ТЕОРИЯ СЕМЕЙСТВ МНОГОГРАННИКОВ: ФУЛЛЕРЕНЫ И МНОГОГРАННИКИ А. В. ПОГОРЕЛОВА

Н.Ю. Ероховец

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Ленинские горы 1, 119991 ГСП-1 Москва, Россия
erochovetsn@hotmail.com

Комбинаторным многогранником называется класс комбинаторной эквивалентности выпуклых многогранников. Далее речь будет идти только о 3-мерных комбинаторных многогранниках, которые мы будем для краткости называть *многогранниками.* Все операции и конструкции будут определены именно на таких многогранниках, хотя описываются геометрически. Многогранник P называется *простым*, если в каждой его вершине сходится ровно $\dim(P)$ рёбер.

Работа посвящена изучению семейств простых многогранников, определяемых условием *циклической рёберной k-связности (ck-связности).*

Определение 1. Назовем *k-поясом* циклическую последовательность граней, в которой смежными являются последовательные грани и только они и никакие 3 грани не имеют общей вершины. Простой многогранник, отличный от *симплекса* Δ^3, является ck-связным, если у него нет l-поясов, $l < k$, и *сильно ck-связным (c^*k-связным)*, если, кроме того, любой его k-пояс окружает грань. По определению Δ^3 является c^*3-связным, но не $c4$-связным.

Понятие ck-связности можно извлечь из работ начала XX века по проблеме 4 красок. В работах середины XX века его определение использует циклические рёберные разрезы графа многогранника. Мы используем эквивалентное определение в терминах поясов. Все простые многогранники (семейство $\mathcal{P}_s$) являются $c3$-связными. Получаем цепочку вложенных семейств:

$$\mathcal{P}_s \supset \mathcal{P}_{aflag} \supset \mathcal{P}_{flag} \supset \mathcal{P}_{aPog} \supset \mathcal{P}_{Pog} \supset \mathcal{P}_{Pog^*}$$

Семейство $c4$-связных многогранников мы обозначаем $\mathcal{P}_{flag}$, так как оно совпадает с семейством *флаговых* многогранников, у которых любой набор попарно смежных граней имеет непустое пересечение. Каждая грань флагового многогранника окружена поясом. Из формулы Эйлера вытекает, что каждый простой многогранник должен иметь грань, которая является 3-, 4- или 5-угольником. Поэтому он не может быть более чем c^*5-связным. Семейство c^*3-связных многогранников мы называем *почти флаговыми* многогранниками и обозначаем $\mathcal{P}_{aflag}$. Благодаря результатам А.В. Погорелова [P67] и Е.М. Андреева [A70a] $c5$-связные многогранники (семейство $\mathcal{P}_{Pog}$) являются в точности многогранниками, реализуемыми в пространстве Лобачевского $\mathbb{L}^3$ в виде ограниченных многогранников с прямыми двугранными углами. Такая реализация единственна с точностью до изометрии. Они получили название *многогранников Погорелова*, так как именно таким многогранникам посвящена работа [P67]. Из работы [A70a] вытекает, что флаговые многогранники отвечают многогранникам с одинаковыми нетупыми двугранными углами в $\mathbb{L}^3$. Пример многогранников Погорелова дают *k-бочки* (*многогранники Лёбелля* в терминологии А.Ю. Веснина [V87, V17]), см. рис. 1a). Из результатов T. Dǒslić [D98, D03] следует, что семейству $\mathcal{P}_{Pog}$ принадлежит семейство *фуллеренов*, состоящее из всех простых многогранников только с 5- и 6-угольными гранями. Математические фуллерены моделируют сферические молекулы углерода, за открытие которых в 1996 году R. Curl, H. Kroto и R. Smalley получили Нобелевскую премию по химии. Они синтезировали *бакминстерфуллерен* C_{60}, который имеет форму усеченного икосаэдра (или футбольного мяча), см. рис. 1b). В работе W.P. Thurston [T98] получена параметризация пространства фуллеренов, из которой следует, что число фуллеренов с n атомами углерода с ростом n растёт как n^9.

