Matematyka i przyroda w kształceniu powszechnym,
PWSZ Nowy Sacz 2012

Geometria molekúl uhlíka

Marián Trenkler

Abstract.

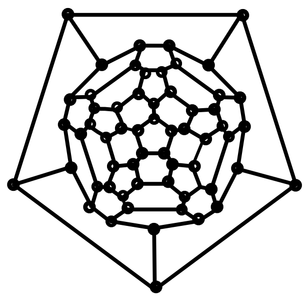
At school most of us learned that there two naturally occurring allotropes of carbon - diamond and graphite. In 1985 another modification of carbon was discovered. It is formed by a group of molecules called fullerenes. The discovery of fullerenes was such an important achievement, that in 1996 the Nobel Prize in Chemistry was awarded for it. They were named after the noted American architectural modeler R.B.Fuller.

The most famous fullerene molecule is the buckminsterfullerene. It is a spherical molecule with the formula C_{60}, composed of 60 atoms of carbon. These atoms are positioned in the vertices of a polyhedron which is combinatorially isomorphic with the soccer ball. The soccer ball consists of 12 pentagons and 20 hexagons. The diameter of this molecule is $7nm$, which is 10^8 times less that the soccer ball. The 3-valent polyhedra consisting only of pentagons and hexagons have been intensively studied by a group of Košice mathematicians from the year 1970.

In this paper, using the Euler polyhedron formula $S - H + V = 2$ (where S, H, V are number of faces, edges, and vertices), we formulate some necessary conditions for the existence of the molecules which play an important role in our lives.

Väčšina z nás sa v škole učila, že uhlík v čistej forme sa v prírode vyskytuje ako diamant alebo grafit. Pri skúmaní tmavej hmoty vo vesmíre ukázali astrofyzikálne pozorovannia uhlikatých hviezd niektoré zvláštne spektrálne čiary. Jedným z vysvetlení tohto prekvapujúceho javu bola existencia veľkých molekúl zložených z desiatok atómov uhlíka, ktoré sme nepoznali. V roku 1985 Američania R.F.Curl, R.E.Smalley a Angličan H.W.Kroto urobili sériu pokusov, v ktorých očarovaním grafitu laserom vyrobili novú látku. Pomocou spektografie v nej identifikovali veľké molekuly uhlíka a takto k známym modifikáciám uhlíka pribudla ďalšia molekula, ktorá dostala názov *fullerén*. Bol to tak významný objav, že už v nasledujúcom roku bola objaviteľom udelená Nobelova cena za chémiu. Názov fullerén bol odvodený z mena amerického architekta Richarda B.Fullera (1895-1983), ktorý je autorom amerického pavilóna na Expo 67 v Montreale a viacerých iných netradičných stavieb. Jeho stavby však majú tvary duánych mnohostenov k modelom fullerénov (sú vytvorené z trojuholníkov, ktorých vrcholy sú 5-valentné a 6-valentné). Mnoho informácií nájdete na internetovských stránkach.

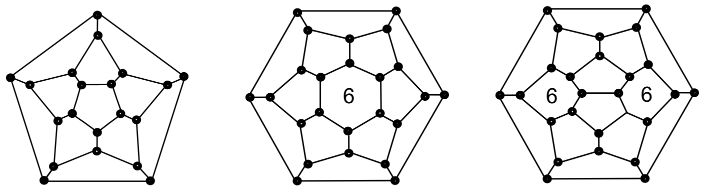
Najznámejšou a svojimi vlastnosťami aj najzaujímavejšou z molekúl fullerénov je molekula C_{60}, ktorá sa skladá zo 60 atómov uhlíka a jej objavitelia ju nazývali *buckyball*. Tieto sa nachádzajú vo vrcholoch mnohostena, ktorý je kombinatoricky izomorfný s futbalovou loptou skladajúcou sa z 12 päťuholníkov a 20 šesťuholníkov. Molekula má tvar gule a jej priemer je $7nm$ $(7.10^{-9}m)$, t.j. asi 10^8 krát menšia ako futbalová lopta. (Pozri obr. 1.)



