

УДК 517.5

MSC2010 30A10, 30C10, 30C15

© Н. В. Прудникова¹

Конструкции фуллеренов с числом шестиугольников не больше 7

В работе описаны конструкции фуллеренов с числом шестиугольников не больше семи. Рассмотрены последовательности операций, позволяющие получить фуллерены из куба и додекаэдра.

Ключевые слова: фуллерены, (s, k) -усечение, операция Эндо – Крото.

1. Введение

В математике фуллерены рассматриваются как простые трехмерные выпуклые многогранники, граница которых разбита на пяти- и шестиугольники. Комбинаторно эквивалентные фуллерены называются изомерами. В основе этой работы лежат результаты полученные Бухштабером и Ероховцом (см. [1] и [2]). В [1] доказано, что любой фуллерен можно получить из куба последовательностью операций: усечение вдоль ребра и $(2, k)$ -усечение, где $k \geq 6$. В работе [2] доказано, что любой фуллерен реализуется из додекаэдра при помощи семи операций: $(1; 4, 5)$ -, $(1; 5, 5)$ -, $(2, 6; 4, 5)$ -, $(2, 6; 5, 5)$ -, $(2, 6; 5, 6)$ -, $(2, 7; 5, 5)$ -, $(2, 7; 5, 6)$ -усечения. Фуллерен с числом шестиугольников p_6 получается из куба последовательностью таких операций длины $p_6 + 6$, а из додекаэдра — последовательностью длины p_6 . Операция $(2, 6; 5, 5)$, известная как операция Эндо – Крото (см. [4]), является единственной из этих семи операций, которая переводит фуллерен в фуллерен. В работе описываются конструкции фуллеренов с $p_6 \leq 7$. Известно, что таких изомеров 20 (см. [8]). Показано, что последовательным применением операции Эндо – Крото к фуллерену с $p_6 = 2$ можно получить 15 фуллеренов из первых 20. Описаны последовательности операций, которые позволяют получить из куба и додекаэдра оставшиеся три изомера. Один из них имеет $p_6 = 5$, и два $p_6 = 6$. В то же время к каждому изомеру с $0 < p_6 \leq 7$ можно применить операцию Эндо – Крото. Представлен граф связей, вершины которого соответствуют изомерам, а ребра связывают изомер с его образом, полученным под действием операции Эндо – Крото.

Автор выражает благодарность В.М. Бухштаберу за постановки задач и полезные обсуждения в ходе получения результатов этой работы.

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломносова, 119991, ГСП-1, г. Москва, Ленинские горы, 1. Электронная почта: prudnikova.nv@yandex.ru

2. Трехмерные многогранники

Мы будем рассматривать многогранники в пространстве \mathbb{R}^3 . Каждому многограннику можно сопоставить вектор из целых неотрицательных чисел (p_3, p_4, p_5, \dots) , где p_k — число k -угольных граней данного многогранника. Введем основные определения, которые нам понадобятся в дальнейшем.

Определение 2.1. *Трехмерный многогранник называется простым, если в каждой его вершине сходится ровно три ребра.*

Связь между количеством элементов в трехмерном многограннике описывается формулой Эйлера:

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2,$$

где f_0, f_1, f_2 — число вершин, ребер и граней соответственно. Для простых многогранников теорему Эйлера можно усилить.

Теорема 2.1. *Для простого выпуклого трехмерного многогранника справедлива формула*

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

Доказательство. Из теоремы Эйлера следует, что

$$f_2 = p_3 + p_4 + p_5 + \dots$$

$$2f_1 = 3p_3 + 4p_4 + 5p_5 + \dots$$

Так как многогранник простой, то $3f_0 = 2f_1$. Домножив формулу Эйлера на 6 и подставив в нее выражения для f_0, f_1 и f_2 , получим требуемую формулу. \square

Как можно заметить, формула (1) не накладывает никаких ограничений на количество шестиугольных граней. При этом многогранники, соответствующие вектору (p_3, p_4, p_5, \dots) , который удовлетворяет соотношению из Теоремы 2.1, реализуются для какого-то p_6 благодаря теореме Эберхарда (см. [5]).

Теорема 2.2. (Эберхард). *Для любого набора целых неотрицательных чисел p_k , где $k \geq 3$ и $k \neq 6$, удовлетворяющих условию (1), существует простой трехмерный многогранник P^3 такой, что $p_k = p_k(P^3)$ для всех $k \geq 3$ и $k \neq 6$.*

Отметим, что для произвольного вектора $(p_3, p_4, p_5, p_7, \dots)$ простой трехмерный многогранник P^3 , существующий согласно теореме Эберхарда, определен неоднозначно (см. ниже случай фуллеренов). В дальнейшем нам потребуется еще одно свойство трехмерных многогранников — флаговость.

Определение 2.2. *Многогранник является флаговым, если любое множество его попарно пересекающихся гиперграней $F_{i_1}, \dots, F_{i_k} : F_{i_s} \cap F_{i_t} \neq \emptyset, s, t = 1, \dots, k$, имеет непустое пересечение $F_{i_1} \cap \dots \cap F_{i_k} \neq \emptyset$.*

3. Фуллерены

3.1. Определение. Основные свойства

Фуллерены были открыты в 1985 году химиками Робертом Кёрлом, Харольдом Крото и Ричардом Смолли, которые впоследствии получили за эту работу Нобелевскую премию по химии (1996 г). Ими были открыты молекулы углерода C_{60} и C_{70} , имеющие форму многогранников с соответствующим числом атомов углерода — вершин многогранника. Позднее были исследованы фуллерены с другим количеством атомов.

Определение 3.1. *Математическим фуллереном называется простой многогранник в пространстве \mathbb{R}^3 , граница которого состоит только из пяти- и шестиугольных граней.*

В физике и химии фуллерены с числом вершин n обозначаются символом C_n . В настоящее время разработаны эффективные алгоритмы перечисления фуллеренов с заданным числом шестиугольников. Число фуллеренов, имеющих p_6 шестиугольных граней, мы будем обозначать $F(p_6)$. На сайте [8] можно найти значение функции $F(p_6)$ для $0 \leq p_6 \leq 190$.

