КОМБИНАТОРИКА ВЫПУКЛЫХ МНОГОГРАННИКОВ И ПРИЛОЖЕНИЯ К ФУЛЛЕРЕНАМ. ОТЧЁТ ЗА 2017 ГОД.

Н. Ю. ЕРОХОВЕЦ.

1. Результаты, полученные в этом году

Новые результаты, полученные в этом году, относятся к теме **Комбинаторика простых 3-многогранников с не более чем 6-угольными гранями.**

Ставшая широко известной работа У. Тёрстона "Shapes of polyhedra and triangulations of the sphere *Geometry and Topology Monographs*, Volume 1 (1998), pp. 511–549 посвящена комбинаторной геометрии многогранников с k-угольными гранями, где $k \leqslant 6$. Семейство таких многогранников мы обозначаем $\mathcal{P}_{\leqslant 6}$. Оно оказалось интересным с разных точек зрения. Для многогранника $P \in \mathcal{P}_{\leqslant 6}$ двойственная триангуляция сферы ∂P имеет в каждой вершине не более шести 3-угольников. Если считать все 3-угольники правильными, получится пространство X, локально изометричное плоскости, за исключением вершин валентности, меньшей 6. Если определить *кривизну вершины* пространства X как разность между 2π и суммой углов в вершине, то кривизна каждой вершины неотрицательна. В работе У. Тёрстона предложен метод перечисления всех таких триангуляций. В 2014 году Ф. Кардош, опираясь на компьютерные вычисления, получил доказательство давно известной гипотезы Д. Барнетта о том, что на каждом многограннике $P \in \mathcal{P}_{\leqslant 6}$ существует *гамильтонов цикл*, то есть простой рёберный цикл, проходящий через все вершины. Также семейство $\mathcal{P}_{\leqslant 6}$ содержит *фуллерены*, то есть простые 3-мерные многогранники только с 5- и 6-угольными гранями. Важный подкласс среди фуллеренов составляют *IPR-фуллерены* – фуллерены без смежных 5-угольников.

Основными инструментами нашего исследования были *k-пояса* граней многогранника и *простого разбиения диска*, а также операции перестройки многогранников и разбиений диска. *k-поясом* называется циклическая последовательности k граней с пустым общим пересечением, в которой грани смежны тогда и только тогда, когда следуют друг на другом. В работах Е.М. Андреева 1970 года k-пояс называется *k-угольным призматическим элементом. Простым разбиением диска* мы называем разбиение 2-мерного круга на многоугольники, задаваемое простым связным плоским графом, все грани которого ограничены простыми циклами из не менее чем трёх рёбер, которые для разный граней либо не пересекаются, либо пересекаются по ребру. Примером простого разбиения диска является *фрагмент* простого 3-многогранника – часть многогранника, ограниченная простым рёберным циклом.

Мы доказываем, что каждое простое разбиение диска можно получить из простейших разбиений, состоящих из одной, двух или трёх граней с общей вершиной при помощи операций: A_1 – связной суммы вдоль граней, A_2 – связной суммы вдоль пар граней и A_3 – добавления пояса вокруг разбиения (Рис 1). Множество простых разбиений диска на не более чем 6-угольные обозначим $\mathcal{D}_{\leqslant 6}$. Оно замечательно тем, что если $D \in \mathcal{D}_{\leqslant 6}$ и $\pi(D) = 3p_3 + 2p_4 + p_5 \leqslant 6$, где p_k – число k-угольников, то

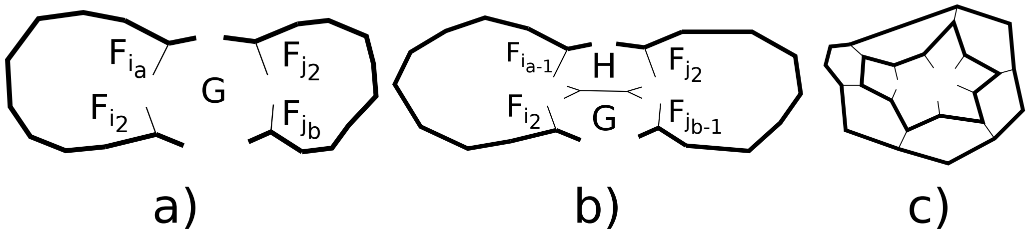

Рис. 1. Операции с простыми разбиениями диска

число μ_3 вершин валентности 3 на границе диска не уменьшается при операциях. В частности из этого следует известный результат Дж. Борнхёфта, Г. Бинкмана и Дж. Греинуса (2003), что простых разбиений диска на не более чем 6-угольные грани с $\pi(D) < 5$ и фиксированным числом $\mu_3(D)$ конечно.