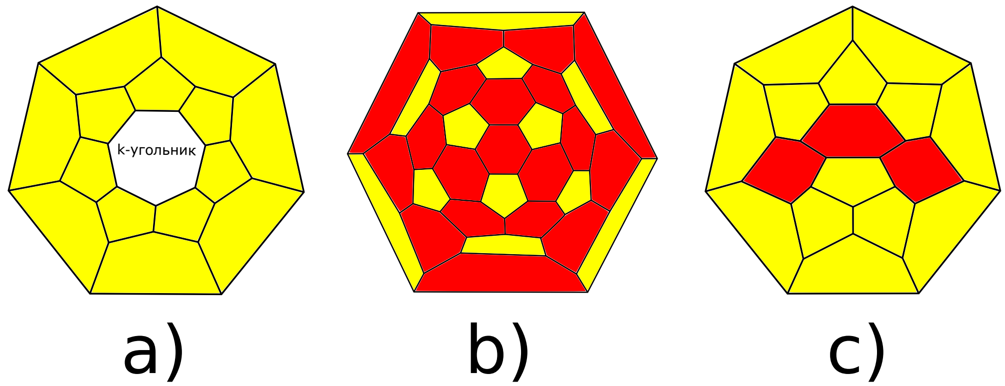

Рисунок 1. a) k-бочка; b) бакминстерфуллерен C_{60}; c) 7-диск-фуллерен с наименьшим числом граней.

Семейство c^*4-связых многогранников $\mathcal{P}_{aPog}$ мы называем *почти погореловскими* многогранниками, а семейство c^*5-связных многогранников $\mathcal{P}_{Pog^*}$ – *сильно погореловскими.* В работе [B1913] Дж.Д. Биркгоф свёл проблему 4 красок к проблеме раскраски в 4 цвета граней многогранников из семейства, которое, как оказалось, совпадает с $\mathcal{P}_{Pog^*}$.

Пусть P_8 – куб с двумя срезанными перпендикулярными непересекающимимся рёбрами.

Утверждение 1. *Пусть P – простой многогранник. Тогда он принадлежит*
а) $\mathcal{P}_{flag}$ тогда и только тогда, когда каждая его грань окружена поясом. [BEMPP17, BE17]
б) $\mathcal{P}_{aPog}\sqcup\{P_8\}$ тогда и только тогда, когда каждая его грань окружена поясом, при обходе внешней границы которого грани не повторяются. [BEMPP17, BE17]
в) $\mathcal{P}_{Pog}$ тогда и только тогда, когда когда каждая его пара смежных граней окружена поясом. [E19]
г) $\mathcal{P}_{Pog^*}$ тогда и только тогда, когда каждая его грань окружена двумя поясами. [B1913]

Определение 2. Простой многогранник, у которого все грани, кроме n-угольника, являются 5- и 6-угольниками, мы называем *n-диск-фуллереном* (это понятие возникло в работе [DDS13] и обозначало дополнение до n-угольника в поверхности такого многогранника). На рис. 1c) изображен 7-диск-фуллерен с минимальным числом граней.

Утверждение 2. [BE17S, BE17, E18] *Любой 3-диск-фуллерен принадлежит $\mathcal{P}_{aflag}$, 4-диск-фуллерен – $\mathcal{P}_{aPog}$, а 7-диск-фуллерен – $\mathcal{P}_{Pog}$. Для каждого $n\geqslant 8$ существует как n-диск-фуллерен, принадлежащий $\mathcal{P}_{Pog^*}$, так и не принадлежащий $\mathcal{P}_{aflag}$.*

Т.Е. Панов обратил внимание, что из результатов Е.М. Андреева [A70a, A70b] должно следовать, что почти погореловские многогранники отвечают прямоугольным многогранникам конечного объема в $\mathbb{L}^3$. У таких многогранников могут быть 4-валентные вершины на абсолюте, в то время как остальные вершины имеют валентность 3.

