# 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, 24 июля 2015 г.
Лекция 2

Разбиение двумерной поверхности (замкнутой или с краем) на многоугольники называется правильным, если пересечение любых двух многоугольников либо пусто, либо вершина, либо ребро.

Обозначим через $\nu_k$ число всех вершин валентности $k$, через $\mu_k$ число вершин валентности $k$, лежащих на границе.

Положим $\mu = \sum_{k\geqslant 2} \mu_k$. Тогда $\nu_2 = \mu_2$ и

$$2\nu_2 + \nu_3 + p_3 = 4\chi(M^2) + \mu + \sum_{k\geqslant 5}(k-4)(\nu_k + p_k)$$

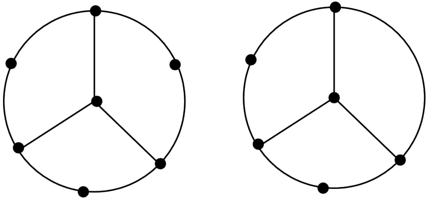
$$\sum_{k\geqslant 2} k\nu_k = \sum_{k\geqslant 3} kp_k + \mu$$

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

# Простые разбиения поверхностей

Правильное разбиение двумерной поверхности называется простым, если

- в каждой внутренней вершине сходится ровно три ребра;
- в каждой вершине на границе сходится либо три, либо два ребра.



$p_4 = 3$ $\qquad$ $p_3 = 1, p_4 = 2$

$\mu_2 - \mu_3 = 0$, $\chi(M) = 1$ $\qquad$ $\mu_2 - \mu_3 = -1$, $\chi(M) = 1$.

$2 \cdot 3 = 6 \cdot 1 + 0$ $\qquad$ $3 \cdot 1 + 2 \cdot 2 = 6 \cdot 1 + 1$

# Простые разбиения поверхностей

*Для простого разбиения двумерной поверхности*

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

где $\delta = \mu_2 - \mu_3$

# Эйлерова характеристика поверхностей

- *Пусть* $M^2$ — *замкнутая ориентируемая поверхность, т.е. сфера с* $g$ *ручками. Тогда* $\chi(M^2) = 2 - 2g$.
- *Пусть* $M^2$ — *замкнутая неориентируемая поверхность, т.е. сфера с* $k$ *листами Мёбиуса. Тогда* $\chi(M^2) = 2 - k$.
- *Пусть* $M^2$ — *диск с* $r$ *дырками. Тогда* $\chi(M^2) = 1 - r$.
- *Пусть* $M^2$ — *лист Мёбиуса. Тогда* $\chi(M^2) = 0$.

## Простые разбиения диска на пяти- и шестиугольники

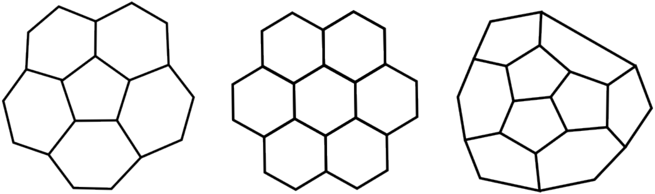
*Диском $D^2$ мы называем двумерную поверхность с краем, гомеоморфную кругу на плоскости.*

Для диска формула

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

принимает вид $p_5 = 6 - \delta$.

- $p_5 = 0 \Leftrightarrow \delta = 6$; $p_5 = 6 \Leftrightarrow \delta = 0$.
- Существует разбиение диска с любыми числами $p_5$ и $p_6$.



$p_5 = 1, p_6 = 5, \delta = 5$; $p_5 = 0, p_6 = 7, \delta = 6$; $p_5 = 7, p_6 = 2, \delta = -1$

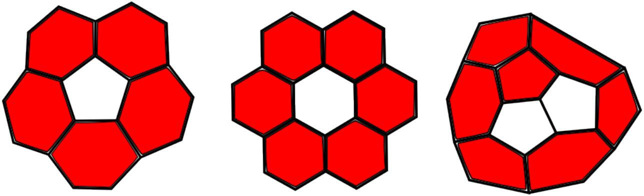
# Простые разбиения цилиндра на пяти- и шестиугольники

Для цилиндра формула

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

принимает вид $p_5 = -\delta$.

- Существует разбиение цилиндра с любыми $p_5 + p_6 \geqslant 3$.



