Выпуклые многогранники, фуллерены и геометрия Лобачевского

В.М. Бухштабер

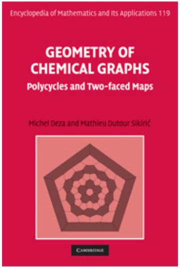
МИАН имени В.А.Стеклова,
МГУ имени М.В.Ломоносова,

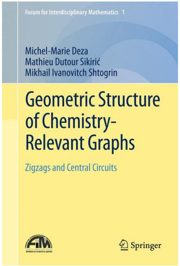
XVI Международная конференция
«Алгебра, теория чисел и дискретная геометрия: современные проблемы, приложения и проблемы истории», посвященная 80-летию со дня рождения профессора Мишеля Деза.
ТГПУ имени Л.Н.Толстого
13-18 мая, 2019

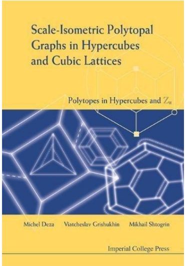
- Первая часть доклада посвящена классическим и современным результатам математики, которые оказались в центре внимания физиков и химиков в связи с Нобелевской премией по химии 1996 г. (Р. Кёрл (R. F. Kurl), Х. Крото (H. Kroto), Р. Смолли (R. E. Smalley)) «за открытие фуллеренов».
- Вторая часть доклада посвящена прямоугольным многогранникам в пространстве Лобачевского, в том числе задачам, пришедшим из математической теории фуллеренов.

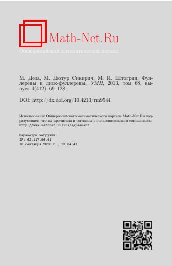
Слайды подготовлены совместно с Н.Ю.Ероховцом.
Все необходимые понятия будут введены по ходу изложения.

Мишель Деза и фуллерены








Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

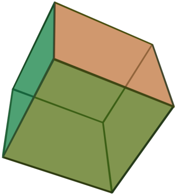
М. Деза, М. Дютур Сикирич, М. И. Штогрин, Фуллерены и диск-фуллерены, *УМН*, 2013, том 68, выпуск 4(412), 69–128

DOI: http://dx.doi.org/10.4213/rm9544

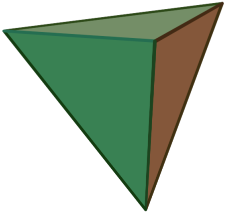
Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением http://www.mathnet.ru/rus/agreement

Параметры загрузки:
IP: 62.117.96.61
18 сентября 2016 г., 13:04:41

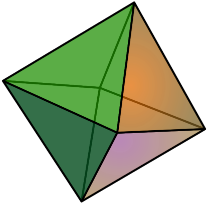
Платоновы тела



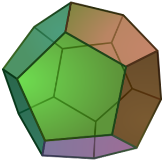
Куб



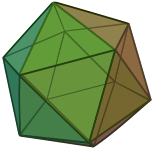
Тетраэдр



Октаэдр



Додекаэдр



Икосаэдр

Только 5 тел обладают следующими свойствами:

- Выпуклые многогранники.
- Грани – одинаковые правильные многоугольники.
- Для любой пары вершин существует симметрия многогранника, переводящая одну вершину другую.

Пирит

Куб серного колчедана – пирит.
Таким он вырос в природе. Его никто не обрабатывал.

Формула Эйлера (1707-1783)

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

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2$$

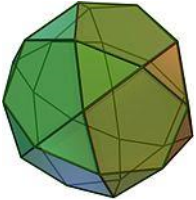
	f_0	f_1	f_2
Тетраэдр	4	6	4
Куб	8	12	6
Октаэдр	6	12	8
Додекаэдр	20	30	12
Икосаэдр	12	30	20

- Выпуклые многогранники.
- Грани – правильные многоугольники двух или более типов.
- Для любой пары вершин существует симметрия многогранника, переводящая одну вершину другую.

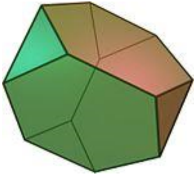
Имеется 13 тел с точностью до движений пространства. Курносый куб и курносый додекаэдр имеют две версии (левую и правую), которые получаются одна из другой отражением относительно плоскости и не могут быть совмещены движением, сохраняющим ориентацию пространства.

