Секция «Геометрия и топология»

$(7,5)$-диск-фуллерены и их приложения

Научный руководитель – Бухштабер Виктор Матвеевич

Прудникова Наталия Викторовна

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Механико-математический факультет, Кафедра высшей геометрии и топологии, Москва, Россия

E-mail: prudnikova.nv@yandex.ru

Математические фуллерены представляют собой простые трехмерные выпуклые многогранники, граница которых разбита только на пяти- и шестиугольники. Комбинаторно эквивалентные фуллерены называются изомерами. Имеются конечные наборы операций роста, достаточные для реализации любого фуллерена из додекаэдра за счет получения на промежуточных шагах многогранников с одной четырех- или семиугольной гранью (см. [4]). В работе [1] выделено семейство $\mathcal{P}_5$ фуллеренов, которые получаются индуктивно из додекаэдра связной суммой додекаэдра с предыдущим многогранником семейства вдоль 5-угольника, окружённого 5-угольниками. Имеет место теорема (см. [1]): если у фуллерена число шестиугольников $p_6 \geq 3$ и он не принадлежит семейству $\mathcal{P}_5$, то его можно получить из 6-бочки при помощи последовательности операций $(2,k)$-усечений, где $k = 6,7$. При этом в последовательности могут возникать многогранники Погорелова, имеющие одну семиугольную грань и хотя бы одну смежную с ней пятиугольную.

Сформулированная выше теорема Бухштабера-Ероховца приводит к понятию $(7,5)$-диск-фуллерена, как простого выпуклого многогранника, у которого имеется фрагмент из двух граней: семиугольника и смежного с ним пятиугольника, а дополнение представляет собой диск разбитый на пяти- и шестиугольники. В работе [2] введено понятие n-диск-фуллерена. Из определения n-диск фуллерена следует, что каждая вершина на границе диска имеет степень 3. В случае $(7,5)$-диск-фуллерена на границе диска будут две вершины степени 2. На множестве $(7,5)$-диск-фуллеренов имеют место операции $(2,7;5,5)$- и $(2,7;5,6)$- усечения. В результате применения первой операции мы возвращаемся в класс фуллеренов, при этом число шестиугольников возрастает на 3 по сравнению с количеством шестиугольников в соответствующем $(7,5)$-диск-фуллерене. Вторая операция оставляет нас в классе $(7,5)$-диск-фуллеренов, увеличивая число шестиугольников на один.

В докладе рассматриваются конструкции фуллеренов и $(7,5)$-диск-фуллеренов с числом граней m, таким что $m-12 \leq 8$. Известно, что фуллеренов, удовлетворяющих этому условию 35. Из них при помощи операции Эндо-Крото нельзя получить 5 изомеров, один из которых принадлежит семейству $\mathcal{P}_5$. Оставшиеся 4 изомера согласно приведенной теореме можно получить из 6-бочки, используя $(7,5)$-диск-фуллерены. Различных $(7,5)$-диск-фуллеренов, имеющих не более 20 граней, всего 27 (см. [5]), из которых необходимыми для реализации изомеров с p_6 не превосходящим восьми являются только три $(7,5)$-диск-фуллерена. В работе [3] был построен граф связей, вершины которого соответствуют изомерам, а ребра связывают изомер с его образом, полученным под действием операции Эндо – Крото. В докладе будет представлен граф связей, вершины которого соответствуют фуллеренам или $(7,5)$-диск-фуллеренам, а ребра связывают многогранник с его образом, полученным под действием операций $(2,k)$-усечения.

Автор выражает благодарность В.М. Бухштаберу за постановки задач и полезные обсуждения в ходе получения результатов этой работы.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (грант № 14-11-00414).

Источники и литература

1) В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец, “Конструкции семейств трёхмерных многогранников, характеристические фрагменты фуллеренов и многогранники Погорелова”, Известия РАН, серия математическая, вып.5, 2017.
2) М. Деза, М. Дютур Сикирич, М.И. Штогрин, “Фуллерены и диск-фуллерены”, УМН, 68:4(412)(2013), 69-128.
3) Н.В. Прудникова, “Конструкции фуллеренов с числом шестиугольников не больше 7”, Дальневост. матем. журн., 15:2, 2015, 247–263.
4) V.M. Buchstaber, N.Y. Erokhovets, “Finite sets of operations sufficient to construct any fullerene from C_{20}”, Structual Chemistry (2016), doi:10.1007/s11224-016-0885-8.
5) G. Brinkmann, O. Delgado Friedrichs, S. Lisken, A. Peeters, N. Van Cleemput, “CaGe - a Virtual Environment for Studying Some Special Classes of Plane Graphs - an Update”, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 63(3), pp. 533-552, 2010.