Набор разбиений диска называется *характеристическим* для семейства многогранников из некоторого класса, если многогранник из класса принадлежит семейству тогда и только тогда, когда он содержит фрагмент из набора. Мы предлагаем индуктивную конструкцию конечных множеств $\mathcal{Q}_i \subset \mathcal{D}_{\leqslant 6}$ простых разбиений диска с $\mu_3(D) = i$ и $\pi(D) = 6$ и конструкцию семейств многогранников $\mathfrak{P}_i \subset \mathcal{P}_{\leqslant 6}$, поверхность которых получается добавлением набора i-поясов 6-угольников к разбиению из $\mathcal{Q}_i$ и приклеиванием вдоль границы ещё одного разбиения из $\mathcal{Q}_i$, и доказываем, что набор $\bigsqcup_{j \leqslant k} \mathcal{Q}_j$ является характеристическим для $\mathfrak{P}_i$ в классе $\mathcal{P}_{\leqslant 6}$. Мы показываем, что все многогранники в $\mathfrak{P}_i$, кроме конечного числа, являются обобщёнными нанотрубками и любой фуллерен принадлежит хотя бы одному семейству $\mathfrak{P}_i$. Мы получаем приложение этих результатов для классификации k-поясов фуллеренов, $k \leqslant 6$, IPR-фуллеренов, $k \leqslant 9$, и простых многогранников с 5-,6- и одной 7-угольной гранью, $k \leqslant 5$. Также мы приводим ряд примеров характеристических наборов фрагментов для семейств фуллеренов.

Приведём более подробно основные конструкции и результаты.

Конструкция 1.0.1 ($(2,0)$-нанотрубки)**.** 1) Склеим двумерный диск из двух 3-угольников по ребру и цилиндр из двух 6-угольников по паре противоположных рёбер; 2) приклеим цилиндр к диску вдоль границы так, чтобы 3-валентные вершины склеивались с 2-валентными; получим диск с такой же окрестностью границы; 3) повторим шаг 2) $r \geqslant 1$ раз; 4) приклеим к границе диска снова два склеенных 3-угольника. Назовём комбинаторный тип получившегося сферического графа $(2,0)$-*нанотрубкой.* Обозначим семейство $(2,0)$-нанотрубок $\mathcal{N}$.

Теорема 1.0.1. *Пусть G – 3-валентный связный сферический граф с менее чем одной вершиной и $p_1(G) = p_2(G) = 0$, $p_7(G) \leqslant 1$ и $p_k(G) = 0$, $k \geqslant 8$. Тогда*

(1) *G является простым графом и каждая его грань ограничена простым рёберным циклом;*
(2) *если G не имеет двух смежных 3-угольников, то если границы двух граней пересекаются, то по общему ребру; таким образом, G комбинаторно эквивалентен графу простого 3-многогранника;*
(3) *если $p_7 = 0$ и G имеет два смежных 3-угольника, то G комбинаторно эквивалентен графу тетраэдра или $(2,0)$-нанотрубке; если границы двух граней такого графа пересекаются более чем по одному ребру, то эти грани совпадают с двумя 6-угольниками, образующими цилиндр в конструкции 1.0.1.*

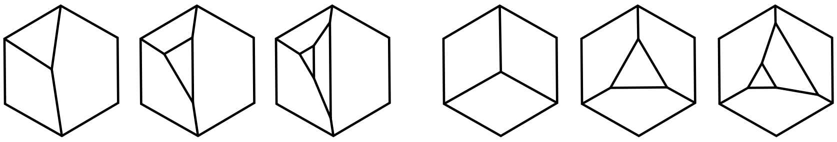

Рис. 2. Множество разбиений $\mathcal{Q}_3$

В работе М. Деза, М. Дютур Сикирича, М.И. Штогрина (2013) результаты пунктов 1) и 2) доказаны для 3-валентных графов, у которых все грани имеют 5- или 6-сторон, а также сформулированы для случая, когда дополнительно разрешается одна k-угольная грань, $k \in \{3,4,7\}$.

