КОМБИНАТОРИКА ВЫПУКЛЫХ МНОГОГРАННИКОВ И ПРИЛОЖЕНИЯ К ФУЛЛЕРЕНАМ. ОТЧЁТ ЗА 2016 ГОД.

Н. Ю. ЕРОХОВЕЦ.

1. Результаты, полученные в этом году

Результаты можно распределить по следующим направлениям:

1. Изучение комбинаторики фуллеренов методами торической топологии. Каждому простому n-мерному многограннику P с m гипергранями можно сопоставить $(m+n)$-мерное момент-угол многообразие $\mathcal{Z}_P$ с каноническим действием тора $T^m = (S^1)^m$. Свободно действующая подгруппа $H \simeq T^k$, $H \subset T^m$, определяет многообразие $M(P,H) = \mathcal{Z}_P/H$ с действием тора $T^m/H \simeq T^{m-k}$. Известно, что $1 \leqslant k \leqslant m-n$. Если $k = m-n$, то многообразие $M(P,H)$ называется *к*вазиторическим. Квазиторические многообразия являются топологическими аналогами алгебраических торических многообразий. Оному многограннику может соответствовать несколько квазиторических многообразий, а может не соответствовать ни одного. Из теоремы о четырёх красках следует, что каждому 3-мерному многограннику соответствует хотя бы одно квазиторическое многообразие.

Известна проблема когомологической жёсткости многообразий и многогранников в разных постановках. Многогранник P размерности n называется *B-жёстким*, если изоморфизм градуированных колец $H^*(\mathcal{Z}_P) \simeq H^*(\mathcal{Z}_Q)$ для n-мерного многогранника Q влечёт комбинаторную эквивалентность $P \simeq Q$. Простой многогранник P называется *C-жёстким*, если он допускает квазиторическое многообразие $M(P,H)$ и из изоморфизма градуированных колец $H^*(M(P,H)) \simeq H^*(M(Q,H'))$ для любого простого многогранника Q и соответствующего ему квазиторического многообразия следует, что многогранники P и Q комбинаторно эквивалентны. Известно, что из B-жёсткости следует C-жёсткость. Обратное утверждение остаётся открытым вопросом.

k-поясом 3-мерного простого многогранника P называется циклическая последовательность из k его 2-мерных граней с пустым общим пересечением, в которой смежными являются только последовательные грани.

Недавно Ф.Фан, Й.Ма и Х.Ванг показали, что простые 3-многогранники без 3- и 4-поясов являются B-жёсткими, а значит и C-жёсткими. Этот класс многогранников является важным, так как из теорем А.В.Погорелова и Е.М.Андреева следует, что простой 3-мерный многогранник, отличный от симплекса, реализуется в пространстве Лобачевского с прямыми двугранными углами тогда и только тогда, когда у него нет 3- и 4-поясов.

Фуллереном называтся простой 3-мерный многогранник, у которого 2-мерные грани являются 5- или 6-угольниками. Из результатов Т.Дослича, а также В.М.Бухштабера и автора следует, что любой фуллерен не имеет 3- и 4-поясов. Более того, В.М.Бухштабером и автором доказано, что этому свойству удовлетворяют также простые 3-мерные многогранники с 5-, 6- и одной 7-угольной гранью.

Из классических результатов Т.Уолла, П.Джуппа и А.В.Жубра следует, что два замкнутых односвязных ориентированных 6-многообразия диффеоморны тогда и только тогда, когда существует изоморфизм их колец когомологий, который переводит первый класс Понтрягина в первый класс Понтрягина и при редукции по модулю два переводит второй класс Штифеля-Уинтни во второй класс Штифеля-Уитни. В работах С.Чоя, М.Масуды и Д.Ю.Су показано, что любой изоморфизм градуированных колец когомологий квазиторических многообразий при приведении по модулю два переводит классы Штифеля-Уитни в классы Штифеля-Уитни. Результат опирается на то, что кольцо когомологий любого квазиторического многообразий мультипликативно порождено двумерными классами когомологий.