Obrázok 1: Fulleren C_{60}

Takýto mnohosten sa reprodukuje 60 zhodnosťami a žiadne iné priestorové teleso nie je reprodukované väčším počtom zhodností. Vďaka svojmu tvaru je (pravdepodobne)najstabilnejší. Molekula C_{60} je považovaná za najkrajšiu molekulu z fullerénov a v ankete časopisu Science sa stala molekulou roku 1990. Objavu a príprave fullerénov predchádzali teoretické úvahy chemikov o možnosti existencie molekuly C_{60}.

Po prvej izolácii fullerénov sa v roku 1990 spustila lavína rôznych experimentov po celom svete a ich laboratórna príprava nebola žiadnym problémom. Onedlho sa fulleróny stali komerčným produktom na trhu. Fulleróny sa získavali zo sadzí spaľovaním benzénu v kyslíkovom plameni za prítomnosti argónu. Neskôr sa prípravovali C_{60} a C_{70} pyrolýzou naftalénu použitím argónu pri teplote 1 000°C. Doteraz najefektívnejšou metódou získavania sadzí obsahujúcich fulleróny je odporové vyparovanie grafitových elektród alebo ich vyparovanie v oblúkovom výboji. Takto získané sadze obsahujú $10-40\%$ fullerénov, z ktorých môžeme separovať fulleróny niekoľkými spôsobmi. Najbežnejší spôsob je chemická extrakcia v organickom rozpúšťadle a následná filtrácia. Nakoniec, pre separáciu fullerénov sú využívané najmä chromatografické metódy, pomocou ktorých bola dosiahnutá čistota prevyšujúca 99%. Vedľa hlavných fullerénov C_{60} a C_{70} vznikajú v nepatrnom množstve tiež vyššie fulleróny C_{76}, C_{78}, C_{84}, ktoré sa skladajú z 76, 78, 84 atómov uhlíka. Objavujú sa aj molekuly s väčšími počtami atómom uhlíka.

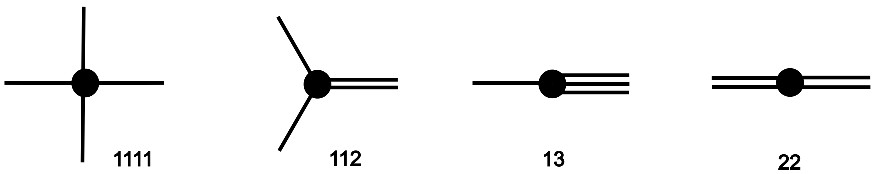


Obrázok 2: Fulleróny C_{20}, C_{24}, C_{26}

Už v roku 1966 David Jones špekuloval o dutých molekulách uhlíka získaných stočením grafitových rovín. Na základe Eulerovej vety ukázal, že k uzavretiu takéhoto systému je potrebných 12 päťuholníkov. O štyri roky neskôr molekulu C_{60} svojimi výpočtami predpovedali E.Osawa a Z.Yoshida. Ich práce však boli publikované v japonštine, a tak nevzbudili žiadnu pozornosť vedeckej komunity. Podobný osud postihol aj ruských vedcov v roku 1973. Nevedome pozorovanie fullerénov bolo zrealizované v roku 1984 bádateľmi firmy Exxon pri odparovaní grafitu laserom, no nezvyčajne anomálie experimentu neboli publikované. Nakoniec, v roku 1985 bol fullerén C_{60} pozorovaný a identifikovaný. V 70-tych rokoch matematici publikovali (S.Jendroľ, E.Jucovič, B.Grünbaum, M.Trenkler, J.Zaks) práce o štruktúre mnohostenov kombinatoricky izomorfných s fullerénmi.

Dnes je možné fulleróny (predovšetkým fullerén C_{60}) zakúpiť. Prirodzený výskyt fullerénov je na našej Zemi veľmi obmedzený. Fulleróny, prevažne C_{60} a C_{70}, boli identifikované vo fulguritoch. Fulgurity (lat. fulgur - blesk) vznikajú pri úderoch blesku do pôdy, piesku púští alebo do pevných hornín obsahujúcich uhlík. V minimálnom množstve sa fulleróny vyskytujú v prírode v sadziach a v uhoľných vrstvách.

