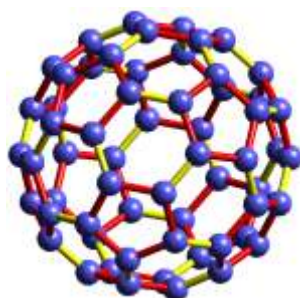




***Facultad
de
Ciencias***

Las Matemáticas del Fullerenos (Mathematics of Fullerenes)



Trabajo de Fin de Grado
para acceder al

GRADO EN MATEMÁTICAS

Autor: Sandra García Fernández

Director: Fernando Etayo Gordejuela

Junio – 2015

Índice

1. Resumen	2
2. Abstract	2
3. Introducción	3
3.1. Comentarios generales	3
3.2. Descripción de la memoria	4
4. Los fullerenos	5
4.1. Historia de los fullerenos	5
4.2. Tipos de fullerenos	7
4.3. Aplicaciones de los fullerenos	9
4.4. Los isómeros y su estabilidad, IPR y PAPR	10
5. La geometría de los fullerenos	12
5.1. Buckybolas	12
5.1.1. Teselaciones	12
5.1.2. Clasificación de superficies	17
5.1.3. Teorema Gauss-Bonnet	19
5.2. Grafeno	21
5.3. Nanotubos	24
6. Teoría de grafos	28
6.1. Introducción a la teoría de grafos.	28
6.2. No existe el C_{22}	32
6.3. Dibujando grafos fullerenos.	33
6.4. Estructura Kekulé	34
6.5. El isómero más pequeño que cumple la IPR	37
7. Simetría	40
7.1. Simetrías del icosaedro truncado.	40
7.2. Los 28 grupos de simetría de los fullerenos.	44
8. Consideraciones matemáticas	46

1. Resumen

Los fullerenos son la tercera forma molecular del carbono. Su descubrimiento a finales del siglo XX supuso un gran avance en el campo de la química, y posteriormente en otros como la nanotecnología y la medicina. Son el objeto de estudio de muchos científicos por su naturaleza, forma y sus características físicas, químicas, matemáticas y estéticas.

En este escrito hacemos caracterización de los diferentes tipos de fullerenos y presentaremos un análisis matemático de los más destacados, detallando numerosas propiedades de estas moléculas y su relación con las matemáticas.

Hay tres posibles enfoques matemáticos de los fullerenos: desde la geometría, la teoría de grafos y las simetrías. En este trabajo recogemos y analizamos cada uno de ellos.

Palabras clave: fullereno, isómero, geometría, grafo, simetría.

2. Abstract

Fullerenes are the third molecular form of carbon. Its discovery in the late twentieth century was a breakthrough in the field of chemistry, and later in others such as nanotechnology and medicine. They are the object of study of many scientists by their nature, shape and physical, chemical, mathematical and aesthetic characteristics.

In this paper we characterize the different types of fullerenes and present a mathematical analysis of the most prominent, detailing numerous properties of these molecules and their relationship with mathematics.

There are three possible mathematical approaches of fullerenes: from geometry, graph theory and symmetries. In this paper we collect and analyze each of them.

Keywords: fullerene, isomer, geometry, graph, symmetry.

3. Introducción

3.1. Comentarios generales

El carbono es un elemento curioso que se presenta de formas y colores diversos, como puede ser el sólido y negro grafito, o el duro y cristalino diamante. Efectivamente, los diamantes están formados íntegramente por átomos de carbono, pero claro está que estos átomos están ordenados de una forma muy especial que solo se consigue bajo presiones muy altas. Por ello, esas piedras tan preciosas son escasas, no debido a su composición, sino a las extrañas condiciones bajo las que se forman y a sus propiedades. Por otro lado, el grafito es un material muy común y barato que podemos *encontrar* en las minas de los lápices. Los diamantes son tan escasos y difíciles de extraer que llegamos a pagar el equivalente de muchos, muchos lápices para conseguir uno. En el grafito, los átomos de carbono forman capas en las que cada átomo está rodeado por otros tres átomos idénticos a él, formando una estructura hexagonal. En el diamante, cada átomo de carbono está enlazado a cuatro vecinos iguales, dispuestos en forma de tetraedro.

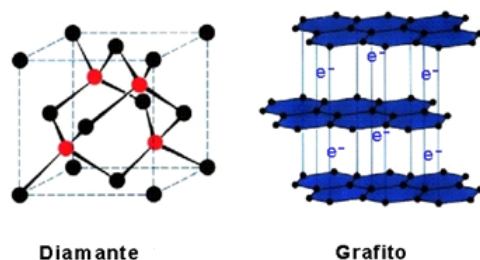


Figura 1: Estructuras del diamante y el grafito

La estructura de cada uno de estos materiales, es decir, la disposición interna de sus átomos, es lo que determina sus propiedades. Por ejemplo, el enlace en tres dimensiones de los átomos de carbono en el diamante da lugar a una estructura más resistente, y por tanto, a cristales más fuertes que en el caso del grafito, en los que el enlace se limita a las dos dimensiones de las capas que pueden deslizarse entre sí, dando lugar a un material más blando. Todo esto es conocido desde hace ya muchos años, pero hace relativamente poco que el carbono irrumpió de nuevo en el mundo de los materiales con una nueva forma; de hecho, con una familia de nuevas formas, la tercera más estable, detrás del diamante y el grafito. Los fullerenos (pronunciado "fulerenos") son un amplio conjunto de moléculas constituidas exclusivamente por átomos de carbono. La revista Science caracterizó al fullereno como la molécula del año 1991. En este trabajo se recogen algunas de las propiedades básicas de este tipo de moléculas así como un estudio de las condiciones matemáticas que requieren tales estructuras.

3.2. Descripción de la memoria

La originalidad de este trabajo es recoger, explicar y relacionar de forma detallada en un mismo documento los tres enfoques matemáticos que caracterizan a los fullerenos.

El trabajo tiene una estructura sencilla. Comenzamos con una introducción histórica y química del carbono y los fullerenos. A continuación, haremos una visión matemática de la tales moléculas, desde los tres enfoques matemáticos posibles, presentada en tres secciones diferentes. Cada una de éstas sigue el orden histórico en que se han ido desarrollando las matemáticas del fullereno.

Podemos establecer tres artículos clave que han definido la estructura de este documento, uno para cada enfoque.

En el primer enfoque, "La geometría de los fullerenos", tomamos como referencia el artículo [5], donde recogemos diferentes aspectos geométricos de la molécula como pueden ser las teselaciones o la aplicación del Teorema de Gauss-Bonnet.

A continuación, prestamos la sección dedicada a "Teoría de Grafos", siguiendo el artículo [14]. Veremos como éste enfoque resulta ser el más apropiado para el estudio en general de los fullerenos, aportando mayor precisión y rigor, desde un punto de vista matemático, al estudio de los fullerenos y sus propiedades.

Y finalmente, aparece el apartado dedicado a la "Simetría", el tercer enfoque, basado en el artículo [4]. Nos centraremos en un fullereno en concreto del que estudiaremos su grupo de simetrías con detalle y proporcionaremos un resultado general que permita caracterizar los grupos de simetrías de los demás fullerenos.

Por último, presentamos una serie de consideraciones que recogen los aspectos más importantes aquí tratados.

Desde un punto de vista matemático, hemos tenido que manejar nociones de Geometría y Topología, Teoría de Grafos y Teoría de Grupos. Entre otros aparecen los siguientes conceptos y resultados: característica de Euler, teselaciones, poliedros, Teorema de Gauss-Bonnet discreto, grafos 3-regulares, perfect matching, grupos finitos de simetrías y, en particular, los simétricos y los alternados. Aunque el trabajo no incluye resultados novedosos, sí que hemos desarrollado demostraciones que no hemos encontrado detalladas en la literatura, como la del cálculo del diámetro de un nanotubo, la de la no existencia del fullereno C_{22} o la de que el C_{60} es el fullereno más pequeño que verifica la Regla del Pentágono Aislado (IPR). Y, aunque nos hemos basado fuertemente en la bibliografía manejada, también entendemos como aportación original la estructuración del trabajo.

4. Los fullerenos

4.1. Historia de los fullerenos

Comenzaremos con una visión histórica de éstas moléculas, para la que hemos empleado varios documentos [12], [3]. Antes de comenzar con la historia de los fullerenos destacaremos el benceno como lo que podría ser un antecesor de los fullerenos. El benceno es un hidrocarburo aromático de fórmula molecular C_6H_6 , donde cada átomo de carbono ocupa el vértice de un hexágono regular (aparentemente tres de las cuatro valencias de los átomos de carbono se utilizan para unir átomos de carbono contiguos entre sí, y la cuarta valencia con un átomo de hidrógeno). Las diferentes disposiciones de los carbonos y los enlaces conllevó a que en 1858 August Kekulé propusiese la teoría de la estructura química, basándose la mayoría de su trabajo en el estudio del benceno, en donde los átomos de carbono siguen una disposición geométrica formando anillos hexagonales. Esta teoría permitió explicar el fenómeno de la isomería, es decir, la presencia de diferentes propiedades físicas y/o químicas en compuestos con la misma forma molecular. Más adelante profundizaremos en el concepto de isomería y veremos un tipo de estructuras que deben su nombre a este importante químico del siglo *XIX*.

Avancemos un poco más en la historia. Previamente al descubrimiento de los fullerenos, D.E.H. Jones sugirió en 1966, la posibilidad de formar estructuras en forma de grandes jaulas huecas de carbono. Poco tiempo después, Eiji Osawa, de la Universidad Tecnológica de Toyohashi, propuso la molécula de C_{60} en una revista japonesa en el año 1970, pero hubo que esperar hasta 1985 cuando se descubrió el primer miembro de esta familia, la molécula C_{60} [11], hecho por el cual los investigadores H. Kroto, R. Smalley y R. Curl recibieron el premio Nobel de Química en 1996.¹

El descubrimiento del C_{60} se produjo cuando el astroquímico Kroto, en colaboración con los químicos Smalley y Curl, trataban de reproducir la química de la atmósfera de las estrellas gigantes rojas, ricas en agregados de carbono, buscando una explicación sobre su formación y el modo de mantenerse unidos durante su viaje interestelar. Sus análisis de muestras de grafito irradiado con un laser, mezclando el vapor de carbono resultante mediante una corriente de helio, mostraban una regularidad no sospechada en los espectros de las cadenas de carbonos, ya que estas se presentaban mayoritariamente en agrupaciones cerradas de 60 átomos. El recuerdo de la estructura poliedral de la cúpula diseñada por el arquitecto Richard Buckminster Fuller para el pabellón de EEUU en la exposición mundial de Montreal de 1967 les dio la idea clave para la resolución de su

¹También en 1970 R.W. Henson propuso la existencia del C_{60} , y aunque fue rechazada de primeras, en 1999 los resultados fueron reconocidos como válidos. Independientemente, en 1973, un grupo de científicos de la URSS dirigido por el profesor Bochvar, hizo un análisis químico-cuántico de la estabilidad de la molécula y la estructura electrónica, y a pesar de que tampoco fue admitido, el artículo fue publicado en las Actas de la Academia Rusa de las Ciencias.

enigma, encontrar la forma geométrica en la que estos 60 átomos de carbono se enlazaban para formar una estructura estable. Fuller había diseñado una cúpula geodésica en la que usaba elementos hexagonales junto con alguno pentagonal para curvar la superficie. Resultó ser que los átomos del C_{60} se unían mediante 12 pentágonos y 20 hexágonos, formando una jaula esférica con la estructura de un icosaedro truncado. Debido al asombroso parecido de estas cúpulas con la estructura del C_{60} , en honor a Fuller, esta molécula fue bautizada con el nombre buckminsterfullereno (abreviadamente se le llama fullereno y familiarmente buckybola).

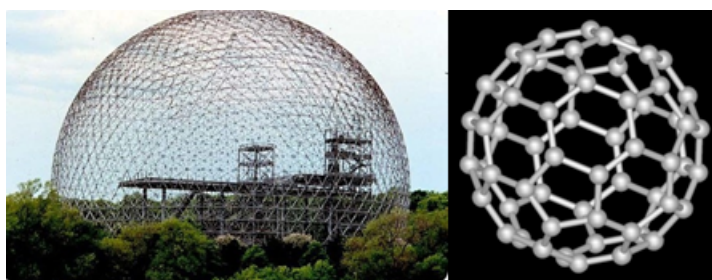


Figura 2: Cúpula geodésica y fullereno

En 1990, Wolfgang Kräschmer del Instituto Max Planck de Física Nuclear y Donald Huffman de la Universidad de Arizona consiguieron sintetizar por primera vez fullerenos mediante una descarga en un arco eléctrico formado por dos electrodos de carbono en atmósfera de un gas noble en cantidades multigramo. Dos años después, se encontraron fullerenos producidos en la naturaleza en un mineral conocido como "shungite", que solo se encuentra en Rusia, y en las fulguritas, rocas cristalinas de Colorado que se forman cuando un rayo cae al suelo.

Posteriormente se han encontrado fullerenos en el espacio interestelar formando parte de algunos asteroirdes. En 2010 se descubrieron en una nube de polvo cósmico que rodea a una estrella distante 6500 años luz. Usando el espectro infrarrojo del telescopio Spitzer de la NASA, científicos de la Universidad de Western Ontario, en Canadá, descubrieron que el espectro de la nebulosa planetaria Tc1 está dominado por el fullereno C_{60} y en menor medida por el C_{70} .

Después del descubrimiento de las buckybolas, surgió otro modelo de organización de los átomos de carbono, los llamados nanotubos de carbono, en donde los átomos de carbono se disponen en forma cilíndrica. El descubrimiento de los nanotubos de pared sencilla (más adelante veremos que hay otro tipo, aunque es este trabajo solo estudiaremos éste) se produjo simultáneamente por los grupos de investigación de S. Iijima e T. Ichihashi [9] (NEC Corporation) y D.S. Bethune *et al.*[6] (IBM) en 1993, con una diferencia de publicación de ambos trabajos en la revista *Nature* de tan solo un mes.