Из Теоремы 2.1 следует, что каждый фуллерен имеет ровно 12 пятиугольных граней. При этом количество шестиугольников p_6 может быть любым, кроме $p_6 = 1$: фуллерена с одним шестиугольником не существует. Отсюда естественным образом следует, что основные параметры фуллерена: число вершин, ребер, двумерных граней — можно выразить через количество шестиугольных граней p_6

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

Также известно, что фуллерены являются флаговыми многогранниками [1].

Наиболее удобным способом представления фуллеренов на плоскости являются диаграммы Шлегеля.



Рис. 1. Диаграммы Шлегеля фуллерена C_{30} . а) Проекция с помощью пятиугольной грани; б) Проекция с помощью шестиугольной грани;

Определение 3.2. *Диаграмма Шлегеля — проекция трехмерного многогранника, сделанная из точки, находящейся над центром одной из граней, на плоскость, которая расположена таким образом, что весь многогранник и выбранная точка лежат в одном полупространстве.*

Диаграмма Шлегеля является полным комбинаторным инвариантом многогранника, то есть по любой диаграмме Шлегеля можно однозначно описать комбинаторный тип фуллерена. При этом полученное изображение фуллерена на плоскости зависит от выбора грани, с помощью которой делается проекция (рис. 1).

Мы будем использовать то, что при $0 \leq p_6 \leq 7$ функция $F(p_6)$ принимает следующие значения (См. [8]):

p_6	0	1	2	3	4	5	6	7
$F(P_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6

Таблица 1. Количество изомеров для $p_6 \leq 7$

4. Операции (s, k) -усечения

Существуют различные способы построения многогранников. В качестве одного из таких методов рассматривается получение нового многогранника из данного многогранника путем срезания вершин, ребер или пар смежных ребер (см. Рис. 2).

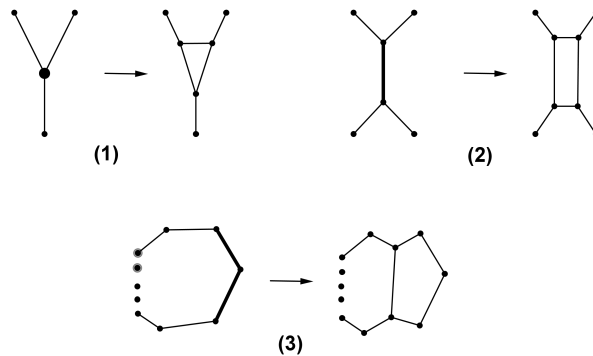


Рис. 2. Операции: (1) усечение вершины; (2) усечение вдоль ребра; (3) усечение пары смежных ребер

Теорема 4.1. (Эберхард [5]). *Любой простой трехмерный многогранник комбинаторно эквивалентен многограннику, полученному из тетраэдра при помощи последовательных усечений вершин, ребер и пар смежных ребер.*

В работе [1] была введена операция (s, k) -усечения, которая естественным образом обобщает операции, приведенные на Рис. 2. Для этого выделяем в k -угольнике s подряд идущих ребер $e_1 \dots, e_s$, где $0 \leq s \leq k - 2$. Рассмотрим два смежных с этой последовательностью ребра e_0, e_{s+1} . Операция (s, k) -усечения состоит в барцентрическом подразделении этих двух ребер и соединении двух новых вершин ребром. В результате k -угольная грань разбивается на две грани с меньшим числом ребер и увеличивается количество вершин в смежных по ребрам e_0 и e_{s+1} гранях.

Теорема 4.1 была уточнена для флаговых трехмерных многогранников.

Теорема 4.2. (Бухитабер, Ероховец [1]). *Простой 3-многогранник P является флаговым тогда и только тогда, когда он комбинаторно эквивалентен многограннику, который получается из куба при помощи срезов рёбер $((1, k)$ -усечений, $k \geq 4$) и срезов пар соседних рёбер, лежащих в не менее чем 6-угольной грани $((2, k)$ -усечений, $k \geq 6$).*

Из этой теоремы следует, что любой фуллерен можно получить из куба при помощи двух типов операций. Более того, в случае фуллеренов имеет место более сильный результат.

Теорема 4.3. (Бухитабер, Ероховец [2]). *Любой фуллерен комбинаторно эквивалентен многограннику, который может быть получен из куба последовательностью операций: усечения вдоль ребра, $(2, 6)$ - и $(2, 7)$ -усечения. При этом на каждом шаге граница многогранника состоит только из k -угольников, где $k = 4, 5, 6$, и не более одного семиугольника.*

Каждая из этих операций действует на многограннике локально, добавляя одну новую грань и увеличивая количество вершин в двух смежных гранях. Остальная часть многогранника в преобразовании не участвует. Поэтому естественно ввести следующие обозначения.

- 1) $(1; s_1, s_3)$ -усечение, где s_1, s_3 — числа рёбер граней F_1 и F_3 , соединённых ребром, вдоль которого идет усечение (см. рис. 3 а)). При этой операции появляется новый четырехугольник, грань F_1 переходит в F'_1 с числом рёбер $s_1 + 1$, а грань F_3 — в грань F'_3 с числом рёбер $s_3 + 1$.