Архимедовы тела

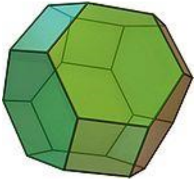
Кубооктаэдр
$(12, 24, 14)$



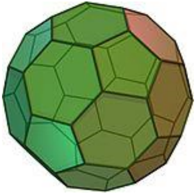
Икосододекаэдр
$(30, 60, 32)$



Усечённый тетраэдр
$(12, 18, 8)$

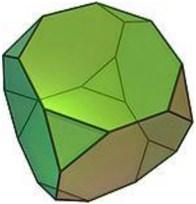


Усечённый октаэдр
$(24, 36, 14)$

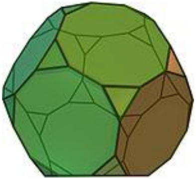


Усечённый икосаэдр
$(60, 90, 32)$

Архимедовы тела

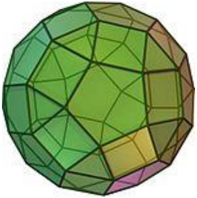


Усечённый куб
$(24, 36, 14)$



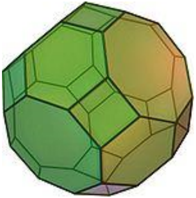
Усечённый додекаэдр
$(60, 90, 32)$

Ромбокубоктаэдр
$(24, 48, 26)$

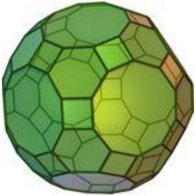


Ромбоикосододекаэдр
$(60, 120, 62)$

Архимедовы тела



Ромбоусечённый кубооктаэдр $(48, 72, 26)$



Ромбоусечённый икосододекаэдр $(120, 180, 62)$

Курносый куб $(24, 60, 38)$

Курносый додекаэдр $(60, 150, 92)$

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.

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.

Граф G(P) однозначно определяет комбинаторику трёхмерного многогранника P.

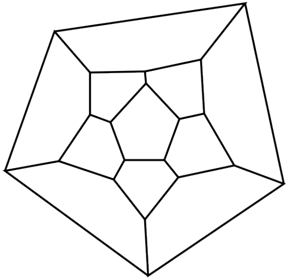


Диаграмма Шлегеля додекаэдра

Плоскую реализацию графа трёхмерного многогранника даёт диаграмма Шлегеля.

Диаграммы Шлегеля

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.

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.».

Фуллерены

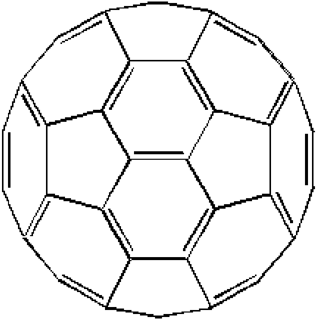
Атомы углерода, испарившиеся с разогретой поверхности графита, соединяясь друг с другом, могут образовывать молекулы, представляющие собой выпуклые многогранники. В этих молекулах атомы углерода расположены в вершинах правильных шести- и пятиугольников.

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.

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.

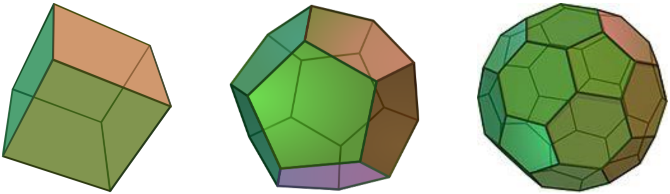
$$(f_0, f_1, f_2) = (60, 90, 32), \quad (p_5, p_6) = (12, 20)$$

Простые многогранники

Определение

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

Непустое пересечение двух граней простого многогранника является их общим ребром.



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 $p_5 = 12$.

Теорема (Эберхард, 1891)

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

Математические фуллерены

Определение

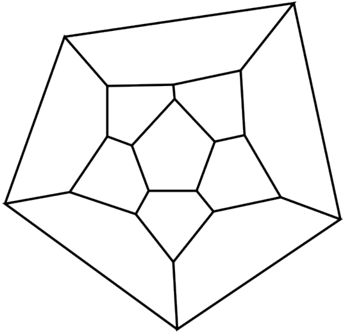
(Математическим) фуллереном называется простой трёхмерный многогранник, у которого все двумерные грани являются пятиугольниками или шестиугольниками.