Finalmente surgió otra organización del carbono, el grafeno, en donde los átomos de carbono se disponían en láminas. Para comprender el grafeno, es preciso conocer el grafito, formado como habíamos dicho anteriormente por láminas de carbono unidas débilmente entre sí, cada una de estas láminas se denomina grafeno. Aunque se han llevado a cabo numerosos estudios dirigidos a separar un número cada vez menor de capas de grafeno a partir de grafito, en 2004 A. Geim y K. Novoselov, de la universidad de Manchester, aislaron las primeras muestras de grafeno a partir de grafito, exfoliaron láminas de grafeno mediante el uso de una cinta de celofán. Ambos descubridores recibieron en 2010 el premio Nobel de Física. La estructura del grafeno no resulta tan llamativa como la de las buckybolos o los nanotubos, pues equivale a una de las capas que forman el grafito; sin embargo, su existencia como lámina bidimensional con un grosor nanoatómico le confiere propiedades diferentes.

4.2. Tipos de fullerenos

Como hemos visto, los fullerenos tienen muchas variaciones estructurales, pero podemos clasificarlos de varias formas estableciendo tres grandes grupos:²

- **Buckybolos.** Jaulas cerradas constituidas exclusivamente por un número definido de átomos de carbono con elevada simetría, matemáticamente se pueden disponer en una esfera. En este grupo encontramos los fullerenos más conocidos siendo el miembro más pequeño el C_{20} y el más común el C_{60} .
 - Nano “cebollas”. Consisten en esferas de carbono concéntricas, es decir, están formadas por múltiples capas de carbonos que rodean a una buckybola que actúa como núcleo. Son jaulas de carbono, una dentro de otra a modo de muñecas rusas.
- **Grafenos.** Láminas bidimensionales de átomos de carbono, matemáticamente homeomorfos al plano.
- **Nanotubos.** Estructuras constituidas por átomos de carbono con forma cilíndrica. Hay tres tipos principales de nanotubos:
 - Los nanotubos de pared sencilla (SWCNTs), formados por una lámina de grafeno curvada y cerrada.
 - Los nanotubos de pared múltiple (MWCNTs), que contienen varias unidades de nanotubos de pared simple concéntricos.
 - Megatubos. Más grandes en diámetro que los nanotubos y cuentan con paredes de diferente espesor.

²La clasificación que aquí aparece no se recoge como tal en ningún otro documento.

■ **Agregados de los anteriores.**

- Schwarzitas. Estructuras tubulares ramificadas.
- Polímeros. Son moléculas de gran tamaño que se forman cuando moléculas pequeñas e idénticas, llamadas monómeros, se enlazan entre sí como los eslabones de una cadena.
- Vinculados dímeros “bola y cadena”. Se le llama vinculados dímeros a dos buckybolos unidas por una cadena de carbonos.
- Anillos de fullerenos.

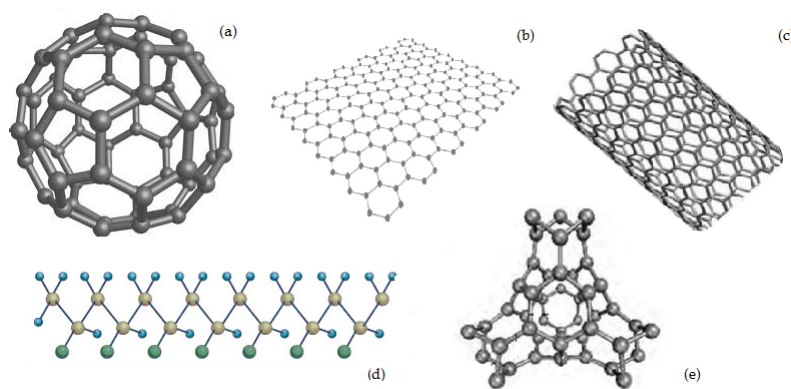


Figura 3: Tipos de fullerenos. (a) Buckybola C_{60} , (b) Lámina de grafeno, (c) Nanotubo, (d) Polímero, (e) Schwarzitas

A pesar de que el nombre fullereno se aparta de la nomenclatura química sistemática, aún conserva la terminación -eno que caracteriza a los compuestos orgánicos que poseen dobles enlaces. Debido a su carácter molecular, los fullerenos pueden disolverse en los disolventes orgánicos habituales y ser modificados químicamente para producir gran cantidad de derivados. Este hecho diferencia a los fullerenos de otras formas alotrópicas del carbono y es clave para entender el desarrollo que su química experimentó en la década de los noventa. De aquí en adelante, a pesar de la clasificación anterior, el término fullereno solo hace referencia a las buckybolos, como ocurre en la mayoría de los documentos.

Cuando estudiemos las matemáticas subyacentes a estas estructuras daremos una descripción más detallada de las restricciones que aparecen en los enlaces y en la disposición geométrica de las moléculas.

4.3. Aplicaciones de los fullerenos

El gran potencial de la aplicación práctica de los fullerenos se vislumbró poco después del descubrimiento del C_{60} cuando se observó que al añadirle ciertos átomos de metales alcalinos se obtenían compuestos superconductores. El hecho de que los fullerenos puedan ser modificados para obtener un elevado número de derivados con excelentes propiedades físicas o químicas inducidas por los fullerenos precursores, posibilita la creación de nuevos materiales a escala nanométrica con especiales propiedades ópticas, magnéticas, de dureza, conductividad eléctrica y térmica. Esto hace que se continúe investigando sobre sus aplicaciones no solo dentro de la ingeniería, ciencia de los materiales, física, química, geología e informática, sino también en biología o medicina, donde se estudian, por ejemplo, sus efectos sobre procesos de diferenciación y proliferación de células embrionarias, su uso en la obtención de nuevos materiales para injertos, su posible actividad antiviral (ya contrastada con un derivado del C_{60} frente al virus HIV-1 y HIV-2 causantes del sida), su utilización para la creación de nuevos fármacos y su eficacia como inhibidores de varias enzimas, en procesos de neuroprotección y transfección, presentando actividad citotóxica sobre células tumorales e incluso provocando la ruptura del DNA con irradiación con luz visible.

Las propiedades químicas, electroquímicas y fotofísicas de los fullerenos les hacen ser los candidatos ideales para el desarrollo de la denominada electrónica molecular orgánica, como una posible aplicación en la obtención de dispositivos fotovoltaicos o cables moleculares. Los fullerenos y sus derivados han sido utilizados con éxito como aceptores de electrones en la preparación de células solares.

El interés por los nanotubos se centra fundamentalmente en las propiedades eléctricas, térmicas y mecánicas que presentan, son 100 veces más fuertes que el acero, poseen la conductividad térmica más alta conocida y sus propiedades electrónicas sirven en cantidad de aplicaciones entre las que destacan como emisión por efecto de campo (emisión de electrones inducida por campos electromagnéticos externos) y nanodispositivos electrónicos.

El grafeno se han convertido en los últimos años en el material estelar y objeto de deseo de la comunidad científica ya que es el primer material bidimensional de anchura atómica. Este material supone el poder acceder al estudio fundamental de la materia es un estado prácticamente desconocido hasta ahora.

4.4. Los isómeros y su estabilidad, IPR y PAPR

Los átomos de carbono en los fullerenos, siempre³ un número par C_{2n} , se distribuyen formando anillos pentagonales y hexagonales, siendo los pentágonos los responsables de las principales propiedades físicas y químicas, así como de su estabilidad de la molécula.

Como ya habíamos visto, los hexágonos se unen para formar estructuras planas, como el grafeno, o cilíndricas, como los nanotubos. Para conseguir la forma esférica típica de los fullerenos es necesario introducir curvatura con los pentágonos, generándose así una tensión adicional. En 1987, Kroto sugirió que tener pentágonos compartiendo enlaces aumenta la tensión de la molécula. Explicó que cuanto mayor sea la tensión generada por los pentágonos mayor es la inestabilidad relativa de la molécula frente al resto de isómeros. Así nació la regla IPR, que discrimina la presencia de pentágonos adyacentes ya que estos desestabilizan considerablemente el fullereno [2].

La *regla del pentágono aislado*, conocida por su acrónimo en inglés IPR (*Isolated Pentagon Rule*), afirma que los fullerenos más estables son aquéllos que no presentan pentágonos adyacentes, es decir, cada uno de los 12 pentágonos está rodeado de hexágonos. El C_{60} (icosaedro truncado) es el fullereno más pequeño que cumple esta regla. Lo demostraremos más adelante (Teorema 6.12).

Cada familia C_{2n} contiene tantos isómeros como diferentes disposiciones de los pentágonos y hexágonos. Así, en el caso de moléculas con 60 átomos de carbono hay 1812 isómeros y solo el icosaedro truncado posee una estructura IPR; el C_{70} tiene 8149 isómeros y también una única IPR; el C_{80} tiene 31924 isómeros y 7 IPR, etc. El número de isómeros tanto IPR como no-IPR aumenta exponencialmente con el número de átomos que forman las estructuras (ver Cuadro 1). Como consecuencia de un resultado publicado en 1998 por W. Thurston se puede probar que el número de isómeros crece del orden de N^9 , con N el número de átomos de carbono [14].

Para fullerenos más pequeños que el C_{60} , no podemos aplicar esta regla, y la estabilidad de los diferentes isómeros es dada por la *regla de penalidad del pentágono adyacente*, también conocida por su acrónimo en inglés PAPR (*Pentagon Adjacency Penalty Rule*), que afirma que entre todos los posibles isómeros no-IPR, el más estable es el que minimiza el número de aristas comunes entre pentágonos, es decir, aquel con el menor número de enlaces pentágono-pentágono [8]. Esta regla también se usa para los fullerenos no-clásicos, aquéllos que además de pentágonos y hexágonos presentan heptágonos o algún otro tipo de polígonos.

³Más adelante en la sección de teoría de grafos veremos que los fullerenos cumplen la relación $3|V| = 2|E|$, siendo V el conjunto de vértices (átomos de carbono) y E el conjunto de aristas (enlaces) de cada fullereno

Átomos carbono	Isómeros	Átomos carbono	Isómeros
20	1	74	14246 (1)
24	1	78	24198 (5)
26	1	80	31924 (7)
28	2	82	39718 (8)
30	3	84	51592 (23)
40	40	88	81738 (35)
60	1812 (1)	96	191839 (187)
70	8149 (1)	100	285913 (450)

Cuadro 1: Número total de isómeros y de estructuras IPR (entre paréntesis) de algunos fullerenos.

5. La geometría de los fullerenos

A continuación, y de acuerdo con el artículo [5], presentaremos en cada una de las secciones los aspectos matemáticos y su aplicación en los tres grandes grupos de fullerenos: las buckybolos, el grafeno y los nanotubos.

5.1. Buckybolos

A continuación presentamos todos los resultados relativos a las buckybolos. Los dividiremos y organizaremos en diferentes secciones de acuerdo con los diferentes aspectos geométricos que tratan.

5.1.1. Teselaciones

Imaginemos que tenemos a nuestra disposición una provisión infinita de piezas de rompecabezas, pero todas iguales y que comenzaremos con el caso más sencillo. Se dice que las piezas son *teselantes* cuando es posible acoplarlas entre sí sin huecos ni fisuras hasta recubrir por completo el plano; la configuración que obtenemos recibe el nombre de *teselación* ("tilings", en inglés), también llamada embaledado poligonal o descomposición poligonal. Las teselaciones han sido utilizadas en todo el mundo para recubrir paredes y suelos, e igualmente como motivos decorativos. Muchos artistas han utilizado teselaciones en su trabajo: M.C. Escher es, probablemente, el más famoso de todos ellos. En algunas de sus obras aparecen teselaciones del plano con figuras que recuerdan pájaros, peces y otros animales como podemos ver en la figura 4.

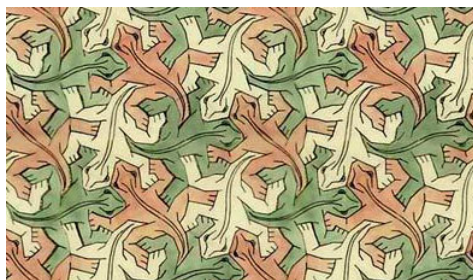


Figura 4: Teselado del plano de Escher n° 25.

Como es fácil de imaginar, la diversidad de las formas de las piezas teselantes y las superficies en las que hacer una teselación es infinita. Por ejemplo, la configuración clásica de pentágonos y hexágonos que aparece en los balones de fútbol induce una teselación en la esfera (figura 5).

Los matemáticos, y en particular los geómetras, se han interesado especialmente por las teselaciones poligonales; incluso las más sencillas de éstas plantean problemas colosales. La teselación más sencilla de una superficie es la triangulación.



Figura 5: Teselado de la esfera.

Definición 5.1. Una *triangulación* en una superficie compacta y conexa S es una descomposición de la superficie de modo que:

- $S = \bigcup T_i$
- Cada T_i es homeomorfo a un triángulo del plano $\mathbb{R}^2$.
- Dos triángulos distintos son disjuntos, o tienen en común exactamente un vértice o exactamente una arista.

Se llama *característica de Euler* de la triangulación al número $\chi = v - e + f$, donde v , e , y f son el número de vértices, aristas y caras.

Los siguientes resultados básicos son bien conocidos [13].

Teorema 5.2 (Teorema de Rado). *Toda superficie es triangulable.*

Teorema 5.3. *Dadas dos triangulaciones T y T' de una misma superficie S resulta que $\chi(T) = \chi(T')$.*

Así, la característica de Euler es un concepto topológico que no depende de la triangulación escogida.