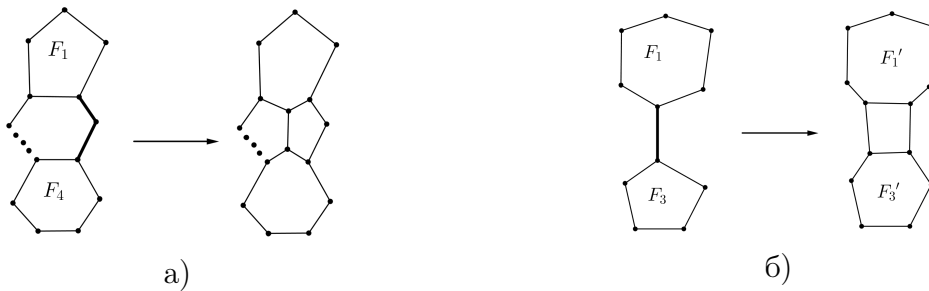


Рис. 3. а) $(1; s_1, s_3)$ -усечение; б) $(2, k; k_1, k_4)$ -усечение

- 2) $(2, k; k_1, k_4)$ -усечение, где k — число рёбер грани F , k_1, k_4 — числа рёбер в гранях F_1 и F_4 (см. рис. 3 б)). При этой операции грань F переходит в объединение граней F' и F'' , где F' является $(k - 1)$ -угольником, а F'' всегда пятиугольник. Грань F_1 переходит в грань F'_1 с числом рёбер $k_1 + 1$, грань F_4 — в грань F'_4 с $k_4 + 1$ ребром.

Таким образом, при операциях (1), (2) число граней увеличивается ровно на одну. Следовательно, если фуллерен с данным p_6 получен последовательностью операций (1) и (2) из куба, то длина этой последовательности равна $6 + p_6$.

5. Операция Эндо – Крото

Среди операций, описанных в теореме 4.3, особое место занимает операция $(2, 6; 5, 5)$. Это широко известная операция Эндо – Крото — единственная из семи операций, которая переводит фуллерен в фуллерен. Как уже отмечалось выше, одной этой операции недостаточно, чтобы построить любой фуллерен, так как после ее применения всегда получается многогранник, у которого имеется два пятиугольника с общим ребром. Для того чтобы ее можно было применить к фуллерену, необходимо, чтобы он обладал ЭК-фрагментом, состоящим из шестиугольника и двух примыкающих к его противоположным ребрам пятиугольников (рис. 4). Фуллерены, обладающие такими фрагментами, будем называть ЭК-фуллеренами.



Рис. 4. Операция Эндо – Крото

Под действием оператора Эндо – Крото ($O_{ЕК}$) число шестиугольников внутри фрагмента I становится равным двум, при этом граница фрагмента остается неизменной. Таким образом, $O_{ЕК}$ позволяет перейти от фуллерена с $p_6 = n$ к фуллерену с $p_6 = n + 1$, при этом важно, что ЭК-фуллерены переходят в ЭК-фуллерены. (см. [3]).

Первый ЭК-фуллерен имеет $p_6 = 2$ — это так называемая “бочка”. Применяя последовательно операцию Эндо – Крото, можно, начиная с фуллерена “бочки”, получить фуллерены с любым числом $p_6 > 2$. В работах [1] и [2] для описания комбинаторики фуллеренов используется понятие поясов граней.

Определение 5.1. Толстым путем в многограннике называется, последовательность его граней $(F_{i_1}, \dots, F_{i_k})$ такая, что F_{i_j} и $F_{i_{j+1}}$ пересекаются по ребру для $j = 1, \dots, k - 1$. Замкнутый толстый путь $L = (F_{i_1}, \dots, F_{i_k}, F_{i_{k+1}})$, $F_{i_{k+1}} = F_{i_1}$ называется k -петлей. k -поясом ($k \geq 3$) называется k -петля $B = (F_{i_1}, \dots, F_{i_k})$ такая, что:

$$F_{i_1} \cap F_{i_2} \cap F_{i_3} = \emptyset, \text{ при } k = 3;$$

$$F_{i_p} \cap F_{i_q} \neq \emptyset \Leftrightarrow (p, q) \in (1, 2), (2, 3), \dots, (k - 1, k), (k, 1), \text{ при } k \geq 4.$$

Утверждение 5.1. Среди фуллеренов с $2 \leq p_6 \leq 7$ имеется только четыре фуллерена, которые нельзя получить действием оператора $O_{ЕК}$:

- 1) фуллерен-“бочка” C_{24} ;
- 2) фуллерен C_{30} , имеющий 5-пояс из шестиугольников;
- 3) два комбинаторных типа фуллеренов с $p_6 = 6$, имеющие 6-пояса из шестиугольников.

Доказательство.

1) Операция Эндо – Крото всегда увеличивает количество шестиугольников в фуллерене на один. В то же время фуллеренов с $p_6 = 1$ не существует. Отсюда следует, что фуллерен, имеющий ровно две шестиугольные грани, нельзя получить при помощи оператора $O_{ЕК}$.

Для доказательства пунктов 2)-3) достаточно рассмотреть диаграммы Шлегеля соответствующих фуллеренов (рис. 5). После применения оператора $O_{ЕК}$ в получившемся фуллерене должен содержаться фрагмент, изображенный справа на рисунке 4. Легко увидеть, что ни один из фуллеренов на рисунке такого фрагмента не имеет. Следовательно, данные комбинаторные типы операций Эндо – Крото получить нельзя. \square

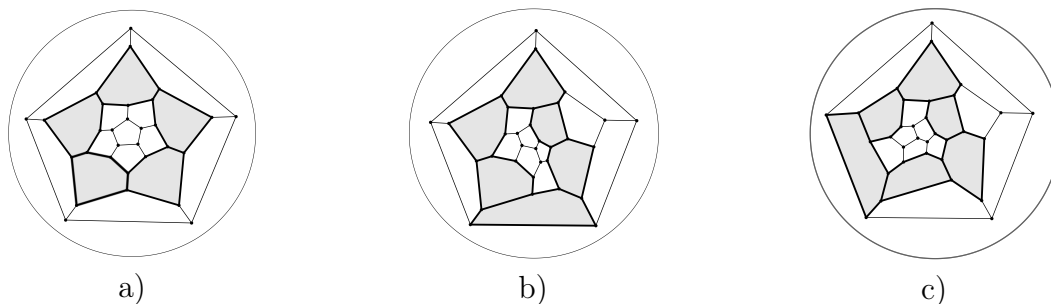


Рис. 5. а) C_{30} с 5-поясом из шестиугольников. б) C_{32}^1 с 6-поясом из шестиугольников. в) C_{32}^2 с 6-поясом из шестиугольников.

