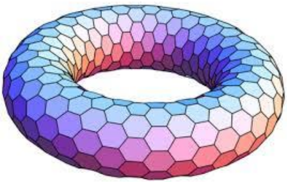
Разбиения поверхностей на многоугольники и задачи, пришедшие из физики, химии и биологии

В. М. Бухштабер

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

XV Летняя школа «Современная математика»
Ратмино, 23 июля 2015 г.
Лекция 1

Разбиение поверхности на многоугольники называется регулярным, если в каждой вершине сходится только три ребра, а два многоугольника пересекаются только по ребру. Комбинаторика таких разбиений — это область исследований на пересечении классических и самых современных разделов математики и её приложений.



Регулярные разбиения

Условие регулярности разбиения сферы позволяет дополнить классическую формулу Эйлера

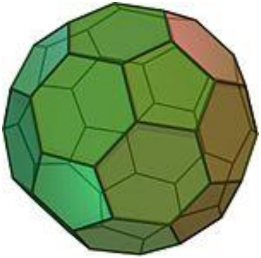
$$f_0 - f_1 + f_2 = 2$$

формулой

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

в которую входит вектор $(p_3, \ldots, p_k, \ldots)$, где p_k — число k-угольников, входящих в разбиение.

Следствия этой формулы нетривиальны. Например, если в регулярном разбиении сферы участвуют только пятиугольники и шестиугольники, то пятиугольников должно быть 12.



Фуллерены

Результаты по комбинаторике регулярных разбиений поверхностей стали очень актуальными в связи с рядом проблем теоретической и математической физики.

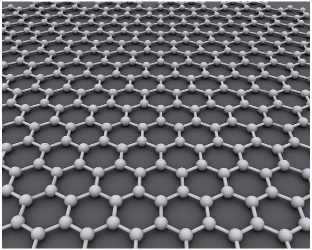
Мы остановимся на задачах, связанных с открытием замечательных молекул углерода — фуллеренов (нобелевская премия по химии 1996 года, Р. Кёрл, Х. Крото, Р. Смолли).

Математическая модель фуллерена это поверхность выпуклого многогранника, разбитая на пятиугольники и шестиугольники.

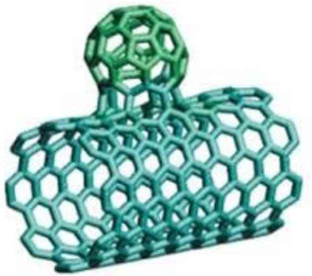
Графен

Большой толчок в интенсификации исследований в этом направлении дало открытие такой углеродной структуры, как графены (нобелевская премия по физике 2010 года, А. К. Гейм, К. С. Новосёлов).

Математическая модель графена – это плоскость, разбитая на шестиугольники. Графеновая плоскость индуцирует разбиение поверхности тора на шестиугольники.



В квантовой физике и химии к математическим задачам о разбиении поверхностей приводят такие углеродные структуры, как нанотрубки и нанопочки.



Нанопочка

В биологии к близким задачам приводят вопросы о структуре вирусов.

В лекциях будет дано достаточно элементарное изложение постановок задач и результатов тех разделов математической теории разбиения поверхностей на многоугольники, которые используются в указанных направлениях приложений в физике, химии и биологии.

Доклад подготовлен совместно с Н. Ю. Ероховцом, кафедра высшей геометрии и топологии, МГУ имени М. В. Ломоносова. Я благодарю Г. А. Мерзона за помощь в подготовке слайдов этих лекций.

Трёхмерные выпуклые многогранники

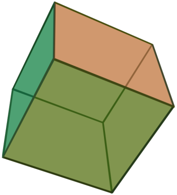
Выпуклым трёхмерным многогранником называется ограниченное множество вида

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

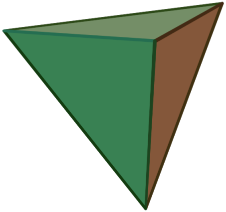
Будем считать, что такое описание неприводимо, т. е. удаление любого неравенства изменяет множество P. В этом случае каждая гиперплоскость $\mathcal{H}_i = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 \colon \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{x} + b_i = 0\}$ определяет двумерную грань $F_i = P \cap \mathcal{H}_i$.