Обозначение 1.0.1. Положим $\mu_i(D)$ – число граничных вершин разбиения D валентности i, $i = 2,3$, $p_k(D)$ – число k-угольников разбиения и $\pi(D) = 3p_3 + 2p_4 + p_5$. Обозначим через $\mathcal{D}_{i,j}$ множество всех простых разбиений диска, у которых $\mu_3 = i$ и $\mu_2 = j$. Положим $\mathcal{D}_i = \bigsqcup_{j\geqslant 0} \mathcal{D}_{i,j}$ и $\mathcal{D} = \bigsqcup_{i\geqslant 0} \mathcal{D}_i$.

Конструкция 1.0.2. Для $i \geqslant 0$, $i \neq 1$, построим индуктивно конечные множества:

(1) $\mathcal{R}_i = \bigsqcup\limits_{i<j} \mathcal{R}_{i,j}$, где $\mathcal{R}_{i,j} \subset \mathcal{D}_{i,j} \cap \mathcal{D}_{\leqslant 6}$ и $\pi(R) = 6 - j + i < 6$ для $R \in \mathcal{R}_{i,j}$;

(2) $\mathcal{Q}_i \subset \mathcal{D}_{i,i} \cap \mathcal{D}_{\leqslant 6}$, где $\pi(Q) = 6$ для $Q \in \mathcal{Q}_i$,

по следующему правилу:

(1) $\mathcal{R}_{0,j}$ состоит из j-угольника; $\mathcal{Q}_0 = \varnothing$;

(2) $\mathcal{R}_2$ состоит из пар смежных m_1- и m_2-угольников, $(m_1, m_2) \neq (3,3)$; $\mathcal{Q}_2$ состоит из двух смежных 3-угольников;

(3) $\mathcal{R}_3$ и $\mathcal{Q}_3$ состоят из троек многоугольников с общей вершиной, не содержащих двух 3-угольников, а также разбиений, получаемых добавлением 3-пояса вокруг разбиений из $\mathcal{R}_{0,3}$ и $\mathcal{R}_{2,3}$ (см. Рис. 2);

(4) множества $\mathcal{R}_k$ и $\mathcal{Q}_k$, $k \geqslant 4$, получаются из множеств $\mathcal{R}_l$, $0 \leqslant l < k$, при помощи операций A_1, A_2, A_3, так что в $\mathcal{Q}_k$ не включаются разбиения, содержащие разбиения из $\mathcal{Q}_l$, $l < k$.

Теорема 1.0.2. *Пусть $D \in \mathcal{D}_k \cap \mathcal{D}_{\leqslant 6}$, $k \geqslant 0$, и $\pi(D) \leqslant 6$. Тогда*

(1) *если $\pi(D) < 6$, то $\mathcal{D} \in \mathcal{R}_k$;*

(2) *если $\pi(D) = 6$, то D получается добавлением $r \geqslant 0$ k-поясов 6-угольников вокруг разбиения $D_1 \in \mathcal{D}_k \cap \mathcal{D}_{\leqslant 6}$, такого что его граничная петля не является поясом 6-угольников, $\pi(D_1) = 6$ и либо $D_1 \in \mathcal{Q}_k$, либо D_1 содержит разбиение из $\mathcal{Q}_l$, $l < k$.*