Утверждение 3. [E19] *Срезка 4-валентных вершин устанавливает биекцию между комбинаторными типами прямоугольных многогранников конечного объема в $\mathbb{L}^3$ и почти погореловскими многогранниками, отличными от куба I^3 и 5-угольной призмы $M_5\times I$.*

Мы развиваем теорию комбинаторного построения семейств многогранников, основной идеей которой является построение семейства при помощи набора операций из небольшого начального набора многогранников. Классический результат В. Эберхарда [Eb1891] заключается в том, что любой простой многогранник комбинаторно получатся из симплекса Δ^3 срезками вершин, рёбер и пар смежных рёбер.

Утверждение 4. [E19] *Простой многогранник принадлежит $\mathcal{P}_{aflag}$ тогда и только тогда, когда он получается из симплекса с не более чем двумя срезанными вершинами при помощи срезок вершин, рёбер и пар смежных рёбер, не эквивалентных срезке вершины 3-угольника, а также тогда и только тогда, когда он получается одновременной срезкой набора вершин симплекса Δ^3 или флагового многогранника, производящей все 3-угольники.*

Из результатов Kotzig A. [K69] (см. также [BE15] и [V15]) следует, что простой многогранник является флаговым тогда и только тогда, когда он получается из куба срезками рёбер и срезками пар смежных рёбер граней по крайне мере с 6 сторонами.

Куб и 5-угольная призма принадлежат классу $\mathcal{P}_{aPog}$. Также этому классу принадлежит *многогранник Сташефа* As^3, представляющий собой куб с тремя срезанными попарно непересекающимися перпендикулярными рёбрами. Из результатов D. Barnette [B74] следует, что простой многогранник принадлежит $\mathcal{P}_{aPog} \setminus \{I^3, M_5 \times I\}$ тогда и только тогда, когда он комбинаторно получается из As^3 при помощи срезок рёбер, не лежащих в 4-угольниках, и пар смежных рёбер граней по крайней мере с 6 сторонами.

В отличие от класса $\mathcal{P}_{flag}$, не любой 4-угольник многогранника из $\mathcal{P}_{aPog}$ получается срезкой ребра многогранника из того же класса. Однако, из результатов D. Barnette следует, что если в многограннике из $\mathcal{P}_{aPog}$ есть 4-угольники, то хотя бы один из них так получается.

Определение 3. *Паросочетанием* графа называется набор его попарно непересекающихся рёбер. Мы называем паросочетанием многогранника паросочетание его рёберного графа. Паросочетание называется *совершенным*, если оно покрывает все вершины.

Теорема 1. [E19] *Любой почти погореловский многогранник $P \neq I^3, M_5 \times I$ получается срезкой паросочетания почти погореловского многогранника или многогранника P_8, производящей все 4-угольники.*

Многогранник в $\mathbb{L}^3$ называется *идеальным*, если все его вершины лежат на абсолюте.

Следствие 1. [E19] *Любой идеальный прямоугольный многогранник P конечного объема в $\mathbb{L}^3$ получается из некоторого многогранника $Q \in \mathcal{P}_{aPog} \sqcup \{P_8\}$ стягиванием рёбер некоторого совершенного паросочетания, не содержащего противоположных рёбер никакого 4-угольника.*

В случае фуллеренов совершенные паросочетания соответствуют структурам Кекуле, обозначающим расстановку двойных связей в углеродной молекуле.