В случае $p_6 = 2$ фуллерен-“бочка” C_{24} обладает симметрией относительно оси, проходящей через центр шестиугольных граней. Легко увидеть, что применением операции Эндо – Крото к любому из 6 допустимых фрагментов C_{24} , мы получим один и тот же фуллерен C_{26} с тремя шестиугольными гранями, который является единственным фуллереном с $p_6 = 3$. Из C_{26} при помощи оператора ЭК получают оба комбинаторных типа фуллеренов с $p_6 = 4$ (детали см. в параграфе 6).

5.1. Ориентированный граф связей фуллеренов на основе операции Эндо – Крото

Обобщая вышесказанное, можно построить ориентированный граф связей первых двадцати фуллеренов с $p_6 \leq 7$ на основе оператора $O_{ЕК}$. Изомеры с одинаковым числом p_6 будем изображать вершинами графа на одном уровне. Изомер, соответствующий вершине v , будем обозначать символом $C(v)$. Для вершин v_1 и v_2 существует ребро, идущее из v_1 в v_2 , если к изомеру $C(v_1)$ можно применить оператор $O_{ЕК}$ так, что в результате получается изомер $C(v_2)$.

Утверждение 5.2. *Ориентированный граф связей фуллеренов на основе операции Эндо – Крото изображен на рис. 6.*

Вершины графа, обозначенные крестом, соответствуют додекаэдру и фуллеренам из утверждения 5.1. Для их построения необходимы более сложные конструкции. Остальные изомеры реализуются из C_{24} последовательным применением оператора $O_{ЕК}$. При этом в результате применения операции Эндо – Крото к разным фрагментам фуллерена могут получиться фуллерены из разных комбинаторных типов. В свою очередь, несколько фуллеренов одного и того же слоя под действием оператора $O_{ЕК}$ могут давать один и тот же изомер. При этом в результате

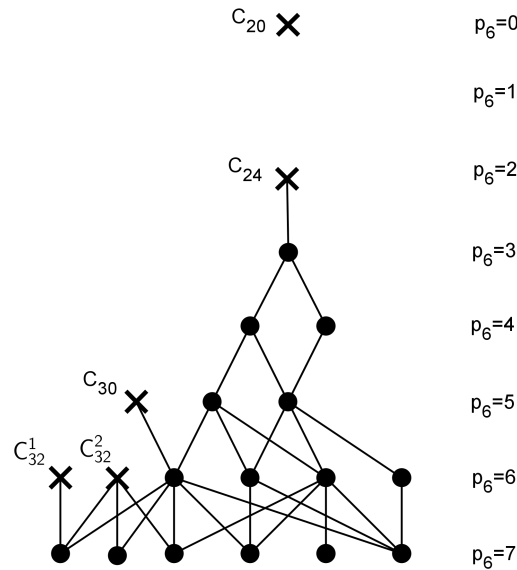


Рис. 6. Граф связи фуллеренов при помощи операции Эндю – Крото

применения O_{EK} к разным фрагментам фуллерена могут получиться фуллерены как одного, так и нескольких комбинаторных типов.

Для построения графа связей необходимо было решить следующие задачи.

- 1) Даны два фрагмента одного фуллерена, позволяющие применить операцию Эндю – Крото. Установить, являются ли полученные фуллерены комбинаторно эквивалентными.
- 2) Даны два фуллерена, и в каждом из них — по одному фрагменту, позволяющему применить оператор O_{EK} . Установить, являются ли полученные фуллерены комбинаторно эквивалентными.

Решение этих задач, которые привели к построению графа, мы выделили в отдельный раздел.

6. Матрицы инцидентности фуллеренов

У фуллерена P имеется $m = 12 + p_6$ граней. Выберем упорядоченный список этих граней F_1, \dots, F_m .

Определение 6.1. Матрицей инцидентности фуллерена с данным p_6 называется симметрическая $(m \times m)$ относительно выбранного порядка матрица, у которой элемент (i, j) равен 1, если грани F_i и F_j пересекаются по ребру, и ноль — в противном случае.

Ясно, что матрица инцидентности определена с точностью до упорядочивания граней. В случае изменения порядка нумерации граней произойдет перестановка соответствующих граням строк и столбцов матрицы. Без ограничения общности

будем считать, что первые 12 граней являются пятиугольниками. Матрица инцидентности фуллерена является полным комбинаторным инвариантом. По ней для каждой грани F_i можно однозначно определить по отдельности количество инцидентных пяти- и шестиугольников.

Построение графа проводится индуктивно. Допустим, он уже построен на уровне k . Тогда к ЭК-фрагментам фуллеренов этого уровня мы применяем операцию $O_{ЕК}$ и формируем матрицы инцидентности. Подсчитываем число неэквивалентных матриц. Как только оно равно заданному числу для $p_6 = k + 1$, мы получаем полный список вершин на уровне $k + 1$, и остается только проверить, сколько ребер выходит из каждой вершины на уровне на уровне k . Решение этой задачи получается опять на основе матрицы инцидентности.

Пример 1. На уровне $p_6 = 3$ имеется один фуллерен (рис. 7). С каждым из шестиугольников связано 3 ЭК-фрагмента. Всего этот фуллерен имеет 9 ЭК-фрагментов. Эти девять ЭК-фрагментов разбиваются на два класса, состоящие из шести и трех ЭК-фрагментов. Фуллерены, принадлежащие одному классу, после применения операции Эндо – Крото дают эквивалентные матрицы инцидентности.

