КОМБИНАТОРИКА ВЫПУКЛЫХ МНОГОГРАННИКОВ И ПРИЛОЖЕНИЯ К ФУЛЛЕРЕНАМ. ИТОГОВЫЙ ОТЧЁТ ЗА 2018 ГОД.

Н. Ю. ЕРОХОВЕЦ.

1. Результаты, полученные в этом году

I. [E18] Комбинаторный простой трёхмерный многогранник P называется *многогранником Погорелова*, если он может быть реализован в пространстве Лобачевского $\mathbb{L}^3$ в виде **ограниченного** многогранника с прямыми двугранными углами. Согласно результатам А.В. Погорелова (1967) и Е.М. Андреева (1970) это условие эквивалентно тому, что P отличен от тетраэдра и не имеет 3- и 4-поясов, где *k-поясом* трёхмерного многогранника называется циклическая последовательность граней, в которой пересекаются последовательные грани и только они, и никакие три грани не имеют общей вершины. *Фуллереном* называется простой трёхмерный многогранник только с 5- и 6-угольными гранями. Из результатов Т. Дошлича (1998,2003) следует, что любой фуллерен является многогранником Погорелова. 7-*диск-фуллереном* называется простой трёхмерный многогранник, у которого одна грань является 7-угольником, а остальные – 5- и 6-угольниками. В 2015 году автором было доказано, что любой 7-диск фуллерен также является многогранником Погорелова. В этом году мы показали, что никакие другие ограничения на числа k-угольников, $k \neq 6$, не гарантируют того, что многогранник является многогранником Погорелова. Напомним, что имеет место классическая формула, связывающая числа k-угольников p_k простого многогранника:

$$3p_3 + 2p_4 + p_5 = 12 + \sum_{k\geqslant 7}(k-6)p_k. \tag{1}$$

Для многогранника Погорелова $p_3 = p_4 = 0$. Таким образом, число пятиугольников определяется числами k-угольников с $k \geqslant 7$. Известна теорема В. Эберхарда (1891) о том, что для любого набора p_k, $k \neq 6$, удовлетворяющего формуле (1), существует простой многогранник с некоторым числом p_6 шестиугольников и заданными числами p_k, $k \neq 6$. В 2017 году автором было показано, что если $p_3 = p_4 = 0$, то такой многогранник можно выбрать в классе многогранников Погорелова.

В отчётном году *для любого набора p_k, $k \geqslant 7$, такого что $\sum_{k\geqslant 7} p_k > 1$ или $p_7 = 0$ и $\sum_{k\geqslant 7} p_k = 1$ дана явная конструкция комбинаторных многогранников P и Q с заданными числами k-угольников, $k \geqslant 7$, и некоторыми числами p_6 шестиугольников, такие что P является многогранником Погорелова, а Q имеет 3-пояс, то есть не является даже флаговым многогранником.* При этом конструкция не использует теорему Эберхарда.

II. Был рассмотрен класс многогранников, называемый нами *почти погореловскими*, которые отличны от тетраэдра, не имеют 3-поясов, то есть являются флаговыми, и любой 4-пояс которых окружает грань. В литературе они известны также как многогранники с сильно циклически 4-рёберно связными графами. В 1977 году Д. Барнеттом была получена конструкция таких многогранников, отличных от куба I^3 и 5-угольной призмы $M_5 \times I$, из трёхмерного многогранника Сташефа As^3 (представляющего собой куб с тремя срезанными попарно несмежными рёбрами), при помощи операций срезки ребра и пары смежных рёбер. Благодаря идее Т.Е. Панова на основе теорем Е.М. Андреева (1970) удалось показать, что имеется биекция между множеством почти погореловских многогранников, отличных от I^3 и $M_5 \times I$, и множеством многогранников, реализуемых в пространстве Лобачевского в виде многогранников **конечного объёма** с прямыми двугранными углами. У многогранников последнего класса все вершины, лежащие внутри пространства $\mathbb{L}^3$, имеют валентность 3, а вершины, лежащие на абсолюте, – валентность 4. Биекция задаётся срезкой 4-валентных вершин.

Основным результатом автора в этой области является то, что *каждый почти погореловский многогранник $P \neq I^3, M_5 \times I$, получается срезкой дизъюнктного набора рёбер некоторого почти погореловского многогранника Q или многогранника P_8 (представляющего собой куб с двумя срезанными несмежными рёбрами), производящим все четырёхугольники многогранника P. При этом срезка дизъюнктного набора рёбер почти погореловского многогранника Q или многогранника P_8 даёт почти погореловский многогранник тогда и только тогда, когда либо набор состоит из одного ребра куба, либо каждый 4-угольник, содержащий ребро из набора, пересекает другое ребро из набора по вершине; причём для многогранника P_8 набор должен содержать ребро пересечения двух 5-угольников.*

Отметим, что когда мы получаем четырёхугольную грань почти погореловского многогранника при помощи срезки ребра другого почти погореловского многогранника или многогранника P_8, для соответсвующего прямоугольного многогранника это отвечает тому, что 4-валентную вершину мы превращаем в пару 3-валентных вершин, соединённых ребром. Стягивая ребро, мы возвращаемся обратно.