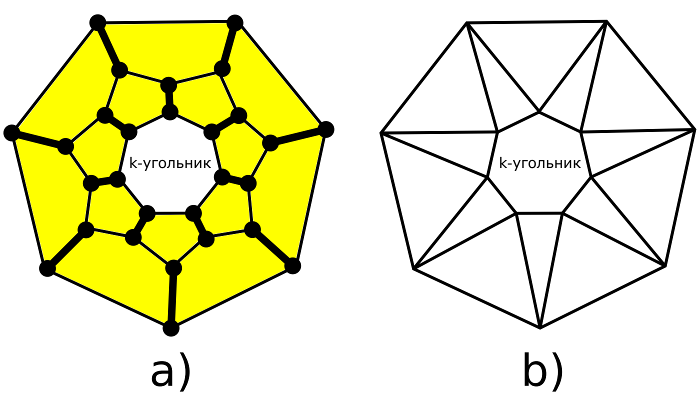

Рисунок 2. a) каноническое паросочетание k-бочки; b) k-антипризма.

Пример 1. k-бочка имеет каноническое совершенное паросочетание, см. рис. 2a). Соответствующий идеальный многогранник называется *k-антипризмой* (рис. 2b).

Определение 4. Операция *скручивания рёбер* изображена на рис. 3. Два ребра слева принадлежат одной грани многогранника и соединяют 4 различные вершины.

В обзоре А.Ю. Веснина [V17] сопоставление результатов работ [R96] об идеальных многогранниках и [BGGMTW05] о разбиениях сферы на 4-угольники привело к следующему результату.

Теорема 2. [V17] *Любой идеальный прямоугольный многогранник конечного объёма в $\mathbb{L}^3$ получается из некоторой k-антипризмы, $k \geqslant 3$, при помощи конечного числа операций скручивания рёбер.*

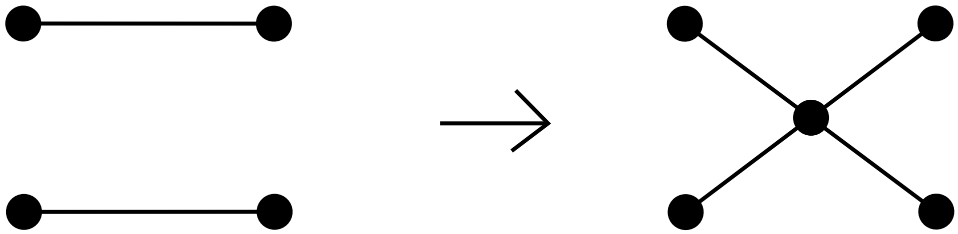

Рисунок 3. Операция скручивания рёбер.

Задача 1. Пусть P – идеальный прямоугольный многогранник конечного объёма в $\mathbb{L}^3$. Найти явный переход от описания многогранника P в терминах следствия 1 к его описанию в терминах теоремы 2.

Легко видеть, что k-бочки, $k \geqslant 5$, принадлежат классу $\mathcal{P}_{Pog^*}$. Из результатов D. Barnette [B74, B77] и J.W. Butler [Bu74] и работы [BE17] следует, что отличный от них простой многогранник принадлежит классу $\mathcal{P}_{Pog}$ тогда и только тогда, когда он получается из 5- или 6-бочки срезками пар смежных рёбер граней по крайней мере с 6 сторонами и связными суммами с 5-бочкой (рис. 4), и классу $\mathcal{P}_{Pog^*}$ тогда и только тогда, когда он получается из 6-бочки срезками пар смежных рёбер граней по крайней мере с 6 сторонами. T. Inoue [I08] показал, что обе операции увеличивают гиперболический объем, и перечислил первые 825 ограниченных прямоугольных многогранника в порядке возрастания объема [I15].

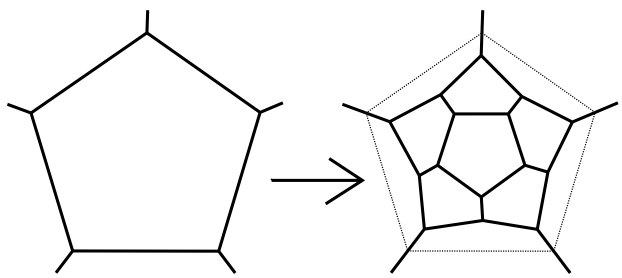

Рисунок 4. Связная сумма с 5-бочкой.