Конструкция 1.0.3. По множеству $\mathcal{Q}_k$, $k \geqslant 2$, построим семейство многогранников и $(2,0)$-нанотрубок $\mathfrak{P}_k \subset \mathcal{P}_{\leqslant 6} \sqcup \mathcal{N}$: $\mathfrak{P}_2 = \{\Delta^3\} \sqcup \mathcal{N}$; для $k \geqslant 3$ 1) возьмём разбиение $Q \in \mathcal{Q}_k$; 2) добавим вокруг него $r \geqslant 0$ k-поясов 6-угольников, если это возможно; 3) приклеим к получившемуся разбиению вдоль границы некоторое разбиение $Q' \in \mathcal{Q}_k$, если это возможно. По теореме 1.0.1 полученный сферический граф является графом многогранника из $\mathcal{P}_{\leqslant 6}$, если он не содержит двух смежных 3-угольников, в частности если $r > 0$; иначе он является $(2,0)$-нанотрубкой. Положим $\mathfrak{P}_{\leqslant k} = \bigcup_{l\leqslant k} \mathfrak{P}_l$.

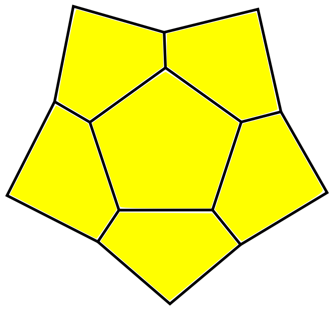

Рис. 3. Разбиение диска C_1

Утверждение 1.0.1. *Все многогранники в $\mathfrak{P}_k$, кроме конечного числа, являются обобщёнными (p,q)-нанотрубками с $p+q=k$.*

Определение 1.0.1. Назовём k-пояс *тривиальным*, если он окружает некоторую k-угольную грань. Иначе назовём k-пояс *нетривиальным*. Назовём k-пояс $\mathcal{B}$ многогранника $P\in\mathcal{P}_{\leqslant 6}$ *невырожденным*, если $\pi(W_i)=6$ для каждой компоненты связности W_1, W_2 дополнения $\partial P\setminus \operatorname{int}|\mathcal{B}|$. Иначе назовём k-пояс *вырожденным*.

Тривиальный пояс является вырожденным. Невырожденный пояс состоит из 6-угольников.

Теорема 1.0.3. *Пусть $\mathcal{B}$ – k-пояс многогранника $P\in\mathcal{P}_{\leqslant 6}$. Тогда*

(1) *если $\mathcal{B}$ – вырожденный пояс, то он примыкает к фрагменту из $\mathcal{R}_{i,k}$, $i<k$;*
(2) *если $\mathcal{B}$ – невырожденный пояс, то либо $P\in\mathfrak{P}_{\leqslant k-1}$, либо $P\in\mathfrak{P}_k$ и $\mathcal{B}$ – один из добавляемых в конструкции k-поясов 6-угольников.*

Теорема 1.0.4. *Если многогранник $P\in\mathcal{P}_{\leqslant 6}$ содержит фрагмент $D\in\mathcal{D}_k$ с $\pi(D)=6$, то $P\in\mathfrak{P}_{\leqslant k}$.*

Следствие 1.0.1. *Набор $\bigsqcup_{i=2}^{k}\mathcal{Q}_i$ является характеристическим для семейства многогранников и $(2,0)$-нанотрубок $\mathfrak{P}_{\leqslant k}$ в классе $\mathcal{P}_{\leqslant 6}\sqcup\mathcal{N}$.*

Теорема 1.0.5. *Каждый фуллерен принадлежит хотя бы одному семейству $\mathfrak{P}_k$.*

Замечание 1.0.1. Теоремы 1.0.2, 1.0.4 и 1.0.3 обобщают результаты отчёта 2016, в которых доказано существование множеств типа $\mathcal{R}_k$ и $\mathcal{Q}_k$ для фрагментов многогранников из $\mathcal{P}_{\leqslant 6}$. Теперь мы даём явную конструкцию этих множеств при помощи операций A_1, A_2 и A_3, а также рассматриваем все простые разбиения диска, а не только фрагменты многогранников из $\mathcal{P}_{\leqslant 6}$.