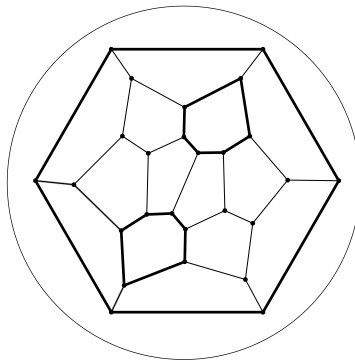


Рис. 7. Фуллерен C_{26}

На уровне $p_6 = 4$ имеется два изомера (рис. 8).

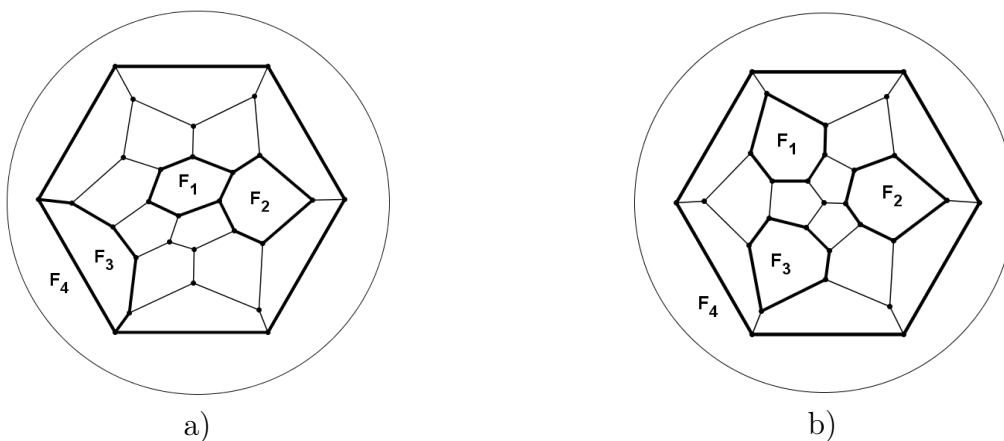


Рис. 8. а) изомер C_{28}^1 ; б) изомер C_{28}^2

В данном случае нам достаточно рассмотреть в матрице инцидентности подматрицу (4×4) , показывающую связи между шестиугольными гранями.

$$C_{28}^1 : \begin{pmatrix} * & 1 & 0 & 0 \\ 1 & * & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & 1 \\ 0 & 0 & 1 & * \end{pmatrix} \quad C_{28}^2 : \begin{pmatrix} * & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix}$$

Действительно, в первом случае все шестиугольники связаны по ребру ровно с одним другим шестиугольником, то есть образуют две связные пары. А во втором случае шестиугольники не имеют никаких пересечений. Отсюда следует, что эти два изомера не эквивалентны.

7. Построение фуллеренов из куба

Ранее в теореме 4.3 говорилось, что для получения фуллерена из куба достаточно следующих типов операций:

- 1) $(1; s_1, s_3)$;
- 2) $(2, k; k_1, k_4)$, где $k = 6, 7$.

Многогранники, имеющие 4- или 7-грani, будем называть фуллеренами с особенностями. Для получения фуллеренов перечисленными операциями достаточно многогранников с не более чем одной семиугольной гранью. Далее покажем, что для реализации первых 20 фуллеренов из куба можно обойтись без использования многогранников с $p_7 > 0$.

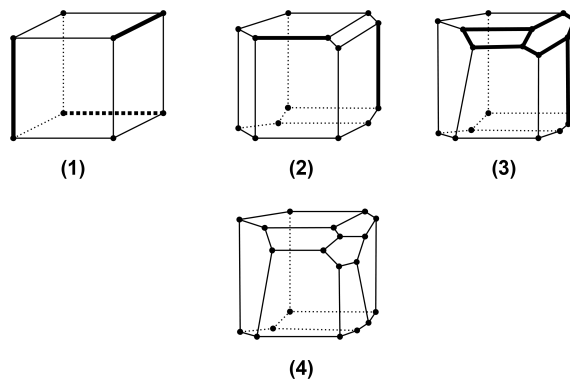


Рис. 9. Получение додекаэдра из куба.

Додекаэдр состоит из 12 пятиугольных граней, следовательно, чтобы получить его из куба C , потребуется 6 операций. Сперва путем усечения вдоль трех скрещивающихся ребер переходим к многограннику Сташефа. Затем срезаем еще два ребра (дважды применяем конструкцию $(1; 4, 4)$ -усечения), тем самым образуя многогранник из 11 ребер с одним шестиугольником и двумя примыкающими к нему

четырёхугольниками. После применения к этому фрагменту операции (2, 6; 4, 4)-усечения получим додекаэдр. В результате, последовательность операций выглядит следующим образом:

$$C \rightarrow 3(1; 4, 4) \rightarrow 2(1; 4, 4) \rightarrow (2, 6; 4, 4) \rightarrow C_{20}.$$

Отметим, что среди фуллеренов с особенностями в данной цепочке построений нет фуллеренов с семиугольными гранями (Рис.9).

Фуллерен-”бочку” можно получить из куба за 8 шагов:

- 1) усечением вдоль трех скрещивающихся ребер получаем многогранник Шташефа (1);
- 2) срезкой выделенного ребра многогранника (1) получаем многогранник (2);
- 3) многогранник (4) получаем усечением вдоль выделенного ребра многогранника (2) и (2, 7)-усечением многогранника (3);
- 4) применением аналогичной последовательности из двух операций к многограннику (4) получаем искомый фуллерен.