Corolario 5.4. *La característica es un invariante topológico, es decir, una propiedad que permanece invariante por homeomorfismos.*

Observación 5.5. *Dado un teselado, se puede obtener una triangulación descomponiendo cada polígono de i lados en i triángulos, y*

$$\chi(\text{teselado}) = \chi(\text{triangulación})$$

Si tomamos como superficie la esfera, tenemos que los cinco poliedros regulares definen descomposiciones poligonales de la esfera, y para todas ellas la característica es 2, aunque solo el tetraedro y el icosaedro definen triangulaciones.

Dependiendo del número de polígonos diferentes que utilicemos para dicha descomposición podemos establecer dos tipos principales, los teselados Platónicos y los teselados Arquimedianos:

- Los teselados Platónicos se caracterizan por utilizar un solo tipo de polígonos regulares.
- Los teselados Arquimedianos se caracterizan por utilizar dos tipos de polígonos regulares, uno de los cuales es el hexágono en el caso de los fullerenos.

Existen varios tipos de teselaciones en las que se utilizan otros tipos de polígonos como por ejemplo polígonos irregulares, pero no son relevantes para nuestro trabajo.

Los dos ejemplos anteriores de teselaciones pertenecen a una misma familia denominada *teselaciones regulares*, ya que se emplean en ambos casos polígonos regulares.

Desde un punto de vista topológico, tanto las buckybolos, los grafenos y los nanotubos, pueden ser descritos por medio de teselaciones con solo pentágonos, hexágonos y heptágonos, donde cada vértice corresponde a un átomo de carbono, cada arista corresponde a un enlace covalente, y cada polígono corresponde a un anillo de carbono. Es decir, la descomposición poligonal se corresponde con la descripción de los anillos de carbono.

Por tanto, de acuerdo con la característica de Euler, el teselado de una superficie cerrada (compacta y conexa) cumple la ecuación:

$$v - e + f = \chi \quad (5.1)$$

donde v = número de vértices (átomos), e = número de aristas (enlaces) y f = número de caras poligonales (anillos de carbonos).

Si denotaremos por f_j el número de polígonos con j aristas en el teselado, tenemos:

$$f = \sum_j f_j \quad (5.2)$$

y

$$v = \sum_j j f_j / 3 = \frac{2e}{3} \quad (5.3)$$

Observación 5.6. *La ecuación (5.3) deriva de de las propiedades de los enlaces de los átomos de carbono. El número de aristas que inciden en un vértice es 3.*

Usando las ecuaciones (5.2) y (5.3) en (5.1) obtenemos:

$$\chi = \frac{1}{3} \sum_j j f_j - \frac{3}{2} \frac{1}{3} \sum_j j f_j + \sum_j f_j = \sum_j \left(1 - \frac{1}{6}j\right) f_j \quad (5.4)$$

Notemos que la fórmula anterior es válida para para cualquier superficie cerrada. Así, una vez conocida la característica de la superficie, esta ecuación proporciona una condición sobre el número de polígonos. Esta condición es independiente del número de hexágonos, que es por lo tanto arbitrario.

Ejemplo 5.7. *Vemos algunas aplicaciones de la ecuación (5.4) a los poliedros regulares y a algunos arquimedianos que inducen teselaciones de la esfera. Sabemos que la característica de ésta es dos.*

1. (Tetraedro). *Veamos cuántos polígonos de 3 aristas tiene la esfera. Es decir, sabemos que $\chi = 2$, $j = 3$, y queremos calcular f_3 . Luego:*

$$2 = \sum_j (1 - \frac{1}{6}j) f_j = \frac{6-3}{6} f_3$$

Por tanto, $f_3 = 4$, luego como triangulación de la esfera obtenemos el tetraedro.

2. (Hexaedro). *Veamos cuántos polígonos de 4 aristas tiene la esfera. Para este caso, $\chi = 2$, $j = 4$, y queremos calcular f_4 . Luego:*

$$2 = \sum_j (1 - \frac{1}{6}j) f_j = \frac{6-4}{6} f_4$$

Por tanto, $f_4 = 6$, luego como teselación de la esfera mediante cuadrados obtenemos el hexaedro.

3. (Dodecaedro). *Veamos cuántos polígonos de 5 aristas tiene la esfera. Para este caso, $\chi = 2$, $j = 5$, y queremos calcular f_5 . Luego:*

$$2 = \sum_j (1 - \frac{1}{6}j) f_j = \frac{6-5}{6} f_5$$

Por tanto, $f_5 = 12$, luego como teselación de la esfera con pentágonos obtenemos el dodecaedro.

4. (Icosaedro truncado). *Este poliedro cumple $f_5 = 12$ y $f_6 = 20$. Veamos que también se cumple la igualdad en el otro sentido:*

$$\chi = \sum_j (1 - \frac{1}{6}j) f_j = \frac{6-5}{6} 12 + \frac{6-6}{6} 20$$

Por tanto, $\chi = 2$

Como era de esperar, poliedros como el octaedro y el icosaedro no aparecen ya que no verifican la fórmula (5.3) (no concurren tres aristas en cada vértice).

Los teselados Platónicos son un caso especial en el que solo se emplea un tipo de polígonos, mientras que en los teselados Arquimedianos se utilizan dos tipos de polígonos diferentes, uno de los cuales en el caso de los fullerenos es el hexágono. En ambos casos,

$$f_j = 6\chi/(6 - j), \text{ para } j \neq 6 \quad (5.5)$$

Para las buckybolos ($\chi = 2$), la ecuación (5.5) proporciona los valores $f_5 = 12$, $f_4 = 6$ ó $f_3 = 4$. Pero excluyendo los polígonos con tres y cuatro miembros, que son desfavorables energéticamente, resulta que todos los fullerenos Arquimedianos deben contener siempre 12 anillos de 5 miembros. Y el número de átomos crece con el número de anillos de 6 miembros como:

$$v = 20 + 2f_6 \quad (5.6)$$

Por tanto, como consecuencia de la expresión (5.4) todo fullereno debe cumplir (para $\chi = 2$):

- $f_5 = 12$
- $v = 2f_6 + 20$

Demostración. Sin utilizar la ecuación (5.4).

- Si todo fullereno está formado por f_5 pentágonos f_6 hexágonos, entonces tiene $f_5 + f_6$ caras y $(5f_5 + 6f_6)/2$ aristas, ya que toda arista es compartida por dos polígonos. Además, en los fullerenos concurren en cada vértice (átomo) 3 polígonos, luego tiene $(5f_5 + 6f_6)/3$ vértices. Por tanto, y para que se cumpla la fórmula de Euler,

$$\frac{5f_5 + 6f_6}{3} - \frac{5f_5 + 6f_6}{2} + (f_5 + f_6) = 2 \iff p = 12$$

- Si todo fullereno Arquimadiano consta de caras pentagonales y hexagonales, y tenemos $f_5 = 12$ caras pentagonales y f_6 caras hexagonales, entonces tenemos $12 * 5 + f_6 * 6$ átomos. Pero tenemos que tener en cuenta que en cada vértice concurren 3 polígonos, luego:

$$v = \frac{12 * 5 + f_6 * 6}{3} = 20 + 2f_6 \implies f_6 = -10 + \frac{v}{2} \quad (5.7)$$

□

Así, los fullerenos más comunes C_{60} y C_{70} tienen 20 y 25 anillos de 6 miembros, respectivamente, mientras que el fullereno más pequeño es el dodecaedro C_{20} .

Si, además de hexágonos, el teselado también incluye pentágonos y heptágonos, entonces, utilizando la ecuación (5.4):

$$f_5 - f_7 = 6\chi \quad (5.8)$$

Como podemos comprobar fácilmente, esta relación se cumple para todos los ejemplos vistos anteriormente. A partir de esta ecuación, parece que la pareja pentágono-heptágono debe ser añadida (o cancelada) a una teselación dentro de la misma topología de la superficie. Por lo tanto, si un hexágono es reemplazado por un pentágono en algún otro lugar de la superficie debe formarse un heptágono.

5.1.2. Clasificación de superficies

La generalización de estructuras con grandes o pequeños polígonos es sencilla. En los fullerenos, y en concreto en las buckybolos, cada átomo tiene una coordinación triple, es decir, en cada átomo concurren tres aristas. El embaldo-sado poligonal de anillos de carbono que cubre una superficie, define la forma de ésta y está caracterizado por su conectividad, u orden de conexión .

Definición 5.8. *El orden de conexión k es el número máximo más uno de cortes cerrados que pueden hacerse en una superficie dada sin romperla en dos piezas.*

La definición anterior no implica que los cortes sean disjuntos. Por ejemplo, el toro simple (con un solo agujero) podemos cortarlo a lo largo de dos líneas cerradas sin dividirlo en dos piezas, a través del paralelo y el meridiano), así $k = 3$. Para la esfera no podemos hacer ningún corte, luego el orden de conexión de esta es 1.

Veamos que la definición anterior guarda una estrecha relación con el género de una superficie y con el teorema de Jordan para superficies cerradas (sin borde).

Teorema 5.9 (Teorema de Jordan para superficies cerradas). *El número máximo g de curvas cerradas simples disjuntas dos a dos que pueden dividir una superficie cerrada sin desconectarla es igual al género de la superficie, tanto en el caso orientable como en el no orientable.*

Luego el toro simple tiene género 1 y la esfera tiene género 0. Para un toro con n agujeros, se tiene que $k = 1 + 2n$ y $g = n$. Por tanto, el género representa el número de agujeros de un toro generalizado (el número de asas). Definir el género de una superficie a partir del teorema anterior no es lo habitual, sino que para el caso orientable (en el que vamos a trabajar), podemos definir el género a partir del orden de conexión mediante la expresión $g = (k - 1)/2$, y finalmente podemos relacionarlo con la característica de Euler-Poincaré: $\chi = 3 - k$. Por tanto, y recopilando lo anterior, una superficie topológica puede ser caracterizada por el orden de conexión, el género o la característica de Euler⁴.

⁴ Así, la fórmula (5.4) se puede reescribir en función del género y el orden de conexión en lugar de la característica

Para terminar, veamos una definición necesaria para enunciar una última propiedad en forma de teorema:

Definición 5.10. Sean X e Y dos superficies conexas y sin borde. Sean D_1 y D_2 dos discos topológicos en X e Y (esto es, ambos abiertos definidos respectivamente en X e Y , homeomorfos al disco unidad del plano euclídeo). En $(X - D_1) \cup (Y - D_2)$ se identifican los bordes de ambas superficies, mediante un homeomorfismo f . El espacio topológico resultante se denomina **suma conexa** de X e Y y se denota como $X \# Y$

Proposición 5.11. La anterior definición no depende de los discos escogidos en cada superficie, ni del homeomorfismo f .

Teorema 5.12. Si X, Y son dos superficies, entonces $\chi(X \# Y) = \chi(X) + \chi(Y) - 2$, donde $\#$ representa la suma conexa de dos superficies.

En el cuadro 2, se recogen algunos de los resultados vistos hasta el momento:

	k	χ	g
Esfera	1	2	0
Toro simple	3	0	1
Toro n-agujeros	$1+2n$	$2(1-n)$	n

Cuadro 2: Tabla resumen del orden de conexión, característica y género

Demostración. Veamos que se cumple la fórmula de la característica de Euler-Poincaré para el toro con n -agujeros. Procederemos por inducción.

Para un toro simple (con un solo agujero) $\chi = 0$. Supongamos cierta la fórmula para $n - 1$ toros. Cuando añadimos el n -ésimo toro obtenemos que la característica de Euler de la suma conexa de n toros es $(2(1 - (n - 1)) + 0 - 2 = 2 - 2n = 2(1 - n)$, luego se verifica la expresión.

□

El cuadro anterior recoge resultados muy importantes ya que el teorema de clasificación de superficies cerradas afirma que cualquier superficie compacta cerrada sin borde es homeomorfa a una esfera, una suma conexa de n -toros ó a una suma conexa de n -planos proyectivos. La colección de resultados anterior resulta interesante ya que pesar de que en este trabajo nos centraremos en las buckybolos, y por ello nos interesa especialmente los resultados relativos a las superficies esféricas, también hay trabajos recientes[14] sobre otros tipos de fullerenos, por ejemplo, los fullerenos tóricos (figura 6).

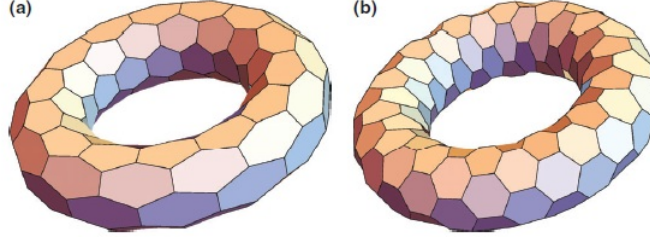


Figura 6: Ilustración de dos fullerenos tóricos.

5.1.3. Teorema Gauss-Bonnet

Hay una relación fundamental, conocida como Teorema de Gauss-Bonnet, que une las propiedades topológicas de una superficie cerrada, expresadas por la característica de Euler-Poincaré, con sus propiedades geométricas, expresadas por las curvaturas principales k_1 y k_2 . Ambos valores son normalmente reemplazados por dos variables más convenientes, la curvatura media H y la curvatura de Gauss K , definidas por:

$$K = k_1 k_2 \quad (5.9)$$

y

$$H = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \quad (5.10)$$

Teorema 5.13 (Teorema de Gauss-Bonnet). *Si S es una superficie compacta, entonces*

$$\int \int_S K dA = 2\pi\chi(S) \quad (5.11)$$

donde la integral se extiende sobre la superficie S .