$p_5 = 0, p_6 = 5, \delta = 0$; $p_5 = 0, p_6 = 6, \delta = 0$;
$p_5 = 5, p_6 = 2, \delta = -5$

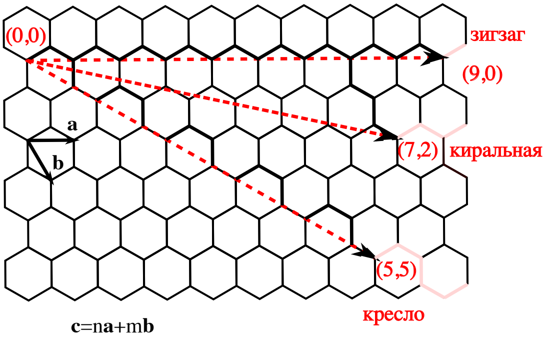
# Простые разбиения замкнутых поверхностей

## Следствие

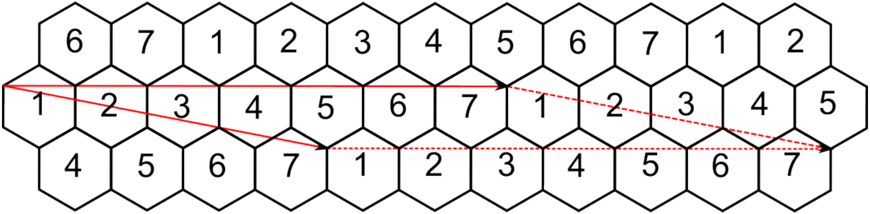
*Пусть* $M^2$ *— замкнутая поверхность и только одно* $p_k \neq 0$.

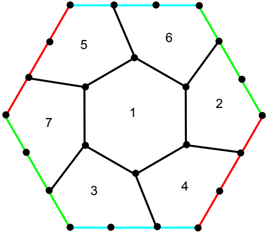
- $k = 3$. *Тогда* $M^2$ *— сфера — поверхность тетраэдра.*
- $k = 4$. *Тогда* $M^2$ *— сфера — поверхность куба.*
- $k = 5$. *Тогда* $M^2$ *— сфера — поверхность додекаэдра или проективная плоскость с разбиением, двойственным минимальной триангуляции.*
- $k = 6$. *Тогда* $M^2$ *— тор или бутылка Клейна.*

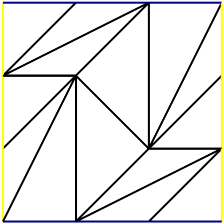
Углеродные нанотрубки получаются в результате свёртки графенового листа в бесконечный цилиндр. Свёртка характеризуется киральным вектором $\boldsymbol{c} = n\boldsymbol{a} + m\boldsymbol{b}$. При сдвиге на вектор $\boldsymbol{c}$ решётка переходит в себя. При свёртке отождествляются узлы, которые переходят друг в друга.



получается $(7,0)$, $(4,1)$-факторизацией графеновой плоскости и двойственно минимальной триангуляции.



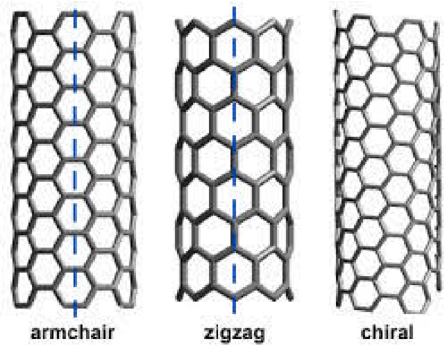
Нумерация на графеновой плоскости соответствует нумерации на разбиении тора.

В зависимости от $n$ и $m$ электронные свойства нанотрубок существенно различаются: нанотрубки, для которых $n - m$ делится на 3, проявляют металлические свойства, а все прочие — полупроводниковые.
С ростом диаметра нанотрубки ширина запрещённой зоны в любом случае приближается к 0.

Для получения конечной нанотрубки необходимо обрезать бесконечный цилиндр вдоль двух замкнутых рёберных путей. Каждый из этих путей должен разбивать цилиндр на две бесконечные части. Пути должны не пересекаться и не самопересекаться.

# Углеродные нанотрубки

Выделяют нанотрубки типа зигзаг (zigzag) $(n, 0)$ и кресло (armchair) $(n, n)$.
Эти трубки обладают зеркальной симметрией. Все остальные типы являются киральными, то есть не совпадающими со своим зеркальным отражением.