Мы будем отождествлять комбинаторно эквивалентные многогранники.

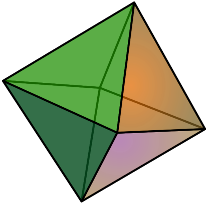
Платоновы тела (правильные многогранники)



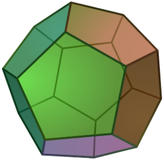
Куб



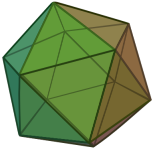
Тетраэдр



Октаэдр



Додекаэдр

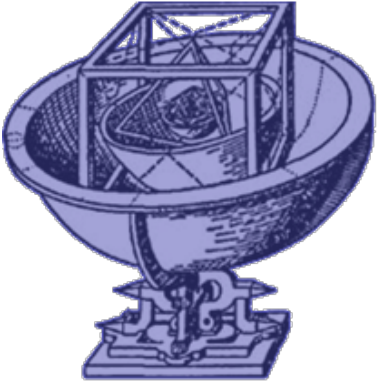


Икосаэдр

Только 5 тел обладают следующими свойствами:

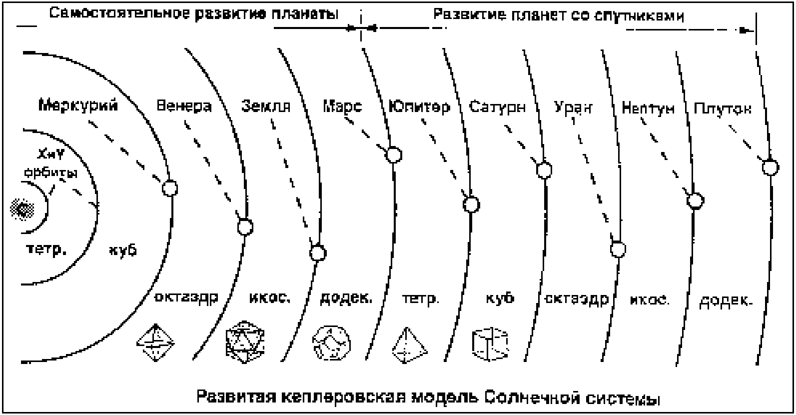
- Выпуклые многогранники.
- Все грани — одинаковые правильные многоугольники.
- Для любой пары вершин существует симметрия многогранника, переводящая одну вершину другую.

Кубок Кеплера



Модель Солнечной системы И. Кеплера

Опубликовано в 1596.


Самостоятельное развитие планеты
Развитие планет со спутниками
Меркурий
Венера
Земля
Марс
Юпитер
Сатурн
Уран
Нептун
Плутон
ХиY
орбиты
тетр.
куб
октаэдр
икос.
додек.
тетр.
куб
октаэдр
икос.
додек.
Развитая кеплеровская модель Солнечной системы

Пирит

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

Пусть f_0 — число вершин, f_1 — число рёбер и f_2 — число двумерных граней трёхмерного многогранника. Тогда имеет место формула Эйлера (1707–1783)

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2$$

Задача. *Доказать формулу Эйлера, используя формулу включения-исключения:*

$$\chi(W_1 \cup W_2) = \chi(W_1) + \chi(W_2) - \chi(W_1 \cap W_2),$$

где $\chi(W) = f_0(W) - f_1(W) + f_2(W)$.

Формула Эйлера для правильных многогранников

Для правильных многогранников получаем таблицу:

	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

Формулу Эйлера для правильных многогранников открыл еще Рене Декарт (1596–1650).

Реализация f-вектора

Теорема (Штейниц, 1906 г.)

