



ISTITUTO UNIVERSITARIO DI STUDI SUPERIORI

CORSI ORDINARI

CLASSE DI SCIENZE E TECNOLOGIE

Fullereni, simmetrie e colorazioni

Relatore:

Prof. Ludovico Pernazza

Correlatore:

Prof. Franco Brezzi

**Tesi di diploma di
Andrea Moiola**

Anno accademico 2007/2008

Fullereni, simmetrie e colorazioni

Andrea Moiola

27 ottobre 2008

Indice

| | |
|--|-----------|
| Introduzione | 2 |
| 1 Definizioni e notazione | 3 |
| 1.1 Le colorazioni dei poligoni | 5 |
| 1.2 Notazione per i gruppi algebrici | 7 |
| 2 I fullereni planari | 8 |
| 2.1 La costruzione di Goldberg-Coxeter dei fullereni sferici | 9 |
| 2.2 Classificazione delle colorazioni invarianti | 10 |
| 2.3 La famiglia PPI | 12 |
| 2.3.1 Non esiste una colorazione con $G_p = T_h$ | 13 |
| 2.3.2 La colorazione ottimale | 15 |
| 2.3.3 I casi di $GC_{2,0}$ e $GC_{3,0}$ | 17 |
| 2.4 La famiglia PPO | 18 |
| 2.4.1 Non esiste una colorazione con $G_p = T_h$ | 18 |
| 2.4.2 Le colorazioni simmetriche | 20 |
| 2.4.3 Il caso di $GC_{1,1}$ | 21 |
| 2.5 I fullereni sferici chirali | 22 |
| 3 I fullereni non planari | 26 |
| 3.1 I fullereni toroidali | 26 |
| 3.2 I fullereni non orientabili | 30 |
| 3.3 Un grafo toroidale contenente ettagoni | 32 |
| Bibliografia | 34 |

Introduzione

Molto spesso, assemblando moduli origami per costruire dei poliedri particolarmente complessi, capita di chiedersi: ho scelto di unire i moduli dei diversi colori secondo un certo schema, ma ne esistono altri migliori? Esiste una colorazione che sia in assoluto la migliore? Quali sono dei criteri ragionevoli secondo cui una colorazione è preferibile rispetto ad un'altra?

In questa piccola tesi ho provato a dare una risposta parziale a queste domande. Ci limitiamo a studiare poliedri i cui grafi sono fullereni, cioè grafi cubici formati da pentagoni ed esagoni. Visto che questi solidi sono facilmente costruibili ad esempio con i moduli di tipo *PHiZZ* [16], ci interessano solo le colorazioni per spigoli, in particolare le 3-colorazioni. I criteri principali per preferire una colorazione ad un'altra saranno la sua simmetria e la presenza o l'assenza di pattern particolari.

Nonostante esistano numerosi origami modulari corrispondenti a fullereni o a poliedri simili, è molto difficile trovare discussioni e risultati che riguardino la scelta delle colorazioni. Un esempio è [15], in cui ci si limita a costruire una colorazione per ogni fullerene sferico senza indagarne le proprietà. D'altro canto esistono diversi articoli che studiano alcune caratteristiche dei grafi di fullereni per applicazioni alla chimica, ma sono in generale abbastanza distanti da quanto riguarda le colorazioni. Le proprietà più studiate sono quelle che riguardano i perfect matching, i cicli hamiltoniani, i cosiddetti "zigzag", lo spettro della matrice di adiacenza e le enumerazioni efficienti dei fullereni planari. Le tecniche utilizzate e gli obiettivi perseguiti in questa tesi sono invece più vicini ad altri ambiti legati alla teoria dei grafi e al calcolo combinatorio: la teoria di Ramsey, il combinatorial design, i gruppi di simmetrie puntuali e cristallografici. Le colorazioni dei grafi per vertici e per spigoli sono studiate in molti ambiti teorici e applicativi, dall'informatica all'ottimizzazione

Nel Capitolo 1 introduciamo alcune definizioni e proprietà di base. Nel Capitolo 2 studiamo e classifichiamo i fullereni che possono essere tracciati su una sfera, dimostriamo che ognuno di questi possiede una colorazione e che la massima simmetria possibile per una colorazione è tetraedrale chirale, cioè senza riflessioni. In diversi casi vedremo come costruire una colorazione con la simmetria massima e con altre proprietà. Nel Capitolo 3 analizziamo e classifichiamo i fullereni tracciati su un toro, per ognuno di essi dimostriamo l'esistenza di una 3-colorazione per spigoli e ne osserviamo almeno una con la massima regolarità. Per ogni coppia di interi positivi a e b , dimostriamo che è possibile costruire un fullerene toroidale colorato in cui gli spigoli di due coppie di colori formano un link torico di parametri (a, b) . Infine commentiamo brevemente i fullereni tracciati su superfici non orientabili: sul piano proiettivo mostriamo un esempio di fullerene non 3-colorabile mentre sulla bottiglia di Klein dimostriamo l'esistenza di una colorazione per ogni grafo.

Capitolo 1

Definizioni e notazione

Consideriamo un grafo come una coppia di insiemi, quello dei vertici V e quello degli spigoli E , con $E \subset V^2$, in modo tale che $e = (v_1, v_2)$ è lo spigolo che unisce i vertici v_1 e v_2 . Non consideriamo i *loops*, quindi $(v, v) \notin E$, e consideriamo gli spigoli senza una direzione privilegiata, quindi se $(v, w) \in E$ allora $(w, v) \in E$.

Diciamo che un grafo è *tracciato* su una superficie quando può essere rappresentato come un suo sottoinsieme, in modo tale che ad ogni vertice corrisponda un punto, e allo spigolo (v, w) un arco che congiunge i punti corrispondenti ai vertici v e w , e gli spigoli non si intersechino. Quando gli archi di un grafo tracciato su una superficie delimitano regioni semplicemente connesse parleremo di poliedro, e chiameremo tali regioni facce. Queste non sono però necessariamente da intendere come facce piane, come negli usuali poliedri.

Diciamo che un grafo è n -regolare se ogni vertice è incidente a n spigoli, e n -connesso se togliendo meno di n vertici il grafo rimane connesso. Un grafo 3-regolare si dice cubico.

I grafi che prenderemo in considerazione sono i **fullereni**, definiti come i grafi cubici, 3-connessi, tracciati su una superficie in modo tale che tutte le facce individuate dal grafo siano omeomorfe ad un disco aperto di \mathbb{R}^2 e possiedano esattamente 5 o 6 spigoli.

Questo tipo di poliedri è molto noto e studiato nella chimica fisica, poiché esistono delle molecole composte unicamente di carbonio la cui struttura è rappresentata con questo tipo di grafi. La più nota di queste molecole, scoperta sperimentalmente nel 1985 da Kroto, Curl e Smalley, è il C_{60} , detta anche fullerite o buckminsterfullerene. Il suo grafo corrisponde a quello di un icosaedro tronco o, come vedremo, a $GC_{1,1}$. La parola fullerene deriva dal nome di Buckminster Fuller, architetto noto per la costruzione di cupole geodetiche, strutture rappresentabili con un grafo il cui duale è proprio un fullerene. Molti fullereni, in particolare quelli più "regolari", sono facilmente rappresentabili mediante origami modulari, ad esempio con i moduli di tipo PHiZZ, [16].

Poiché deve essere soddisfatta la relazione di Eulero

$$\chi = v - e + f,$$

un fullerene può essere tracciato solo su quattro differenti superfici compatte: la sfera S^2 , il toro T^2 , il piano proiettivo reale P^2 e la bottiglia di Klein K^2 , [5].

Chiamiamo v il numero dei vertici, e quello degli spigoli, f_p il numero dei pentagoni e f_e quello degli esagoni. Valgono chiaramente:

$$v = \frac{5f_p + 6f_e}{3}, \quad e = \frac{5f_p + 6f_e}{2}.$$

La caratteristica di Eulero della superficie su cui il grafo è tracciato è

$$\chi = v - e + f_p + f_l = \left(\frac{5}{3} - \frac{5}{2} + 1\right) f_p + (2 - 3 + 1) f_e = \frac{1}{6} f_p.$$

Quindi deve essere $\chi \geq 0$, e le uniche superfici compatte che rispettano questo requisito sono queste quattro. In particolare la superficie su cui il fullerene è tracciato determina il numero delle facce pentagonali: rispettivamente 12 pentagoni su una sfera, 6 sul piano proiettivo e 0 altrimenti.

Una **n -colorazione per spigoli** di un grafo è l'assegnazione ad ogni suo spigolo di un colore, cioè di un elemento dell'insieme $C = \{1, 2, \dots, n\}$, in modo tale che due spigoli adiacenti abbiano colori diversi. Per semplicità chiameremo semplicemente colorazione di un grafo una sua 3-colorazione per spigoli. In un fullerene, assegnata una colorazione, ogni vertice è incidente esattamente ad uno spigolo per ogni colore. Nelle immagini rappresenteremo sempre il colore 1 in rosso, il 2 in giallo e il 3 in blu.

Per ogni grafo G è possibile definire l'**indice cromatico** $\chi'(G)$, il numero minimo n per cui è possibile trovare una n -colorazione per spigoli. Detto ρ il numero massimo di spigoli adiacenti ad un vertice, il teorema di Vizing, [6, Teorema 5.3.2], [11, Teorema 5.1], afferma che per ogni grafo $\chi'(G)$ è uguale a ρ oppure a $\rho + 1$. I grafi per cui $\chi'(G) = \rho$ si dicono di classe 1, altrimenti di classe 2. La classificazione dei grafi di classe 1 e 2 è un problema aperto e NP-completo. Dimosteremo che tutti i fullereni tracciati su superfici orientabili e sulla bottiglia di Klein sono di classe 1, mentre mostreremo un noto controesempio di classe 2 per i fullereni proiettivi.