# Углеродные нанотрубки

*Для простого разбиения цилиндра на шестиугольники:*

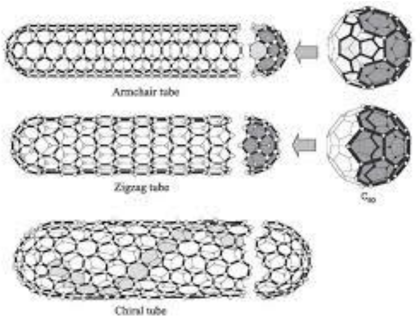
- $\mu_2 = \mu_3$;
- $f_0 = \mu_2 + 2p_6, \; f_1 = \mu_2 + 3p_6, \; f_2 = p_6$.

Для конечной нанотрубки имеет место более сильный результат:

*на каждой компоненте её границы число вершин валентности* 2 *равно числу вершин валентности* 3.

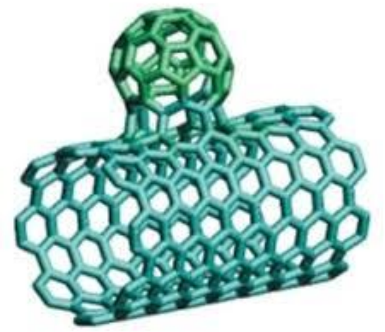
Закрытой нанотрубкой мы называем поверхность, которая получается заклеиванием концов конечной нанотрубки дисками, разбитыми на пяти- и шестиугольники.

*Каждый диск, закрывающий конец конечной нанотрубки, содержит ровно 6 пятиугольников.*



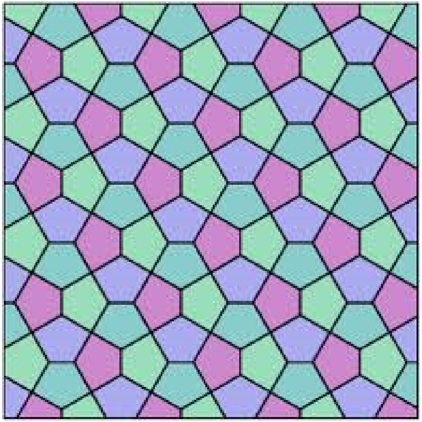
# Нанопочки (Nanobuds)

Нанопочка — сцепление фуллерена с нанотрубкой.
Нанотрубки химически нейтральны, поэтому их тяжело сочетать с другими материалами.
Фуллерены химически активны и создают условия для хорошего сцепления.



На рисунке видны семиугольники. Добавление семиугольников позволяет компенсировать наличие пятиугольников у фуллерена.

# Пентаграфен



На рисунке изображён «Каирский коврик» – разбиение плоскости на пятиугольники. Каждая вершина либо простая, либо имеет валентность 4. Исследования по пентаграфену начались в Virginia Commonwealth Univ. (США) и Пекинском университете.

Считается, что толчком послужило наблюдение проф. Qian Wang во время ужина в ресторане, где она обратила внимание на панно с изображением замощения пятиугольниками улицы в Каире.

Qian Wang сфотографировала это панно и послала одному из студентов со словами: «Думаю, мы сможем это сделать. Материал может оказаться стабильным. Но это нужно тщательно проверить.» Студент выполнил задание, и оказалось, что смоделированная структура замечательна и очень проста.

Оказалось, что по механическим свойствам новый материал может превзойти графен, поскольку будет механически стабильным, будет обладать очень высокой прочностью и выдерживать температуру до 1000 K.

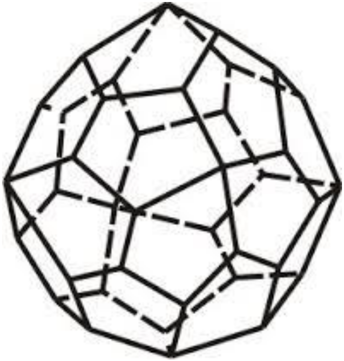
Пентаграфен будет иметь отрицательный коэффициент Пуассона – отношение относительного поперечного сжатия к относительному продольному растяжению – то есть его поперечное сечение будет расти при растяжении в продольном направлении.

У графена коэффициент Пуассона положительный, то есть при растяжении в продольном направлении его поперечное сечение уменьшается, как у большинства материалов.

Графен прекрасный проводник (ширина запрещенной зоны равна 0). Пентаграфен будет широкозонным полупроводником (по расчетам, запрещенная зона будет равна 3,5 эв., т.е. почти как у диэлектриков).

