

УДК 513
ББК 22.151
Д269

Интернет-магазин
MATHESIS

<http://shop.rcd.ru>

- физика
- математика
- биология
- нефтегазовые технологии

Деза М.-М., Сикирич М.-Д.

Геометрия химических графов: полициклы и биполициклы. — М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2013. — 384 с.

Полициклы и симметричные полиэдры возникают как обобщения графов при моделировании молекулярных структур, возникающих в химии и кристаллографии, таких как фуллерены, за открытие которых была присуждена Нобелевская премия. Химия породила много интересных вопросов в математике и компьютерном моделировании, которые, в свою очередь, предлагают новые направления при синтезе молекул. Данная монография содержит новые результаты теории полициклов и биполициклов вместе с необходимой вводной информацией, включающей в себя описание необходимых для изучения материала математических инструментов. Книга организована так, что после чтения вводной главы каждая последующая может быть прочитана независимо от предыдущих. Она будет доступна как исследователям, так и студентам, изучающим теорию графов, дискретную геометрию, комбинаторику, а также более прикладные области, такие как математическая химия и кристаллография. Многие приводимые результаты потребовали использование компьютерного перебора. Соответствующие программы доступны на сайтах авторов.

ISBN 978-5-4344-0130-2

ББК 22.151

© М.-М. Деза, М.-Д. Сикирич, 2013

© Ижевский институт компьютерных исследований, 2013

<http://shop.rcd.ru>
<http://ics.org.ru>

Оглавление

Предисловие к русскому изданию	9
Предисловие	11
ГЛАВА 1. Введение	13
1.1. Графы	13
1.2. Топологические понятия	15
1.2.1. Карты	15
1.2.2. Ориентируемость и классификация поверхностей	17
1.2.3. Фундаментальные группы, накрытия и фактор-карты . .	19
1.2.4. Гомологии и характеристика Эйлера–Пуанкаре	23
1.3. Представление карт	24
1.4. Группы симметрии карт	27
1.5. Типы регулярности карт	34
1.6. Операции над картами	38
ГЛАВА 2. Биполициклы	41
2.1. Конструкция Гольдберга–Коксетера	46
2.2. Описание классов	50
2.3. Компьютерные построения классов	57
ГЛАВА 3. Фуллерены как паркеты на поверхностях	59
3.1. Классификация конечных фуллеренов	59
3.2. Фуллерены на торе и бутылке Клейна	62
3.3. Проективные фуллерены	63
3.4. Плоские 3-фуллерены	64
ГЛАВА 4. Полициклы	65
4.1. (r, q) -полициклы	65
4.2. Примеры	68
4.3. Клеточный гомоморфизм и структура (r, q) -полициклов	70
4.4. Углы и кривизна	75
4.5. Полициклы на поверхностях	78

ГЛАВА 5. Полициклы с заданной границей	81
5.1. Проблема единственности (r, q) -заполнений	81
5.2. Алгоритмы построения $(r, 3)$ -заполнения	87
ГЛАВА 6. Симметрии полициклов	91
6.1. Группа автоморфизмов (r, q) -полициклов	91
6.2. Изоздральные и изогональные (r, q) -полициклы	92
6.3. Изоздральные и изогональные $(r, q)_{gen}$ -полициклы	100
ГЛАВА 7. Элементарные полициклы	103
7.1. Разложение полициклов	103
7.2. Параболические и гиперболические элементарные $(R, q)_{gen}$ -полициклы	108
7.3. Ядерно-элементарные полициклы	111
7.4. Классификация элементарных $(\{2, 3, 4, 5\}, 3)_{gen}$ -полициклов	115
7.5. Классификация элементарных $(\{2, 3\}, 4)_{gen}$ -полициклов	122
7.6. Классификация элементарных $(\{2, 3\}, 5)_{gen}$ -полициклов	123
7.7. Приложение 1: 204 отдельных $(\{2, 3, 4, 5\}, 3)$ -полицикла	127
7.8. Приложение 2: 57 отдельных элементарных $(\{2, 3\}, 5)$ -поли- циклов	135
ГЛАВА 8. Применения разложения на элементарные (r, q) -поли- циклы	139
8.1. Экстремальные полициклы	140
8.1.1. Экстремальные $(5, 3)$ -полициклы	142
8.1.2. Экстремальные $(3, 5)$ -полициклы	146
8.1.3. Параболические и гиперболические экстремальные (r, q) -полициклы	147
8.2. Непродолжаемые полициклы	149
8.3. 2-вложимые полициклы	156
ГЛАВА 9. Строго регулярные сферы и торы	161
9.1. Строго регулярные сферы	163
9.2. Строго регулярные $(\{a, b\}, k)$ -сферы, не являющиеся много- гранниками	174
9.3. Строго регулярные $(\{a, b\}, k)$ -плоскости	181
9.3.1. Перечисление возможных случаев	183
9.3.2. Доказательство и описание 33 случаев	190