Иллюстрацию этого результата дают *идеальные многогранники*, у которых все вершины лежат на абсолюте. Каждый такой многогранник отвечает почти погореловскому многограннику, получаемому срезкой совершенного паросочетания (то есть дизъюнктного набора рёбер, покрывающему все вершины) почти погореловского многогранника или многогранника P_8, не содержащего противоположных рёбер четырёхугольников. И обратно, совершенное паросочетание, не содержащее противоположных рёбер четырёугольников, задаёт идеальный многогранник.

Отметим, что одному и тому же идеальному многограннику могут отвечать разные многогранники с разными совершенными паросочетаниями. Такие многогранники вместе с совершенными паросочетаниями отличаются флипами – «поворотами рёбер» паросочетания.

III. [BBDEGKS18] В работах Б.Н. Делоне и Н.П. Долбилина была заложена математическая теория, описывающая принцип кристаллообразования. В основе лежит идея, что локальные условия одинаковости окрестностей атомов влекут глобальную регулярность кристалла. Множеством Делоне X с параметрами (r, R) называется дискретное множество в $\mathbb{R}^d$, такое что для любой точки $y \in \mathbb{R}^d$ открытый шар $B_r^o(y)$ радиуса r с центром в этой точке содержит не более одной точки из X, а замкнутый шар $B_R(y)$ содержит не менее одной точки из X. ρ-кластером $C_\rho(x)$ точки $x \in X$ называется множество $B_\rho(x) \cap X$ всех точек в X. Кластеры $C_\rho(x)$ и $C_\rho(y)$ называются эквивалентными, если существует изометрия, переводящая x в y и $C_\rho(x)$ в $C_\rho(y)$. Множество Делоне называется правильным, если для любых двух его точек существует изометрия пространства, переводящая одну точку в другую, а множество X в себя. Радиусом правильности $\widehat{\rho}_d(R, r)$ множеств Делоне в $\mathbb{R}^d$ называется наименьший параметр ρ, такой что эквивалентность любых ρ-кластеров множества X влечёт правильность множества X. Классический результат Н.П. Долбилина и М.И. Штогрина утверждает, что радиус правильности множеств Делоне на плоскости не превосходит $4R$, а в пространстве - $10R$. Известен результат о том, что радиус правильности существует в каждой размерности. До недавнего времени лучшей нижней оценкой радиуса правильности $\widehat{\rho}_d(R, r)$ была $4R$.

В работе [BBDEGKS18] авторами *доказана оценка* $\widehat{\rho}_d(R, r) \geqslant 2dR$. Для этого для любого $\varepsilon > 0$ построено множество «Энгелевого типа», которое не является правильным, но имеет эквивалентные $(2dR - \varepsilon)$-кластеры.

2. Опубликованные и принятые к печати работы

[E18] Nikolai Erokhovets, *Construction of Fullerenes and Pogorelov Polytopes with* 5-*,* 6- *and one* 7-*Gonal Face*, Symmetry 2018, 10, 67; doi:10.3390/sym10030067.

[BBDEGKS18] Igor A. Baburin, Mikhail Bouniaev, Nikolay Dolbilin, Nikolay Yu. Erokhovets, Alexey Garber, Sergey V. Krivovichev and Egon Schulte, *On the origin of crystallinity: a lower bound for the regularity radius of Delone sets*, Acta Cryst. (2018). A74, 616–629.

3. Участие в конференциях и школах

(1) Международная конференция «Динамика в Сибири», 26 февраля - 4 марта 2018, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия. Доклад *Combinatorics and toric topology of fullerenes and Pogorelov polytopes.*
(2) Конференция «Ломоносовские чтения-2018», 16-25 апреля 2018, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия. Доклад *Конструкция фуллеренов и многогранников Погорелова с* 5-*,* 6- *и не более чем одной* 7-*угольной гранью.*
(3) Международная конференция «Graphs and Groups, Representations and Relations», 6-19 августа 2018, Академгородок, Новосибирск, Россия. Доклад *Construction of fullerenes and Pogorelov polytopes.*
(4) Международная конференция «Дискретная геометрия и математическая кристаллография», посвящённая 80-летнему юбилею Михаила Ивановича Штогрина, 26 сентября 2018, МИАН им. В.А.Стеклова, Москва, Россия. Пленарный доклад *Семейства трёхмерных многогранников, фуллерены и* 7-*диск-фуллерены.*
(5) Всероссийская конференция с международным участием «Декабрьские чтения в Томске», 11-16 декабря 2018, Томск, Россия. Пленарный доклад *Прямоугольные многогранники в пространстве Лобачевского: комбинаторика и конструкции.*

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) Итогом поездки на Workshop «Soft packings, nested clusters, and condensed matter», AIM, Сан-Хосе, США, 19-23 сентября 2016 стала совместная статья [BBDEGKS18].