Теорема 1.0.6. *Пусть P – простой 3-мерный выпуклый многогранник с 5-, 6- и не более чем одной 7-угольной гранью. Тогда*

(1) *P не имеет 3- и 4-поясов.*
(2) (a) *каждый 5-угольник окружён тривиальным 5-поясом, который с одной стороны имеет граничный рёберный код $(1,1,1,1,1)$;*
    (b) *любой нетривиальный 5-пояс с одной стороны имеет граничный рёберный код $(2,2,2,2,2)$ и ограничивает с этой стороны фрагмент, получаемый добавлением 5-поясов 6-угольников вокруг разбиения C_1 (Рис. 3).*

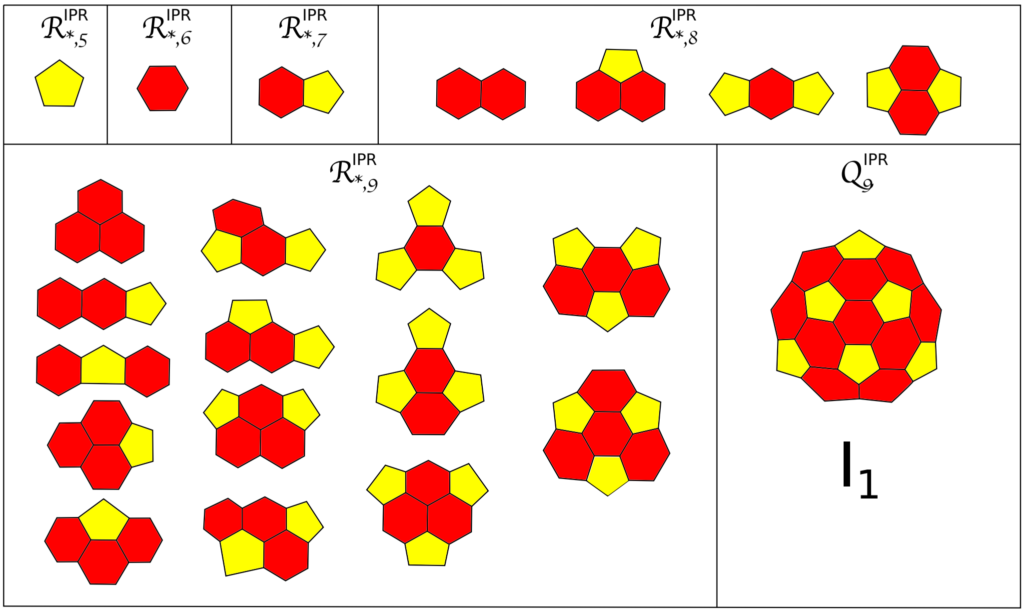

Рис. 4. Простые разбиения диска в $\mathcal{R}^{IPR}_{*,j}$ и $\mathcal{Q}^{IPR}_{j}$, $5 \leqslant j \leqslant 9$

Конструкция 1.0.4 ($(9,0)$-IPR-нанотрубки)**.** 1) Возьмём разбиение диска I_1; 2) добавим вокруг него 9-пояс 6-угольников; *получим простое разбиение диска с таким же граничным кодом*; 3) для $r \geqslant 0$ проведём r раз шаг 2); 3) приклеим к границе получившегося разбиения фрагмент I_1, так чтобы получилось 3-валентное разбиение сферы. По теореме 1.0.1 существует фуллерен с таким комбинаторным типом. Обозначим это семейство фуллеренов $\mathfrak{I}_1$. Для $r > 0$ каждый фуллерен является $(9,0)$-нанотрубкой. Для $r = 0$ получаем бакминстерфуллерен C_{60}.

Теорема 1.0.7. *Пусть P – IPR-фуллерен. Тогда*

(1) *каждый его* 5*- или* 6*-пояс тривиален;*
(2) *каждый его* 7*- или* 8*-пояс является вырожденным и окружает фрагмент из $\mathcal{R}^{IPR}_{*,7}$ или $\mathcal{R}^{IPR}_{*,8}$ (см. Рис. 4);*
(3) (a) *каждый его вырожденный* 9*-пояс окружает фрагмент из $\mathcal{R}^{IPR}_{*,9}$;*
(b) *если P имеет невырожденный* 9*-пояс, то $P \in \mathfrak{I}_9$ для $r \geqslant 1$ и этот пояс является одним из* 9*-поясов* 6*-угольников, добавляемых в конструкции 1.0.4.*

Теорема 1.0.8. *Фрагмент I_1 является характеристическим для семейства $\mathfrak{I}$ в классе IPR-фуллеренов.*

Назовём бесконечный плоский граф *локально конечным*, если каждая точка плоскости имеет окрестность, содержащую конечное число вершин и имеющую непустое пересечение только с конечным числом рёбер и граней графа.