Por lo tanto, de acuerdo con el teorema de Gauss-Bonnet, la característica de Euler es el promedio de la curvatura de Gauss de la superficie partido por 2π .

Como veremos más adelante, las buckybolos son isomorfos a la esfera, luego poseen curvatura positiva. ¿Y qué superficies tenemos para una curvatura negativa? Por ejemplo tenemos las superficies minimales, en donde se tiene que la curvatura media es cero en toda la superficie. Este es el caso de las schwarzitas. En algunos trabajos recientes [5][14] se estudian estructuras de éstos tipos desde el punto de vista de la curvatura. Sin embargo, no hemos encontrado una aplicación explícita del teorema de Gauss-Bonnet aunque aparezca citado en dichos trabajos.

Existe un caso especial del teorema de Gauss-Bonnet en el que la curvatura se concentran en puntos discretos. Se trata de su aplicación en poliedros convexos. Aquí la curvatura se concentra en los vértices, mientras en las caras y las aristas

la curvatura es cero y la integral de la curvatura en un vértice es igual a su defecto. Veámoslo más detalladamente.

Definición 5.14. Se llama **defecto angular** de un vértice a diferencia entre 2π y la suma de los ángulos formados por cada dos aristas consecutivas que concurren en dicho vértice.

Por ejemplo, para un vértice cualquiera de un cubo tenemos que los tres ángulos que concurren en él miden $\pi/2$ radianes. Por tanto, el defecto angular de cualquier vértice del cubo sería:

$$2\pi - 3 \cdot \frac{\pi}{2} = \frac{\pi}{2}$$

Teorema 5.15 (Teorema de los defectos angulares de Descartes). *La suma de los defectos angulares de todos los vértices de un poliedro convexo es 4π .*

Demostración. Denotemos Δ_i al defecto angular en el vértice i , con $i \in \{1, \dots, n\}$ y por Δ a la suma total de los defectos angulares.

Suponemos que tenemos un poliedro convexo con f caras, e aristas y v vértices. Si llamamos S_i a la suma de los ángulos concurrentes en cada vértice i , tenemos que el defecto angular en dicho vértice es $\Delta_i = 2\pi - S_i$. Si llamamos S a la suma total de todos los ángulos de todas las caras del poliedro, tenemos la siguiente igualdad:

$$S = \sum_{i=1}^v S_i = \sum_{i=1}^v (2\pi - \Delta_i) = 2\pi v - \sum_{i=1}^v \Delta_i = 2\pi v - \Delta \quad (5.12)$$

Por otro lado, para cada cara con i aristas, la suma de los ángulos de dicha cara es $i\pi - 2\pi$ (ya que cada cara se puede descomponer en i triángulos y tenemos que restar los 2π radianes correspondientes al vértice central que se formaría en la descomposición). Si llamamos f_i al número de caras con i aristas para $i \in \{3, \dots, k\}$, tenemos que el número total de caras f es igual a $f_3 + \dots + f_k$.

Con todo esto, la suma de todos los ángulos es:

$$S = \sum_{i=3}^k (i-2)\pi f_i = \left(\sum_{i=3}^k i f_i - 2 \sum_{i=3}^k f_i \right) \pi = (2e + 2f)\pi \quad (5.13)$$

Si igualamos las expresiones (5.12) y (5.13) obtenemos:

$$\Delta = 2\pi(f - e + v) \quad (5.14)$$

Como bien habíamos visto anteriormente, la expresión $(f - e + v)$ se corresponde con la característica de Euler, y para la esfera tiene un valor de 2. Por tanto la suma de los defectos angulares es 4π $\square$

5.2. Grafeno

Las características topológicas del grafeno son relevantes para su energía cohesiva y la estructura de los electrones. El embañosado poligonal de anillos de carbono que cubre una superficie, define la forma de un grafeno. Como habíamos dicho anteriormente, el grafeno es matemáticamente isomorfo al plano, y esta es la superficie más sencilla sobre la que podemos establecer una triangulación, o cualquier otro tipo de teselación.

Proposición 5.16.

- *Solo existen tres teselados Platónicos diferentes en el plano.*
- *Y solo existen dos teselados Arquimedianos (con hexágonos) diferentes en el plano.*

Los teselados del plano se describen indicando la configuración de cada vértice, por ejemplo la combinación $x.y.z$ donde todos son número naturales, significa que en cada vértice concurren tres polígonos, de x , y y z aristas respectivamente. Para probar las dos propiedades anteriores, necesitamos saber algunas de las reglas para la construcción de teselados en el plano.

Lema 5.17.

- *Regla 1. (Para teselados regulares, aquellos cuyas teselas son polígonos regulares). En cada vértice la suma de los ángulos de las teselas que se encuentran en cada vértice deben sumar 360° .*
- *Regla 2. El número de polígonos en cada vértice está entre 3 y 6.*
- *Regla 3. No puede haber 4 polígonos distintos en cada vértice.*
- *Regla 4. Si los vértices son del tipo $k.n.m.$ con k impar, entonces $n = m$.*
- *Regla 5. No puede haber ninguna configuración $3.k.n.m.$ con $k \neq m$*

Demostración.

- Las reglas 1, 2 y 3 son evidentes.
- Regla 4. Hagamos una representación visual que ilustre los casos más sencillos, $k = 3$ y $k = 5$ (figura 7) y para el resto de casos aplicamos el método de inducción.
- Regla 5. Si son del tipo $3.k.n.m.$ tenemos una teselación como muestra la figura 8.

□

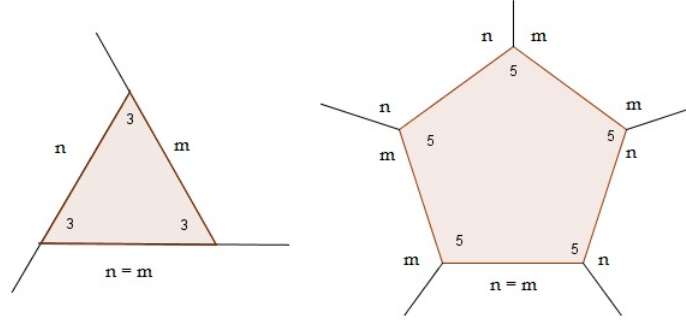


Figura 7: Ilustración de los casos para $k = 3, 5$

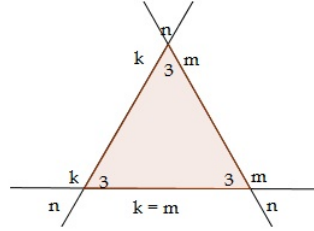


Figura 8: Ilustración del caso $k = 3.k.n.m$

Demostración. (Proposición 5.16)

- Si queremos hacer una teselación regular del plano, vemos que no podemos emplear cualquier polígono. Como la unión de los polígonos en cada vértice debe sumar 2π radianes (para que no queden espacios), tenemos que los únicos polígonos regulares que suman 2π radianes al unirlos por sus ángulos interiores son los triángulos equiláteros, los cuadrados y los hexágonos. Por tanto, solo existen tres teselados Platónicos diferentes del plano.
- Sabemos que en cada vértice hay entre 3 y 6 polígonos. Veamos cada caso por separado. Sea h el número de hexágonos.
 - Para 3 polígonos en cada vértice.
Si $h = 1$, tenemos que encontrar un polígono de n lados tal que sus ángulos internos midan α radianes y verifique:

$$\frac{2\pi}{3} + 2\alpha = 2\pi$$

Entonces, $\alpha = \frac{2\pi}{3}$, luego tendríamos $h = 3$ y no sería un teselado Arquimediano.

Si $h = 2$, de igual manera α debe verificar:

$$2\frac{2\pi}{3} + \alpha = 2\pi$$

Entonces $\alpha = \frac{2\pi}{3}$ radianes, y obtendríamos el mismo resultado que para el caso anterior.

Por tanto, no existe ningún polígono distinto del hexágono con el que poder formar una teselación Arquimediana con tres polígonos en cada vértice.

- Para 4 polígonos en cada vértice.

Si $h = 1$, siguiendo con el razonamiento anterior,

$$3\alpha + \frac{2\pi}{3} = 2\pi$$

entonces $\alpha = \frac{4\pi}{9}$ radianes, luego no existe una teselación en este caso.

Si $h = 2$,

$$2\alpha + \frac{4\pi}{3} = 2\pi$$

entonces $\alpha = \frac{\pi}{3}$ radianes, y tenemos dos posibles configuraciones, la 3.6.3.6. y la 3.3.6.6., siendo esta última imposible puesto que viola la regla 5 de los teselados. Es imposible que el número de hexágonos que coinciden en un mismo vértice sea más de dos, ya que entonces la suma de los ángulos internos en cada vértice serían 2π radianes, y por tanto, el único teselado Arquimediano que existe 3.6.3.6.

- Para 5 polígonos en cada vértice.

Si $h = 1$,

$$4\alpha + \frac{2\pi}{3} = 2\pi$$

entonces $\alpha = \frac{\pi}{3}$. Así, tenemos la configuración 3.3.3.3.6.

Si $h = 2$,

$$3\alpha + \frac{4\pi}{3} = 2\pi$$

entonces $\alpha = \frac{2\pi}{9}$.

Por tanto, y como no puede haber más de dos hexágonos en cada vértice, solo se puede formar la teselación 3.3.3.3.6.

Así, hemos visto que solo hay dos posibles teselados Arquimedianos, el 3.6.3.6. y el 3.3.3.3.6.

□

Podemos preguntarnos el grafeno hace una teselación en hexágonos, pero ¿por qué no en cuadrados o triángulos? Por ejemplo, la configuración 4.8.8. es matematicamente posible. Simplemente es por la química de la molécula y los enlaces, las estructuras que presentan ambos polígonos resultan ser altamente inestables.

5.3. Nanotubos

Aunque los nanotubos de carbono, tanto de pared múltiple como de pared sencilla, presentan propiedades muy interesantes, en este apartado nos centraremos en los nanotubos de pared sencilla por ser los más estudiados hasta el momento, mostrando algunas de sus propiedades más interesantes y siguiendo los trabajos [5] y [1, chapter 3].

La estructura de los nanotubos de pared simple viene determinada por la forma en que se pliega sobre si misma la red hexagonal de grafeno, y podemos decir que queda definida por el par de enteros (L, M) , que representa cada hexágono de la lámina de grafeno.

Otra forma de definir los nanotubos es mediante el *vector Quiral*. El vector Quiral define la posición relativa de los puntos en la red de grafito, está definido mediante la combinación del par (L, M) y los vectores unitarios de la red hexagonal $\vec{a}_1$ y $\vec{a}_2$. Entonces el vector Quiral se puede escribir como:

$$\vec{Q}_u = L\vec{a}_1 + M\vec{a}_2 \quad (5.15)$$

Cuando doblamos la lámina, tratamos que el par (L, M) coincida con el origen $(0, 0)$, pudiendo realizar tres pliegues diferentes (como muestra la figura 9) que darán lugar a los tres tipos de nanotubos (figura 10), denominados nanotubos paralelos, perpendiculares y quirales.

Por tanto, los nanotubos son clasificados en tres grupos dependiendo de los índices (L, M) : (figura 9)

- Nanotubos paralelos; con índices $(L, 0)$ o $(0, M)$, donde un tercio de los enlaces interatómicos son paralelos al eje del nanotubo.
- Nanotubos perpendiculares; con índices (L, L) , donde un tercio de los enlaces interatómicos son normales al eje del nanotubo.
- Y nanotubos quirales; con $L > M > 0$ (diestro) o $M > L > 0$ (zurdo).

Proposición 5.18. *El diámetro del nanotubo (L, M) es:*

$$d_{L,M} = \frac{\sqrt{3}}{\pi} r_0 (L^2 + LM + M^2)^{1/2} \quad (5.16)$$

donde $r_0 = 0,142$ nm denota la longitud media de los enlaces del carbono.

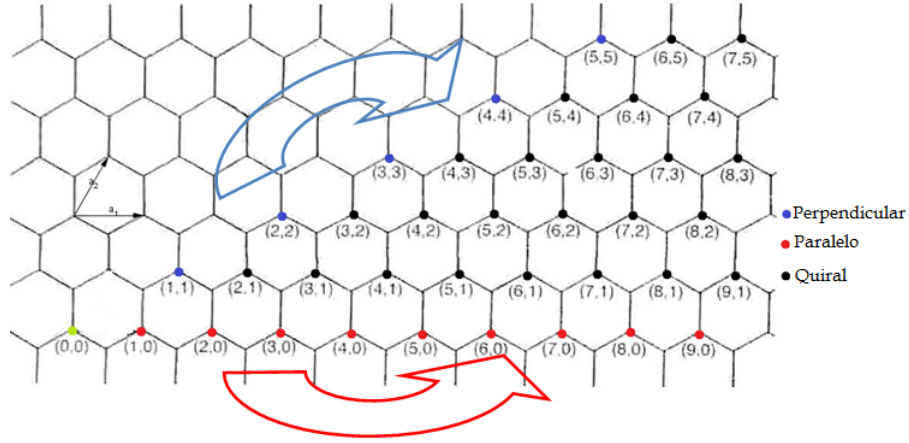


Figura 9: Tipos de pliegues de la malla de grafeno.

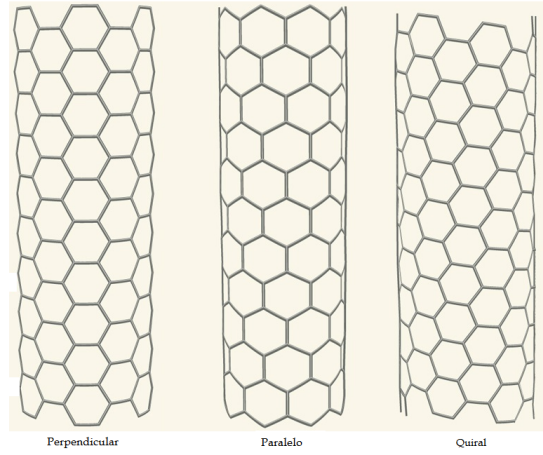


Figura 10: Nanotubos resultantes de los 3 tipos de pliegues.