Data una 3-colorazione per spigoli di un grafo cubico, gli spigoli corrispondenti ad un colore formano un sottografo 1-regolare contenente ogni vertice, cioè un *perfect matching*. L'insieme degli spigoli corrispondenti a due colori forma un sottografo 2-regolare, cioè un insieme di cicli. Se questo sottografo è composto da un unico ciclo, questo è un **ciclo hamiltoniano**, cioè un ciclo connesso che attraversa ogni vertice del grafo.

Dato un grafo con gruppo degli automorfismi G e data una sua colorazione, consideriamo due sottogruppi significativi di G : il gruppo degli automorfismi che conservano la colorazione G_c e il gruppo degli elementi di G che conservano la colorazione a meno di permutazione dei tre colori G_p . È evidente che G_c è un sottogruppo di G_p , è anche un sottogruppo normale. Inoltre il gruppo quoziente G_p/G_c deve essere isomorfo ad un sottogruppo di S_3 , considerato come gruppo delle permutazioni dei tre colori.

Con un piccolo programma realizzato con *Matlab*, dato un grafo generico, siamo in grado di calcolare tutte le sue n -colorazioni (per spigoli, vertici o facce). Il programma è particolarmente efficiente per le colorazioni per spigoli

dei grafi cubici, in particolare per i fullereni. Un grafo non molto grande però può avere un numero molto alto di colorazioni, o comunque richiedere un tempo di elaborazione molto lungo. Ad esempio un fullerene sferico con 120 spigoli ($GC_{2,0}$) ha 57.720 colorazioni (a meno di permutazione dei colori), un fullerene tracciato sul piano proiettivo con 135 spigoli ($\mathbb{P}GC_{3,0}$) ha ben 1.254.600 colorazioni. Considerazioni di simmetria permettono di ridurre di 5 volte il numero delle colorazioni per ogni poliedro avente una simmetria pentagonale e in questo modo per il primo fullerene sono necessari circa 4 minuti di calcolo su un personal computer, per il secondo circa 7 ore. Il numero delle colorazioni, e soprattutto il tempo, aumentano molto velocemente in funzione della dimensione del grafo e non è possibile usare il programma per poliedri troppo grandi. Non si può nemmeno sperare di riuscirci migliorando l'algoritmo: il risultato è comunque una matrice di grandi dimensioni, ad esempio nel caso di un fullerene sferico con 270 spigoli ($GC_{3,0}$) la matrice è dell'ordine del centinaio di gigabytes.

Per i grafi di cui conosciamo il gruppo degli automorfismi, un altro programma permette di distinguere le colorazioni che non possono essere identificate da automorfismi. Quindi possiamo avere a disposizione le colorazioni che sono effettivamente distinte tra loro. Nel caso dei fullereni sferici tale auto-omeomorfismo può essere indotto da una trasformazione lineare di \mathbb{R}^3 .

Poiché il nostro scopo ultimo è la costruzione di un poliedro origami, siamo interessati a trovare le colorazioni di un fullerene che siano ottimali rispetto a qualche parametro. La prima caratteristica che vogliamo ottenere è la simmetria: se una colorazione ha un gruppo di simmetria molto alto allora significa che poliedro ha lo stesso aspetto osservato da diverse posizioni, quindi è più "regolare". Una simmetria di tipo cilindrico su un poliedro tracciato su una sfera è meno interessante delle simmetrie corrispondenti ai solidi platonici, poiché individua una direzione privilegiata e due punti, i poli, che devono essere conservati da ogni trasformazione. Un'altra caratteristica importante è la presenza o l'assenza di pattern piacevoli o meno: vedremo che alcuni fullereni sferici e tutti quelli sul toro possono essere colorati in modo che ogni esagono abbia due spigoli per ogni colore, evitando quindi gli esagoni più irregolari. La presenza di cicli hamiltoniani costituiti da classi di colori è un'altra proprietà importante, soprattutto per i fullereni toroidali. Queste caratteristiche possono sembrare astratte, ma osservando un poliedro origami sono molto evidenti e il loro studio ha sicuramente applicazione immediata.

1.1 Le colorazioni dei poligoni

Prima di passare alle colorazioni dei poliedri, vediamo quelle dei poligoni che li compongono, pentagoni ed esagoni. Se il grafo è tracciato su una superficie orientabile (S^2 o T^2) consideriamo gli spigoli di ogni poligono come se fossero letti in senso orario sulla superficie esterna del solido.

I pentagoni sono fatti tutti allo stesso modo: due spigoli di un colore, due di un'altro e l'ultimo del colore rimanente. Chiamiamo pentagoni di **tipo** 1-6 quelli con gli spigoli colorati secondo la tabella 1.1. I tipi di pentagono sono a due a due simmetrici: quelli di tipo 1 e 4 diremo che appartengono alla prima

Tabella 1.1: I tipi di pentagoni per colore degli spigoli.

| | | | | | |
|--------|---|---|---|---|---|
| tipo 1 | 1 | 2 | 3 | 2 | 3 |
| tipo 2 | 2 | 3 | 1 | 3 | 1 |
| tipo 3 | 3 | 1 | 2 | 1 | 2 |
| tipo 4 | 1 | 3 | 2 | 3 | 2 |
| tipo 5 | 2 | 1 | 3 | 1 | 3 |
| tipo 6 | 3 | 2 | 1 | 2 | 1 |

famiglia, quelli di tipo 2 e 5 alla seconda famiglia e quelli di tipo 3 e 6 alla terza famiglia. Chiamiamo spigolo **dispari** quello di colore diverso dagli altri quattro.

Per gli esagoni esistono forme molto diverse, addirittura 14 tipi, raggruppati in quattro famiglie (vedi tabella 1.2). Gli esagoni della prima famiglia contengono due soli colori, quelli della seconda uno spigolo di un colore, due di un altro e tre dell'ultimo, quelli della terza e della quarta famiglia hanno due spigoli per colore. Esteticamente quelli della seconda famiglia sono i più irregolari, e un parametro di "bellezza" di una colorazione è la loro assenza.

Tabella 1.2: Le famiglie e i tipi di esagoni.

| | | | | | | | |
|-------------------------|---------|---|---|---|---|---|---|
| 1 ^a famiglia | tipo 1 | 1 | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 |
| | tipo 2 | 1 | 3 | 1 | 3 | 1 | 3 |
| | tipo 3 | 2 | 3 | 2 | 3 | 2 | 3 |
| 2 ^a famiglia | tipo 4 | 1 | 2 | 1 | 2 | 1 | 3 |
| | tipo 5 | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 | 3 |
| | tipo 6 | 1 | 3 | 1 | 3 | 1 | 2 |
| | tipo 7 | 3 | 1 | 3 | 1 | 3 | 2 |
| | tipo 8 | 2 | 3 | 2 | 3 | 2 | 1 |
| | tipo 9 | 3 | 2 | 3 | 2 | 3 | 1 |
| 3 ^a famiglia | tipo 10 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 |
| | tipo 11 | 1 | 3 | 2 | 1 | 3 | 2 |
| 4 ^a famiglia | tipo 12 | 1 | 2 | 3 | 1 | 3 | 2 |
| | tipo 13 | 2 | 1 | 3 | 2 | 3 | 1 |
| | tipo 14 | 3 | 1 | 2 | 3 | 2 | 1 |

Si dimostra facilmente, verificando tutte le combinazioni possibili, una cosa che si rivela interessante per i fullereni sferici. Se un grafo contiene un pentagono circondato da cinque esagoni, fissata una colorazione (ad esempio del tipo 3) per il pentagono, esistono esattamente quattro colorazioni per i cinque esagoni che non contengono elementi della seconda famiglia. La tabella 1.3 mostra a quali famiglie appartengono i cinque esagoni nei quattro casi possibili. Le ultime due colorazioni sono tra loro speculari. Da questo fatto segue che tutti fullereni sferici senza esagoni della seconda famiglia devono contenerne della terza e della quarta, e non necessariamente della prima.

Tabella 1.3: Le famiglie dei cinque esagoni che circondano un pentagono fissato.

| | | | | | |
|---------------------|---|---|---|---|---|
| prima colorazione | 4 | 1 | 1 | 4 | 3 |
| seconda colorazione | 3 | 4 | 4 | 3 | 3 |
| terza colorazione | 4 | 4 | 4 | 3 | 4 |
| quarta colorazione | 3 | 4 | 4 | 4 | 4 |

1.2 Notazione per i gruppi algebrici

Useremo queste notazioni per indicare i gruppi algebrici finiti che ci interessano:

C_n il gruppo ciclico di ordine n generato da una rotazione di $2\pi/n$;

D_n il gruppo diedrale di $2n$ elementi;

S_n il gruppo simmetrico delle permutazioni di n oggetti ($n!$ elementi);

A_n il gruppo alterno delle permutazioni pari di n oggetti ($n!/2$ elementi);

T il gruppo delle rotazioni del tetraedro (12 elementi, $T = A_4$);

T_h il gruppo tetraedrale completo (24 elementi, $T_h = T \times C_2$);

O il gruppo delle rotazioni dell'ottaedro (24 elementi, $O = S_4$);

O_h il gruppo ottaedrale completo (48 elementi, $O_h = O \times C_2$);

I il gruppo delle rotazioni dell'icosaedro (60 elementi, $I = A_5$);

I_h il gruppo icosaedrale completo (120 elementi, $I_h = I \times C_2$).

Capitolo 2

I fullereni planari

I fullereni planari sono quelli che possono essere tracciati su una sfera o equivalentemente (mediante proiezione stereografica) sul piano.

In questo capitolo proviamo l'esistenza di una colorazione per ogni fullerene planare e dimostriamo che la massima simmetria possibile per queste colorazioni è tetraedrale chirale ($G_p = T$). In diversi casi costruiamo esplicitamente una colorazione con questa regolarità, ne osserviamo alcune semplici proprietà e infine studiamo nel dettaglio le colorazioni di alcuni fullereni tra quelli più noti agli origamisti. Il Teorema 2.3 riassume i principali risultati del capitolo.