ГЛАВА 10. Параболические слабо регулярные сферы	211
10.1. Регулярные $(\{2, 6\}, 3)$ -сферы	211
10.2. Регулярные $(\{3, 6\}, 3)$ -сферы	212
10.3. Регулярные $(\{4, 6\}, 3)$ -сферы	212
10.4. Регулярные $(\{5, 6\}, 3)$ -сферы (фуллерены)	214
10.5. Регулярные $(\{3, 4\}, 4)$ -сферы	221
10.6. Регулярные $(\{2, 3\}, 6)$ -сферы	223
ГЛАВА 11. Общие свойства 3-валентных регулярных карт	227
11.1. Произвольные $(\{a, b\}, 3)$ -карты	232
11.2. Неразрешенные вопросы	234
ГЛАВА 12. Сферы и торы со свойством aR_i	235
12.1. Карты со свойством aR_0	236
12.2. Карты со свойством $4R_1$	238
12.3. Карты, обладающие свойством $4R_2$	244
12.4. Карты, обладающие свойством $5R_2$	254
12.5. Карты, обладающие свойством $5R_3$	254
ГЛАВА 13. Сферы и торы Франка – Каспера	273
13.1. Формула Эйлера для $(\{a, b\}, 3)$ -карт, обладающих свойством bR_0	273
13.2. Главный остов, элементарные полициклы и классификационные результаты	274
ГЛАВА 14. Сферы и торы со свойством bR_1	281
14.1. Формула Эйлера для $(\{a, b\}, 3)$ -карт со свойством bR_1	281
14.2. Элементарные полициклы	282
ГЛАВА 15. Сферы и торы со свойством bR_2	293
15.1. $(\{a, b\}, 3)$ -карты со свойством bR_2	293
15.2. $(\{5, b\}, 3)$ -торы со свойством bR_2	296
15.3. $(\{a, b\}, 3)$ -сферы, содержащие цикл из b -угольников	299
ГЛАВА 16. Сферы и торы со свойством bR_3	309
16.1. Классификация $(\{4, b\}, 3)$ -карт, обладающих свойством bR_3	309
16.2. $(\{5, b\}, 3)$ -карты, обладающие свойством bR_3	314
ГЛАВА 17. Сферы и торы со свойством bR_4	321
17.1. $(\{4, b\}, 3)$ -карты со свойством bR_4	321
17.2. $(\{5, b\}, 3)$ -карты со свойством bR_4	325

ГЛАВА 18. Сферы и торы со свойством bR_j при $j \geq 5$	341
18.1. Карты со свойством bR_5	341
18.2. Карты со свойством bR_6	349
ГЛАВА 19. Икосаэдральные фуллероиды	353
19.1. Построение I -фуллероидов и бесконечных серий	354
19.2. Необходимые условия на p -вектора	358
19.3. От p -вектора к структуре	361
Предметный указатель	367
Литература	371