Demostración. (De la proposición 5.18.) Si nos fijamos en el vector Quiral, nos damos cuenta de que el perímetro de la base de los nanotubos coincide con el módulo de este vector. En consecuencia, podemos tener la siguiente expresión para el diámetro del nanotubo:

$$|\vec{Q}_u| = \pi d_{L,M} \quad (5.17)$$

Como $\vec{Q}_u = N\vec{a}_1 + M\vec{a}_2$, y el ángulo que forman los vectores $\vec{a}_1$ y $\vec{a}_2$ es de $\pi/3$ radianes, donde:

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = r_0\sqrt{3} \quad (5.18)$$

Por comodidad, tomamos $a = r_0\sqrt{3}$. Entonces:

$$|\vec{Q}_u| = \sqrt{N^2a^2 + M^2a^2 + 2NM a^2 \cos(\pi/3)} = a\sqrt{N^2 + M^2 + NM} \quad (5.19)$$

Reemplazando las ecuaciones (5.17) y (5.19) obtendremos la ecuación (5.16). $\square$

Desde el punto de vista de la simetría, el eje del nanotubo es un eje de rotación de orden L para ambos nanotubos paralelo $(L, 0)$ y perpendicular (L, L) , mientras los nanotubos quirales tienen un eje helicoidal (una rotación y una traslación paralela al eje).

Definición 5.19. *La operación de rotación consiste en realizar un giro de α grados alrededor de un eje, llamado eje de rotación. El **orden de rotación** L indica el número de veces necesarias que hay que realizar un giro de α radianes para completar los 2π radianes de una vuelta completa, siendo el ángulo de giro $\alpha = \frac{\pi}{L}$*

En la dirección paralela al eje, los nanotubos son periódicos, con un periodo de $3r_0$ para el tipo paralelo, $\sqrt{3}r_0$ para el tipo perpendicular y $\pi d_{L,M}/\sqrt{3}D(L, M)$ para el tipo quiral, donde $D(L, M)$ es el máximo divisor común de L y M . Así para los pares de primos para los cuales $D(L, M) = 1$ el periodo a lo largo del eje es $1/\sqrt{3}$ veces la circunferencia.

Los nanotubos con múltiples capas se forman por una adición secuencial de capas a un nanotubo con una sola capa. La distancia entre capas es constante y es sobre $0,34 \text{ nm}$, con una tolerancia que mantiene, para reacciones energéticas, dentro del 1 %. Así el diámetro de un nanotubo con múltiples capas con los nanotubos concéntricos centrados etiquetados en la dirección hacia el exterior por $n = 1, 2, 3, \dots$ son dados por:

$$d_{L',M'} = d_{L,M} + 2(n-1)(0,34nm) \quad (5.20)$$

Resulta que cada etiqueta tiene índices (L', M') que difieren de los índices (L, M) ; sus valores son aquellos que mejor cumplen las ecuaciones (5.16) y (5.20) dentro de un 1 % de tolerancia.

Aparte de las tapas, que contienen doce pentágonos entre las dos, los nanotubos rectos ideales son construidos exclusivamente con anillos hexagonales como en las láminas de grafito, con una buena conjugación entre los límites interatómicos. Sin embargo, los nanotubos pueden ser doblados gracias a la adición de parejas de pentágono-heptágono. En particular, un nanotubo abierto-cerrado puede ser cerrado en sí mismo para dar una forma toroidal, siendo válidos los resultados de la sección 3.1.2. para superficies toroidales.

Un nanotubo no ideal puede tener una variedad de defectos como el grafito común. El interés especial aquí son los defectos topológicos en los cuales algunos hexágonos son reemplazados por otros polígonos preservando la coordinación

triple de cada átomo. Puesto que la conectividad no debe cambiar, el número f_j^d de polígonos que reemplazan a los hexágonos debe cumplir:

$$\sum_j (6 - j) f_j^d = 0 \quad (5.21)$$

como consecuencia de la ecuación (5.4) para superficies compactas con forma toroidal. El defecto topológico más simple, en el que pueden ser introducido un anillo de 14 miembros sin alteraciones fuera, está constituido por dos parejas pentágono-heptágono ($f_5^d = f_7^d = 2$) y está generado por la llamada transformación de Stone-Wales.

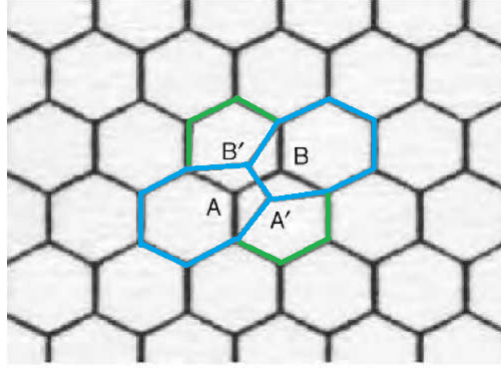


Figura 11: Transformación de Stone-Wals.

Esta transformación reduce en uno el número de aristas de los polígonos que tienen la arista AB en común e incrementa en uno el número de aristas de los dos polígonos adyacentes, como muestra la figura 11.

6. Teoría de grafos

Después de todo esto cabe preguntarse qué tipo de poliedros son los fullerenos. Comenzando con las buckybolos, en general no son sólidos platónicos (salvo el dodecaedro C_{20}). Tampoco son sólidos arquimedianos, porque fullerenos hay muchos y sólidos arquimedianos sólo hay trece; el icosaedro truncado es el C_{60} y no existe ninguno más cuyas caras sean sólo pentágonos y hexágonos [25]. No son poliedros cuyas aristas sean todas de la misma longitud, porque en el C_{60} tienen dos longitudes de arista distintas [23] y en el C_{70} las aristas toman ocho tamaños diferentes [24].

Por otro lado, un nanotubo se obtiene a partir de la malla hexagonal del plano (grafito), enrollándolo y obteniendo así una malla hexagonal en el cilindro. Pasar de un plano a un cilindro es una isometría local, y la malla hexagonal del plano se convierte isométricamente en una malla hexagonal del cilindro de lados arcos de geodésica. Esto no es lo que conviene en la química, pues los enlaces son segmentos rectos y no curvos. ¿Cuál es la solución? Los vértices de la malla hexagonal se aplican sobre puntos del cilindro. Uniendo los puntos correspondientes por segmentos rectos, se obtiene un grafo formado por vértices (que están en un cilindro) y segmentos, que forman ciclos de seis lados, conocidos químicamente como anillos hexagonales, pero estos anillos no encierran hexágonos planos ya que los seis vértices de cada anillo no son puntos de un mismo plano.

Con todo esto, el mejor modo de representar los fullerenos desde un punto de vista matemáticos es mediante la teoría de grafos. Las buckybolos son grafos tridimensionales, formados por vértices y aristas, que tienen ciclos hexagonales y ciclos pentagonales, de modo que en cada vértice confluyen tres aristas (esto es, son grafos 3-regulares). Las caras que cierran esos ciclos no tienen por qué ser planas. Además, tiene que verificarse que el grafo tiene que ser homeomorfo a un grafo sobre la esfera (o admitir un embedding sobre la esfera, que significa lo mismo), y, por tanto, se tiene una descomposición poligonal de la esfera topológica en pentágonos y hexágonos: de aquí se sigue que el número de pentágonos es 12 (por la característica de Euler) y que la suma de sus defectos esféricos es 4π (teorema de Descartes o de Gauss-Bonnet discreto). Que el número de pentágonos sea doce y que sobre el de hexágonos no haya condición, no significa de entrada, y como veremos más adelante, que se pueda dar cualquier número de hexágonos. Analicemos qué quieren decir todas estas afirmaciones.

6.1. Introducción a la teoría de grafos.

Hasta ahora, hemos visto y estudiado a las buckybolos como superficies que viven en $\mathbb{R}^3$ pero, ¿habría alguna manera de poder estudiarlas en $\mathbb{R}^2$? La respuesta es sí. Gracias a la teoría de grafos veremos cómo representar estas superficies en el plano y cómo estudiarlas.

Antes de introducir la definición de grafo y demás conceptos, veremos un

enfoque que nos permite tener una idea de lo que nos encontraremos más adelante.

Comenzamos primero dos poliedros regulares sencillos, el tetraedro y el cubo contruidos con varillas. Si nos fijamos en una cara y tratamos de reproducir en el plano la disposición de los vértices y aristas tal y como los vemos a través de dicha cara, el diagrama obtenido se conoce como representación de Schlegel del poliedro. Esta representación nos permiten ver a la vez todas sus las caras, aristas y vértices del poliedro en cuestión, donde cada región, incluida la exterior, corresponde a una cara (ver figura 12).

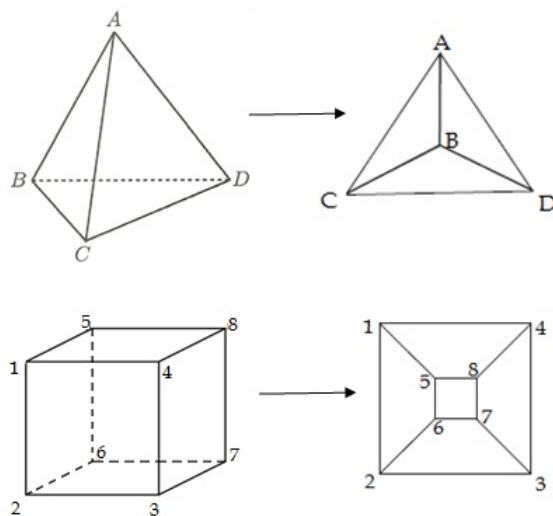


Figura 12: Diagrama de Shlegel del tetraedro (parte superior de la imagen)y del cubo (parte inferior de la imagen)

Como podemos ver, los poliedros regulares tienen un diagrama de Schlegel único, pero cualquier otro poliedro tendrá varios, dependiendo de la cara en que nos fijemos. Así, el grafo una buckybola coincide con la representación de Schlegel de ésta, y dependerá de si nos fijamos en una cara pentagonal o hexagonal.

Desde un punto de vista matemático, es habitual asociar a las buckybolas un grafo, de modo que como cabe esperar los átomos de carbono se corresponden con los vértices y los enlaces con las aristas, lo que proporciona una modelización topológico-geométrica. En términos de la teoría de grafos, los fullerenos pertenecen a la clase de grafos cúbicos, planos, 3-conexos y simples, con solo 12 pentágonos y f_6 hexágonos. Veamos qué quiere decir todo esto.

Definición 6.1. Un **grafo** es un par $G = (V, E)$ donde $V = V(G)$ es un conjunto finito no vacío cuyos elementos son llamados *vértices*, o *nodos*, y $E = E(G)$ es un conjunto finito cuyos elementos son pares de vértices, y reciben el nombre de *aristas*.

Definición 6.2. Un **grafo** es **simple** si no tiene lazos ni aristas múltiples.

Definición 6.3. Un **grafo** se dice **planar** si hay un *embedding*, también llamado *inmersión* o *inmersión* (dibujo sin cruces de aristas, es decir, dos aristas solo tienen un vértice en común) en el plano $\mathbb{R}^2$.

En $\mathbb{R}^3$, todo grafo se puede dibujar sin cruces si no colocamos 4 de los puntos asociados a los vértices en el mismo plano.

Observación 6.4. Un grafo puede admitir un *embedding* en el plano $\mathbb{R}^2$ si y solo si admite un *embedding* en la esfera S^2 . (Proyección estereográfica)

Siempre que al menos se necesite quitar tres vértices del grafo para tener dos componentes no conexas, el grafo será llamado **3-conexo**, y esencialmente (salvo homeomorfismos) hay una sola forma de sumergirlo en el plano. Por esto, un grafo plano 3 conexo tiene bien definido un conjunto de *caras*, F . Luego podemos representar un grafo con estas características como $G = (V, E, F)$.

Cuando un grafo es plano, también puede ser sumergido en la superficie de una esfera sin cruces de aristas, y viceversa. Una vez más, esta inmersión es única si y solo si el grafo es 3-conexo, y obtenemos las mismas caras. De hecho, los grafos que describen poliedros en tres dimensiones son exactamente los grafos planos 3-conexos, y por lo tanto son llamados *grafos poliedrales*.

El número de vértices vecinos de un vértice v , o lo que es lo mismo, el número de aristas incidentes en v , se denomina **grado**, abreviadamente se escribe $\deg(v)$.

Del carácter tetravalente del carbono surgen cuatro posibles situaciones un vértice que denotaremos como 3.1, 2.2, 2.1.1, 1.1.1.1 (Figura 13).

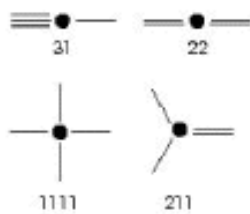


Figura 13: Posibles enlaces del carbono

En la mayoría de los fullerenos todos los enlaces son del tipo 2.1.1 y en consecuencia, sus grafos asociados tienen la propiedad de que en cada vértice

inciden tres aristas, se dicen que son grafos **3-regulares** o grafos cúbicos (los enlaces dobles en el grafo se representan mediante una sola arista).

Definición 6.5. Un **grafo** se dice **regular** si todos los vértices son del mismo grado.