Per ogni grafo appartenente a questa categoria esiste sempre almeno una 3-colorazione per spigoli. Questo risultato non è banale, anzi è equivalente al celebre Teorema dei quattro colori. La dimostrazione è istruttiva perché verrà ripresa nella Sezione 2.5.

Teorema 2.1 (Tait, 1880). *Ogni fullerene planare è 3-colorabile per spigoli.*

Dimostrazione. Se il grafo viene tracciato sul piano reale, divide quest'ultimo in regioni connesse che, per il teorema citato, possono essere colorate con quattro diversi colori. Chiamiamo questi colori come gli elementi del gruppo $C_2 \times C_2$: $(0,0)$, $(0,1)$, $(1,0)$, $(1,1)$. Assegniamo anche ad ogni spigolo uno di questi colori, quello ottenuto sommando (con le regole di $C_2 \times C_2$) i colori delle due facce adiacenti ad esso. Nessuno spigolo sarà del colore $(0,0)$ perché le due facce interessate devono essere diverse tra loro. Spigoli adiacenti avranno colori diversi perché si uniscono in un vertice di grado tre, quindi tutte le tre facce coinvolte devono avere colori diversi tra loro. \square

Per la dimostrazione del fatto che ad ogni 3-colorazione per spigoli corrisponde una 4-colorazione per facce si veda il Teorema 4.4 di [11].

Esistono numerosi fullereni planari; il più semplice è il grafo del dodecaedro (20 vertici, 30 spigoli, 12 pentagoni, 0 esagoni). Per ogni $n \geq 0$, $n \neq 1$, pari esiste almeno un fullerene planare con $20 + 2n$ vertici, $30 + 3n$ spigoli e n esagoni, [5]. Il numero dei fullereni non isomorfi tra loro aventi lo stesso numero di elementi aumenta rapidamente all'aumentare del numero dei vertici, circa come n^9 . Esistono diversi algoritmi per classificare tutti i fullereni fino ad un dato ordine [12, 1, 19].

Questi fullereni planari generici però sono molto irregolari, in generale possono addirittura non avere automorfismi non banali. Ci interessiamo di una categoria più ristretta di grafi. Definiamo **fullereni sferici** o **buckyballs** tutti i fullereni planari che hanno gruppo degli automorfismi isomorfo a I o I_h . Questa è la simmetria massima che può avere un fullerene. In questo caso è possibile tracciare il grafo su una sfera in modo tale che i centri dei pentagoni siano disposti come i vertici di un icosaedro. Se il gruppo di simmetria è I_h , il poliedro è indistinguibile dalla sua immagine mediante una riflessione, pertanto lo chiameremo **achirale**, in caso contrario lo chiameremo **chirale**.

2.1 La costruzione di Goldberg-Coxeter dei fullereni sferici

Per i fullereni sferici esiste una classificazione molto semplice introdotta da Goldberg in [13] e ripresa da Coxeter in [4]. Dati due numeri naturali, vediamo come è possibile costruire un grafo, che denoteremo con $GC_{k,l}$.

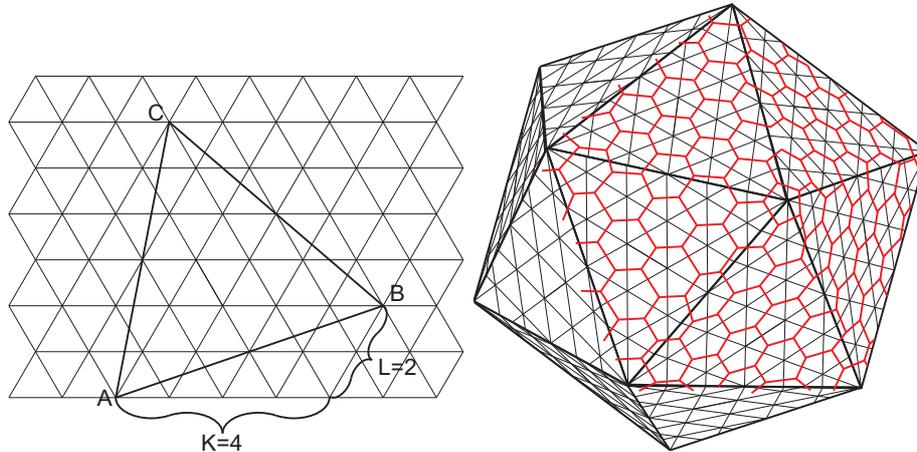
Consideriamo la tassellazione del piano formata da triangoli equilateri e due numeri naturali $k \geq 1$, $0 \leq l \leq k$. A partire da un vertice A percorriamo k spigoli della tassellazione in una direzione, poi cambiamo direzione ruotando di 60° in senso antiorario, procediamo di l spigoli e arriviamo al vertice B . Da qui ruotiamo di altri 60° , ripetiamo il procedimento e arriviamo al punto C . Se ripetiamo ancora una volta ci ritroviamo nel punto A . Abbiamo così individuato un triangolo equilatero più grande di quelli che costituiscono il reticolo. Ora sostituiamo ad ogni faccia di un icosaedro questo grande triangolo ABC con tutti i piccoli triangoli della tassellazione originale al suo interno. Incollando a due a due le parti dei triangoli lungo gli spigoli del dell'icosaedro otteniamo un poliedro costituito da soli triangoli. Consideriamo il suo duale: il poliedro che ha per vertici i centri delle facce del poliedro di partenza, e in cui due vertici sono adiacenti se le facce corrispondenti lo sono nel poliedro originale. In questo modo abbiamo ottenuto un fullerene sferico, che chiameremo $GC_{k,l}$.

Questo procedimento si può generalizzare per costruire grafi complessi a partire da un qualsiasi grafo 3-regolare tracciato su una superficie orientabile, come analizzato nel dettaglio in [8]. Il caso più semplice è $GC_{1,0}$ e corrisponde al dodecaedro.

Se i lati dei triangoli più piccoli hanno lunghezza unitaria, il punto A è l'origine e il primo segmento percorso è orientato nella direzione positiva dell'asse delle ascisse, il punto B ha coordinate $(k + \frac{1}{2}l, \frac{\sqrt{3}}{2}l)$ e il segmento AB è lungo $\sqrt{k^2 + kl + l^2}$. Indichiamo $t(k,l) = k^2 + kl + l^2$, il rapporto tra l'area del triangolo ABC e quella di un triangolo della tassellazione. Il grafo ottenuto ha $20t$ vertici, $30t$ spigoli, 12 pentagoni e $10(t-1)$ esagoni. Il grafo ha simmetria I_h se $l = 0$ oppure se $k = l$; queste due condizioni costituiscono due famiglie importanti di fullereni. In caso contrario il poliedro ottenuto è chirale, cioè è diverso dal proprio riflesso e il gruppo degli automorfismi è solo I . Il simmetrico di $GC_{k,l}$ è $GC_{l,k}$.

In [13] e nel Teorema 5.2(iv) di [8], con semplici considerazioni di simmetria, si dimostra il seguente notevole risultato.

Figura 2.1: La costruzione di $GC_{4,2}$.



Teorema 2.2 (Goldberg, 1937). *Per ogni fullerene sferico F esiste una coppia di interi $k \geq 1$, $0 \leq l \leq k$, tale che F è isomorfo a $GC_{k,l}$.*

Per il seguito definiamo per un fullerene sferico il suo **tile** come l'insieme costituito dai tre pentagoni corrispondenti a facce mutuamente adiacenti nel dodecaedro inscritto (cioè un terzetto di pentagoni disposti a distanza minima) e dagli esagoni compresi tra essi. Ogni tile costituisce la parte del poliedro corrispondente ad una faccia dell'icosaedro inscritto in esso. Chiamiamo **interfaccia** l'insieme degli esagoni condivisi da due tiles diversi. Chiamiamo spigoli di interfaccia gli spigoli compresi tra due esagoni della stessa interfaccia oppure tra uno di questi esagoni e un pentagono. Un fullerene sferico può essere costruito assemblando venti tiles uguali lungo le rispettive interfacce.

2.2 Classificazione delle colorazioni invarianti

Ora vogliamo studiare quali di questi grafi ammettono una 3-colorazione per spigoli con una buona regolarità. Vediamo qual è la massima regolarità possibile in generale. Ricordiamo che ogni pentagono colorato possiede uno spigolo dispari distinto dagli altri. Esistono quindi 12 spigoli dispari che devono essere conservati da G_p . Fissato un pentagono A, per ogni pentagono B esiste un'unica rotazione che trasforma A in B e ne conserva lo spigolo dispari, ed esiste un'unica simmetria in $I_h \setminus I$ che fa lo stesso. Quindi G_p e G_c possono avere al massimo 24 elementi, di cui al massimo 12 rotazioni.

Poiché $I = A_5$ non contiene elementi di ordine 6, i suoi sottogruppi di ordine 12 devono essere isomorfi a T il gruppo tetraedrale. Vogliamo capire quali sono i fullereni sferici tali che $G_p = T \times C_2 = T_h$ o $G_p = T$, le massime regolarità possibili. Vedremo nelle prossime sezioni che il primo caso non è mai verificato mentre il secondo in molti casi sì. Gli elementi di un qualsiasi sottogruppo di I isomorfo a T sono quelli che fissano uno dei tetraedri iscritti

nell'icosaedro e permutano gli altri quattro. Qualunque simmetria rispetto a un piano non conserva i tetraedri, quindi è naturale pensare che possiamo avere un gruppo $G_p = T$ ma non più grande.

I principali risultati che dimostreremo in questo capitolo si possono riassumere nel seguente teorema.

Teorema 2.3. *Il fullerene sferico $GC_{k,l}$ ammette una colorazione il cui gruppo delle simmetrie che permutano i colori è isomorfo a T quando*

(i) $l = 0, k \geq 1,$

(ii) $l = k,$ pari,

(iii) $l - k$ non è multiplo di 3 e almeno uno tra l e k è dispari.

Nel caso $k = l = 1$ non esistono colorazioni con gruppo di simmetria T e in nessun caso esistono colorazioni con gruppi di simmetria con più di dodici elementi.