# Кристалл кубической сингонии

Все грани – пятиугольники.

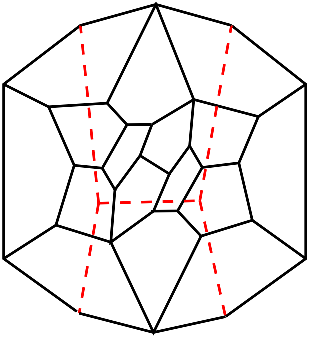


Пентагонтриоктаэдр

$(38, 60, 24)$

32 простые вершины, 6 вершин валентности 4

# Разбиение сферы на пятиугольники



Перестройка фуллерена «бочка»
(32,50,20)
28 простых вершин, 4 вершины валентности 4.

### Определение

Трёхмерный многогранник называется пента-$(3,4)$-многогранником, если все его грани – пятиугольники, а вершины либо простые, либо имеют валентность 4.

Пусть $f_{0,k}$ – число вершин валентности $k$.

*Для пента-$(3,4)$-многогранника имеем*

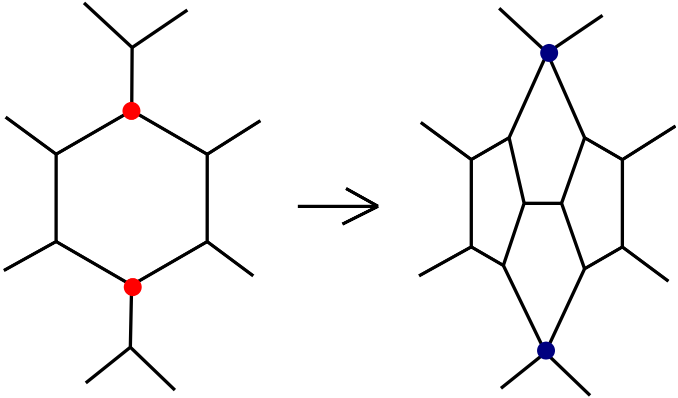
$$f_{0,3} = 8 + p_5, \qquad f_{0,4} = \frac{1}{2}p_5 - 6 \quad \Longrightarrow \quad f_{0,3} = 2(10 + f_{0,4})$$

$f_2 = p_5 \geqslant 12$ – *чётное число, и* $2f_0 = 3f_2 + 4$, $2f_1 = 5f_2$

При $p_5 = 12$ имеем $f_{0,4} = 0$ и разбиение комбинаторно эквивалентно поверхности додекаэдра.
Не существует пента $(3,4)$-многогранника с $f_{0,4} = 1$.

# Перестройка шестиугольной грани

Пусть дан трёхмерный многогранник с шестиугольной гранью, у которой имеется две противоположные простые вершины. Тогда определена перестройка



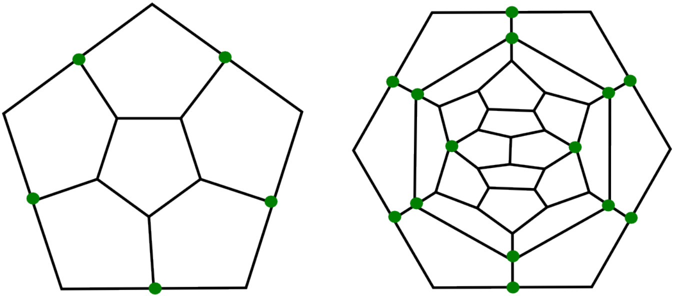
Перестройка даёт многогранник, у которого вместо шестиугольной грани появились 4 пятиугольные грани.

Все другие грани сохраняют свой комбинаторный тип.

Возникают 6 новых простых вершин вместо 2 старых.

Валентность двух старых вершин увеличивается на один.

# Универсальное разбиение фуллерена



**Теорема**

*Пусть дан фуллерен. Разобьём каждый его пятиугольник по схеме, изображённой слева, а каждый его шестиугольник по схеме, изображённой справа. Тогда в результате получится пента-*$(3,4)$*-разбиение сферы.*

# Графы трёхмерных многогранников

Рёберным графом $G(P)$ многогранника $P$ называется его одномерный остов. Вершины графа $G(P)$ соответствуют вершинам многогранника $P$.

Графом граней $G(P^*)$ многогранника $P$ называется рёберный граф двойственного многогранника $P^*$. Вершины графа $G(P^*)$ соответствуют гиперграням 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.*

Каждый из графов $G(P)$ и $G(P^*)$ однозначно определяет комбинаторику трёхмерного многогранника $P$.