У любого фуллерена $p_5 = 12$,

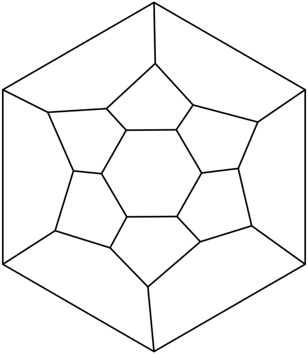
$$f_0 = 20 + 2p_6, \quad f_1 = 30 + 3p_6, \quad f_2 = 12 + p_6$$

- Единственный фуллерен без шестиугольников – додекаэдр.
- Не существует фуллерена с одним шестиугольником.

Диаграммы Шлегеля фуллеренов

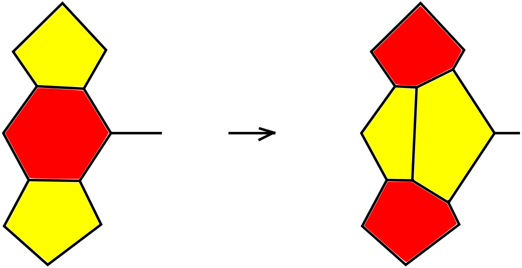


Додекаэдр (5-бочка)
$p_6 = 0$



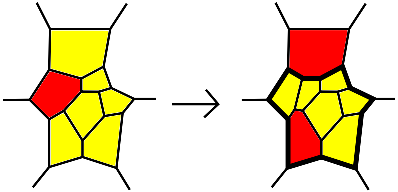
6-бочка
$p_6 = 2$

Перестройка Эндо-Крото



- При помощи последовательности перестроек Эндо-Крото из 6-бочки можно получить фуллерен с любым $p_6 = k$, $k \geqslant 2$;
- фуллерен, полученный в результате такой перестройки, содержит смежные пятиугольники. Поэтому он не может быть бакминстерфуллереном.

Серия фуллеренов, получаемых перестройкой Эндо-Крото



1. рассмотрим фрагмент S фуллерена 6-бочки, изображённый слева;
2. сделаем перестройку Эндо-Крото;
3. новый фрагмент содержит копию фрагмента S, поэтому мы можем снова применить перестройку;
4. в результате $k \geqslant 1$ перестроек получим фуллерен N_k;

Фуллерен P является 6-бочкой или имеет вид N_k $\Leftrightarrow$ он содержит фрагмент S.

Комбинаторные типы фуллеренов

Имеются эффективные алгоритмы и программы перечисления комбинаторных типов фуллеренов:

- fullgen (G.Brinkmann and A.W.M. Dress, 1997);
- buckygen (G.Brinkmann, J.Goedgebeur, B.D.McKay, 2012);
- fullerene (L.N.Wirz, P.Schwerdtfeger, J.E.Avery, 2017)

По адресу http://hog.grinvin.org доступны результаты перечисления фуллеренов.

Пусть $F(p_6)$ – число комбинаторных типов фуллеренов.

Функция $F(p_6)$ быстро растёт с ростом p_6.

Из результатов William P. Thurston (1998) следует, что $F(p_6)$ растёт как p_6^9: имеются константы c_1 и c_2, такие что для больших p_6 выполнено $c_1 p_6^9 < F(p_6) < c_2 p_6^9$.

Кроме того, имеется константа c, такая что

$$\sum_{p_6 \leqslant n} F(p_6) = cn^{10} + O(n^9).$$

p_6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	...	190
$F(p_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6	15	17	...	132247999328

http://hog.grinvin.org

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}.
Всего существует 1812 фуллеренов с $p_6 = 20$.

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

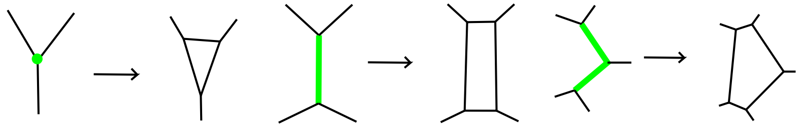
p_6	20	21-24	25	26	27	28	29	...	190
$F_{IPR}(p_6)$	1	0	1	1	1	2	5	...	40286153024

http://hog.grinvin.org

Конструкция простых многогранников

Теорема (В. Эберхард, 1891)

Многогранник P является простым $\Leftrightarrow$ он получается из тетраэдра Δ^3 операциями срезки вершины, ребра или пары смежных рёбер.