La dimostrazione di questo teorema occuperà gran parte del capitolo. Nelle prossime due sezioni costruiremo esplicitamente le colorazioni corrispondenti ai punti (i) e (ii) del teorema e ne studieremo ulteriori proprietà relative agli esagoni che le compongono. Per quanto riguarda il punto (iii) dimostreremo nella Sezione 2.5 l'esistenza di una colorazione con questa simmetria e vedremo come costruirla.

Osserviamo che per un buckyball generico esistono solo poche colorazioni possibili per i pentagoni che rispettano una simmetria tetraedrale, cioè con $G_p = T$.

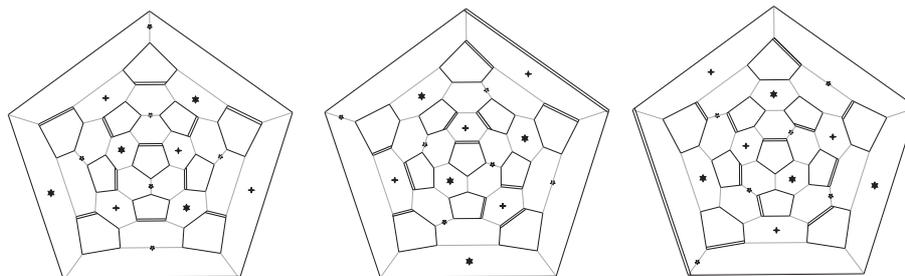
Lemma 2.4. *Gli spigoli dei dodici pentagoni di un fullerene sferico $GC_{k,l}$ colorato con simmetria I o I_h possono essere colorati in 9 modi diversi se il poliedro è achirale ($l = 0$ o $k = l$), in 15 modi diversi se è chirale, a meno di simmetria. I pentagoni saranno tutti dello stesso tipo rispettivamente in tre (poliedri achirali) o cinque (chirali) casi.*

Dimostrazione. Per iniziare fissiamo la colorazione di un pentagono, ad esempio dando a quello centrale (nella Figura 2.2) la colorazione del tipo 3 con lo spigolo dispari rivolto verso l'alto.

Il gruppo I ha cinque sottogruppi isomorfi a T e ognuno di questi contiene esattamente una rotazione di 180° intorno al punto medio di una delle cinque interfacce uscenti dal pentagono iniziale (che nel caso di $GC_{1,1}$ in Figura 2.2 si riducono a cinque spigoli). Facendo agire uno dei sottogruppi isomorfi a T , lo spigolo dispari del pentagono iniziale viene trasportato dagli undici elementi non banali in uno spigolo per ogni pentagono del grafo. Il sottogruppo può essere scelto in cinque modi diversi quindi esistono cinque configurazioni di spigoli dispari. Nel caso achirale quattro di queste configurazioni possono essere identificate a due a due da una riflessione lungo la retta verticale passante per il centro dell'immagine, quindi il numero delle configurazioni diverse si riduce a tre.

Il fatto che solo una di queste configurazioni è uguale alla propria immagine mediante riflessione, fa sì che solo questa configurazione permetterebbe ancora una simmetria $G_p = T \times C_2$.

Figura 2.2: Le tre configurazioni di spigoli dispari con simmetria tetraedrale nel caso achirale ($GC_{1,1}$). Le stelle a cinque punte rappresentano i centri delle rotazioni di 180° , quelle a quattro e sei punte i centri delle rotazioni di 120° . Se consideriamo T come il gruppo delle rotazioni di un tetraedro inscritto, questi ultimi due simboli indicano rispettivamente i vertici e i centri delle facce del tetraedro.



Ora supponiamo di avere una colorazione dei pentagoni del grafo con simmetria $G_p = T$. Il gruppo delle simmetrie che preservano i colori G_c è sottogruppo normale di questo, quindi deve essere isomorfo a T stesso, a $C_2 \times C_2$ o al gruppo banale. Questo ultimo caso è da escludere perché i dodici elementi del gruppo dovrebbero permutare i colori in dodici modi diversi, ma le permutazioni possibili dei tre elementi 1, 2 e 3 sono solamente sei. Nel caso in cui $G_c = G_p$ tutti i pentagoni sono dello stesso tipo, quindi abbiamo una colorazione per ogni configurazione degli spigoli dispari. Nel caso rimanente una particolare rotazione di 120° può causare la permutazione dei colori (123) oppure (132), e ad ognuna di queste corrisponde una colorazione di tutti i pentagoni. Esistono quindi 3×3 o 5×3 colorazioni rispettivamente nel caso achirale e chirale (ad esempio quelle achirali sono mostrate nella Figura 2.3).

Si osserva ancora che solo la prima delle nove colorazioni può permettere un gruppo di simmetrie $G_p = T_h$, dove le riflessioni scambiano i colori 1 e 2 mentre tutte le rotazioni conservano ogni colore.

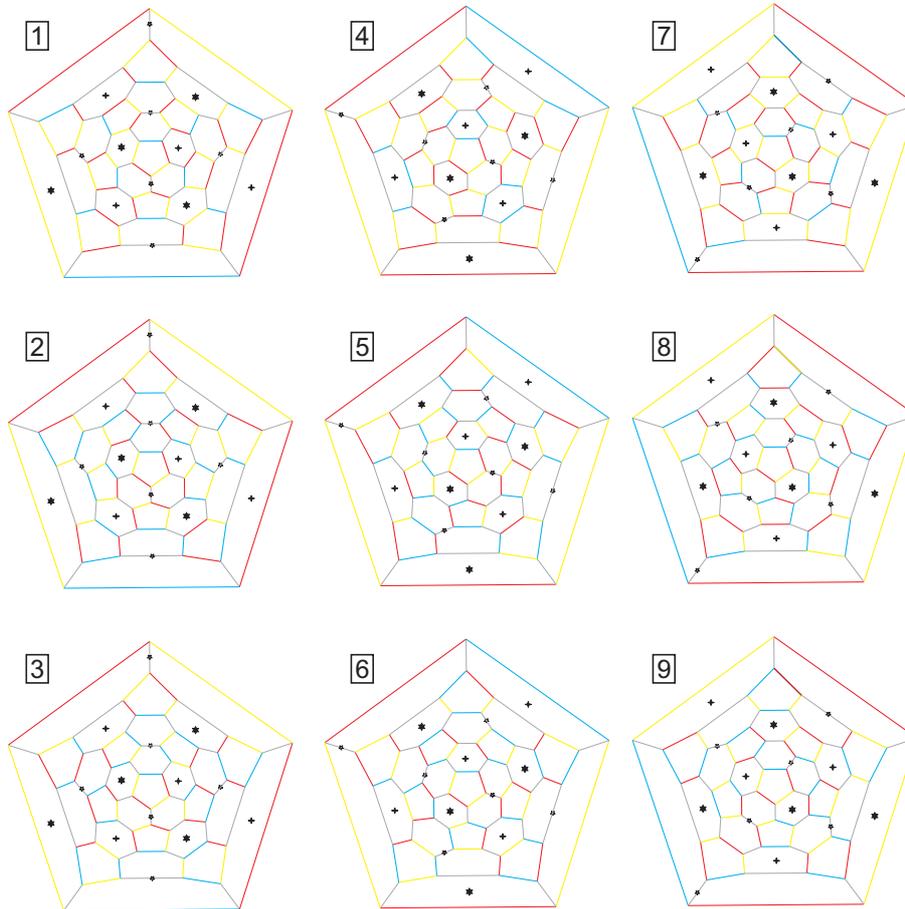
□

Dalla Figura 2.3 è chiaro però che nessuna di queste nove colorazioni simmetriche dei pentagoni permette una colorazione globale del poliedro nel caso raffigurato, cioè $GC_{1,1}$: infatti in nessuna di queste immagini è possibile colorare in modo coerente gli spigoli compresi tra due esagoni (in grigio nella figura). Questo dimostra il caso $k = l = 1$ del Teorema 2.3; nel seguito ci occuperemo dei casi restanti, cominciando dai fullereni achirali.

2.3 La famiglia PPI

La prima famiglia rilevante di fullereni sferici achirali è quella costituita dai grafi $GC_{k,0}$, con $k \geq 1$. Vengono chiamati PPI (*pentagons pointing-in*, [16]) perché i pentagoni rivolgono i vertici verso il centro dei tiles adiacenti. Il k -esimo buckyball PPI ha $20k^2$ vertici, $30k^2$ spigoli e $10(k^2-1)$ esagoni, il caso

Figura 2.3: Le nove colorazioni dei pentagoni con simmetria tetraedrale nel caso achirale ($GC_{1,1}$).



$k = 1$ corrisponde al dodecaedro e quello $k = 2$ al grafo della molecola C_{80} . Questi fullereni vengono spesso chiamati *chamfering* [18] o *k-inflation* [8] del dodecaedro. Per quest'ultimo poliedro la situazione è chiara:

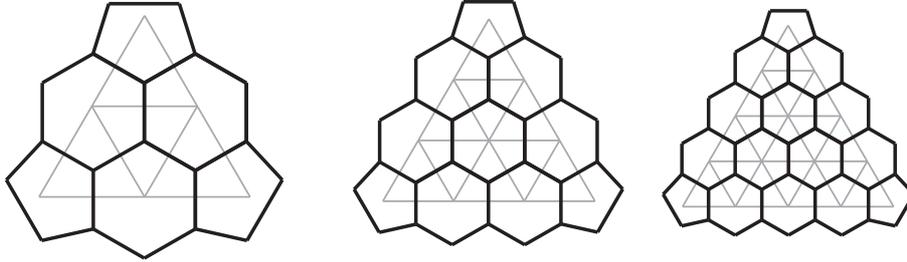
Proposizione 2.5. *Il dodecaedro, a meno di simmetrie, possiede un'unica 3-colorazione per spigoli e questa ha gruppi di simmetrie $G_c = C_2 \times C_2$ e $G_p = T$.*

Dimostrazione. Questo fatto può essere verificato facilmente a mano colorando il grafo. □

2.3.1 Non esiste una colorazione con $G_p = T_h$

Dimostriamo che non può esistere una colorazione di un fullerene sferico PPI con gruppo di simmetria con più di 12 elementi. Come visto prima l'unico

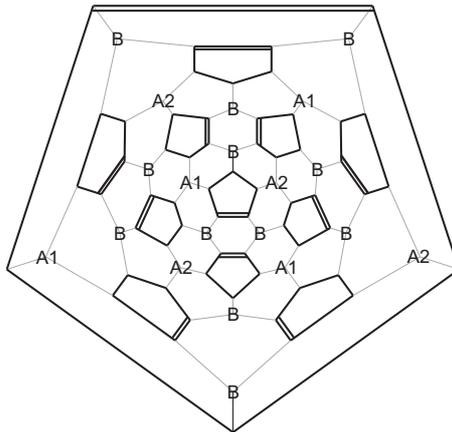
Figura 2.4: I tiles di $GC_{2,0}$, $GC_{3,0}$, $GC_{4,0}$ con i loro duali.



caso da escludere è quello $G_p = T_h$. Ipotizziamo per assurdo che G_p abbia proprio questa struttura. I pentagoni dovranno essere colorati come nella prima delle nove colorazioni in Figura 2.3, (ruotando ogni pentagono di 180°) con tutti i pentagoni uguali, dodici elementi conservano i colori (rotazioni) e altrettanti scambiano 1 e 2.