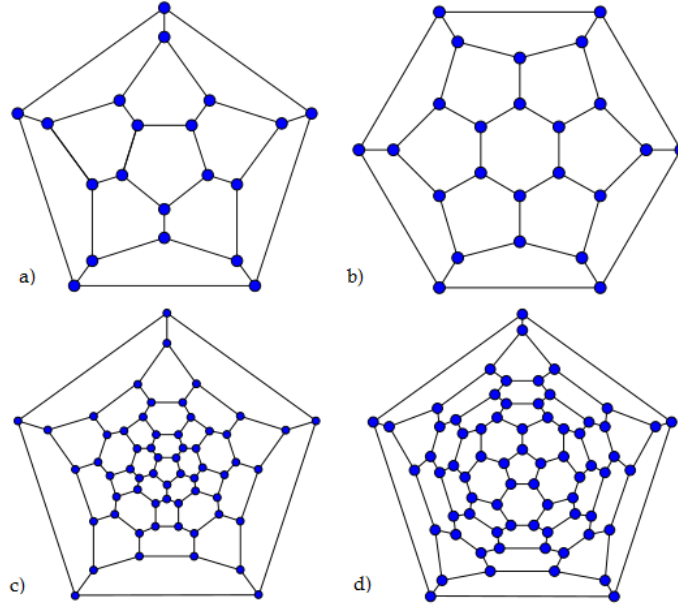


Figura 14: Grafos de distintos fullerenos: a) C_{20} , b) C_{24} , c) C_{60} y d) C_{70}

Lema 6.6. (*Hand-shaking*)

$$\sum_{i=1}^N \deg(v_i) = 2|E|$$

Como $\deg(v_i) = 3$ para todo vértice:

- $E = \frac{3}{2}N$ (en cada carbono concurren tres aristas, y cada arista es compartida por dos carbonos).
- $E = 3F - 6$ (sustituyendo la igualdad anterior en la fórmula de Euler).

Si seguimos este razonamiento obtenemos la fórmula (5.7) vista anteriormente y la fórmula (5.4) para la esfera.

6.2. No existe el C_{22}

Como ya habíamos visto en la sección anterior, todo fullereno debe cumplir unas reglas, entre ellas, debe contener exactamente 12 pentágonos y un cierto número de hexágonos, que podía ser cero (como en el dodecaedro) o un número mayor o igual a que dos, en donde el número de hexágonos queda determinado en función del número de átomos de carbono por la ecuación (5.6).

Teorema 6.7. *No existe un fullereno con 22 átomos de carbono, es decir, con 12 pentágonos y 1 hexágono.*

Demostración. Hagamos una construcción del grafo plano de cómo sería un fullereno con un solo hexágono y 12 pentágonos. Recordemos que en cada vértice concurren tres aristas, y por tanto, tres regiones (pentagonales o hexagonal una de ellas). Dos regiones distintas concurren sólo en un vértice, una arista o son disjuntas.

- Paso 1. Colocamos el hexágono. En cada uno de los seis vértices concurren dos pentágonos, que, por tanto, tendrán una arista común.
- Paso 2. Ponemos los seis pentágonos, que consecutivamente comparten arista con sus vecinos. Aparecen alternadamente vértices en los que ya concurrían dos pentágonos de nuestra construcción y vértices en que sólo uno. La única manera de seguir completando la figura es que en los primeros añadamos un único pentágono y en los segundos dos, que a la fuerza han de compartir arista.
- Paso 3. Entonces nos queda una configuración con doce pentágonos y el hexágono, y tenemos seis aristas libres que cierra con otro hexágono que añadamos.

Por tanto, tendríamos 12 pentágonos y 2 hexágonos. Contradicción.

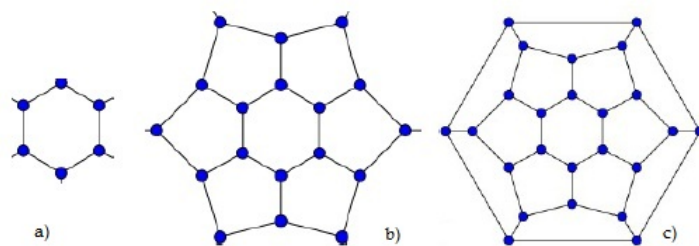


Figura 15: Representación de la demostración: a) Paso 1. b) Paso 2. c) Paso 3.

□

Todos los demás fullerenos C_N existen, donde como habíamos demostrado anteriormente $N = 20 + 2f_6$, siendo el C_{20} el más pequeño de todos.

6.3. Dibujando grafos fullerenos.

Para obtener un grafo plano no todas las elecciones de embedding son igualmente útiles, además queremos aquellas que resulten más simples. Mientras un pequeño grafo puede ser fácilmente dibujado a mano, los fullerenos como el C_{540} requieren de un algoritmo computacional y un programa de dibujo.

El primer método sobre el que hablaremos se llama la *proyección de Schlegel*. En 1886, Victor Schlegel probó que todo grafo planar puede ser obtenido desde un poliedro tridimensional realizando una proyección siguiendo el siguiente método: un punto $\vec{x}_0$ es colocado sobre una de las caras, y se elige un plano P que esté situado debajo del poliedro. Se trazan las rectas que unen $\vec{x}_0$ con cada uno de los vértices del poliedro. La intersección de cada recta $\vec{x}_0 - \vec{x}_v$ con P define las coordenadas en 2D del vector v . Si escogemos $\vec{x}_0$ suficientemente cerca de la cara, y los vértices del poliedro yacen en una esfera, el embedding resultante será planar.

Los diagramas de Schlegel, como los que habíamos visto al principio de esta sección, son el resultado de la proyección de Schlegel, o también conocida como proyección estereográfica (Figura 16 a)).

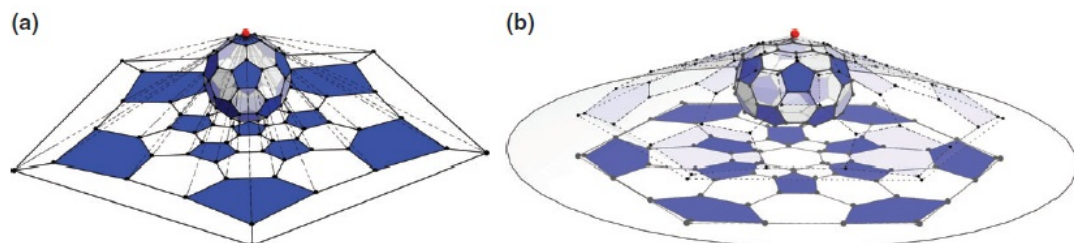


Figura 16: a) Proyección de Schelegel del C_{60} b) Poyección cónica del C_{72}

Un problema de este tipo de proyección es que a veces produce cruces entre aristas cuando se aplica a algunos poliedros no esféricos o cuando los parámetros no están bien escogidos.

El *método de proyección cónica*, (Figura 16 b)) proyecta los vértices fuera del cono que envuelve el fullereno y éstos posteriormente se plasman en el plano. Ambos métodos, la proyección de Schlegel y la proyección cónica requieren primero del embedding de un grafo en un poliedro tridimensional.

Como cabe esperar, hay muchos algoritmos para dibujar grafos, cada uno con sus ventajas y desventajas, pero ninguno garantiza siempre obtener buenos resultados.

6.4. Estructura Kekulé

Como habíamos señalado, ya que todos los átomos de carbono son tetravalentes, para cada átomo es imprescindible que uno de los tres enlaces sea doble. Dicho conjunto de dobles enlaces en química se denomina *estructura de Kekulé* en un fullerenó.

Todo químico aprende cómo dibujar dobles enlaces en un sistema aromático llamado estructura de Kekulé. Para el benceno hay solamente dos posibles estructuras de Kekulé con tres enlaces dobles (Figura 17),

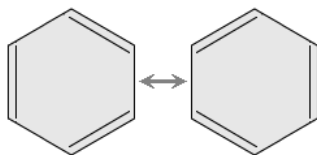


Figura 17: La representación de Kekulé de los tres enlaces dobles del benceno

pero, ¿cuántas hay para el C_{60} ? ¿Y para cualquier C_N ?

Lo que en química se denomina estructura Kekulé, desde el punto de vista matemático supone un *perfect matching*, es decir, una estructura de Kekulé es lo mismo que un perfect matching en el grafo químico $G = (V, E)$, donde las aristas del matching corresponden a los dobles enlaces. Veamos qué quiere decir todo esto.

Definición 6.8. Sea G un grafo, un **matching** es una colección de aristas disjuntas del grafo. Dicho de otra forma, es un subgrafo en el que todos los vértices tienen grado cero o uno. Dado un grafo G , un **perfect matching** M en G es un subgrafo que contiene todos los vértices de G tal que cada vértice (del matching) tiene grado 1.

Si denotamos $K(G)$ como el conjunto de todos los perfect matching del grafo, el número de diferentes estructuras de Kekulé es $K = |K(G)|$ llamado número de Kekulé. Es conveniente usar este número como un parámetro básico para el fullerenó en cuestión. De esta forma tenemos $|V| = 2K$, $|E| = 3K$ y $|F| = K + 2$.

¿Guarda relación este número con la estabilidad de fullerenó correspondiente? Schmalz calculó el número de Kekulé para algunos fullerenos como el C_{60} , el isómero menos estable, el $C_{60} - D_{5h}$ ⁵ tiene $K = 16501$, mientras el isómero más estable, el $C_{60} - I_h$ (icosaedro truncado) tiene $K = 12500$. De hecho, Austin mostró que 20 isómeros del C_{60} tienen el número de Kekulé mayor que el $C_{60} - I_h$. Por lo tanto, el número de Kekulé no es un buen indicador de la estabilidad del fullerenó.

⁵Notación para referirse a cada uno de los isómeros del C_{60} y que guarda relación con el grupo de simetrías al que pertenece.

Dado K un perfect matching de un grafo fullereno G cualquiera. Una cara del grafo G puede tener 0, 1, 2 o 3 aristas en el perfect matching; denotamos $B_i(K)$ al conjunto de las caras que tienen exactamente i aristas en K . Las caras en $B_0(K)$ son llamadas caras vacías de K y las caras en $B_3(K)$ son llamadas caras completas o caras bencenoides. Dependiendo del número de aristas con que incidan los hexágonos en el matching podemos definir dos números, el número de Clar y el número de Fries, que dependen del número de *hexágonos bencenoides*⁶, (hexágonos con tres aristas en el matching).

Definición 6.9. *El número de Fries de un grafo es el número máximo de hexágonos bencenoides sobre todas los perfect matching.*

En la figura 18 se muestra un ejemplo de la definición.

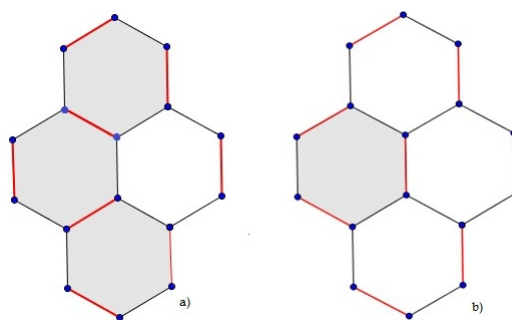


Figura 18: Ejemplo simple de dos posibles matching (los enlaces dobles se corresponden con las aristas rojas) donde $Fries(G) = 3$.

De forma similar tenemos:

Definición 6.10. *El número de Clar es el mayor número de hexágonos bencenoides independientes (no adyacentes) sobre todas las estructuras de Kekulé.*

Veamos en la figura 19 un ejemplo de que quiere decir esto.

Para el $C_{60} - I_h$ tenemos $Fries(G) = 20$ y $Clar(G) = 8$, y un ejemplo de las estructuras de Fries y Clar para éste se recogen en la figura 20.

Cabe esperar que los fullerenos con un mayor número de Clar sean los aquellos con una estabilidad mayor. Por ejemplo, el $C_{60} - I_h$ es el único de todos los isómeros con una estructura de Fries, es decir, una estructura de Kekulé con el número de hexágonos bencenoides, donde todos los hexágonos contienen tres enlaces dobles y los pentágonos ninguno. Esto es la razón de la estabilidad única de éste fullereno. Sin embargo, encontrar el número de Clar no siempre

⁶Bencenoide (Benzenoid): moléculas con una estructura electrónica análoga al benceno. Contienen al menos un anillo de benceno

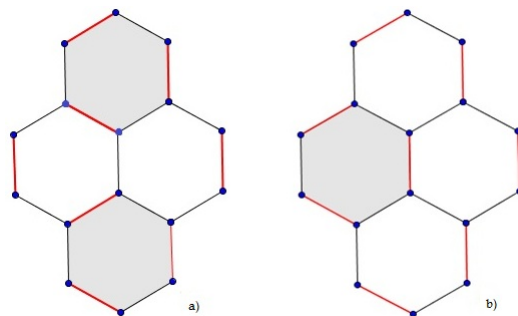


Figura 19: Siguiendo con los ejemplos de matching de la figura 18, tenemos $Clar(G) = 2$.

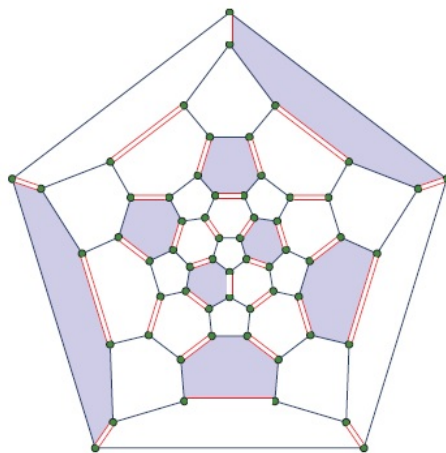


Figura 20: Una de las estructuras de Fries del C_{60} , y superpuesta la estructura con el mayor número de Clar ($Clar(C_{60}) = 8$ y $Fries(C_{60}) = 20$), y representados en rojo los dobles enlaces.

es un problema trivial, computacionalmente es un problema NP-HARD⁷. Recientemente se ha demostrado que para el C_{60} hay exactamente 18 fullerenos con el número máximo de Clar 8, algunos de los cuales poseen 6 pentágonos adyacentes, y por tanto el número de Clar solo no resulta una buena medida de la estabilidad de la molécula.

