

Диаграммы Шлегеля и граф связей фуллеренов.

Прудникова Наталья 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. В работах Бухштабера и Ероховца доказано, что любой фуллерен реализуется из куба последовательностью операций: усечение вдоль ребра и $(2, k)$ -усечение, где $k \geq 6$ [1] и любой фуллерен можно получить из додекаэдра при помощи семи операций: $(1; 4, 5)$ -, $(1; 5, 5)$ -, $(2, 6; 4, 5)$ -, $(2, 6; 5, 5)$ -, $(2, 6; 5, 6)$ -, $(2, 7; 5, 5)$ -, $(2, 7; 5, 6)$ -усечения [4]. Операция $(2, 6; 5, 5)$, известная как операция Эндо – Крото [5], является единственной операцией, которая переводит фуллерен в фуллерен, при этом к полученному фуллерену также всегда можно применить операцию Эндо – Крото [2].

В докладе рассматриваются конструкции фуллеренов с числом шестиугольников $p_6 \leq 7$. Известно, что таких изомеров 20 [6]. Для представления фуллеренов на плоскости используется метод диаграмм Шлегеля, которые являются полным комбинаторным инвариантом фуллерена. Последовательным применением операции Эндо – Крото к фуллерену с $p_6 = 2$ можно получить 15 фуллеренов из первых 20. В работе [3] описаны последовательности операций, которые позволяют получить из куба и додекаэдра оставшиеся три изомера. Один из них имеет $p_6 = 5$, и два $p_6 = 6$. В то же время из каждого изомера с $0 < p_6 \leq 7$ применением операции Эндо – Крото можно получить фуллерен с числом шестиугольных граней $p_6 + 1$. В докладе будет представлен граф связей, вершины которого соответствуют изомерам, а ребра связывают изомер с его образом, полученным под действием операции Эндо – Крото. Также будут рассмотрены вопросы хиральности отдельных фуллеренов.

Источники и литература

- 1) Бухштабер В.М., Ероховец Н.Ю. Усечения простых многогранников и приложения // Избранные вопросы математики и механики. Сборник статей. К 150-летию со дня рождения академика Владимира Андреевича Стеклова. Тр. МИАН. 2015. 289. С. 115–144. МАИК.
- 2) М. Деза, М. Дютур Сикирич, Штогрин М.И. Фуллерены и диск-фуллерены // УМН. 68:4(412)(2013). С. 69-128.
- 3) Прудникова Н.В. Конструкции фуллеренов с числом шестиугольников не больше 7 // Дальневост. матем. журн. 15:2. 2015. С. 247–263.
- 4) Buchstaber V.M., Erokhovets N.Yu. Construction of fullerenes // arXiv: 1510.02948v1[math.CO], 10 Oct 2015.
- 5) M. Endo, H.W. Kroto Formation of Carbon Nanofibers // Journal of Physical Chemistry. Vol. 96. No. 17. 6941–6944 (1992).
- 6) The House of Graphs: hog.grinvin.org/Fullerenes

Слова благодарности

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