Všeobecne je známe, že atóm uhlíka je 4-mocný (4-valentný), tj. má štyri valenčné elektróny, ktorých vynechaním sa môže spájať s inými atómami. Vďaka jeho vlastnostiam môže byť spojený s iným atómom aj nahradou dvojice atómov alebo trojice atómov (pozri obr.3.) Ak sú všetky atómy uhlíka spojené so štyrmi atómami uhlíka, tak tieto sú vo vrholoch pravidelného štvorstena a vytvárajú priestorovú štruktúru. Diamant je vytvorený z veľkého množstva atómov uhlíka, okrem atómov na hraniciach diamantu. Ak sú atómy umiestnené v dvoch rovinách, tak vznikne grafit. V tejto práci sa budeme zaoberať takýmito štruktúrami, v ktorých je každý atóm uhlíka spojený s troma atomami uhlíka. S jediným atómom uhlíka dvojitou väzbou a s dvoma jednoduchou väzbou. V tomto prípade všetky atómy "ležia" v jednej rovine a príslušné molekuly tvoria "rovinné" molekuly. V práci sa nezaoberáme molekulami uhlíka, v ktorých je atóm uhlíka spojený s práve dvoma atómami uhlíka (posledné dva prípady na obr.3.)



Obrázok 3: Valencie atómu uhlíka

Konvexné 3-valentné mnohosteny, ktorých steny sú 5-uholníky a 6-uholníky.

Fullerény majú tvar (presnejšie - sú kombinatoricky izomorfné) 3-valentných mnohostenov (všetky vrcholy sú 3-teho stupňa), ktoré sa skladajú z päťuholníkov a šesťuholníkov. V čase, keď D.Jones sa zaoberal možnostami existencie molekuly C_{60}, matematici riešili nasledujúci problém:

Ak je daná postupnosť z celých nezáporných čísel $(s_3, s_4, s_5, s_6, \ldots, s_n)$, *či existuje* 3*-valentný konvexný mnohosten* $\mathbf{M}$, *ktorý sa sklad práve zo* s_k k*-uholníkov pre všetky* $k \geq 3$.

Ak $\mathbf{M}$ je konvexný 3-valentný mnohosten, tak označíme symbolmi $S(\mathbf{M})$, $H(\mathbf{M})$ a $V(\mathbf{M})$ počet jeho stien, hrán a vrcholov. Už od čias L.Eulera je známe, že platí

$$S(\mathbf{M}) - H(\mathbf{M}) + V(\mathbf{M}) = 2.$$

Ak označíme symbolom $s_k(\mathbf{M})$ počet k-uholníkov (stien ohraničených práve k hranami) mnohostena $\mathbf{M}$, tak platí

$$S(\mathbf{M}) = \sum_{k\geq 3} s_k(\mathbf{M}), \qquad 2H(\mathbf{M}) = 3V(\mathbf{M}) = \sum_{k\geq 3} k.s_k(\mathbf{M}).$$

Vynásobením Eulerovej formuly šiestimi a úpravou dostaneme

$$6S(\mathbf{M}) - 2H(\mathbf{M}) + 2(3V(\mathbf{M}) - 2H(\mathbf{M})) = 12,$$

dosadením z vyššie uvedených vzťahov

$$6\sum_{k\geq 3} s_k(\mathbf{M}) - \sum_{k\geq 3} k.s_k(\mathbf{M}) + 2(3V(\mathbf{M}) - 2H(\mathbf{M})) = 12$$

a úpravou dostaneme

$$\sum_{k\geq 3}(6-k)s_k(\mathbf{M}) = 12.$$

Vzťah

$$3s_3(\mathbf{M}) + 2s_4(\mathbf{M}) + s_5(\mathbf{M}) = 12 + \sum_{k\geq 6}(k-6)s_k(\mathbf{M}).$$

je nutnou podmienkou pre existenciu 3-valentného mnohostena, ktorý sa skladá zo $s_k(\mathbf{M})$ k-uholníkov. V tomto vzťahu nie je informácia o počte 6-uholníkov. Prirodzene vzniká otázka, pre aké počty 6-uholníkov existuje konvexný mnohostem, ktorého každý vrchol je 3-valentný a skladá sa z predpísaných počtov k-uholníkových stien.