Приведём основной результат автора.

Теорема. *Для простых* 3*-многогранников без* 3*- и* 4*-поясов изоморфизм градуированных колец целочисленных когомологий квазиторических многообразий переводит первый класс Понтрягина в первый класс Понтрягина.*

Таким образом, квазиторические многообразия над такими многогранниками диффеоморфны тогда и только тогда, когда их градуированные кольца целочисленных когомологий изоморфны.

В связи с перечисленными результатами актуальной стала задача оценить, насколько широк класс простых 3-многогранников без 3-и 4-поясов. Автором построены примеры простых 3-многогранников без 3-угольников и 4-угольников, которые, тем не менее, имеют 3- или 4-пояс. Автором доказано, что срезка $s \in \{2, \dots, k-4\}$ последовательных рёбер k-угольной грани и связная сумма вдоль граней двух многогранников не выводят за пределы этого класса многогранников. Более того, для любой финитной последовательности неотрицательных целых чисел $(p_k | k > 6)$ существует простой многогранник в этом классе, у которого p_k – числа его k-угольных граней, причём $p_3 = p_4 = 0$ и $p_5 = \sum\limits_{k\geqslant 7}(k-6)p_k$.

II. Комбинаторика простых 3-многогранников с не более чем 6-угольными гранями. Класс многогранников, указанных в заголовке, находится в центре внимания благодаря фундаментальной работе W. P. Thurston, “Shapes of polyhedra and triangulations of the sphere *Geometry and Topology Monographs*, Volume 1 (1998), pp. 511–549.

Назовём *фрагментом* диск, ограниченный простым рёберным циклом на простом 3-многограннике. Обозначим класс простых 3-многогранников с не более чем 6-угольными гранями через $\mathcal{P}_6$, а множество фрагментов на таких многограниках через $\mathcal{D}_6$. Из формулы Эйлера для любого многогранника из $\mathcal{P}_6$ получаем $3p_3 + 2p_4 + p_5 = 12$. Назовём дефектом фрагмента величину $\pi = 3p_3 + 2p_4 + p_5$.

Рассмотрим замощение плоскости $\mathbb{R}^2$ правильными шестиугольниками. Для трёх шестиугольников с общей вершиной возьмём векторы $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$, соединяющие центр одного шестиугольника с центрами остальных шестиугольников. Для неотрицательных целых чисел (p, q), $p \geqslant q$, рассмотрим вектор $\mathbf{c} = p\mathbf{a}_1 + q\mathbf{a}_2$. Факторизация плоскости по вектору $\mathbf{c}$ задаёт разбиение цилиндра на шестиугольники. Рассмотрим замкнутую цепочку граней на цилиндре, которая получается, если от заданного шестиугольника пройти p раз вдоль вектора $\mathbf{a}_1$ и q раз вдоль вектора $\mathbf{a}_2$ в произвольном порядке. Граница этой цепочки состоит из двух простых рёберных циклов, которые получаются друг из друга переносом на вектор $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. Если поверхность многогранника $P \in \mathcal{P}_6$ комбинаторно эквивалентна поверхности, получающейся разрезанием цилиндра вдоль двух таких параллельных циклов и заклеиванием циклов фрагментами из $\mathcal{D}_6$ с $\pi(D)=6$, то P называется *нанотрубкой типа* (p,q).

Основной результат автора можно сформулировать следующим образом.