⁷En teoría de la complejidad computacional, la clase de complejidad NP-hard (NP-complejo, o NP-difícil) puede ser descrita como aquella que contiene a los problemas de decisión que son como mínimo tan difíciles como un problema de NP, problemas que se pueden resolver en tiempo polinómico, en un sentido no determinado. Puedo comprobarlo en tiempo polinómico si me dan suficiente información adicional.

Es natural preguntarse cuál es el número de perfect matching en los grafos fullerenos. El cálculo del promedio de perfect matching para fullerenos con un pequeño número de vértices indica que este número debe crecer exponencialmente con el número de vértices.

Todo grafo cúbico tiene un número exponencial de perfect matchings y, por tanto, un número exponencial de estructuras de Kekulé. El número medio de perfect matching para un isómero C_N es aproximadamente $20 * 2^{(N-20)/4}$. En general, calcular el número de perfect matching es muy complicado, pero para los grafos planos como los fullerenos, el número de Kekulé puede ser calculado en un tiempo del orden de N^3 usando la matriz de Pfaff. Sin embargo, podemos establecer una cota superior e inferior de éste número.

Teorema 6.11. *(Došlić) El número de estructuras de Kekulé crece exponencialmente con una cota inferior de $2^{N/8}$.*

Esta cota no está muy ajustada, para el C_{60} predice al menos 181 estructuras de Kekulé, y hay hasta 12500.

La cota superior para el número de Fries de un grafo G se define como $Fries(G) \leq N/3$. Las estructuras de Fries con el número máximo de Fries $N/3$ se llaman *estructuras de Fries completas* o *estructuras de Clar perfectas*. Una cota para el número de Clar es $Clar(G) \leq (N/6 - 2)$.

En resumen, dado un fullereno con N átomos de carbono,

$$2^{N/8} \leq |K(G)| \quad (6.1)$$

$$Fries(G) \leq \frac{N}{3} \quad (6.2)$$

$$Clar(G) \leq \frac{N}{6} - 2 \quad (6.3)$$

Con todo esto tenemos un conjunto de indicadores que nos ayudan a determinar la estabilidad de una molécula.

6.5. El isómero más pequeño que cumple la IPR

Cuando presentamos la subsección "3.4 Los isómeros y su estabilidad, IPR y PAPR", enunciamos un resultado:

Teorema 6.12. *El isómero más pequeño que cumple la IPR⁸ es el $C_{60} - I_h$ (icosaedro truncado)⁹.*

⁸Recordemos que la IPR es la regla del pentágono aislado.

⁹La notación $C_{60} - I_h$ permite distinguir a que isómero del C_{60} nos referimos. Lo denotamos así porque I_h es su grupo de simetrías, como veremos en el correspondiente capítulo de simetrías.

Para demostrarlo vamos a aplicar un razonamiento análogo al empleado en la demostración de que el fullereno C_{22} no existe.

Demostración. Hagamos una construcción del grafo plano de cómo sería un fullereno en el que los 12 pentágonos deben estar rodeados por hexágonos. Podemos situar en el centro de nuestro grafo un pentágono o un hexágono, hagamos la construcción del grafo correspondiente para ambos casos.

- Paso 1. Colocamos el pentágono.
- Paso 2. Colocamos los 5 hexágonos alrededor del pentágono central para que éste no tenga ningún pentágono adyacente
- Paso 3. Añadir alternativamente pentágonos y hexágonos de modo que dos pentágonos no posean aristas compartidas.

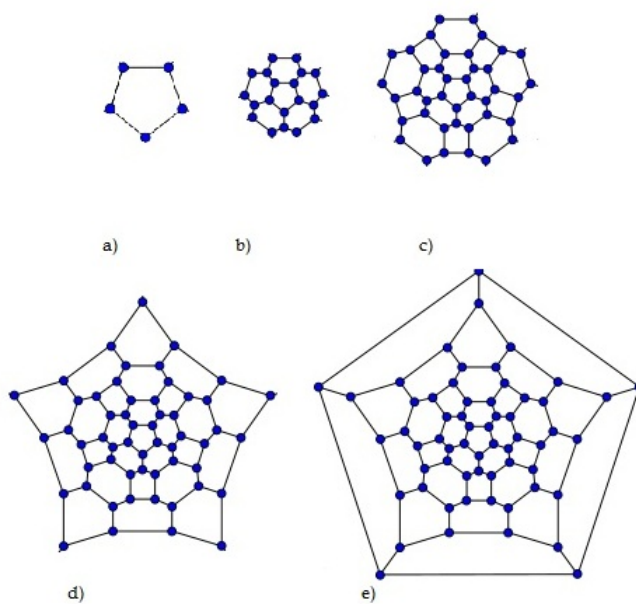


Figura 21: Construcción del grafo fullereno C_{60} paso a paso.

De forma análoga podemos hacer la construcción si en lugar de un pentágono colocamos un hexágono en el centro del grafo (figura 22).

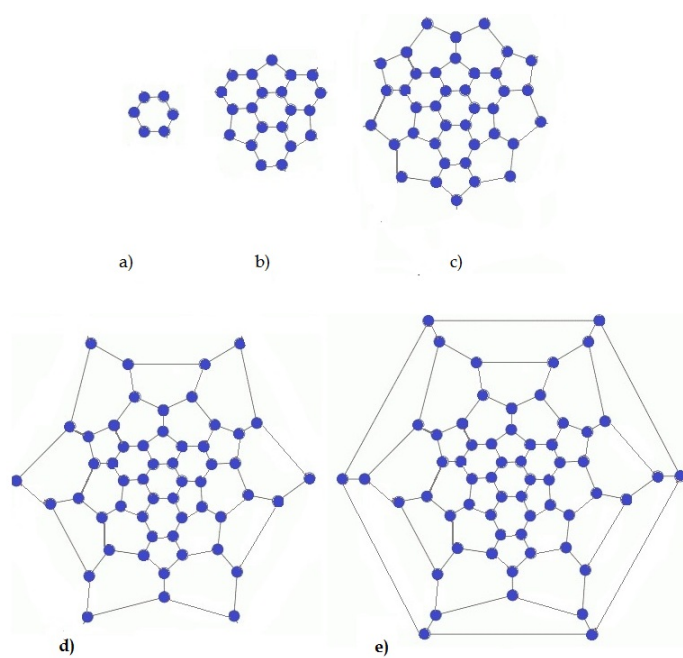


Figura 22: Construcción del grafo fullereno C_{60} paso a paso.

□

7. Simetría

Teniendo en cuenta la gran variedad de fullerenos que se conocen, hemos decidido centrarnos en la primera sección en las simetrías del icosaedro truncado, fullereno que estamos estudiando con detalle desde el comienzo del trabajo. En la segunda sección, recogemos algunos de los resultados más importantes para caracterizar las simetrías de cualquier otro fullereno.

7.1. Simetrías del icosaedro truncado.

En este apartado, dedicado a las simetrías del icosaedro truncado, presentaremos especial atención a aquellas simetrías que preservan la orientación. Antes de comenzar de lleno con las simetrías, recordemos algunas definiciones que nos van a hacer falta a lo largo de ésta sección y debemos tener claras:

Definición 7.1. Una **permutación** de un conjunto X es una aplicación biyectiva de X en X . Se llama **grupo de permutaciones** de X al conjunto de permutaciones de X que forman grupo respecto de la composición.

Centrándonos en el caso de que X sea un conjunto finito, si X tiene n elementos, los numeramos como $1, \dots, n$ y suponemos que $X = \{1, \dots, n\}$.

Definición 7.2. Se llama **grupo simétrico** de grado n al formado por todas las permutaciones de un conjunto X de n elementos. Se representa por S_n y tiene orden $n!$

Definición 7.3. Si $\{i_1, \dots, i_r\}$ es un subconjunto de X , se representa por $(i_1 \dots i_r)$ la permutación que aplica $i_1 \rightarrow i_2, i_2 \rightarrow i_3, \dots, i_{r-1} \rightarrow i_r, i_r \rightarrow i_1$ y deja fijos los elementos de $X \setminus \{i_1, \dots, i_r\}$. Una permutación de este tipo se llama **ciclo de longitud r** . Un ciclo de longitud dos se llama **transposición**.

Definición 7.4. Se dice que una **permutación** es **par** cuando es producto de un número par de transposiciones. En otro caso, se dice **impar**. (El producto de permutaciones se define como la composición de las aplicaciones correspondientes)

Teorema 7.5. Las permutaciones pares de S_n ($n > 1$) forman un subgrupo de S_n de orden $\frac{n!}{2}$. Se representa por A_n y se llama **grupo alternado** de grado n .

Volviendo con los poliedros, el icosaedro tiene 20 triángulos equiláteros como caras, concurriendo 5 triángulos en cada vértice. Por tanto, tiene 12 vértices y 30 aristas. El icosaedro es el dual de dodecaedro (sólido platónico que tiene tres pentágonos regulares adyacentes en cada vértice, cuyos vértices corresponden con los centros de las caras del icosaedro) y por ello los grupos de simetría de ambos poliedros coinciden, y también coinciden con el grupo de simetrías del icosaedro truncado [7].

Por tanto, como el icosaedro y dodecaedro regular tienen el mismo conjunto de simetrías, así que nos centraremos en el dodecaedro para estudiar cuales son

dichas simetrías por tener un número menor de caras. El dodecaedro regular posee:

- 6 ejes de simetría de orden 5 (la recta que une los centros de cada par de caras opuestas es un eje de simetría de orden 5 y las 12 caras pentagonales forman 6 pares de caras opuestas.
- 10 ejes de simetría de orden 3 (la recta que une cada vértice con su diametralmente opuesto es un eje de simetría de orden 3 y los 20 vértices forman 10 pares de vértices opuestos.
- 15 ejes de simetría de orden 2 (la recta que une el punto medio de cada con el punto medio de la arista opuesta es un eje de simetría de orden dos y las 30 aristas forman 15 pares de aristas opuestas.

Los giros que resultan, respectivamente, son:

$$15 \times 1 = 15$$

$$10 \times 2 = 20$$

$$6 \times 4 = 24$$

Uniendo a estos giros la identidad, resulta que el orden de este grupo de rotaciones debe ser:

$$1 + 15 + 20 + 24 = 60$$

Por tanto, el dodecaedro (y el icosaedro) posee 60 simetrías de rotación, esto es, simetrías que preservan la orientación. Este grupo se representa como I .

Teorema 7.6. *Sea I es el grupo de simetría rotacional de un icosaedro, $I \simeq A_5$.*

Demostración. En éste caso, en lugar de hacer la demostración con todo lujo de detalles, presentaremos un esquema con los pasos a seguir.

- Primer paso: encontrar un conjunto de 5 elementos en el que I opere. Tomamos el conjunto formado por los 5 cubos que pueden ser inscritos en el dodecaedro (en la figura 23 se muestra un ejemplo de un cubo inscrito en un dodecaedro. Aprovechando las 5 diagonales del pentágono construimos los 5 cubos). I actúa en este conjunto mediante la operación de permutación de los vértices de los cubos. Así, obtenemos permutaciones de los cubos, pues cada simetría llevará un cubo en otro (las simetrías preservan distancias, ángulos y llevan vértices del dodecaedro en vértices del dodecaedro).
- Segundo paso: ver que I es un grupo simple, es decir, los dos únicos subgrupos normales son el trivial y el total.

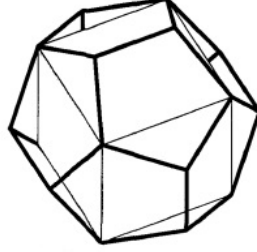


Figura 23: Representación de un cubo inscrito en el dodecaedro.

- Tercer paso: definir $\phi: I \rightarrow S_5$ una representación de la permutación correspondiente a esta operación y ver que ϕ es inyectiva y define por tanto un isomorfismo desde I hasta su imagen es S_5 .
- Cuarto paso: Considerar el homomorfismo signo $\sigma: S_5 \rightarrow \{\pm 1\}$, que asigna a cada permutación par el valor $+1$ y a cada permutación impar el valor -1 . El homomorfismo $\sigma\phi: I \rightarrow \{\pm 1\}$ notando que no es sobreyectivo.

Por tanto, la restricción es el homomorfismo trivial, implicando que la imagen de ϕ está contenida en el núcleo de σ , que es A_5 . Ambos I y A_5 tienen orden 60 y ϕ es inyectiva, en conclusión,

$$I \simeq \text{im}(\phi) \simeq A_5 \quad (7.1)$$

□

Éste resultado es útil, además, para calcular el subgrupo de isotropía (aquellas isometrías que dejan fijo algún elemento) ya que I habíamos dicho que son las simetrías que conservan la orientación.

El grupo de simetría completo del icosaedro se conoce como el grupo icosaédrico completo I_h , equivalente al producto del grupo de simetría de rotación y el grupo $\mathbb{Z}_2$ de orden dos, que se genera por la reflexión a través del centro del icosaedro. Así, el grupo de simetría del icosaedro regular tiene orden 120, de las cuales 60 son simetrías de rotación.

Proposición 7.7. $I_h \cong I \times \mathbb{Z}_2$

Demostración. I es el conjunto de simetrías que conservan la orientación, y $\mathbb{Z}_2 = \{id, \sigma\}$, donde σ es la simetría central que invierte la orientación. Sea $\tau \in I_h$. Entonces tenemos dos posibilidades:

- $\tau \in I$.
- $\tau \notin I$.