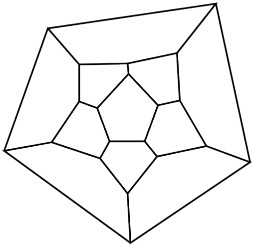
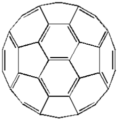


Диаграмма Шлегеля додекаэдра

Плоскую реализацию графа трёхмерного многогранника даёт диаграмма Шлегеля.

# Структуры Кекуле

*Структурой Кекуле* фуллерена называется набор рёбер без общих вершин, такой что каждая вершина принадлежит хотя бы одному ребру. Эти рёбра указывают на двойные связи атомов углерода.

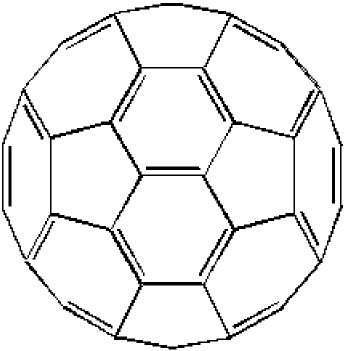


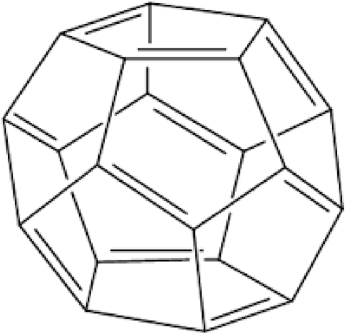
Для любого фуллерена существует хотя бы одна структура Кекуле (Следствие результата Петерсона, 1891).

Согласно теории, чем больше структур Кекуле имеет фуллерен, тем более химически стабильным он является.

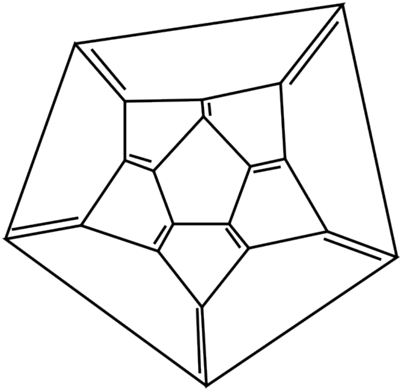
Любой фуллерен имеет экпоненциально много структур Кекуле ($\geqslant 2^{\frac{2p_6-360}{61}}$). (Ф. Кардош, 2010).

В теории графов структуры Кекуле отвечают совершенным паросочетаниям.

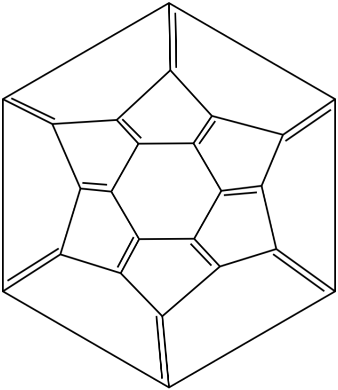




# Совершенные паросочетания



додекаэдр



бочка

# Структуры Кекуле пента-$(3,4)$-многогранников

*Структурой Кекуле пента-$(3,4)$-многогранника называется совершенное паросочетание индуцированного подграфа всех его простых вершин.*

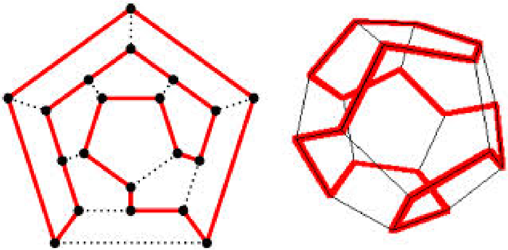
*Не каждый пента-$(3,4)$-многогранник обладает структурой Кекуле.*

- *Каирский коврик и пентагонтриоктаэдр имеют структуры Кекуле.*
- *Пента-$(3,4)$-разбиение сферы, получаемое как универсальное разбиение фуллерена, не имеет структур Кукуле.*

*Гамильтоновым циклом называется цикл графа, проходящий через каждую его вершину один и только один раз.*

**Теорема (Кардош, 2014)**

*Рёберный граф любого фуллерена имеет гамильтонов цикл.*



*Каждый гамильтонов цикл определяет структуру Кекуле.*

# 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.

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.