Целочисленный вектор (f_0, f_1, f_2) является вектором граней трехмерного многогранника тогда и только тогда, когда

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2, \quad f_2 \leqslant 2f_0 - 4, \quad f_0 \leqslant 2f_2 - 4$$

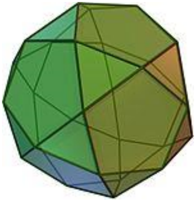
Следствие

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

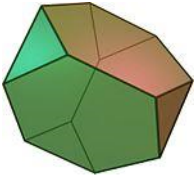
Для многогранников размерности 4 до сих пор неизвестны условия, характеризующие вектор (f_0, f_1, f_2, f_3) его граней.

Архимедовы тела

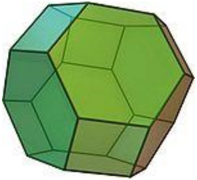
Кубооктаэдр
$(12, 24, 14)$



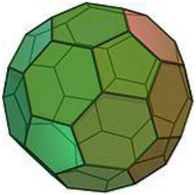
Икосододекаэдр
$(30, 60, 32)$



Усечённый тетраэдр
$(12, 18, 8)$

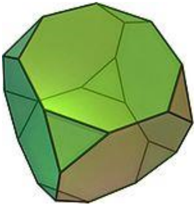


Усечённый октаэдр
$(24, 36, 14)$

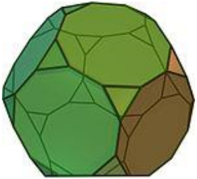


Усечённый икосаэдр
$(60, 90, 32)$

Архимедовы тела

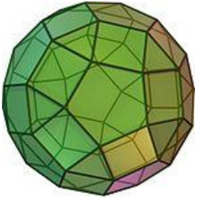


Усечённый куб
$(24, 36, 14)$



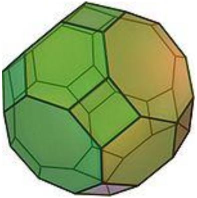
Усечённый додекаэдр
$(60, 90, 32)$

Ромбокубоктаэдр
$(24, 48, 26)$

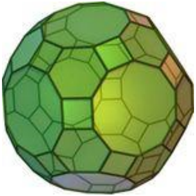


Ромбоикосододекаэдр
$(60, 120, 62)$

Архимедовы тела



Ромбоусечённый кубооктаэдр
$(48, 72, 26)$



Ромбоусечённый икосододекаэдр
$(120, 180, 62)$

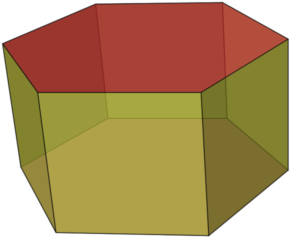
Курносый куб
$(24, 60, 38)$

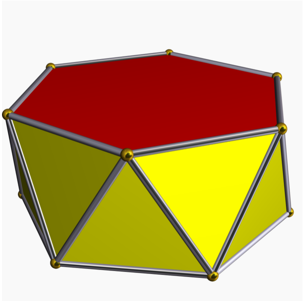
Курносый додекаэдр
$(60, 150, 92)$

Полуправильные многогранники обладают следующими свойствами:

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

Полуправильными многогранниками являются только 13 архимедовых тел и две бесконечные серии: призмы и антипризмы.

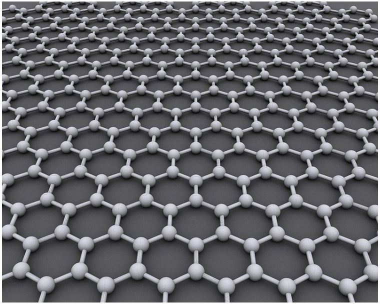




Из 13 архимедовых тел 11 с многоугольниками 2 типов и 2 с многоугольниками 3 типов.

Курносые куб и додекаэдр имеют две версии (левую и правую), которые получаются одна из другой отражением относительно плоскости и не могут быть совмещены движением, сохраняющим ориентацию пространства.

Плоскость $\mathbb{R}^2$ может быть замощена правильными шестиугольниками.



Схематическое изображение графена. Узлы — атомы углерода, а рёбра — связи, удерживающие атомы в листе графена.