Для фуллеренов имеет место более сильный результат, чем для многогранников Погорелова. Имеется 1-параметрическая серия фуллеренов, которые получаются связной суммой 5-бочек вдоль 5-угольников, окруженных 5-угольниками. Она состоит из 5-бочки и так называемых $(5,0)$-*нанотрубок*. Из результатов F. Kardoš, R. Skrekovski [KS08] и, независимо, K. Kutnar, D. Marušič [KM08] следует, что остальные фуллерены принадлежат $\mathcal{P}_{Pog^*}$.

Теорема 3. [BE17] *Любой фуллерен, отличный от* 5*-бочки и* $(5,0)$*-нанотрубок, получается из* 6*-бочки при помощи срезок пар смежных рёбер граней по крайней мере с* 6 *сторонами так, что промежуточные многогранники являются фуллеренами или* 7*-диск-фуллеренами, у которых* 7*-угольник смежен с* 5*-угольником.*

Трудность заключается в том, что конструкция многогранников из класса $\mathcal{P}_{Pog^*}$ не гарантирует того, что промежуточные многогранники будут близки к фуллеренам.

Теорема 4. [E18] 7*-диск-фуллерен не принадлежит классу* $\mathcal{P}_{Pog^*}$ *тогда и только тогда, когда он получается из фуллерена последовательностью связных сумм с* 5*-бочкой. Любой* 7*-диск-фуллерен из* $\mathcal{P}_{Pog^*}$ *получается из* 6*-бочки при помощи срезок пар смежных рёбер граней по крайней мере с* 6 *сторонами так, что промежуточные многогранники имеют* 5*-,* 6*- и не более чем две* 7*-угольные грани.*

Пример решения задачи 1. Пусть многогранник $P \in \mathcal{P}_{Pog^*}$ получается из q-бочки, $q \geqslant 5$, последовательностью комбинаторных операций, отвечающих срезкам одной плоскостью s последовательных рёбер k-угольников, $2 \leqslant s \leqslant k-4$. Комбинаторно срезка разбивает грань на две грани новым ребром. Пусть каждое такое ребро не пересекает рёбер, возникших таким образом на предыдущих шагах, и рёбер изначального канонического паросочетания бочки. Тогда P и все промежуточные многогранники имеют канонические совершенные паросочетания, отвечающие последовательности операций. Стягивание рёбер этих паросочетаний даёт последовательность идеальных многогранников, связанных скручиваниями рёбер, отвечающую теореме 2. Первый многогранник является q-антипризмой, последний получается стягиванием рёбер совершенного паросочетания многогранника P. Таким образом, для специального класса идеальных многогранников мы получаем мост между теоремой 2 и конструкцией класса $\mathcal{P}_{Pog^*}$ при помощи следствия 1. В общем случае вопрос остаётся открытым.

В работе [V87] была предложена конструкция 3-мерного компактного гиперболического многообразия $R(P,\Lambda)$, отвечающего отображению Λ_2 граней многогранника $P\in\mathcal{P}_{Pog}$ в $\mathbb{Z}_2^3=(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^3$ такому, что для каждой вершины образы граней линейно независимы. Многообразие получается склейкой 8 копий многогранника вдоль граней. Наличие отображения следует из теоремы 4 красок. В *торической топологии* (см. [BP15]) такие многообразия получаются как *малые накрытия* над прямоугольными многогранниками. Каждому простому многограннику P с m гранями торическая топология также сопоставляет $(m+3)$-мерное гладкое *момент-угол многообразие* $\mathcal{Z}_P$ с действием m-мерного тора $T^m=(S^1)^m$, таким что $\mathcal{Z}_P/T^m=P$. Отображению Λ граней в $\mathbb{Z}^3$, такому что для каждой вершины образы граней образуют базис, она сопоставляет 6-мерное гладкое *квазиторическое многообразие* $M(P,\Lambda)$ с действием тора T^3, таким что $M(P,\Lambda)/T^3=P$. В работе [FMW15] F. Fan, J. Ma и X. Wang доказали, что для многогранников Погорелова P и P' многообразия $\mathcal{Z}_P$ и $\mathcal{Z}_{P'}$ диффеоморфны тогда и только тогда, когда их кольца когомологий над $\mathbb{Z}$ градуированно изоморфны.