Už v roku 1890 slepý nemecký matematik Viktor Eberhard dokázal nasledujúce tvrdenie:

Ak postupnosť $(s_3, s_4, s_5, s_7, s_8, s_9, ..., s_n)$ *z celých nezáporných čísel spĺňa podmienku* $\sum_{k=3}^{n}(6-k)s_k = 12$, *tak existuje* 3*-valentný konvexný mnohosten, ktorý sa skladá zo* s_k k*-uholníkov pre všetky* $3 \leq k \neq 6$.

V tejto vete nie je informácia o počte šesťuholníkov príslušného mnohostena. Pôvodný dôkaz bol uverejnený asi na 90 stranách. Neskôr bola táto veta zlepšená a dnes, vo väčšine prípadov, poznáme počty 6-uholníkov, pre ktoré existuje príslušný mnohosten. (Pozri knihy [1], [2].)

Najskôr uvedieme trochu teórie o konvexných mnohostenoch a ich grafoch, respektíve o ich mapách. Ak vnoríme súvislý planárny graf do roviny, tak tento graf rozdelí rovinu na súvislé oblasti (steny). Oblasť ohraničenú k-hranami nazývame *k-uholník* a vrchol, z ktorého vychádza k hrán nazývame *k-valentný vrchol*. Vnorený graf spolu so všetkými k-uholníkmi, nazývame *planárna mapa*.

Z historických dôvodov v práci používame dva pojmy - graf mnohostena aj mapa mnohostena, ktoré autori publikovaných prác v minulosti často navzájom zamieňali. Ak píšeme o grafe mnohostenu, tak máme na mysli aj oblasti, ktoré vzniknu jeho vnorením do roviny. Graf nazývame *vrcholovo*

3-*súvislý*, ak vynechaním dvoch ľubovoľných vrcholov a hrán, s ktorými incidujú, ostane súvislým grafom. (Niektoré pojmy, ktoré nie sú definované v tejto práci, sú štandardne používané v teórii grafov.)

V práci budeme podstatným spôsobom využívať dve matematické tvrdenia, ktoré vyjadrujú súvis medzi kombinatorickými a metrickými vlastnosťami konvexných mnohostenov. Obe vety umožňujú stručné dôkazy uvádzaných tvrdení. V roku 1922 bola publikovaná Steinitzova veta [2, str. 33]:

Ak G je vrcholovo 3-súvislý planárny (polyedrický) graf, tak existuje konvexný mnohosten s rovnakými typmi stien a vrcholov.

Vravíme, že graf a príslušný mnohosten sú kombinatoricky izomorfné. V roku 1971 publikoval P.Mani [3] tvrdenie, podľa ktorého navyše platí, *že existuje kombinatoricky izomorfný mnohosten, ktorý má grupu symetrií izomorfnú s grupou automorfizmov príslušného polyedrického grafu.*

Tieto vety nám umožňujú to, že namiesto popisu konštrukcie mnohostenov s uvádzanými vlastnosťami, stačí zostrojiť príslušné planárne grafy (presnejšie mapy) v rovine. Ich využitím sa výrazne zjednodušili viaceré dôkazy tvrdení o mnohostenoch s danými grupami symetrií.

Konštrukcie mnohostenov $\mathbf{M}(12, s_6)$.

3-valentný mnohosten, ktorý sa skladá z 12 päťuholníkov a s_6 šesťuhoníkov označujeme symbolom $\mathbf{M}(12, s_6)$. Takýto mnohosten je kombinatoricky izomorfný s molekulou C_{20+2s_6} (ak takáto molekula existuje). V práci [2, str. 61] je bez dôkazu uvedené nasledujúce tvrdenie:

Mnohosten $\mathbf{M}(12, s_6)$ *existuje práve vtedy, keď* $s_6 \neq 1$.

Dôkaz tejto vety vykonáme popisom konštrukcie planárnychej mapy s 3-valentným grafom, ktoré sa skladá s 12 päťuholníkov a s_6 šesťuholníkov pre všetky $s_6 \neq 1$. Neexistencia mnohostena, ktorý sa sklada z 12 päťuholníkov a jedného šesťuholníka vyplýva z jednoznačnosti konštrukcie. Ak vychádzame zo šesťuholníka a pridávame len päťuholníky, tak konštrukciu ukončíme šesťuholníkom.