Si $\tau \notin I$, entonces $\tau\sigma$ conserva la orientación, luego $\tau\sigma \in I$. Por tanto,

$$\tau = \tau\sigma\sigma = (\tau\sigma)\sigma$$

Así, construimos el siguiente isomorfismo de grupos:

$$\begin{aligned} \phi: I_h &\longrightarrow I \times \mathbb{Z}_2 \\ \tau &\longmapsto (\tau, Id) \text{ si } \tau \in I \\ \tau &\longmapsto (\tau\sigma, \sigma) \text{ si } \tau \notin I \end{aligned}$$

La aplicación ϕ es inyectiva por la relación anterior, y trivialmente es biyectiva y homomorfismo de grupos. □

Proposición 7.8. *A pesar de que $|I_h| = 120 = |S_5|$, $I \times \mathbb{Z}_2 \not\cong S_5$.*

Demostración. Sea el par $(\alpha, \beta) \in I \times \mathbb{Z}_2$, donde $\alpha = (12345)$ y $\beta = 1$.

Claramente $\alpha \in I$. De acuerdo con el teorema 7.6, $I \cong A_5$, luego basta ver que α es una permutación par.

$$\alpha = (12345) = (15)(14)(13)(12) \implies \alpha \in A_5$$

$\alpha^5 = \alpha$, por tanto $O(\alpha) = 5$ (el orden de α es 5), y como $\beta^2 = 0$ $O(\beta) = 2$. Por tanto

$$O(\alpha, \beta) = 10$$

Pero en S_5 no hay ningún elemento de orden 10, luego $I \times \mathbb{Z}_2 \not\cong S_5$. □

Corolario 7.9. *Se puede definir la sucesión exacta corta de grupos¹⁰ siguiente*

$$1 \longrightarrow A_5 \longrightarrow S_5 \longrightarrow \mathbb{Z}_2 \longrightarrow 1$$

que no es escindida.

Demostración. Denotamos f a la aplicación $f: A_5 \longrightarrow S_5$, y g a la aplicación $g: S_5 \longrightarrow \mathbb{Z}_2$ (g es la aplicación definida en el paso 4 de la demostración del teorema 7.6), donde f es la inyección de A_5 en S_5 y $Ker(g) = im f$.

Esta sucesión no se escinde, si lo hiciera, entonces $S_5 \cong A_5 \times \mathbb{Z}_2$ que es falso en virtud del teorema 7.6 y de la proposición 7.8. □

¹⁰una **sucesión exacta de grupos** es una cadena de homomorfismos de grupos de modo que la imagen de cada uno de ellos coincide con el núcleo del siguiente homomorfismo. La sucesión se dice **exacta corta** si consta de cinco grupos, siendo los de los extremos el grupo trivial. En tal caso el primer homomorfismo es inyectivo, f , y el último suprayectivo, g . La sucesión se dice **escindida** si existe una retracción, esto es un homomorfismo r del grupo que ocupa la posición central en el de su izquierda de modo que rf es la identidad en éste. En tal caso, el grupo que ocupa la posición central es isomorfo al producto de los dos grupos contiguos.[15]

7.2. Los 28 grupos de simetría de los fullerenos.

De acuerdo con el artículo [10], y como cabía esperar por las propiedades físicas de los carbonos y los enlaces de los fullerenos, cuando hablemos de las simetrías de los fullerenos, tenemos que tener en cuenta que hay dos grupos de simetría asociados:

- *El grupo ideal o grupo de simetría topológica* de un grafo fullereno.
- *El grupo real o grupo de simetría físico* de la molécula en el espacio 3D.

El grupo de simetría físico es un subgrupo del ideal, debido a las variaciones de las longitudes de los enlaces y otros efectos de perturbaciones externas. Pero como a veces la forma solo es alterada levemente con respecto a la forma ideal, el grupo de simetría ideal aporta información útil sobre el sistema físico.

En 1971, P. Mani demostró que todo grafo G 3-conexo planar puede ser sumergido en la 2-esfera (esfera) como un politopo¹¹ convexo P de tal forma que el grupo de automorfismos de G coincide con el grupo de automorfismos del politopo convexo P formado por la inmersión, esto es, los automorfismos combinacionales de X son de hecho los mismos que los automorfismos topológicos de P .

Proposición 7.10. *Para cada grafo poliedral G , existe un politopo 3-dimensional P tal que cada automorfismo de X es inducido por una simetría de P .*

Definición 7.11. *Dado $G_1 = (V_1, E_1)$ y $G_2 = (V_2, E_2)$ dos grafos, decimos que son **grafos isomorfos** si existe una biyección $\phi_1: V_1 \rightarrow V_2$ y $\phi_2: E_1 \rightarrow E_2$ tal que si $a \in G_1$ unos dos vértices x e y , entonces $\phi_1(a)$ es una arista de G_2 que une $\phi(x)$ y $\phi(y)$. Un **automorfismo de un grafo** $G = (V, E)$ es cualquier isomorfismo de G en G .*

Siguiendo con la proposición 7.10. Por supuesto, los automorfismos topológicos de P forman un subgrupo del grupo de todos automorfismos de la 2-esfera. Sea el subgrupo formado por las rotaciones de P que denotaremos como grupo de rotación de P . Entonces la proposición 7.10 implica que existen precisamente dos familias infinitas y los tres ejemplos esporádicos de grupos de rotación finitos de la 2-esfera: los grupos cíclicos $\mathbb{Z}_n$, los grupos diedrales D_{2n} , donde $n \in \mathbb{N}$, el grupo alternado A_4 , el grupo simétrico S_4 y el grupo alternado A_5 . Además, tanto el grupo de rotación de P es su grupo de automorfismo completo como el grupo de automorfismo completa de P es un producto de su grupo de rotación y una reflexión. Y ya que los fullerenos son grafos planos, estos hechos implican la siguiente proposición.

Proposición 7.12. *Sea $Rot(F)$ el grupo rotacional de un fullereno F . Entonces $Rot(F) \cong A_4, S_4, A_5, \mathbb{Z}_n$ o D_{2n} , donde $n \in \mathbb{N}$ y el grupo de automorfismos de F*

¹¹ En geometría elemental, un politopo es un objeto geométrico con lados planos, y puede existir en cualquier dimensión n como un politopo n -dimensional o n -politopo. Por ejemplo un polígono bidimensional es un 2-politopo y un poliedro tridimensional es un 3-politopo.

coincide con el grupo rotacional $Aut(F) = Rot(F)$, ó el grupo de automorfismos coincide con el grupo formado por la simetrías que conservan la orientación y aquellas que la invierten, es decir, $Aut(F) = Rot(F) \cup Rot(F)\tau \cong Rot(F) \times \mathbb{Z}_2$ donde τ es una reflexión.

En 1993 Fowler, Manolopoulos, Redmond y Ryan obtuvieron una lista de exactamente los 28 grupos que se pueden obtener en el automorfismo de grupos de los fullerenos, dando ejemplos, para cada uno de los 28 grupos, de fullerenos que verifican la regla del pentágono aislado IPR cuyo grupo de simetrías es el dado.

8. Consideraciones matemáticas

Como comentamos en la introducción, en el trabajo hemos seguido el orden de abstracción de las ideas en el que éstas se han ido desarrollando. De las primeras presentaciones de la teoría en revistas del ámbito físico-químico, con menos rigor matemático, a la sistematización matemática de los conceptos.

Así, a pesar de la imprecisión en la geometría de los fullerenos, todos los resultados presentados a lo largo de la sección son válidos; ya que quedan comprobados desde la teoría de grafos. Como vimos los teselados de los fullerenos no están constituidos por polígonos regulares, ya que, entre otros motivos, las longitudes de los enlaces entre los carbonos varían y además éstos enlaces son rectos y no curvos, como puede parecer en las ilustraciones, dando lugar a que los átomos de carbono no sean coplanarios. Como habíamos señalado, es posible pasar de la visión geométrica de la molécula como tal a la teoría de grafos mediante diferentes técnicas, como la proyección estereográfica, y éste enfoque resulta ser el mejor posible para estudiar las propiedades de los fullerenos; se presenta con gran rigor y carece de importancia aquello que restaba precisión en el enfoque geométrico. Finalmente, gracias al teorema de Mani se establece la relación entre el grupo de automorfismos del grafo con el grupo de automorfismos de los fullerenos y de esta forma podemos relacionar ambas secciones, aunque no olvidemos que los grupos son “aproximados”, asumiendo que las aristas son de igual longitud en algunos casos.

Una de las mayores dificultades que se nos han presentado ha sido la de traducir al lenguaje y precisión matemática los artículos, ya que la mayor parte están redactados desde el campo físico-químico, en donde no existen las definiciones, teoremas y demostraciones tal y como estamos acostumbrados a tratar desde las matemáticas. Por citar un ejemplo,

"Los fullerenos se describen como moléculas en forma de jaula, con simetría pseudoesférica consistentes en pentágonos y hexágonos, siendo (en la mayor parte de los casos) poliedros convexos trivalentes, con exactamente tres aristas (los enlaces) uniendo los vértices, ocupados por átomos de carbono". [14]

La teoría de grafos da el rigor que esta descripción no tiene y el teorema de Mani permite entender el concepto de simetría.

A lo largo de todo el trabajo hemos seguido la misma estructura, comenzando desde el caso más sencillo hasta lo más complejo, alcanzando el rigor que cabe esperar de un texto de carácter matemático.

Con todo ello podemos decir que los fullerenos son objeto de estudio no solo de carácter químico como se trataba en un principio, si no que dan lugar a problemas puramente matemáticos que hoy en día quedan abiertos. En este documento hemos tratado de recoger todas aquellas propiedades básicas para describir éstas moléculas desde el punto de vista matemático, pero es un tema en el que se puede profundizar tanto como uno desee.

Referencias

- [1] Alcca, F.: *Estructura y síntesis de nanotubos de carbono*, Tesis Doctoral. Universidad Nacional Mayor San Marcos, Lima, Perú, 2005.
- [2] Alegret, N.; Rodriguez-Forte, A.; Poblet, J.M.: *Sinfonía de fullerenos: la magia de la encapsulación*, *A. Quím.* **110** (2014) 121-130.
- [3] Ardanza-Trevijano, S.; Arsuaga, J.; Crespo, J.A.; Extremiana, J.I.; Hernández, L.J.; Rivas, M.T.; Roca, J.; Vázquez, M.: *Invariantes topológicos en el ADN, los Fullerenos y la Teoría de Elección Social*, *La gaceta de la RSME* **Vol. 10.3** (2007) 611-632.
- [4] Bandyopadhyay, S.: *Construction and Properties of the Icosahedron*, Preprint 2013.
- [5] Benedek, G.; Bernasconi, M.: *Fullerenes: topology and structure*, **Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology**, J.A. Schwarz, C. Contescu, and K. Putyera, Eds., Marcel Dekker Inc., 2004.
- [6] Bethune, D.S.; Kiang, C.H.; De Vries, M.S.; Gorman, G.; Savoy, R.; Vázquez, J.; Beyers, R.: Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls, *Nature* **363** (1993) 605-606.
- [7] Carranza, E.P.: Grupo de movimientos de los poliedros regulares, *Gaceta Mat.* **22** (1970), 75-83.
- [8] Gan, L.; Zhao, J.; Hui, Q.: *Nonclassical fullerenes with a heptagon violating the pentagon adjacency penalty rule*, *Journal of Computational Chemistry* **31** (2010), 1715-1721,
- [9] Iijima, S.; Ichihashi, S.: *Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter*, *Nature* **363** (1993) 603-605.
- [10] Klavdija, K.; Dragan, M.; Dušanka, J.: *Fullerenes via their automorphism*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* **63** (2010) 267-282.
- [11] Kroto, W.; Heath, J.; O'Brien, S.; Curl, R.; Smalley, R.: *C60: Buckminsterfullerene*, *Nature* **318** (1985) 162-163.
- [12] Martín, N.: *Sobre fullerenos, nanotubos de carbono y grafenos*, *Arbor* **187** (2011), 115-131.
- [13] Massey, W.S.: **Introducción a la topología algebraica**, *Reverté* (Barcelona) 1972.
- [14] Schwerdtfeger, P.; Wirz, L.; Avery, J.: The topology of fullerenes, *WIREs Computational Molecular Science* **5** (2015), 96-145.

- [15] Spanier, E.H.: *Algebraic Topology*. Berlin: Springer. (1995) p.179

Apuntes de asignaturas de la UC.

- [16] Apuntes de Matemática Discreta curso 2012-2013.
[17] Apuntes de Geometría, Arte y Naturaleza curso 2010-2011.
[18] Apuntes de Teoría Global de Superficies curso 2012-2013.
[19] Apuntes de Estructuras Algebraicas curso 2011-2012.

Documentos electrónicos.

- [20] Blog Gaussianos: ¿La fórmula de Euler la descubrió Descartes?
<http://gaussianos.com/la-formula-de-euler-%C2%BFla-descubrio-descartes/>
- [21] Math and the Art of M. C. Escher
http://euler.slu.edu/escher/index.php/Math_and_the_Art_of_M._C._Escher
- [22] Wikipedia: Defecto angular
<https://math.berkeley.edu/~giventh/difgem.pdf>
http://en.wikipedia.org/wiki/Angular_defect#Descartes.27_theorem http://en.wikipedia.org/wiki/Icosahedral_symmetry
http://es.wikipedia.org/wiki/August_Kekul%C3%A9
- [23] Wikipedia: Fullerene.
<http://en.wikipedia.org/wiki/Fullerene>
- [24] Wikipedia: C70 Fullerene.
http://en.wikipedia.org/wiki/C70_fullerene
- [25] Wikipedia: Archimedean solid.
http://en.wikipedia.org/wiki/Archimedean_solid
- [26] The symmetry group of the fullerene C_{60}
http://www.mathe2.uni-bayreuth.de/frib/html/fullerene/full11_3.html