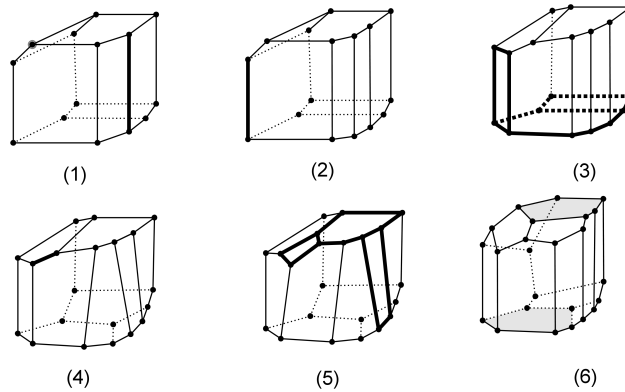


Рис. 10. Последовательность построения фуллерена-”бочки” C_{24} : $3(1; 4, 4) \mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 4, 6) \mapsto (2, 7; 4, 4) \mapsto (1; 4, 6) \mapsto (2, 7; 4, 4)$

В случае использования операции (2, 8)-усечения, можно построить еще один путь реализации фуллерена-”бочки” из куба с сохранением наибольшей группы симметрии на каждом шаге (рис. 11).

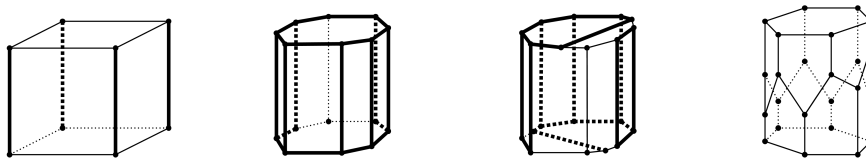


Рис. 11. Способ реализации C_{24} с сохранением группы симметрии

Здесь последовательными усечениями вдоль ребер мы превращаем куб в шестигранную призму. А затем к каждому основанию применяем операции (2, 8; 4, 4)

и $(2, 7; 4, 4)$ -усечения. В этом случае цепочка преобразований выглядит следующим образом: $(1; 4, 4) \mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 6, 6) \mapsto (1; 7, 7) \mapsto 2(2, 8; 4, 4) \mapsto 2(2, 7; 4, 4)$.

На (рис. 6) видно, что все остальные фуллерены, за исключением трех, получаются из фуллерена C_{24} при помощи последовательности операций Эндо–Крото $((2, 6, 5, 5)$ -усечений). Приведем возможные варианты построения этих трех фуллеренов. Для получения C_{30} можно использовать последовательность операций: $(1; 4, 4) \mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 4, 4) \mapsto (1; 4, 4) \mapsto (1; 4, 6) \mapsto (1; 4, 4) \mapsto (1; 4, 4) \mapsto (1; 4, 5) \mapsto (2, 7; 4, 5) \mapsto (1; 4, 6) \mapsto (2, 7; 4, 5)$.

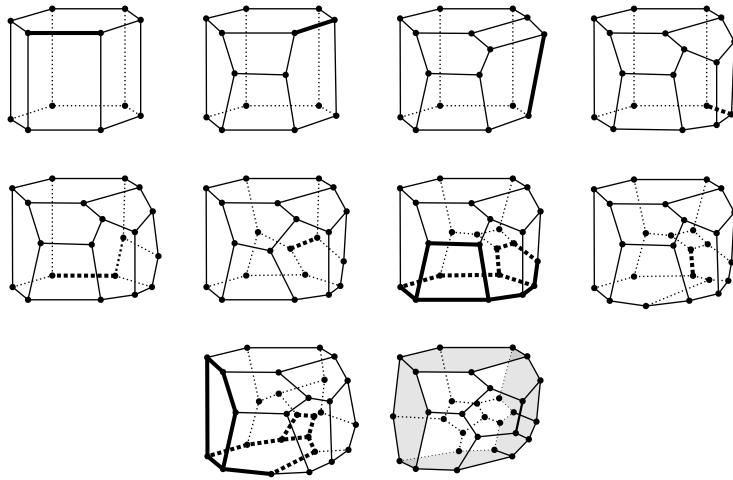


Рис. 12. Реализация фуллерена C_{30} из куба.

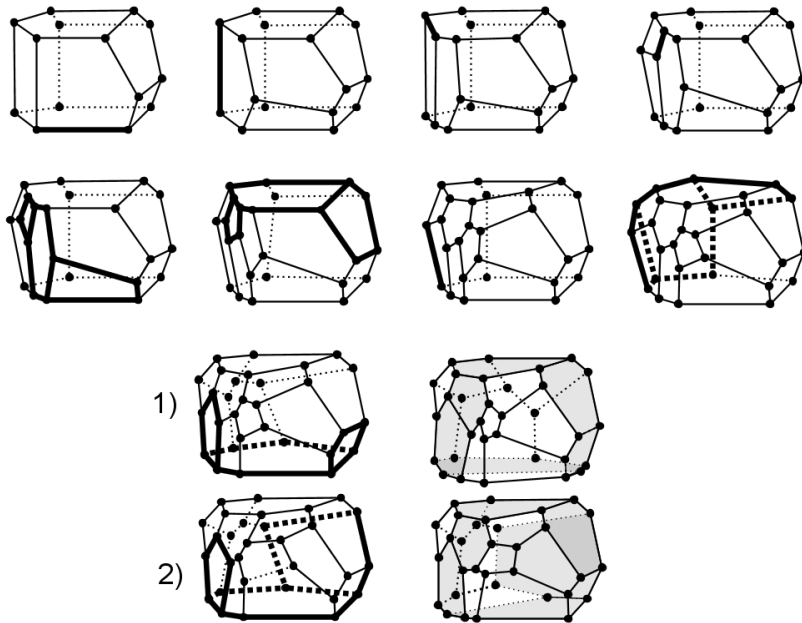


Рис. 13. Построение фуллеренов C_{32}^1 и C_{32}^2 .

Существует последовательность операций, которую можно использовать для построения фуллеренов C_{32}^1 и C_{32}^2 :

$3(1; 4, 4) \mapsto (1; 4, 4) \mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 4, 6) \mapsto (2, 6; 4, 4) \mapsto (2, 7; 5, 5) \mapsto (1; 4, 6) \mapsto (2, 6; 4, 4) \mapsto (2, 7; 5, 5)$.