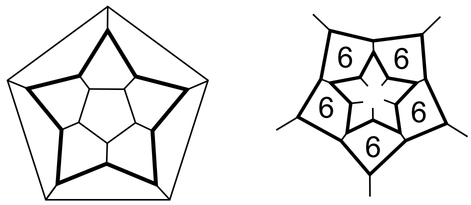
Na obrázku 2 sú nakreslené planárne mapy, ktoré sú kombinatoricky izomorfné s $\mathbf{M}(12, 0)$, $\mathbf{M}(12, 2)$ a $\mathbf{M}(12, 3)$. Opakovaním nasledujúcich dvoch konštrukčných krokov z nich vytvoríme $\mathbf{M}(12, k)$ pre všetky $k \geq 3$.

1. Vkladanie prstencov z 5, respektíve zo 6 šesťuholníkov.

Na obrázku 4 je vľavo nakreslený dodekaéder (precíznejšie - graf dodekaédra). Hrubými čiarami je nakreslená grafová kružnica P_{10} dĺžky 10, ktorej vrcholy sú 3-valentné, pričom incidujúce hrany striedavo smerujú do vnútra a vonkajšku grafovej kružnice. Takáto kružnica sa v teórii grafov nazýva

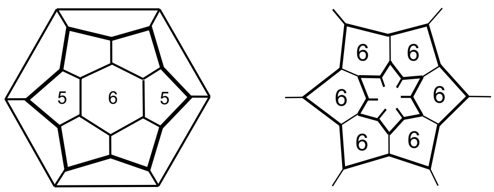
Petriho kružnica. Ak rozrežeme graf dodekaédra **D** pozdĺž kružnice P_{10}, tak sa graf rozdelí na dve časti, pričom v každej časti je práve 6 päťuholníkov.

Mapu mnohostena $\mathbf{M}(12,5)$ vytvoríme vložením prstenca (nakreslený na obrázku 4 vpravo) do východzej mapy, ktorou je mapa dodekaédra. Prstenec je vytvorený z 5 šesťuholníkov. Mapu $\mathbf{M}(12,5k)$, pre všetky $k>1$, vytvoríme vložením k prstencov do východzej mapy.



Obrázok 4: Petriho kružnica P_{10} - prstenec

Ak zostrojujeme mapu $\mathbf{M}(12,6k+2)$ alebo $\mathbf{M}(12,6k+3)$, tak postupujeme rovnako. Petriho kružnica P_{12} (obr. 5) sa nachádza v grafoch v strede a na pravej strane na obrázku 2. Ak rozrežeme graf $\mathbf{M}(12,2)$, resp. $\mathbf{M}(12,3)$ pozdĺž kružnice P_{12}, tak sa graf rozdelí na dve časti. Mapu mnohostena $\mathbf{M}(12,6k+2)$, respektíve $\mathbf{M}(12,6k+3)$, pre $k\geq 1$, vytvoríme vložením k prstencov vytvorených zo 6 šesťuholníkov do východzej mapy.

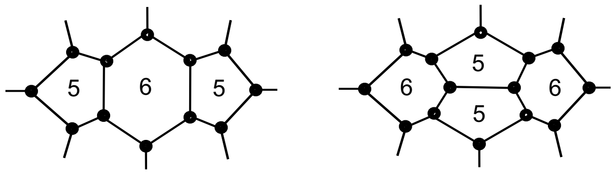


Obrázok 5: Petriho kružnica P_{12} - prstenec

2. Zväčšovanie počtu šesťuholníkov o jeden.

V grafoch vytvorených v predchádzajúcich krokoch sa nachádza konfigurácia zložená z 1 šesťuholníka a dvojice päťuholníkov (nakreslená na pravej strane obrázku 6). Ak na spoločných hranách šesťuholníka a dvoch päťuholníkov vyberieme dva nové vrcholy a spojíme ich novou hranou, tak dostaneme konfiguráciu (vpravo na obr. 6), ktorá sa skladá z dvoch šesťuholníkov a dvoch päťuholníkov. Opakovaním tejto konštrukcie môžeme v každej časti (vytvorených Petriho kružnicou) grafu $\mathbf{M}(12,2)$, resp. $\mathbf{M}(12,3)$ vytvoriť aspoň tri nové šesťuholníky.