Графен

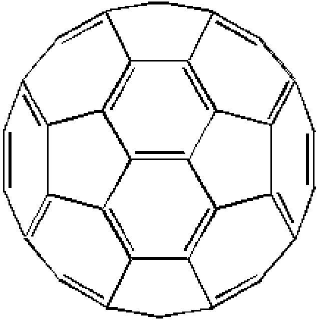
Графен (англ. graphene) — двумерная модификация углерода, образованная слоем атомов углерода толщиной в один атом. Обладает уникальными электрофизическими свойствами.

За «передовые опыты с двумерным материалом — графеном» А.К. Гейму и К.С. Новосёлову была присуждена Нобелевская премия по физике за 2010 год.

Модификации углерода: алмаз, графит, фуллерен, карбин, графен, углеродные нанотрубки, лонсдейлит и др.
Наиболее многочисленны молекулярные структуры фуллеренов и нанотрубок.

Бакминстерфуллерен

Фуллерен C_{60}



Усечённый икосаэдр
со структурой Кекуле

Атомы углерода, замкнутые в шестичленное кольцо, с простыми и двойными связями попеременно.

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

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.

Фуллерены

Фуллерены были открыты химиками-теоретиками Р. Кёрлом, Х. Крото и Р. Смолли в 1985 г. (Нобелевская премия, 1996 г.).

Астрономы обнаружили заранее предсказанные характерные спектральные линии фуллеренов в космосе — в атмосферах углеродных звезд.
Затем и на Земле удалось их получить в пламени электрической дуги.
Долгое время фуллерены получали только в лабораториях научных центров.

К 1992 году стало известно, что в водорастворимой части шунгита содержится до одного процента фуллеренов.

Шунгит-фуллерены

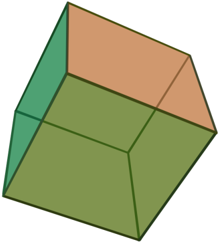
Образцы шунгитовой породы

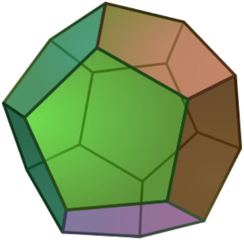
В 1877 году профессор геологии Петербургского университета А.А.Иностранцев определил новый крайний член в ряду природных некристаллических углеродов, не являющихся каменным углём. Он дал этой породе имя шунгит по названию заонежского села Шуньга, где она впервые была обнаружена.

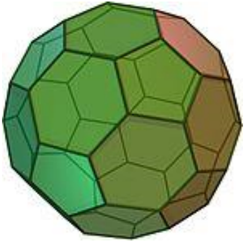
Эта порода присутствует в качестве примеси в шунгитовых сланцах и доломитах, распространённых по всему Заонежью — от Гирваса на западе до Толвуи и Шуньги на востоке.

Определение

Трёхмерный многогранник называется простым, если каждая его вершина простая, то есть в ней сходится ровно три ребра.







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

Следствия формулы Эйлера для простых многогранников

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 $k \neq 5, 6$, то $p_5 = 12$.
Не существует простого многогранника только с шестиугольными гранями.

$$f_0 = 2\Big(\sum_k p_k - 2\Big) \quad f_1 = 3\Big(\sum_k p_k - 2\Big) \quad f_2 = \sum_k p_k \Longrightarrow f_0 = 2(f_2 - 2)$$

Простые разбиения поверхностей на многоугольники

Разбиение замкнутой (то есть без края) двумерной поверхности на многоугольники называется простым, если в каждой вершине сходится ровно три ребра.

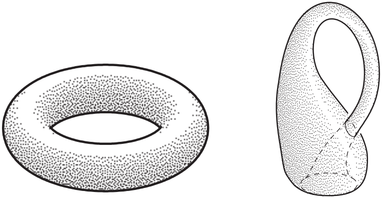
Для простого разбиения двумерной поверхности имеем

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

где $\chi(M^2) = f_0 - f_1 + f_2$ *— Эйлерова характеристика.*

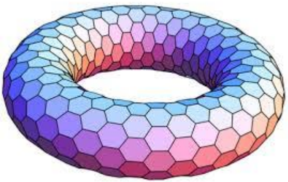
Следствие

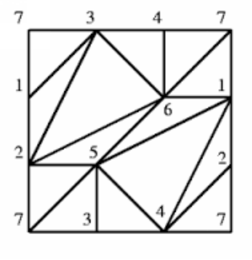
Пусть существует простое разбиение поверхности M^2 на шестиугольники.
Тогда $\chi(M^2) = 0$, то есть M^2 — тор или бутылка Клейна.