Теорема 5. [BEMPP17] *Для многогранников Погорелова P и P' с функциями Λ_2, Λ и Λ_2', Λ' многообразия $M(P,\Lambda)$ и $M(P',\Lambda')$ диффеоморфны тогда и только тогда, когда их кольца целочисленных когомологий градуированно изоморфны, а также тогда и только тогда, когда существует комбинаторная эквивалентность φ многогранников P и P' и замена координат $A\in Gl_3(\mathbb{Z})$, такие что для каждой грани F выполнено $\Lambda(\varphi(F))=\pm A\Lambda(F)$. Многообразия $R(P,\Lambda_2)$ и $M(P',\Lambda_2')$ диффеоморфны тогда и только тогда, когда их кольца $\mathbb{Z}_2$-когомологий градуированно изоморфны, а также тогда и только тогда, когда существует комбинаторная эквивалентность φ многогранников P и P' и замена координат $A\in Gl_3(\mathbb{Z}_2)$, такие что для каждой грани F выполнено $\Lambda(\varphi(F))=A\Lambda(F)$.*

Эта теорема дает ответ на известный и давно стоявший в алгебраической топологии вопрос в фундаментальной проблеме классификации многообразий с точностью до диффеоморфизма.

Автор благодарен В.М. Бухштаберу и Т.Е. Панову за плодотворную совместную работу и А.Ю. Веснину и О.В. Шварцману за обсуждение аспектов гиперболической геометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ 17-01-00671 и 16-51-55017.

Литература

[P67] Погорелов А.В. *О правильном разбиении пространства Лобачевского*// Матем. заметки. 1967. Т. 1, № 1. С. 3–8.

[A70a] Андреев Е.М. *О выпуклых многогранниках в пространствах Лобачевского*// Матем. сб. 1970. Т. 81 (123), № 3. С. 445–478.

[V87] Веснин А.Ю. *Трехмерные гиперболические многообразия типа Лёбелля*// Сиб. мат. журн. 1987. V. 28, N 5. P. 50–53.

[V17] Веснин А.Ю. *Прямоугольные многогранники и трехмерные гиперболические многообразия*// УМН. 2017. Т.72, № 2(434). С. 147–190.

[D98] Dǒslić T. *On lower bounds of number of perfect matchings in fullerene graphs*// J. Math. Chem. 1998. V. 24, N 4. P. 359–364.

[D03] Dǒslić T. *Cyclical edge-connectivity of fullerene graphs and $(k,6)$-cages*// J. Math. Chem. 2003. V. 33, N 2. P. 103–112.

[T98] Thurston W.P. *Shapes of polyhedra and triangulations of the sphere.* In: The Epstein birthday schrift, Geom. Topol. Monogr., 1. Geom. Topol. Publ., Coventry, 1998, P. 511–549.

[B1913] Birkhoff G.D. *The Reducibility of Maps*// American Journal of Mathematics. 1913. V. 35, N 2. P. 115–128.

[BEMPP17] Бухштабер В.М., Ероховец Н.Ю., Масуда М., Панов Т.Е., Пак С. *Когомологическая жесткость многообразий, задаваемых трехмерными многогранниками*// УМН. 2017. Т. 72, № 2 (434). С. 3–66.

[BE17] Бухштабер В.М., Ероховец Н.Ю. *Конструкции семейств трехмерных многогранников, характеристические фрагменты фуллеренов и многогранники Погорелова*// Изв. РАН. Сер. матем. 2017. Т. 81, №5. С. 15–91.