5. Педагогическая деятельность

На механико-математическом факультете МГУ:

(1) Весной 2018 года вёл учебный семинар по линейно алгебре у первого курса механиков.
(2) Осенью 2018 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 2018 года совместно с В.М. Бухштабером и Т.Е. Пановым читал лекции спецкурса «Алгебраическая топология».
(5) Осенью 2018 года совместно с В.М. Бухштабером и Т.Е. Пановым участвовал в проведении спецкурса «Комплексные бордизмы и действия тора».

6. Итоги 3 лет

В заявке на конкурс были описаны три направления исследований проекта.
Основное направление:
1. Изучение комбинаторики фуллеренов методами торической топологии.
Дополнительные направления:
2. Теория числа Бухштабера выпуклых многогранников.
3. Проблема флаговых чисел выпуклых многогранников.

В действительности, работа была сосредоточена преимущественно в рамках основного направления. Был верифицирован анонсированный Ф.Фаном результат о том, что градуированное кольцо когомологий $H^*(\mathcal{Z}_P,\mathbb{Z})$ *момент-угол многообразия* $\mathcal{Z}_P$ характеризует многогранник Погорелова P среди всех трёхмерных простых многогранников и является его комбинаторным инвариантом, то есть изоморфизм градуированных колец для многогранников P и Q влечёт комбинаторную эквивалентность $P\simeq Q$, если P является многогранником Погорелова, а Q – произвольным простым трёхмерным многогранником. Авторское понимание этого результата было опубликовано в [BE17c]. На основе освоенных методов в совместной работе [BEMPP17] автором было доказано, что изоморфизм градуированных колец целочисленных когомологий 6-мерных *квазиторических многообразий* $M(P,\Lambda_P)$ и $M(Q,\Lambda_Q)$ переводит канонические образующие для P в канонические образующие для Q с точностью до знака, если P является многогранником Погорелова, а Q – произвольным трёхмерным простым многогранником. На основе этого результата авторами было доказано, что указанные градуированные кольца изоморфны тогда и только тогда, когда многогранники вместе с *характеристическими функциями* (отображениями Λ из множества граней в $\mathbb{Z}^3$, для которых образы любых трёх граней с общей вершиной образуют базис) комбинаторно эквивалентны, и тогда и только тогда, когда многообразия диффеоморфны. Аналогичный результат был доказан для трёхмерных гиперболических многообразий, задаваемых многогранниками Погорелова согласно конструкции А.Ю.Веснина (1987) (или согласно конструкции *малого накрытия* в торической топологии, определённой для любого трёхмерного многогранника, но не обеспечивающей гиперболическую структуру), и колец когомологий с коэффициентами в $\mathbb{Z}_2$.

Был развит метод описания комбинаторики простых трёхмерных многогранников с не более чем шестиугольными гранями при помощи k-поясов и фрагментов многогранника (простых разбиений диска на многоугольники, ограниченных простыми рёберными циклами на многограннике). Было введено и исследовано понятие жёстких фрагментов таких многогранников – фрагментов, наличие которых на многограннике накладывает жёсткие условия на его комбинаторику, в частности гарантирует принадлежность некоторому узкому семейству. На основе подхода k-поясов и фрагментов был разработан новый метод, гарантирующий перечисление всех фуллеренов. Также были получены результаты об описании k-поясов фуллеренов с изолированными пятиугольниками для $k \leqslant 9$. [BE17a]

Работа по теории инварианта Бухштабера и проблеме флаговых чисел многогранников, в целом, не производилась. Отдельные результаты, связанные с числами граней трёхмерных многранников Погорелова, были получены в 2017-2018 годах в работах [BE17a], [BEMPP17] и [E18].

Отметим, что в 2016-2018 году велась работа по новому для автора направлению благодаря участию в Workshop «Soft packings, nested clusters, and condensed matter», AIM, Сан-Хосе, США. Это направление касается математических основ образования кристаллов, заложенных в работах школы Б.Н.Делоне, особенно его учеников Н.П.Долбилина и М.И.Штогрина. В совместной работе [BBDEGKS18] была получена нижняя оценка $2dR$ на радиус правильности множеств Делоне в любой размерности $d \geqslant 2$.

[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.