Не существует разбиения тора или бутылки Клейна на многоугольники такого, что $p_k = 0$ для всех $k > 5$.

Разбиения тора на шестиугольники





Минимальная триангуляция тора
7 вершин, в каждой вершине
сходится 6 рёбер.
Каноническое двойственное разбиение
является простым и разбивает тор
на 7 шестиугольников.

Теорема (Эберхард, 1891)

Для любого набора $(p_k | 3 \leqslant k \neq 6)$ *неотрицательных целых чисел, удовлетворяющих соотношению*

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

между числами p_k, *существует число* p_6 *и простой трёхмерный многогранник* P^3, *так что* $p_k = p_k(P^3)$ *для всех* $k \geqslant 3$.

Пусть дан простой трёхмерный многогранник P. *Определена операция одновременной срезки всех его рёбер, в результате которой получается простой многогранник* $\widehat{P}$, *такой что*

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

Определение

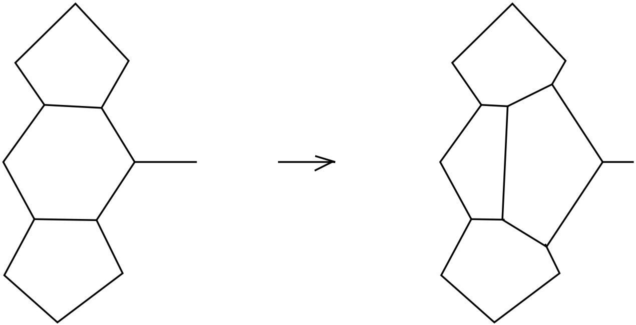
Фуллереном называется простой трёхмерный многогранник, у которого все двумерные грани являются пятиугольниками или шестиугольниками.

Для любого фуллерена имеем $p_5 = 12$,

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

$$\Longrightarrow f_0 = 2(f_2 - 2), \qquad f_2 \geqslant 12.$$

Перестройка Эндо-Крото



- Перестройка Эндо-Крото увеличивает p_6 на 1.
- При помощи последовательности перестроек Эндо-Крото из бочки можно получить фуллерен с любым $p_6 = k$, $k \geqslant 2$.

Комбинаторно неэквивалентные фуллерены с одинаковым p_6 называются изомерами.

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

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

p_6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...	75
$F(p_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6	15	...	46.088.148

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}.

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

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

Экспериментальные наблюдения (Бринкман, Дресс, 1997):
$F(p_6 + 48) \approx F_{IPR}(p_6)$.

Конструкция *IPR*-фуллеренов

Перестройка Эндо-Крото не может дать *IPR*-фуллерен.

Операция одновременной срезки всех рёбер фуллерена P даёт *IPR*-фуллерен $\widehat{P}$ с $p_6(\widehat{P}) = p_6(P) + f_1(P)$.

Для додекаэдра соответствующий *IPR*-фуллерен C_{80} имеет 80 вершин и обладает большой симметрией.

Литература I

С.Г. Смирнов,
Прогулки по замкнутым поверхностям
(серия «Библиотека “Математическое просвещение”»),
М., МЦНМО, 2003.

Н.П. Долбилин,
Жемчужины теории многогранников
(серия «Библиотека “Математическое просвещение”»),
М., МЦНМО, 2000.

В.М. Бухштабер, Т.Е. Панов,
Торические действия в топологии и комбинаторике,
М., МЦНМО, 2004.

А.К. Звонкин, С.К. Ландо,
Графы на поверхностях и их приложения,
М., МЦНМО, 2010.

Литература II

- Э.Э. Лорд, А.Л. Маккей, С. Ранганатан,
  Новая геометрия для новых материалов,
  М., Физматлит, 2010.
- 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, 115–144.