Перестройка Эндо-Крото представляет собой специальный случай срезки пары смежных рёбер шестиугольника, когда соседние с ними рёбра этого шестиугольника принадлежат пятиугольникам.

Операции роста

Актуальной задачей является исследование операций, позволяющих получить любой фуллерен из некоторого начального набора фуллеренов.

Фрагментом называется диск на поверхности трёхмерного многогранника, ограниченный простым рёберным циклом.

Операция роста – это комбинаторная операция, которая из простого трёхмерного многогранника P производит новый простой многогранник Q заменой фрагмента на другой фрагмент с такой же границей, но большим числом граней.

Перестойка Эндо-Крото – простейшая операция роста, которая переводит фуллерен в фуллерен.

Операции роста

Теорема (Brinkmann, Graver, Justus, 2009)

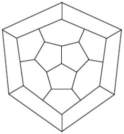
Не существует конечного набора операций роста, такого что

- начальное множество фуллеренов конечно;
- любой фуллерен получается последовательностью данных операций;
- на каждом шаге появляются только фуллерены.

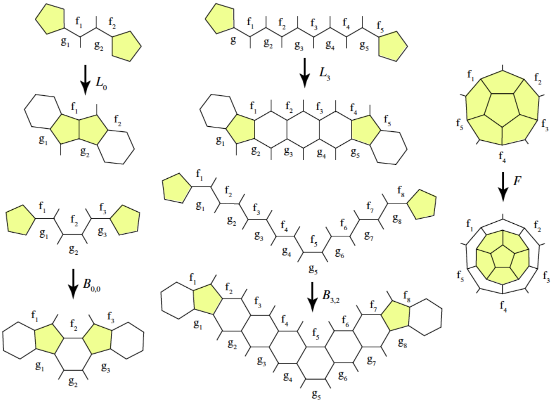
Операции роста

Теорема (Hasheminezhad, Fleischner, McKay, 2008)

Любой фуллерен, кроме $C_{28}(T_d)$, получается из додекаэдра последовательностью операций роста типов L, B, и F.



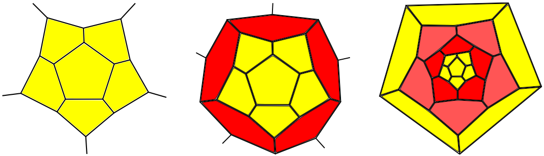
$C_{28}(T_d)$



Операции роста

- Операций типов L и B счётное число.
- Операция F одна. Она представляет собой добавление пояса из пяти шестиугольников вокруг фрагмента, состоящего из пятиугольника, окружённого пятиугольниками. Эта операция применима только к однопараметрическому семейству фуллеренов, состоящему из додекаэдра и $(5, 0)$-нанотрубок.

$(5, 0)$-нанотрубки



1. Возьмём фрагмент C додекаэдра, изображённый слева;
2. добавим $k \geqslant 1$ поясов из пяти шестиугольников;
3. получится фрагмент с такой же границей, как у C;
4. вдоль этой границы приклеим второй фрагмент C;
5. получится фуллерен D_{5k} – $(5, 0)$-нанотрубка.

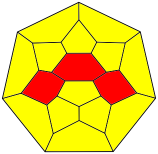
Фуллерен является додекаэдром или $(5, 0)$-нанотрубкой $\Leftrightarrow$ он содержит фрагмент C.

n-диск-фуллерены (М.Деза, M.Dutour Sikirić и М.И.Штогрин, 2013)

Простой многогранник, у которого одна грань является n-угольником, $n \neq 5, 6$, а остальные грани – 5-угольниками или 6-угольниками, называется n-диск-фуллереном.

n-диск-фуллерен, $n \geqslant 7$, имеет $p_5 = n + 6$ пятиугольников.

7-диск-фуллерен, у которого 7-угольник смежен с 5-угольником назовём (7,5)-диск-фуллереном.



7-диск-фуллерен с минимальным числом граней

Конструкция фуллеренов

Теорема (В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец, 2017)

Имеется 4 операции роста, такие что любой фуллерен с p_6 шестиугольниками, кроме додекаэдра и $(5,0)$-нанотрубок, получается из 6-бочки последовательностью операций, где

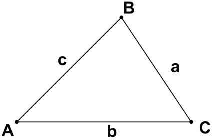
- на промежуточных шагах появляются либо фуллерены, либо $(7,5)$-диск-фуллерены;
- каждая операция является срезкой пары смежных рёбер шестиугольника или семиугольника;
- число операций в последовательности равно $p_6 - 2$;
- первая операция – перестройка Эндо-Крото, переводящая фуллерены в фуллерены;
- вторая операция рождает семиугольник;
- третья операция перемещает семиугольник;
- четвёртая операция уничтожает семиугольник.