Определение 1.0.2. *Простым разбиением R плоскости на многоугольники* назовём её разбиение, которое задаётся простым бесконечным плоским локально конечным 3-валентным графом, у которого каждая грань ограничена, в качестве границы имеет простой рёберный цикл, и если граничные циклы двух граней имеют непустое пересечение, то оно является их общим ребром.

Теорема 1.0.9. *Пусть R – простое разбиения плоскости на не более чем 6-угольники. Тогда*

$$\pi(R) = 3p_3(R) + 2p_4(R) + p_5(R) \leqslant 6.$$

2. Опубликованные и принятые к печати работы

[BE17a] В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец, *Конструкции семейств трехмерных многогранников, характеристические фрагменты фуллеренов и многогранники Погорелова*, Изв. РАН. Сер. матем., 81:5 (2017), 15–91.

[BEMPP17] В.М. Бухштабер, Н.Ю. Ероховец, М. Масуда, Т.Е. Панов, С. Пак, *Когомологическая жёсткость многообразий, задаваемых трёхмерными многогранниками*, УМН, 72:2(434) (2017), 3–66.

[BE17b] Victor M. Buchstaber, Nikolay Yu. Erokhovets, *Finite sets of operations sufficient to construct any fullerene from C_{20}*, Structural Chemistry, 28:1 (2017), 225–234.

[BE17c] V. M. Buchstaber, N.Yu. Erokhovets, *Fullerenes, polytopes and toric topology*, in Volume 35 «Combinatorial and Toric Homotopy: Introductory Lectures» of the Lecture Notes Series, Institute for Mathematical Sciences, National University of Singapore, pp. 67–178, Inst. Math. Sci. Natl. Univ. Singap., World Sci. Publ., River Edge, NJ, 2017.

3. Участие в конференциях и школах

(1) Рождественские математические встречи с Пьером Делинем, 4-6 января 2017, НМУ, Москва, Доклад *Combinatorics and toric topology of Pogorelov polytopes*.
(2) "Британско-Российский семинар по торической топологии и теории гомотопий 14-15 марта 2017, Москва, Россия, Доклад *Toric topology, and combinatorics of fullerenes and Pogorelov polytopes*.
(3) Ломоносовские чтения - 2017, МГУ им. М.В. Ломоносова, Россия, 17-26 апреля 2017.
Доклад *Конструкции семейств трёхмерных многогранников, характеристические фрагменты фуллеренов и многогранники Погорелова*.
(4) Princeton-Rider Workshop on the Homotopy Theory of Polyhedral Products, Princeton University, Rider University, USA. Приглашённый доклад *Toric topology and combinatorics of fullerenes and Pogorelov polytopes*.
(5) Международная открытая Китайско-Русская конференция "Algebraic topology, geometry and combinatorics of manifolds Санья, Китай, 5-9 декабря, 2017. Приглашенный доклад *Toric topology and combinatorics of fullerenes and Pogorelov polytopes*.

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).

5. Педагогическая деятельность

На механико-математическом факультете МГУ:

(1) Весной 2017 года вёл учебный семинар по линейно алгебре у первого курса механиков.
(2) Осенью 2017 года вёл учебный семинар по аналитической геометрии у первого курса математиков.

(3) Совместно с Т.Е. Пановым руководил учебно-научным семинаром «Геометрия и топология» для студентов и аспирантов. Программа этого семинара во многом связана с задачами в рамках проекта.
(4) Весной 2017 года совместно с В.М. Бухштабером и Т.Е. Пановым читал лекции спецкурса «Геометрия и топология торических многообразий».
(5) Осенью 2017 года совместно с В.М. Бухштабером и Т.Е. Пановым читал лекции спецкурса «Алгебраическая топология».