Osservando la disposizione degli spigoli dispari nella Figura 2.5 notiamo che esistono tipi diversi di tiles: chiamiamo tile di tipo B quelli in cui due dei tre pentagoni adiacenti rivolgono i propri spigoli dispari verso l'interno del tile e chiamiamo A gli altri. Questi ultimi possono essere distinti in due categorie, A1 e A2, speculari tra loro. Possiamo immaginare i tiles A1 come i vertici del tetraedro fissato da G_p e quelli A2 come i centri delle facce dello stesso tetraedro, oppure viceversa. I tiles A1 corrispondono alle stelle a sei punte nella Figura 2.2 e i tiles A2 a quelle a quattro punte.

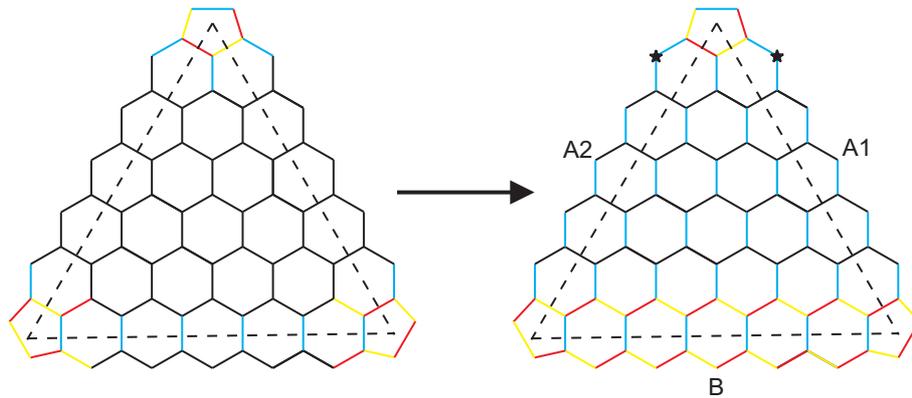
Figura 2.5: La disposizione dei tiles di tipo A1, A2 e B in un buckyball PPI.



Si verifica immediatamente che il gruppo $G_c = G_p \cap I = T$ agisce transitivamente su ognuno dei tre insiemi di tiles, mentre G_p completo scambia tra loro i tiles A1 e A2. Quindi i tiles dello stesso tipo devono avere la stessa colorazione, A1 e A2 devono essere simmetrici tra loro scambiando i colori 1 e 2.

L'interfaccia tra due tiles B è attraversata da un piano di simmetria di G_p , quindi i suoi spigoli sono punti fissi di una riflessione che scambia i colori 1 e 2, quindi sono tutti di colore 3. Questo fa sì che tutti gli spigoli del tile B perpendicolari all'interfaccia siano del colore 3 e quindi ci sia un'incompatibilità con gli spigoli incidenti al pentagono opposto, come illustrato nella Figura 2.6.

Figura 2.6: L'interfaccia tra tiles B fissa la colorazione degli spigoli verticali e crea un'incompatibilità in \star .



Abbiamo trovato un assurdo: non esiste nessuna colorazione con questa regolarità. Resta dimostrato il seguente risultato.

Lemma 2.6. *I fullereni sferici di tipo PPI non possiedono colorazioni con gruppo di simmetria con più di 12 elementi.*

2.3.2 La colorazione ottimale

I buckyballs di tipo PPI possiedono una colorazione con molte proprietà interessanti.

Proposizione 2.7. *Tutti i buckyball di tipo $GC_{k,0}$, $k \geq 1$, possiedono una colorazione con gruppo di simmetrie $G_p = T$. Tutti gli esagoni contengono due spigoli per ogni colore.*

Dimostrazione. Costruiamo esplicitamente la colorazione. Sappiamo dalla Proposizione 2.5 che il dodecaedro ha un'unica 3-colorazione per spigoli, a meno di simmetria. Coloriamo con questa colorazione gli spigoli dei pentagoni di $GC_{k,0}$ e tutti gli spigoli di interfaccia. Infatti ogni interfaccia corrisponde ad uno spigolo dell'icosaedro inscritto ma anche ad uno spigolo perpendicolare ad essa del dodecaedro inscritto. Questa condizione è sufficiente per definire tutta la colorazione del fullerene: l'interno di ogni tile è una parte triangolare di una tassellazione esagonale, su cui sono stati imposti tre colori diversi sugli spigoli dei tre bordi, e si colora sempre in modo univoco.

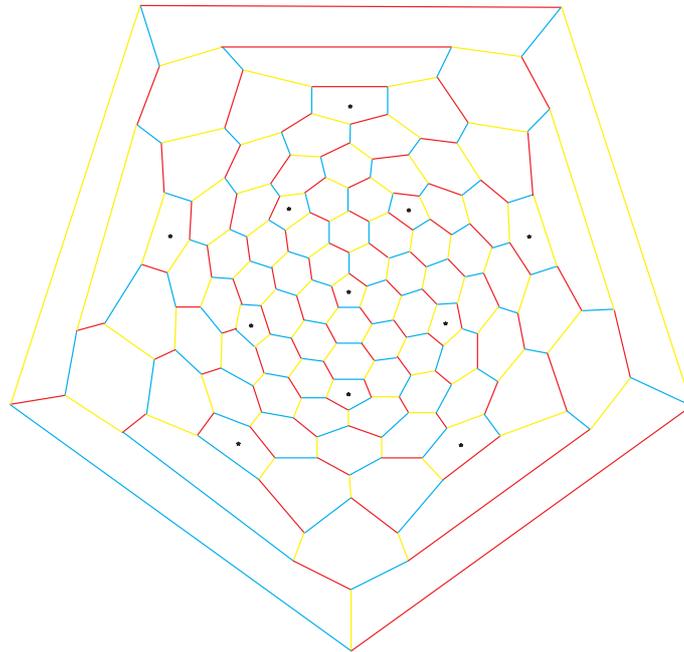
Questa colorazione ha gruppo di simmetria $G_p = T$, il massimo possibile, perché è definita unicamente a partire dalla colorazione del dodecaedro che

ha questa simmetria. La proprietà relativa agli esagoni segue: lungo le interfacce gli esagoni hanno due spigoli opposti dello stesso colore, all'interno dei tiles sono colorati come nella colorazione della tassellazione esagonale. \square

Il gruppo delle simmetrie che preservano i colori G_c è isomorfo a $C_2 \times C_2$, l'unico sottogruppo normale proprio di T .

Questa è l'unica colorazione possibile in cui gli spigoli di ogni interfaccia sono di un unico colore.

Figura 2.7: La colorazione a simmetria tetraedrale di $GC_{3,0}$.



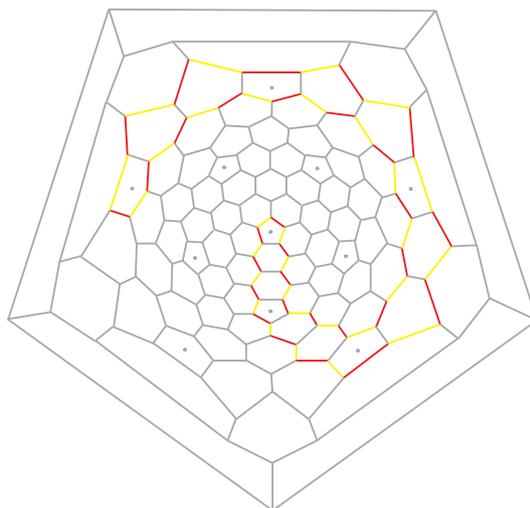
Osserviamo alcune proprietà di tipo “estetico”. Il fatto che in questa colorazione tutti gli esagoni sono della terza o della quarta famiglia, cioè ognuno di essi ha due spigoli per colore, è ben visibile nel solido tridimensionale. Gli esagoni della quarta famiglia, i più irregolari tra le due presenti, sono concentrati solo sulle interfacce che dividono tiles con esagoni di tipo differente. Quindi all'aumentare di k il loro numero è proporzionalmente sempre più piccolo: sono $12(k-1)$ poiché $k-1$ è il numero degli esagoni per ogni interfaccia e 12 sono gli spigoli di un dodecaedro 3-colorato che uniscono due vertici con i colori ordinati in modo diverso (123 e 132 in senso orario). Il numero degli esagoni della terza famiglia sarà quindi $(k-1)(10k-2)$.

Nei casi $k=2$ e $k=3$ una ricerca esaustiva al calcolatore ha mostrato che questa è l'unica colorazione avente esagoni solo di queste due famiglie.