Теорема. *Для любого $k \geqslant 3$ существует конечный набор фрагментов $\mathcal{Q}_k \subset \mathcal{D}_6$ с $\pi(Q)=6$ для всех $Q \in \mathcal{Q}_k$, такой что семейства многогранников $\mathcal{S}_k \subset \mathcal{P}_6$, $\mathcal{S}_3 \subset \mathcal{S}_4 \subset \dots \subset \mathcal{S}_k$, где каждый многогранник в $\mathcal{S}_k \setminus \mathcal{S}_{k-1}$ состоит из последовательности $r \geqslant 0$ примыкающих друг к другу k-поясов шестиугольников и двух примыкающих к ним фрагментов из $\mathcal{Q}_k$, обладают следующими свойствами:*

(1) *все многогранники в $\mathcal{S}_k$, кроме конечного числа, являются нанотрубками;*
(2) *многогранник $P \in \mathcal{P}_6$ принадлежит $\mathcal{S}_k$ тогда и только тогда, когда он содержит фрагмент из $\mathcal{Q}_k$;*
(3) *многогранник $P \in \mathcal{P}_6$ принадлежит хотя бы одному семейству S_k тогда и только тогда, когда он содержит фрагмент с дефектом, равным шести.*
(4) *любой фуллерен P имеет фрагмент, состоящий из шести пятиугольников, и принадлежит хотя бы одному семейству $\mathcal{S}_k$, $k \geqslant 5$.*

Таким образом, фрагменты из $\mathcal{Q}_k$ накладывают жёсткие условия на комбинаторику многогранника P, содержащего один из таких фрагментов.

Пример 1. Множество $\mathcal{Q}_3$ состоит из шести фрагментов. Первый фрагмент состоит из трёх сходящихся в одной вершине четырёхугольников. Второй и третий фрагмент получаются из первого последовательной срезкой одной и двух внутренних вершин. Эти фрагменты отвечают нанотрубкам типа $(3,0)$. Четвёртый фрагмент состоит из сходящихся в одной вершине треугольника, четырёхугольника и пятиугольника. Пятый фрагмент получается из него срезкой внутренней вершины. Шестой фрагмент получается из пятого срезкой вершины, в которой сходятся треугольник, четырёхугольник и пятиугольник. Эти фрагменты отвечают нанотрубкам типа $(2,1)$.

Пример 2. Фрагмент из пятиугольника, окружённого пятью пятиугольниками, является жёстким для фуллеренов: если фуллерен содержит такой фрагмент, то он является нанотрубкой типа $(5,0)$ и получается из двух таких фрагментов вставкой любого числа 5-поясов шестиугольников между ними.

2. Опубликованные и принятые к печати работы

[BE16a] Victor M. Buchstaber, Nikolay Yu. Erokhovets, «Fullerenes, Polytopes and Toric Topology», Singapore Lecture Notes, 2016, 117pp., arXiv: 609.02949v1.

[BEPMP16] В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец, М.Масуда, Т.Е.Панов, С.Пак, «Когомологическая жёсткость многообразий, задаваемых трёхмерными многогранниками», УМН, 2017, arXiv:1610.07575v1.

[BE16b] Victor M. Buchstaber, Nikolay Yu. Erokhovets, «Finite sets of operations sufficient to construct any fullerene from C_{20}», Structural Chemistry, 2016, 1–10, DOI:10.1007/s11224-016-0885-8.

[E16m1] Н.Ю. Ероховец, «Жёсткие фрагменты на простых трёхмерных многогранниках с не более чем шестиугольными гранями», Материалы XII Международного семинара «Дискретная математика и ее приложения» имени академика О. Б. Лупанова (Москва, МГУ, 20–25 июня 2016 г.), место издания Изд-во механико-математического факультета МГУ Москва, с. 354-357.

[E16m2] Н.Ю. Ероховец, «Конструкция фуллеренов», Труды XIII Всероссийской (с международным участием) научной школы "Математические исследования в естественных науках Апатиты, 2016, с. 31-38.

[E16t1] Nikolay Erokhovets, «Construction of fullerenes by truncations», Тезисы докладов 7 Европейского математичекого конгресса в Берлине, с. 546, 2016.

[E16t2] Nikolay Erokhovets, «Construction of fullerenes by truncations», Тезисы докладов международной конференции «4-th International Workshop 'Analysis, Geometry And Probability'», Москва, с. 37-38, 2016.