[DDS13] Деза М., Дютур Сикирич М., Штогрин М.И. *Фуллерены и диск-фуллерены*// УМН. 2013. V. 68, N 4(412). P. 69–128.

[BE17S] Buchstaber V.M., Erokhovets N.Yu. *Fullerenes, Polytopes and Toric Topology*. In Volume 35 Combinatorial and Toric Homotopy: Introductory Lectures of Lect. Notes Ser. Inst. Math. Sci. Natl. Univ. Singap.; World Sci. Publ.: River Edge, NJ, USA, 2017; P. 67–178, arXiv: math.CO/160902949.

[E18] Erokhovets N. *Construction of Fullerenes and Pogorelov Polytopes with* 5-*,* 6- *and one* 7-*Gonal Face*// Symmetry. 2018. V.10, N 3, 67.

[A70b] Андреев Е.М. *О выпуклых многогранниках конечного объема в пространстве Лобачевского*// Матем. сб. 1970. Т. 83 (125), № 2(10). С. 256–260.

[E19] Ероховец Н.Ю. *Трехмерные прямоугольные многогранники конечного объема в пространстве Лобачевского: комбинаторика и конструкции*//Тр. МИАН. 2019. В печати.

[Eb1891] Eberhard V. *Zur Morphologie der Polyheder*. Leipzig, 1891.

[K69] Kotzig A. *Regularly connected trivalent graphs without non-trivial cuts of cardinality* 3// Acta. Fac. Rerum Natur. Univ. Comenian. Math. Publ. 1969. V. 21, P. 1-14.

[V15] Володин В.Д. *Комбинаторика флаговых симплицилальных* 3*-многогранников*//УМН. 2015. Т. 70, № 1(421). С. 181–182.

[BE15] Бухштабер В.М., Ероховец Н.Ю. *Усечения простых многогранников и приложения*// Тр. МИАН. 2015. Т. 289,115–144.

[B74] Barnette D. *On generation of planar graphs*// Discrete Mathematics. 1974. V. 7, N 3-4. P. 199–208.

[R96] Rivin I. *A characterization of ideal polyhedra in hyperbolic* 3*-space*// Ann. of Math., Second Series.1996. V. 143, N 1. P. 51–70.

[BGGMTW05] Brinkmann G., Greenberg S., Greenhill C., McKay B.D., Thomas R., Wollan P. *Generation of simple quadrangulations of the sphere*// Discrete Mathematics. 2005, V. 305, P. 33–54.

[B77] Barnette D. *Generating the* c^**-5-connected graphs*// Israel Journal of Mathematics. 1977. V. 28, N 1-2. P. 151–160.

[Bu74] Butler J.W. *A generation procedure for the simple* 3*-polytopes with cyclically* 5*-connected graphs*// Canad. J. Math. 1974, V. XXVI, N 3. P. 686-708.

[I08] Inoue T. *Organizing volumes of right-angled hyperbolic polyhedra*// Algebr. Geom. Topol. 2008.V. 8, N. 3. P. 1523-1565.

[I15] Inoue T. *The* 825 *smallest right-angled hyperbolic polyhedra*// 2015. arXiv: 1512.01761.

[KS08] Kardoš F., Skrekovski R. *Cyclic edge-cuts in fullerene graphs*// J. Math. Chem. 2008. V. 22, P. 121–132.

[KM08] Kutnar K., Marušič D. *On cyclic edge-connectivity of fullerenes*// Discr. Appl. Math. 2008. V. 156, P. 1661–1669.

[BP15] Buchstaber V.M., Panov T.E. *Toric topology*. Math. Surveys Monogr. V. 204, Amer. Math. Soc.: Providence, RI, USA, 2015.

[FMW15] Fan F., Ma J., Wang X. *B-Rigidity of flag* 2*-spheres without* 4*-belt*//arXiv: math.AT/151103624.