Consideriamo il ciclo formato dagli spigoli dei colori 1 e 2 passante per un pentagono con spigolo dispari di colore 3 (ad esempio quello centrale nella Figura 2.7). Questo ciclo corre lungo cinque interfacce e sei pentagoni prima di richiudersi, come in Figura 2.8, quindi non è hamiltoniano. Esistono quat-

tro pentagoni per ogni famiglia, quindi si può ripetere lo stesso ragionamento per ogni coppia di colori e non esiste alcun ciclo hamiltoniano.

Figura 2.8: Un ciclo bicromatico nella colorazione a simmetria tetraedrale di $GC_{3,0}$. Non esistono cicli hamiltoniani.



Ogni tile viene colorato con la colorazione più regolare della tassellazione piana esagonale, questo fa sì che il poliedro, costruito ad esempio con moduli PHiZZ, assuma un'aspetto estremamente ordinato e piacevole. Se il nostro scopo iniziale era trovare colorazioni ottimali per i fullereni, almeno nel caso di quelli di tipo PPI, abbiamo trovato una soluzione ottimale sia dal punto di vista della simmetria che da quello dei poligoni presenti.

2.3.3 I casi di $GC_{2,0}$ e $GC_{3,0}$

Il primo fullerene PPI non banale è il $GC_{2,0}$, con 80 vertici, 120 spigoli e 30 esagoni, corrisponde alla molecola C80. Per questo poliedro ho calcolato tutte le possibili 3-colorazioni per spigoli, identificando quelle equivalenti per simmetria. Risulta che esistono 543 colorazioni distinte, di cui 426 hanno gruppo delle simmetrie banale, 105 hanno G_p isomorfo a C_2 , solo 12 hanno gruppi di simmetria più grandi. Nove casi hanno G_c banale e $G_p = C_3$ oppure $G_p = D_3$ (rispettivamente tre e sei casi), due casi hanno $G_c = C_2$ e rispettivamente $G_p = C_2 \times C_2$ oppure $G_p = C_6$ e infine l'unico caso con $G_p = T$ è quello già visto nella sezione precedente.

Studiando i tipi e le famiglie dei pentagoni e degli esagoni nelle diverse colorazioni si possono trovare alcuni risultati interessanti e selezionare le colorazioni più rilevanti. Ad esempio si nota che la colorazione già analizzata è l'unica senza esagoni della seconda famiglia, ed è una delle tre con pentagoni opposti identici. Esistono quattro colorazioni in cui gli spigoli opposti sono dello stesso colore, tra cui quella con con simmetria cilindrica $G_p = C_6$. Esiste un'unica colorazione in cui ogni coppia di colori forma un ciclo hamiltoniano.

Si vede infine che per ogni colorazione esistono esattamente 4 pentagoni per ogni famiglia, fatto del tutto imprevedibile.

Nel caso di $GC_{3,0}$ (180 vertici, 270 spigoli e 80 esagoni) non è possibile calcolare tutte le colorazioni, perché sono un numero computazionalmente ingestibile. Se ci si restringe a quelle con spigoli opposti identici, quindi quelle in cui la mappa antipodale appartiene a G_c , condizione estremamente restrittiva, si trovano 20.972 colorazioni distinte, di cui 94 hanno $G_p \cap I$ non banale, tutte con $G_p = C_6$.

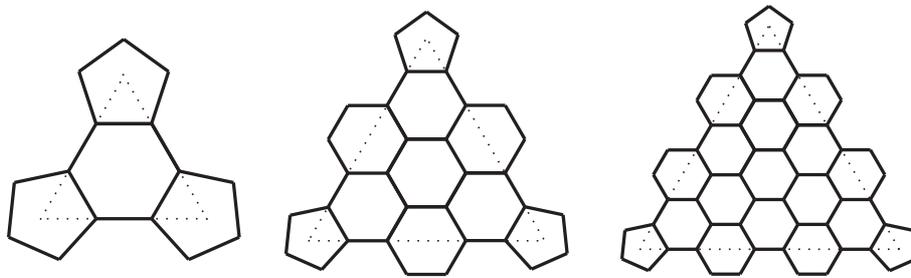
Non esistono colorazioni senza esagoni della seconda famiglia, né senza esagoni delle ultime due famiglie, né con tutti gli esagoni di una stessa famiglia. In sintesi non si trovano colorazioni interessanti tra quelle stabili rispetto alla mappa antipodale.

2.4 La famiglia PPO

La seconda classe di fullereni sferici achirali è quella dei $GC_{k,k}$, con $k \geq 1$, i buckyballs PPO cioè *pentagons pointing-out*. Ognuno di questi ha $60k^2$ vertici, $90k^2$ spigoli, $30k^2 - 10$ esagoni. Questi poliedri vengono spesso chiamati trasformazione *leapfrog* del dodecaedro.

Come per i PPI dimostreremo che non esistono colorazioni con gruppo G_p di 24 elementi, ma siamo in grado di dimostrare che esiste una colorazione con simmetria T solo nel caso di k pari. Nel caso $k = 1$ vedremo che non esiste nessuna colorazione con questa regolarità, mentre in tutti gli altri non lo sappiamo.

Figura 2.9: I tiles di $GC_{1,1}$, $GC_{2,2}$ e $GC_{3,3}$.



2.4.1 Non esiste una colorazione con $G_p = T_h$

La dimostrazione di questa proprietà è molto simile al caso dei fullereni PPI, ma è più semplice. Come in quel caso assumiamo per assurdo l'esistenza di una colorazione con gruppo di simmetria $G_p = T_h$.

Come prima, i pentagoni dovranno essere colorati secondo la prima delle nove colorazioni in Figura 2.3. Possiamo anche qui distinguere tiles di tipo A1, A2 e B.

Figura 2.10: Gli spigoli dispari e tipi di tiles A1, A2 e B per un fullerene PPO.

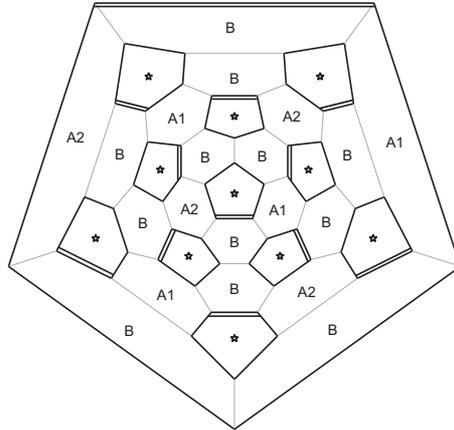
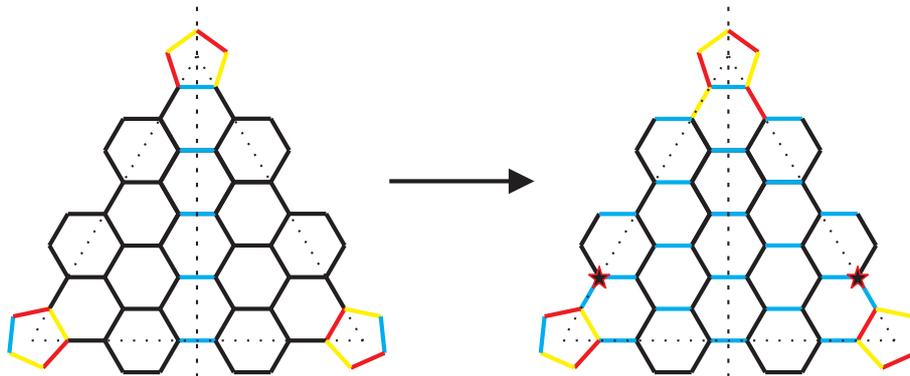


Figura 2.11: Non è possibile colorare un tile di tipo B rispettando una simmetria assiale che scambia i colori 1 e 2 e la colorazione dei pentagoni data dalla simmetria globale.



La colorazione dei tiles B deve essere tale che la simmetria rispetto ad un'altezza del triangolo scambi i colori 1 e 2. Quindi tutti gli spigoli del tile che intersecano questa altezza devono essere di colore 3, e di conseguenza anche tutti quelli del tile perpendicolari a tale altezza. Come si vede dalla Figura 2.11 questo porta ad un'incompatibilità con la colorazione dei pentagoni, fissata in modo univoco, nella posizione ★.

Questo ci dà un assurdo: i fullereni PPO non ammettono colorazioni con questo gruppo di simmetria, e quindi con nessun gruppo con più di 12 elementi. Ma i buckyball PPI e PPO esauriscono i fullereni sferici achirali, cioè con gruppo degli automorfismi I_h , tutti gli altri hanno gruppo I , e quindi le loro colorazioni, nella migliore delle ipotesi, hanno gruppo di simmetria da 12 elementi. Abbiamo quindi provato un altro tassello del Teorema 2.3.

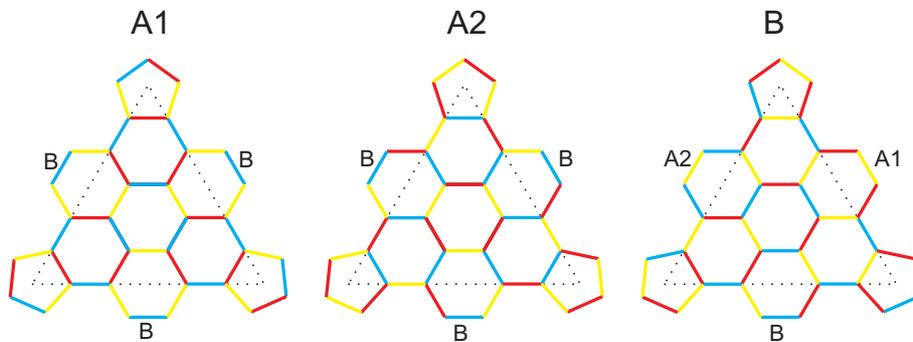
Proposizione 2.8. *Non esistono fullereni sferici che ammettono colorazioni con gruppi di simmetria aventi più di dodici elementi.*

2.4.2 Le colorazioni simmetriche

Nel caso $k = 1$ abbiamo visto che non esistono colorazioni con simmetria tetraedrale. Infatti non è possibile completare una colorazione del poliedro in nessuno dei casi in Figura 2.3.