[E16t3] Nikolay Erokhovets, «Rigidity in the cohomology of moment-angle manifolds of simple 3-polytopes» Тезисы международной конференции «Toric Topology 2016 in Kagoshima», Япония, https://sites.google.com/site/torictopology2016/

[E18t4] Н.Ю. Ероховец, «Жёсткость в когомологиях момент-угол и квазиторических многообразий трёхмерных многогранников», Тезисы докладов международной конференции «Александровские чтения 2016», Москва, с. 18-19.

[E18t5] Н.Ю. Ероховец, «Комбинаторика и торическая топология фуллеренов», Материалы международной научной конференции «XII Белорусская математическая конференция». Часть 1, Институт математики НАН Беларуси, Минск, Беларусь, с. 65-66.

3. Участие в конференциях и школах

(1) Workshop «Soft packings, nested clusters, and condensed matter», AIM, Сан-Хосе, США, 19-23 сентября 2016.
Доклад *Problems of the mathematical theory of fullerenes*

(2) 7-ом Европейском математическом конгрессе, Берлин, Германия, 18-22 июля 2016.
20-минутный доклад *Construction of fullerenes by truncations*.

(3) XII Международный научный семинар «Дискретная математика и ее приложения» имени академика О. Б. Лупанова, Москва, 20-25 июня 2016.
Доклад *Жёсткие фрагменты на простых трёхмерных многогранниках с не более чем шестиугольными гранями*.

(4) Международная конференция «Александровские чтения 2016», Москва, 23-25 мая 2016. Доклад *Rigidity in the cohomology of moment-angle manifolds of simple 3-polytopes*.

(5) Международная конференция «Торическая топология в Кагосиме», Кагосима, Япония, 19-23 марта 2016.
Доклад *Rigidity in the cohomology of moment-angle manifolds of simple 3-polytopes*

(6) XIII Всероссийская (с международным участием) научная школа "Математические исследования в естественных науках Апатиты, Россия, 17-18 октября 2016.
Доклад *Конструкция фуллеренов*.

(7) Международная научная конференция «XII Белорусская математическая конференция», Минск, Беларусь, 5-10 сентября 2016.
Доклад *Комбинаторика и торическая топология фуллеренов*.

(8) Ломоносовские чтения - 2016, МГУ им. М.В. Ломоносова, Россия, 18-27 апреля 2016.
Доклад *Реализация фуллеренов при помощи усечений рёбер многогранников*.

4. Работа в научных центрах и международных группах

(1) Участник русско-китайского гранта РФФИ 16-51-55017 Китай-а, «Алгебраическая топология, геометрия и комбинаторика многообразий» (руководитель Т.Е. Панов)

(2) Участие в симпозиуме «Soft packings, nested clusters, and condensed matter», AIM, Сан-Хосе, США, 19-23 сентября 2016 (Организаторы: Н.П.Долбилин, Karoly Bezdek, Egon Schulte, Marjorie Senechal). Приглашён сделать доклад на специальной сессии Американского математического конгрессе в той же научной группе.

5. Педагогическая деятельность

На механико-математическом факультете МГУ:

(1) Весной 2016 года вёл учебный семинар по линейно алгебре у первого курса механиков.

(2) Осенью 2016 года вёл учебный семинар по аналитической геометрии у первого курса математиков.

(3) Совместно с В.М. Бухштабером, Т.Е. Пановым и А.А. Гайфуллиным руководил учебно-научным семинаром «Геометрия и топология» для студентов и аспирантов. Программа этого семинара во многом связана с задачами в рамках проекта.

(4) Разработал спецкурс «Теория выпуклых многогранников и элементы торической топологии», вторую часть которого прочитал весной 2016 года.

(5) Осенью 2016 года совместно с В.М. Бухштабером и Т.Е. Пановым читал лекции спецкурса «Геометрия и топология торических многообразий».