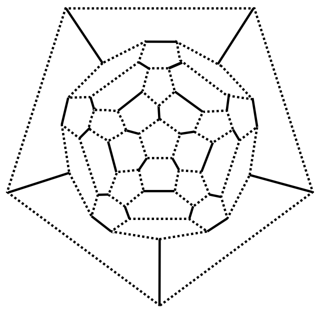
Na obrázku 5 vpravo je číslicami 5 a 6 nakreslená uvažovaná konfiguráciu. Po zväčšeni počtu šesťuholníkov o jeden, sa päťuholníky zmenia na šesťuholníky, ktoré sú základom ďalších dvoch konfigurácii.



Obrázok 6: Zväčšenie počtu 6-uholníkov o jeden.

Popísaným spôsobom môžeme vytvoriť mnohosten $\mathbf{M}(12, s_k)$ pre všetky prirodzené čísla $s_k \neq 1$.

Poznámka: Grafy všetkých zostrojených 3-valentných máp, ktoré sú kombinatoricky izomorfné s fullerénmi, sa dajú rozložiť na 1-faktor a 2-faktor. (k-faktor je indukovaný podgraf, ktorého každý vrchol je k-teho stupňa.) Hrany 1-faktora reprezentujú dvojité väzby medzi atómami uhlíka. Na obrázku 7 sú hrubými čarami znázornené dvojité väzby a prerušovanými jednoduché väzby medzi atómami uhlíka vo fulleréne C_{60}. (V tomto prípade, každá hrana ľubovoľného päťuholníka reprezentuje jednoduchú väzbu.) Overenie tohto faktu ponechávame na čitateľa.

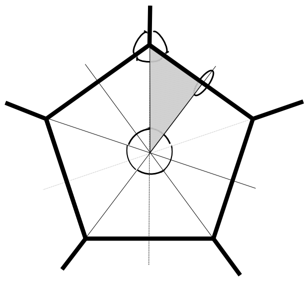


Obrázok 7: Väzby vo fulleréne C_{60}

Fulleríny s dodekahedrálnou grupou symetrií $\mathcal{D}$.

Zo známych faktov vyplýva, že medzi najstabilnejšie fulleríny patria tie, ktoré majú najväčší počet symetrií a majú opísanú guľovú plochu t.j. existuje guľová plocha, na ktorej ležia stredy všetkých atómov uhlíka.

Všeobecne je známe, že dodekaéder (pravidelný 12-sten) je súmerný podľa 15 rovín. Každá z rovín je určená dvoma "protiľahlými" hránami. Ťažisko (päťuholník nemá stred) každej steny leží v piatich rovinách súmernosti. Roviny súmernosti dodekaédra rozdeľujú jeho povrch na 120 trojuholníkov, ktoré nazývame *elementárne trojuholníky.* Tieto trojuholníky môžeme rozdeliť do dvoch skupín tak, že žiadne dva trojuholníky jednej skupiny nemajú spoločnú hranu. Pretože pre každú dvojicu elementárnych trojuholníkov existuje práve jedna zhodnosť, ktorá prevedie prvý do druhého existuje práve 120 zhodností, ktoré zobrazujú dodekaéder na seba. Dvoma trojuholníkmi z jednej skupiny je určená súhlasná zhodnosť, preto je 60 súhlasných a rovnaký počet nesúhlasných zhodností. (Dva nesúhlasne zhodné útvary však nemôžeme stotožniť v 3-rozmernom priestore.) Pretože pri každom zobrazení kocky na seba stred dodekaédra je samodružný bod existuje 60 otáčaní (vrátane identity), ktoré zobrazujú dodekaéder na seba. Zhodnosti, ktoré reprodukujú dodekaéder, s operáciou skladanie zobrazení tvoria grupu, ktorá sa nazýva *dodekahedrálna grupa symetrií* a v práci ju označujeme symbolom $\mathcal{D}$.