Veridifichiamo il punto (iii) del Teorema 2.3. Nel caso $k = 2$ è possibile colorare i pentagoni con la colorazione numero quattro di Figura 2.3 e i tiles di tipo A1, A2 e B come in Figura 2.12.

Figura 2.12: I tre tipi di tiles per la colorazione con simmetria tetraedrale di $GC_{2,2}$.

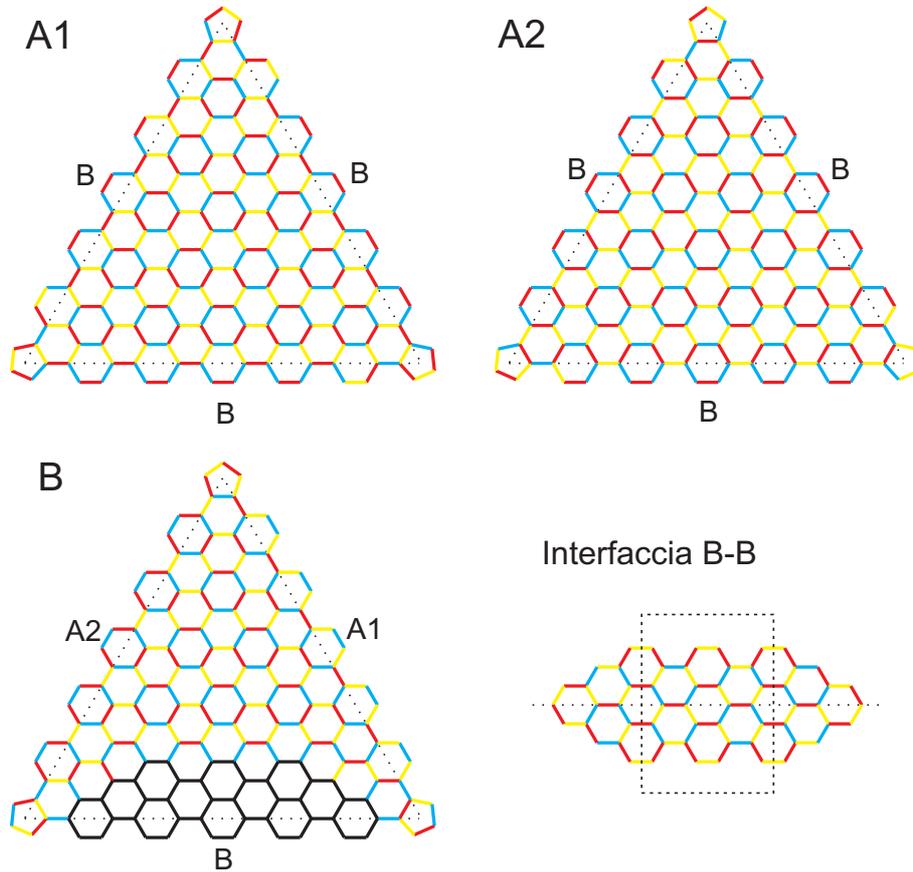


Nel caso $k \geq 4$ pari possiamo costruire una colorazione con gruppi di simmetria $G_c = G_p = T$ in questo modo. Coloriamo i pentagoni secondo la prima colorazione di Figura 2.3. Coloriamo tutti i tiles di tipo A1 con una tassellazione di esagoni della prima famiglia, cioè ognuno di soli due colori, eccetto gli esagoni adiacenti ad un pentagono, come in Figura 2.13. Coloriamo i tile di tipo A2 come il simmetrico di questi, scambiando i colori 1 e 2. Infine coloriamo i tiles B con lo stesso tipo di tassellazione eccetto che lungo l'interfaccia tra due tile dello stesso tipo, qui useremo una colorazione come in Figura 2.13.

Il fullerenone risultante ha esagoni della prima famiglia all'interno di ogni tiles ($10(3k^2 - 6k + 2)$ in totale), lungo le interfacce esistono complessivamente solo $54k - 12$ esagoni della seconda famiglia e $6(k - 3)$ della terza.

Questo modo di colorare il poliedro non va bene nel caso di k dispari perché l'interfaccia tra due tiles B deve essere stabile rispetto ad una rotazione di 180° intorno al proprio punto medio. Adattando questa colorazione ad un buckyball con k dispari, dimezzando la parte di interfaccia evidenziata dal rettangolo, si ottiene una colorazione "quasi tetraedrale", cioè che viola questa simmetria solo su 12 spigoli, uno per ogni tile di tipo B.

Figura 2.13: I tre tipi di tiles per la colorazione con simmetria tetraedrale di un buckyball PPO con k pari ($GC_{6,6}$). Lungo l'interfaccia tra due tiles di tipo B la parte indicata con il rettangolo si ripete $\frac{k}{2} - 2$ volte.



2.4.3 Il caso di $GC_{1,1}$

Il buckyball PPO più semplice è sicuramente il fullerene più noto: infatti corrisponde alla struttura della molecola di carbonio C_{60} (buckminsterfullerene), il primo fullerene di cui è stata scoperta l'esistenza in natura. Inoltre corrisponde alla forma del classico pallone da calcio. Questo poliedro è chiamato abitualmente icosaedro troncato.

Si può verificare al calcolatore che le teoriche 3190 colorazioni possibili si riducono a 39 distinte a meno di simmetria: di esse 20 hanno gruppo G_p banale, in nove casi questo ha solo due elementi, in due casi è isomorfo a C_3 , in quattro a C_6 , in tre a D_3 e in uno a $C_2 \times C_2$.

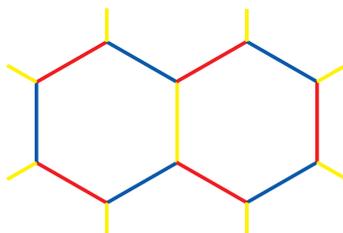
Una colorazione è stabilizzata da una simmetria che non conserva l'orientazione se e solo se G_p è isomorfo a C_6 . La colorazione con $G_p = C_2 \times C_2$ è anche l'unica in cui tutte le coppie di colori formano un ciclo hamiltoniano.

L'unica colorazione in cui ogni spigolo ha lo stesso colore del proprio antipodale è l'unica con $G_c = C_6$. Questa è anche l'unica in cui G_c contiene

una trasformazione che non conserva l'orientazione, quindi è l'unica colorazione identica alla propria speculare.

Questa colorazione ha un'ulteriore regolarità. L'insieme di tutti gli spigoli dei colori 1 e 3 formano 6 pattern (componenti connesse) identici, a forma di doppio esagono: un esagono del tipo 6 e uno del tipo 7 uniti per l'unico spigolo del colore 2, come nella Figura 2.14. Questi pattern si dispongono al centro delle facce di un cubo circoscritto al buckyball, sono allineati con gli spigoli di questo cubo e sono collegati tra loro da elementi del colore 2. In un buckyball costruito con questa colorazione la presenza del pattern è abbastanza appariscente ed ha un effetto grafico piacevole.

Figura 2.14: Il pattern ripetuto sei volte nella colorazione di $GC_{1,1}$ con simmetria $G_c = C_6$.



2.5 I fullereni sferici chirali

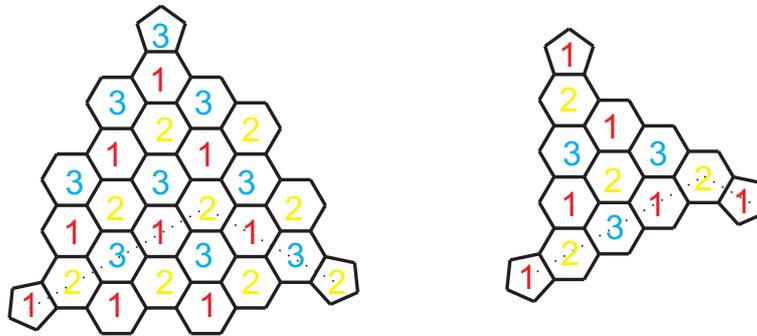
Ora dimostriamo il punto (iii) del Teorema 2.3: anche per alcuni fullereni sferici chirali, cioè non appartenenti alle due famiglie che abbiamo analizzato finora, è possibile costruire una colorazione a simmetria tetraedrale.

Usiamo la tecnica introdotta in [15] e descritta nel seguito per costruire una colorazione. Sappiamo dalla dimostrazione del Teorema 2.1 che una 3-colorazione per spigoli corrisponde ad una 4-colorazione per facce dello stesso grafo.

Coloriamo con tre colori le facce di un tile, usando l'unica 3-colorazione della tassellazione esagonale. Si possono presentare due casi (Figura 2.15): se i pentagoni ai vertici del tile hanno lo stesso colore possiamo costruire una colorazione a partire da una 3-colorazione per facce dell'icosaedro. In questo caso questo metodo non porta ad alcun risultato perché non esiste una 3-colorazione per facce dell'icosaedro con simmetria tetraedrale. Per verificare questo ultimo fatto basta notare che una rotazione di 120° ha centro in un triangolo, quindi deve fissare tutti i tre colori, in particolare i tre triangoli adiacenti a quello centro della rotazione hanno lo stesso colore; osservando come sono disposti in un icosaedro i vertici di un tetraedro inscritto (corrispondenti ai centri di queste rotazioni) si conclude facilmente.

Nel caso contrario i tre pentagoni di uno stesso tile hanno tre colori diversi. Questo caso si verifica esattamente quando k non è congruo a l modulo tre, cioè $|k - l|$ non è multiplo di tre, come si vede nell'esempio in Figura 2.15. Coloriamo i pentagoni secondo l'unica (a meno di simmetria) 4-colorazione

Figura 2.15: I due casi che si possono presentare: i tre pentagoni hanno colore diverso ($GC_{4,3}$, $k \not\equiv_{(3)} l$) oppure uguale ($GC_{4,1}$, $k \equiv_{(3)} l$).



per facce del dodecaedro. Questo ci permette di colorare gli esagoni di ogni tile con i tre colori corrispondenti ai pentagoni posti sui suoi vertici.