Оба комбинаторных типа C_{32}^1 и C_{32}^2 реализуются этой последовательностью за счет различного расположения фрагментов $(6; 4, 4)$ и $(7, 5, 5)$, к которым применяются последние две операции (рис. 13).

8. Построение фуллеренов из додекаэдра

Теорема 4.3 была усилена в работе [2]. Было доказано, что любой фуллерен можно получить из додекаэдра, и для этого достаточно семи усечений:

- 1) $(1; 4, 5)$ -, $(1; 5, 5)$ -;
- 2) $(2, 6; 4, 5)$ -, $(2, 6; 5, 5)$ -, $(2, 6; 5, 6)$ -;
- 3) $(2, 7; 5, 5)$ -, $(2, 7; 5, 6)$ -.

8.1. Метод построения данного фуллерена из додекаэдра

Опишем основные этапы метода из работы [2].

- 1) Этот метод опирается на предъявленный список фрагментов такой, что у любого фуллерена с $p_6 \neq 1$ существует фрагмент из списка.
- 2) Описан алгоритм, позволяющий по данному фуллерену P и его фрагменту из списка построить фуллерен P' , такой что $p_6(P') < p_6(P)$.
- 3) Доказано, что существует обратная операция построения P из P' , которая разлагается в композицию усечений из приведенного выше набора.
- 4) Каждая перестройка фрагмента сохраняет его границы и изменяет количество шестиугольников внутри него.

Таким образом, в работе [2] описан алгоритм, позволяющий получить любой фуллерен из додекаэдра. Платой за то, что достаточно использовать только семь усечений, является необходимость на промежуточных шагах выходить из класса фуллеренов, используя фуллерены с особенностями.

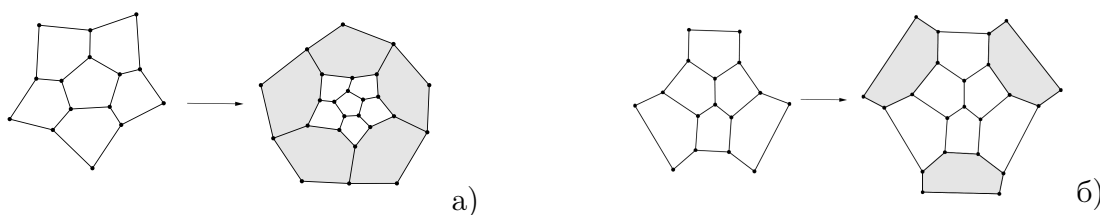
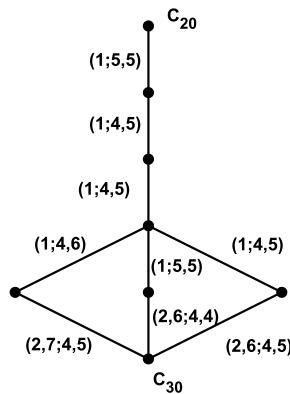


Рис. 14. Перестройка фрагментов фуллерена (1)



Рис. 15. Перестройка фрагментов фуллерена (2)

Путей построения фуллерена из додекаэдра может быть несколько, в особенности если разрешить использование других $(1; s_1, s_3)$ - и $(2, k; k_1, k_4)$ -усечений помимо приведенного списка из семи операций. Ниже представлены все возможные последовательности, позволяющие перейти от C_{20} к C_{30} . Обратим внимание на то, что лишь одна из этих последовательностей использует только операции, входящие в список 1)-3) (см. начало параграфа).



Фуллерены C_{30} и C_{32}^2 можно построить путем добавления поясов шестиугольников, как показано на рис.14. Операция, показанная на рис.15 б), необходима для построения C_{24} из додекаэдра и C_{32}^1 — из фуллерена-”бочки”. Остальные фуллерены получаются из C_{24} применением оператора $O_{ЕК}$.

Как было отмечено раньше, при построении фуллеренов с $p_6 \leq 7$ как из куба, так и из додекаэдра, можно обойтись без использования семиугольных граней. Выше (Рис.9) была приведена последовательность операций, переводящая куб в додекаэдр без использования многогранников с $p_7 > 0$. Переход от додекаэдра к фуллерену-”бочке” осуществляется перестройкой фрагмента, изображенного на рис.15 б). При этом переходе семиугольники не используются. Для трех фуллеренов, которые не образуются последовательным применением операции Эндо–Крото, также существуют пути построения без использования семиугольных гра-

ней:

$$\begin{aligned}
 C_{20} &\mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 4, 5) \mapsto (1; 4, 5) \mapsto (1; 4, 5) \mapsto (2, 6; 4, 5) \mapsto C_{30}, \\
 C_{20} &\mapsto (1; 5, 5) \mapsto (2, 6; 4, 5) \quad [C_{24}] \mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 4, 5) \mapsto (1; 4, 5) \mapsto (2, 6; 4, 5) \mapsto C_{32}^1, \\
 C_{20} &\mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 4, 5) \mapsto (2, 6; 4, 5) \quad [C_{26}] \mapsto (1; 5, 5) \mapsto (1; 4, 5) \mapsto (2, 6; 4, 5) \mapsto C_{32}^2.
 \end{aligned}$$

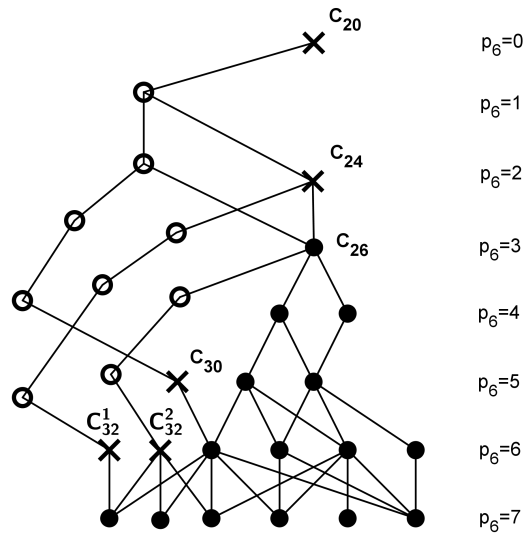
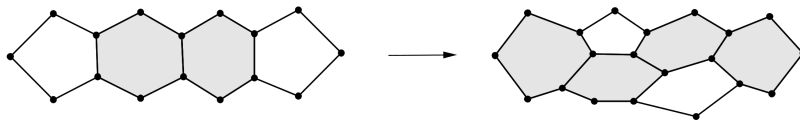