Николай Иванович Лобачевский (1792 – 1856)

"Лобачевский – Коперник геометрии".
Уильям Клиффорд (1845–1879, Великобритания).

Один из создателей неевклидовой геометрии. В 1842 году Лобачевский по рекомендации К. Гаусса – президента Геттингенского научного общества – был избран членом-корреспондентом этого общества в знак признания его "одним из величайших математиков Российской империи".

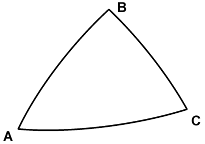
Треугольники



Евклидова геометрия

$$\angle A + \angle B + \angle C = \pi$$

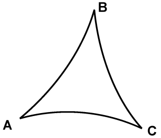
$$S^2 = p(p-a)(p-b)(p-c)$$



эллиптическая геометрия

$$\angle A + \angle B + \angle C > \pi$$

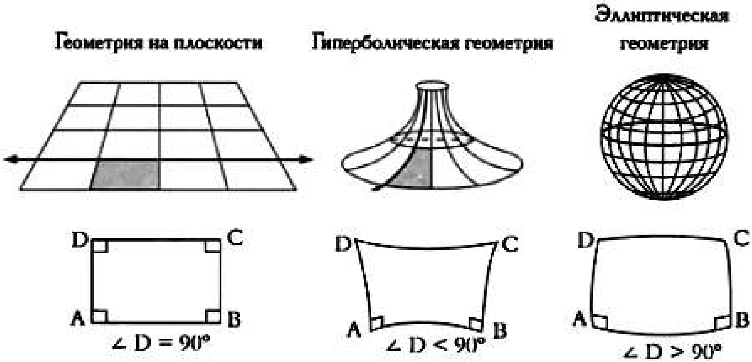
$$S = \angle A + \angle B + \angle C - \pi$$



гиперболическая геометрия

$$\angle A + \angle B + \angle C < \pi$$

$$S = \pi - \angle A - \angle B - \angle C$$



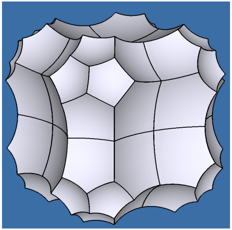
Все углы этих четырёхугольников равны.

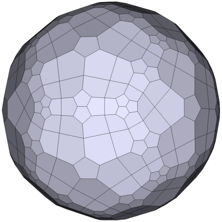
Вопрос (А.В. Погорелов, 1967)

Какие многогранники реализуются в пространстве Лобачевского $\mathbb{L}^3$ в виде ограниченных многогранников с прямыми двугранными углами?

Мотивация

Такие многогранники задают «правильное» разбиение пространства $\mathbb{L}^3$ на равные многогранники.



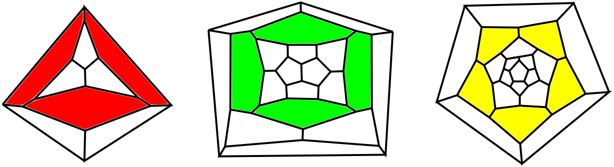


(рисунки Я.В. Кучириненко)

k-пояса (=k-угольные призматические элементы)

k-пояс многогранника – циклическая последовательность граней, такая что

- смежными являются последовательные грани и только они;
- никакие три грани не имеют общей вершины



3-пояс 4-пояс 5-пояс

Любой простой многогранник P, кроме тетраэдра Δ^3, имеет 3-, 4-, или 5-пояс.

Алексей Викторович Погорелов (1919-2002)

Теорема (А.В. Погорелов, 1967)

Многогранник P реализуется в виде ограниченного многогранника с прямыми двугранными углами в пространстве Лобачевского $\mathbb{L}^3$ тогда и только тогда, когда P

- является простым;
- отличен от тетраэдра Δ^3;
- не имеет 3- и 4-поясов;
- реализуется с острыми двугранными углами.

Реализация единственна с точностью до изометрии.

