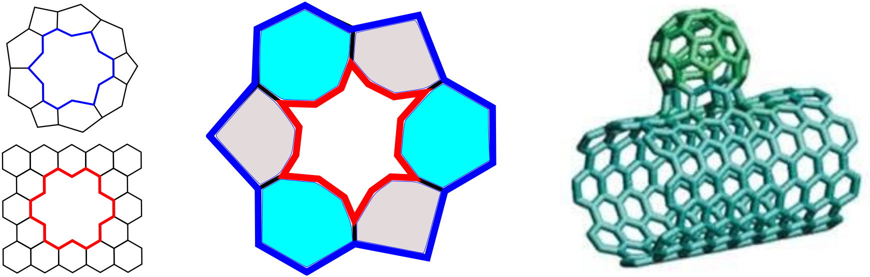
f)

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 получается отождествлением одноцветных границ.

Результат

Построена нанопочка N с

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

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.

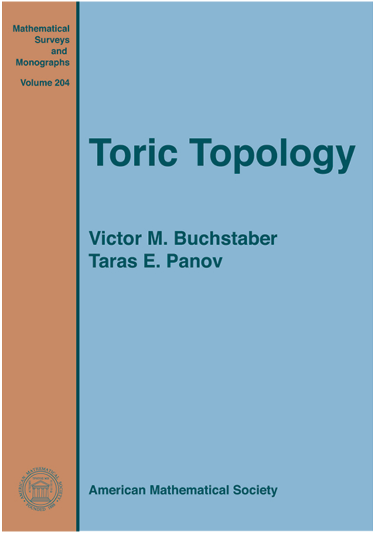
Н.Ю. Ероховец,
k-пояса и рёберные циклы трёхмерных простых многогранников с не более чем шестиугольными гранями
Дальневост. матем. журн., 15:2 (2015), 197–213.

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

Buchstaber, Victor, Erokhovets, Nikolay
Fullerenes, Polytopes and Toric Topology
Lecture note series IMS, National University of Singapore, to appear; arXiv: 1609.02949

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.


Mathematical Surveys and Monographs
Volume 204
Toric Topology
Victor M. Buchstaber
Taras E. Panov
American Mathematical Society

Содержание.

Благодарности

Я благодарю

Тараса Евгеньевича Панова,
Николая Юрьевича Ероховца,
Наталью Викторовну Прудникову

за плодотворное научное сотрудничество.

Благодарю Якова Александровича Верёвкина
за помощь в подготовке слайдов настоящего доклада.

Приглашаю Вас в удивительный мир математических наноструктур.

Приглашаю Вас в удивительный мир математических наноструктур.

Спасибо за внимание!