Obrázok 8: Elementárny trojuholník

Všetky zhodnosti, ktoré reprodukujú dodekaéder, sú vytvorené skladaním zobrazení z nasledujúcich troch otáčaní, ktorých osi prechádzajú vrcholmi ľubovoľného elementárneho trojuholníka:

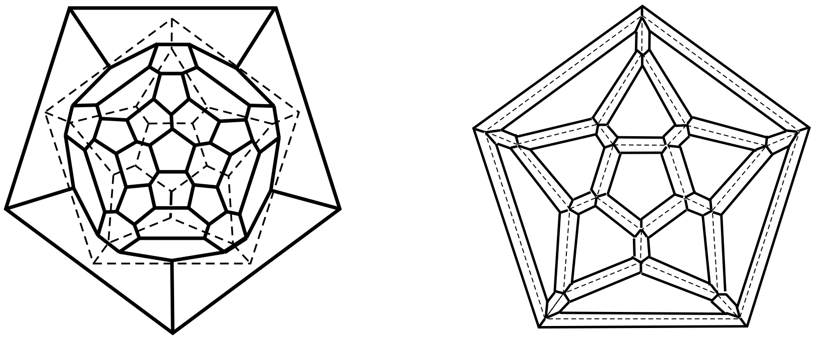
a) R_{72} - otáčanie o 72 stupňov okolo priamky spájajúcej stredy protiľahlých stien dodekaédra (takýchto otáčaní je 6),

b) R_{120} - otáčanie o 120 stupňov okolo priamky spájajúcej stredy protiľahlých vrcholov (takýchto otáčaní je 10),

c) R_{180} - otáčanie o 180 stupňov okolo priamky spájajúcej stredy protiľahlých hrán (takýchto otáčaní je 15).

Ak má 3-valentný mnohosten dodekahedrálnu grupu symetrií a je vytvorený vytvorený z 12 päťuholníkov a s_6 šesťuholníkov, tak musí platiť $s_6 = 60i + 20j + 30k$, kde $i = 0, 1, 2, 3, ...$, $j = 0$ alebo $j = 1$ a $k = 0$ alebo $k = 1$. Toto je dane tým, že stena môže byť vo vrchole elementárneho trojuholníka dodekaédra, na práve jednej jeho hrane alebo vo vnútri elementárneho trojuholníka. Index $j = 1$, resp. $k = 1$, keď os otáčania R_{120}, resp. R_{180} prechádza stredmi dvoch protiľahlých šesťuholníkov.

Ak máme daný graf fulleréna (na obrázku 9 nakreslený prerušovanými čiarami), tak z neho môžeme vytvoriť graf iného fulleréna použitím dvoch transformácií, ktoré sú nakreslené na obrázku obr. 9. V prvom prípade nahradíme všetky vrcholy novými šesťuholníkmi ("odrezanie" vrcholov), pričom počet ostatných stien ostane zachovaný. V druhom nahradzujeme každú hranu šesťuholníkov. Pretože uvedené transformácie zachovávajú súmernosti podľa všetkých rovín súmernosti vychodzieho mnohostena platí, že pri oboch transformáciách sa zachováva grupa symetrií východzieho grafu. Uvedené transformácie je môžeme aplikovať na graf ľubovoľného fullerénu.



Obrázok 9: Vytváranie nových fullerénov

Poznamenajme, že na obrázku 9 sú nakreslené hrubou príslušné mnohosteny v prípade C_{60}, C_{70}, ktoré majú grupu symetrií zhodnú s grupou symetrii dodekaédra $\mathcal{D}$. Tieto vznikli z dodekaédra dvoma transformáciami. Opakovaním uvedených transformácií dostávame "ľubovoľne" veľké mnohohosteny, ktoré majú kombinatorickú štruktúru fullerénov s dodekatedrálnou grupou symetrií $\mathcal{D}$.

Z týchto faktov môžeme sformulovať nasledujúce matematické tvrdenie:
Ak existuje fullerén C_k s dodekahedrálnou grupou symetrií $\mathcal{D}$, tak existuje fullerén C_{3k} a C_{4k} s tou istou grupou symetrií $\mathcal{D}$.

Pri prvej transformácii sa "stratí" jeden vrchol pôvodného mnohostena, ktorý je nahradený šesťuholníkom a namiesto neho vzniknú tri nové vrcholy. Počet vrcholov nového mnohostena sa rovná dvojnásobku počtu hrán pôvodného mnohostena. V druhej transformácií ku každému pôvodnému pribudnú ďalšie tri vrcholy, ktoré sú s pôvodným spojené hranami.