Рис. 16. Граф связей фуллеренов на основе семи усечений

Приведен граф связей фуллеренов на основе семи усечений (рис. 16). Выколотыми точками обозначены фуллерены с особенностями. Пути построения первых 20 фуллеренов не единственны. Можно увидеть, что фуллерен с $p_6 = 4$ может быть получен как применением оператора ЭК к C_{24} , так и перестройкой фрагмента, представленного на рис. 14 б), из додекаэдра.

9. Операции, переводящие фуллерен в фуллерен

Известны обобщения операции Эндо–Крото (см. [7]), каждая из которых применяется к фуллерену, обладающему определенным фрагментом. Операция перестраивает этот фрагмент и позволяет получить фуллерен с большим числом шестиугольников.



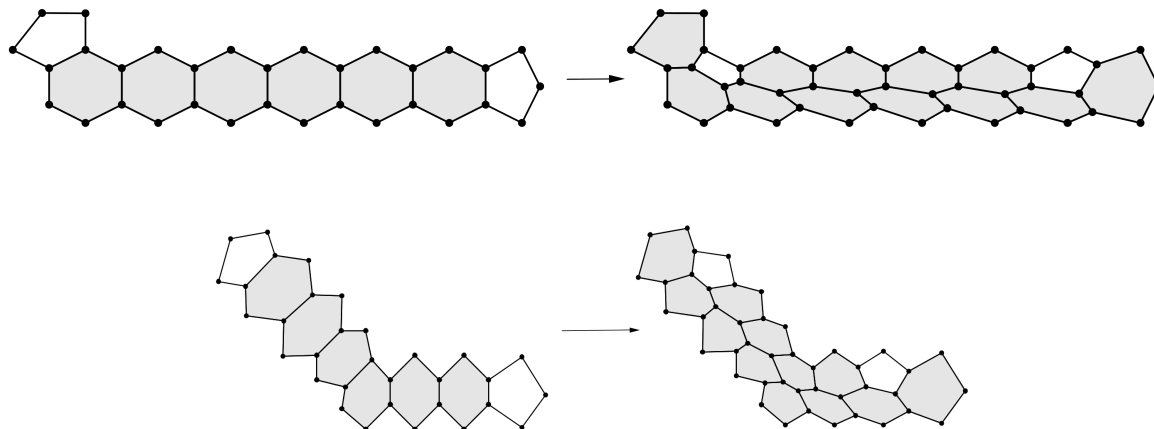


Рис. 17. Обобщенные операции Эндо–Крото

Утверждение 9.1. Каждая обобщенная операция Эндо–Крото раскладывается в последовательность усечений, перечисленных в предыдущем параграфе:

$$(2, 6; 5, 6) \rightarrow \underbrace{(2, 7; 5, 6) \rightarrow \dots \rightarrow (2, 7; 5, 6)}_{k-2} \rightarrow (2, 7; 5, 5),$$

где k — число шестиугольников.

В результате применения обобщенной операции Эндо–Крото к фрагменту фуллерена число шестиугольников k увеличивается в два раза.

В работе [6] описаны две бесконечные серии обобщенных операций Эндо–Крото и одна конечная серия операций, которая также переводит фуллерен в фуллерен, и доказано, что посредством таких операций можно получить любой фуллерен из додекаэдра. Список обобщенных операций Эндо–Крото, достаточных для получения любого фуллерена из додекаэдра, бесконечен.

Список литературы

- [1] В.М. Бухштабер, Н. Ю. Ероховец, “Усечения простых многогранников и приложения”, *Избранные вопросы математики и механики*, Сборник статей. К 150-летию со дня рождения академика Владимира Андреевича Стеклова. Тр. МИАН. Т. 289, МАИК, 2015, 115–144.
- [2] V.M. Buchstaber, N.Yu. Erokhovets, *Construction of fullerenes*, 2015, arXiv: submit/1374260 [math.CO].
- [3] M. Deza, M. Dutour Sikiric, M. I. Shtogrin, “Fullerenes and disk-fullerenes”, *Russian Math. Surveys*, **68**:4 (2013), 665–720.
- [4] M. Endo, H.W. Kroto, “Formation of Carbon Nanofibers”, *Journal of Physical Chemistry*, **96**:17 (1992), 6941–6944.
- [5] V. Eberhard, *Zur Morphologie der Polyheder*, Leipzig, 1891.
- [6] M. Hasheminezhad, H. Fleischner, and B.D. McKay, “A universal set of growth operations for fullerenes”, *Chemical Physics Letters*, **464** (2008), 118–121.
- [7] Brinkmann, Franceus, Fowler, Graver, “Growing fullerenes from seed: Growth transformations of fullerene polyhedra”, *Chemical Physics Letters*, **428**:4–6 (2006), 386–393.

[8] The House of Graphs, hog.grinvin.org/Fullerenes.

Представлено в Дальневосточный математический журнал 30 октября 2015 г.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (грант № 14-11-00414)

Prudnikova N. V. Construction of fullerenes with the number of hexagons no more than 7. Far Eastern Mathematical Journal. 2015. V. 15. № 2. P. 247–263.

ABSTRACT

This paper devoted to the constructions of fullerenes that have at most 7 hexagons. We consider the sequences of operations, which give an opportunity to obtain the fullerenes from cube and dodecahedron.

Key words: *fullerenes*, *(s, k)-truncation*, *Endo – Kroto operation*.