

Комбинаторная топология фуллеренов и замкнутых нанотрубок

В.М. Бухштабер

МИАН им. В.А.Стеклова, ИППИ им. А.А.Харкевича

Актуальные направления в материаловедении, нанотехнологии, наноэлектронике, прикладной химии опираются на теоретические и экспериментальные результаты о фуллеренах и нанотрубках, которые представляют собой гигантские молекулы, состоящие исключительно из атомов углерода.

Математической моделью фуллерена является поверхность выпуклого трёхмерного многогранника, составленная из пяти и шестиугольников.

Нанотрубкой называется плоскость, разбитая на шестиугольники (математическая модель графена) и свёрнутая в цилиндр.

Математической моделью замкнутой нанотрубки является полученный из нанотрубки конечный цилиндр, границы которого заклеены фуллереновыми шапочками.

С комбинаторно топологической точки зрения замкнутые нанотрубки представляют собой частный случай фуллеренов.

Принципиально важным в модели фуллерена является требование, чтобы в каждой его вершине сходилось ровно три ребра. В этом случае из формулы Эйлера легко следует, что число пятиугольников равно двенадцати. Более того, можно показать, что число пятиугольников в каждой шапочке, заклеивающей конечную нанотрубку, равно шести.

Методами выпуклой геометрии нетрудно показать, что число шестиугольников p_6 может быть любым, за исключением $p_6=1$.

Методами гиперболической геометрии получено, что число комбинаторно неэквивалентных фуллеренов с данным p_6 растёт как p_6 в степени 9.

В наших работах с Н.Ю.Ероховцом развита теория операций усечения многогранников, позволившая конструктивно описать важные классы многогранников.

Доклад в основном будет посвящен задачам конструкции фуллеренов и критериям, характеризующим фуллерены, представляющие собой замкнутые нанотрубки. В центре внимания доклада будет следующий результат, полученный нами в качестве приложения этой теории:

Комбинаторный тип любого фуллерена может быть построен из додекаэдра при помощи комбинации всего семи операций усечения. Длина комбинации этих операций равна числу шестиугольников в этом фуллерене.