Z dôkazu vety vyplýva, že analogické tvrdenie platí nielen pre fullerén C_k s dodekahedrálnou grupou symetrií $\mathcal{D}$, ale platí pre fullerény s ľubovoľnou grupou symetrií $\mathcal{S}$. (Pozri [4].)

Na záver poznamenajme, že pokiaľ mnohosteny, ktoré sú kombinatoricky izomorfné s fullerénmi C_{60} a C_{20} majú 15 rovín súmernosti, C_{24} je súmerný podľa 6 rovín a C_{26} už len podľa 2 rovín. Tento fakt môže byť jedným z dôvodom frekvencie ich výskytu v prírode.

Uvádzané tvrdenia sú matematicky korektné, lebo vypovedajú niečo o tom, čo je z hľadiska matematiky možné. V skutočnosti by bolo korektné len vtedy, ak by chemici dokázali nájsť spôsoby výroby fullerénov korešpondujúcich s popisovanými konštrukciami tried mnohostenov. Nazdávame sa, že je to veľmi zložitá (dnes priam neriešiteľná) úloha.

Nanovlákna.

V poslednej dobe významnú úlohu zohrávajú nanovlákna. Sú to veľmi tenké a silné vlákna. Ak vytvoríme mnohosten $\mathbf{M}(12, 5k)$ pre veľmi veľké k a na tento mnohosten aplikujeme transformácie uvedené na obrázku 9, tak dostaneme mnohosten, ktorý je "nekonečne" dlhý a vytvára ideálne vlákna, prípadne nádoby, v ktorých môžeme skladovať iné ťažko skladovateľné látky. Pravdepodobne, vychádzajúc z ďalších vlastnosti atómov uhlíka môžeme predpokladať, že takéto vlákna by boli ideálne rovné a každý ohyb by bol daný tým, že v príslušnej molekule atómy vytvárajú steny iného typu ako uvažované päťuholníky a šesťuholníku. Aj keď sa podobné štruktúry doposiaľ chemici nenašli, matematici môžu uvažovať aj o nich. Dnes sa už začína uvažovať aj o iných prvkoch, ktorých atómy by mohli vytvárať molekuly podobné fullerénom.

Záver.

Aj v prírode je možné stretnút sa s výstavbovým princípom, ktorý vzniká kombináciou päťuholníkových a šesťuholníkových plôch. Sem sa dajú zaradiť napríklad zložené oči hmyzu, škrobové zrná a ananásové plody. Zoznam princípov obsahuje aj skupiny fosílnych korálov z rodu Hexagonia. Navyše, mnohé mikroorganizmy majú tvary podobné mnohostenom, ktorých katalógy matematici spracovavajú a takto matematici vedia biológom povedať, aké mikroorganizmy môžeme hľadať a aké zaručene neexistujú. Často sa ľúdia matematikov pýtajú "Načo je dobré to, čo vymýšľate, veď (takmer) nikto tomu nerozumie"? Zvyčajne, až neskôr nachádzajú matematické výsledky svoje aplikácie. Ak by chemici sa opýtali expertov na kombinatorické štruktúry mnohostenov, tak by pravdepodobne urýchlili štúdium fullerénov a neobjavovali dávno objavené.

Štúdium kombinatorických vlastností mnohostenov je jednou z oblastí matematiky, v ktorej môže byť prínos matematiky pre chemický, ale aj biologický výskum.

Referencie

[1] B. Grünbaum, *Convex Polytopes*, Springer Verlag 2003

[2] E. Jucovič, *Konvexné mnohosteny*, Veda Bratislava 1981

[3] P. Mani, *Automorphismen von polyedrischen Graphen,* Math. Ann. 192(1971), 279-303

[4] M. Trenkler, *On* 4*-valent* 3*-polytopes with prescribed group of symmetries,* Graphs, Hypergraphs and Block systems, Zielona Gora, 1976, 311-317

Address: Catholic University, Hrabovská 1, 034 01 Ružomberok, Slovakia
e-mail:marian.trenkler@ku.sk