Определение

Мы называем такие многогранники многогранниками Погорелова

Теорема (Е.М. Андреев, 1967)

Простой многогранник $P \neq \Delta^3$ реализуется в виде ограниченного многогранника в $\mathbb{L}^3$ с двугранными углами $\varphi_{i,j} \in (0, \frac{\pi}{2}]$ при рёбрах $F_i \cap F_j$ тогда и только тогда, когда

- $\varphi_{i,j} + \varphi_{j,k} + \varphi_{k,i} > \pi$ для каждой вершины $F_i \cap F_j \cap F_k$;
- $\varphi_{i,j} + \varphi_{j,k} + \varphi_{k,i} < \pi$ для $\forall$ 3-пояса (F_i, F_j, F_k);
- $\varphi_{i,j} + \varphi_{j,k} + \varphi_{k,l} + \varphi_{l,i} < 2\pi$ для $\forall$ 4-пояса (F_i, F_j, F_k, F_l);
- если $P = \Delta^2 \times I$, то $\exists$ угол при основании $< \frac{\pi}{2}$.

Реализация единственна с точностью до изометрии.

Мотивация

Классификация дискретных групп, порожденных отражениями в гиперплоскостях, действующих в пространствах Лобачевского.

Следствия теоремы Андреева

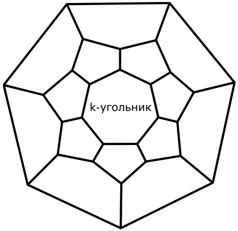
Следствие

Простой многогранник $P \neq \Delta^3$ реализуется в $\mathbb{L}^3$ в виде ограниченного многогранника с прямыми двугранными углами $\Leftrightarrow$ у P нет 3- и 4-поясов.

Следствие

Геометрическое условие в теореме Погорелова является избыточным.

k-бочки (многогранники Лёбелля)



k-бочка является многогранником Погорелова для $k \geqslant 5$;

В 1931 Ф. Лёбелль при помощи склейки 8 копий 6-бочки построил первый пример замкнутого трёхмерного гиперболического многообразия.

В 1987 А.Ю. Веснин построил гиперболические многообразия «типа Лёбелля» для всех k-бочек, $k \geqslant 5$.

Фуллерены как многогранники Погорелова

Из результатов T. Došlić (1998, 2003) следует, что

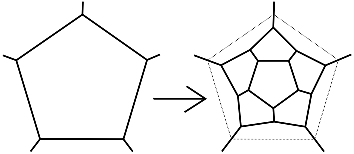
Любой фуллерен является многогранником Погорелова.

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

- Любой 7-диск-фуллерен является многогранником Погорелова (2015).
- Для любого $n > 7$ имеются как погореловские, так и не погореловские n-диск-фуллерены (2018).
- n-диск-фуллерен, $n > 7$, является многогранником Погорелова тогда и только тогда, когда любая пара смежных граней, из которых одна является n-угольником, окружена поясом (2019).

Связная сумма вдоль граней

Связная сумма простых многогранников P и Q вдоль k-угольных граней F и G – это комбинаторный аналог склейки двух многогранников вдоль одинаковых граней, перпендикулярных смежным граням.



Связная сумма с 5-бочкой вдоль пятиугольника.

Связная сумма многогранников Погорелова является многогранником Погорелова.

Теорема (Т.Иное, 2008)

$$\mathrm{vol}(P\#Q) \geqslant \mathrm{vol}(P) + \mathrm{vol}(Q).$$

Конструкция многогранников Погорелова

Теорема (Д. Барнетт, 1977+В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец, 2017)

Многогранник P является многогранником Погорелова тогда и только тогда, когда он либо k-бочка, $k \geqslant 5$, либо получается из 5- или 6-бочки последовательностью операций

- срезки пары смежных рёбер, лежащих в грани по крайней мере с 6 сторонами и
- связной суммы с 5-бочкой вдоль пятиугольника.

Теорема (Т.Иное, 2008)

Операция срезки пары смежных рёбер увеличивает объём многогранника Погорелова.

Литература I

В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец,
Конструкции семейств трехмерных многогранников, характеристические фрагменты фуллеренов и многогранники Погорелова,
Изв. РАН. Сер. матем., 81:5 (2017), 15-91.

Victor M. Buchstaber, Nikolay Yu. Erokhovets,
Finite sets of operations sufficient to construct any fullerene from C_{20},
Structural Chemistry, 28:1 (2017), 225–234.

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

Литература II

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 III

- 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.

Литература IV

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.

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).

Спасибо за внимание!