Lungo le interfacce tra due tile colorati con lo stesso terzetto di colori le colorazioni degli esagoni corrispondono. Sulle interfacce tra due tile colorati con terzetti di colori diversi (ad esempio 123 e 234) possono verificarsi sovrapposizioni tra due esagoni dei colori non condivisi tra i tiles (nell'esempio 1 e 4).

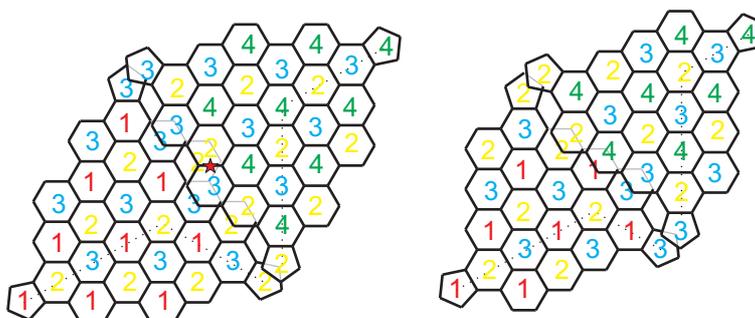
Lungo le interfacce che non sono centro di una rotazione di 180° non ci sono problemi, si può ad esempio scegliere di usare negli esagoni dubbi solo il colore del tile adiacente centro di una rotazione di 120° . Nel caso contrario i due tiles adiacenti all'interfaccia in esame devono essere scambiati tra loro dalla rotazione, con una permutazione dei colori.

Se almeno un parametro tra k ed l è dispari, il centro della rotazione di 180° corrisponde ad un vertice o al punto medio di un segmento (indicatedo dalla stella nella Figura 2.16). Quindi ogni possibile esagono di dubbia colorazione compare con un simmetrico (rispetto alla rotazione centrata nel punto medio dell'interfaccia), e può essere colorato rispettando la simmetria assegnando l'altro colore possibile proprio al suo simmetrico. Se invece k ed l sono entrambi pari, la rotazione ha centro in un esagono a cui non è possibile assegnare un colore in modo tale che la colorazione sia stabile (con una permutazione dei quattro colori) rispetto ad essa. In questo caso, usando questa tecnica, non si può assegnare una colorazione del poliedro coerente con la regolarità tetraedrale richiesta. Questi due casi si possono osservare nella Figura 2.16.

Siamo così in grado di costruire una 4-colorazione delle facce del fullerene, avente simmetria tetraedrale, ogni volta che $|k - l|$ non è multiplo di tre e almeno uno dei due parametri è dispari. La simmetria è di tipo tetraedrale perché è costruita a partire dalla colorazione delle facce del dodecaedro che ha proprio questa simmetria. Da questa otteniamo univocamente la 3-colorazione per spigoli usando lo stesso procedimento usato nella dimostrazione del Teorema 2.1. Rimane così dimostrata la parte rimanente del Teorema 2.3.

□

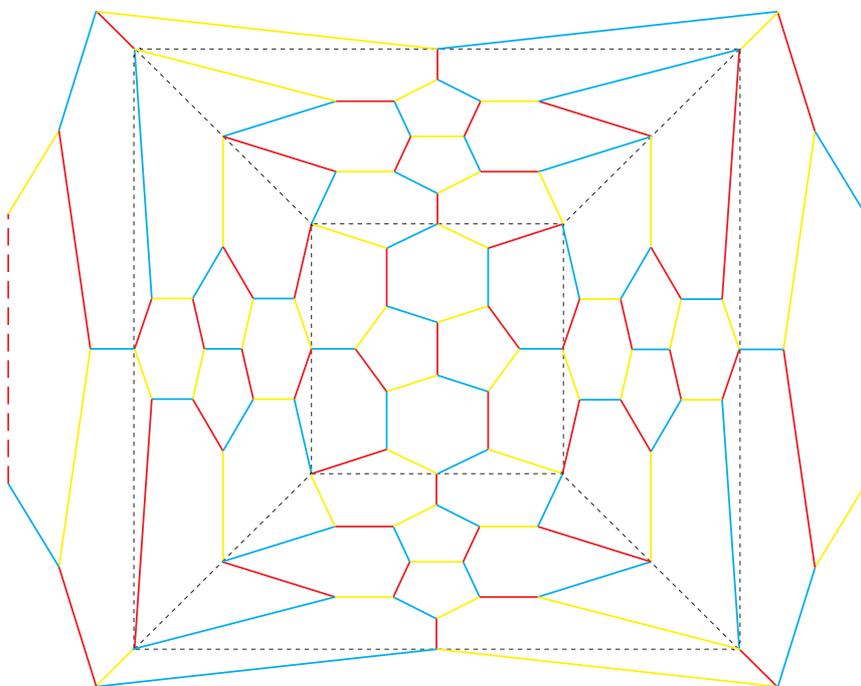
Figura 2.16: Nel caso $GC_{4,3}$ si può colorare l'interfaccia tra due tiles in modo simmetrico rispetto alla rotazione di 180° centrata in \star , con la permutazione dei colori (14)(23). Nel caso $GC_{4,2}$ non è possibile scegliere coerentemente un colore per l'esagono centrale.



Per i fullereni sferici achirali può esistere un altro caso in cui il gruppo G_p ha 12 elementi: quando le rotazioni formano un gruppo isomorfo a D_3 ed esistono simmetrie in $G_p \cap I_h \setminus I$. Questo è il più ampio sottogruppo del gruppo icosaedrale che conserva una coppia di vertici antipodali del dodecaedro. Quindi esistono due vertici oppure due esagoni privilegiati (i “poli”) e il risultato è meno interessante che il caso $G_p = T$.

Fin qui abbiamo analizzato solamente i fullereni sferici, ma non dobbiamo dimenticarci che esistono anche fullereni planari non sferici, cioè con minore simmetria. Non è possibile avere simmetria ottaedrale, perché le rotazioni di 90° richiedono una faccia quadrata oppure un vertice incidente a quattro spigoli. Se invece la simmetria del grafo è tetraedrale, essi possono ammettere colorazioni con questa simmetria ($G_p = T$), come quello di 138 spigoli rappresentato nella Figura 2.17. Anche in questo esempio, come per tutti i fullereni sferici, non è possibile costruire una colorazione con gruppo di simmetria pari a quello del grafo (T_h); vedremo che questo accade per fullereni tracciati su altre superfici.

Figura 2.17: Una colorazione con $G_p = T$ e $G_c = C_2 \times C_2$ di un fullerene planare non sferico a simmetria tetraedrale.



Capitolo 3

I fullereni non planari

Abbiamo visto nel Capitolo 1 che i fullereni possono essere tracciati solo su quattro diverse superfici compatte. Ci occuperemo ora di quelli tracciati sul toro, sulla bottiglia di Klein e sul piano proiettivo. Nei primi due casi siamo in grado di dimostrare l'esistenza di una colorazione con esagoni della terza famiglia per ogni fullerene. Nel caso del piano proiettivo mostriamo un esempio in cui non esiste alcuna colorazione coerente.

3.1 I fullereni toroidali

Tutte le facce dei fullereni tracciati sul toro sono esagonali e possiamo classificare questi grafi seguendo un metodo introdotto in [20].

Per usare questa classificazione dobbiamo prendere in considerazione i grafi duali dei fullereni toroidali, cioè le triangolazioni 6-regolari.

Vogliamo definire una nozione di equivalenza topologica per grafi tracciati su una superficie. Consideriamo un grafo G come un 1-complesso simpliciale. Un embedding di G in una superficie F è una mappa continua $f : G \rightarrow F$ tale che G e $f(G)$ siano omeomorfi. Due embedding $f_i : G_i \rightarrow F_i$ sono equivalenti se esistono un omeomorfismo $h : F_1 \rightarrow F_2$ e un isomorfismo $\sigma : G_1 \rightarrow G_2$ tali che $h \circ f_1 = f_2 \circ \sigma$.

Vediamo che un grafo toroidale 6-regolare, senza spigoli multipli o loop, deve essere una triangolazione. Infatti detto E il numero degli spigoli, i vertici sono $V = \frac{1}{3}E$ e le facce $F = \frac{2}{n}E$, dove n è il numero medio di lati delle facce. Deve valere $0 = \chi = V - E + F = (\frac{1}{3} - 1 + \frac{2}{n})E$, quindi $n = 3$ e tutte le facce devono essere triangoli.

Definiamo \tilde{G} come l'unione dei punti di tutte le rette di \mathbb{R}^2 parallele agli assi o alla bisettrice del primo quadrante e passanti per punti a coordinate intere. Dati tre numeri naturali p, q e r , con $pr \neq 0$, definiamo il gruppo $\Delta(p, q, r)$ di tutte le traslazioni di \mathbb{R}^2

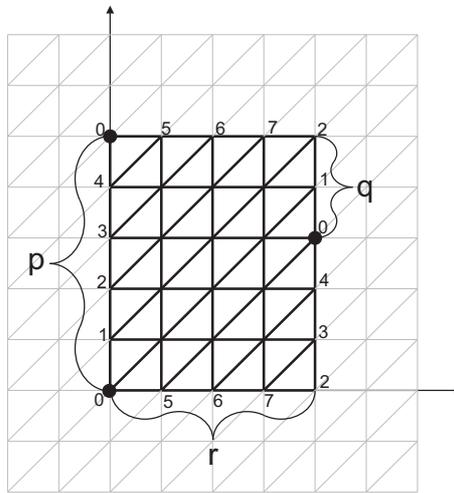
$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} 0 \\ p \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} r \\ -q \end{pmatrix}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{Z}.$$

L'azione di questo gruppo su \mathbb{R}^2 è libera e lascia \tilde{G} invariante. Lo spazio delle orbite $\mathbb{R}^2/\Delta(p, q, r)$ è il toro e $T(p, q, r) = \tilde{G}/\Delta(p, q, r)$ è una sua triangolazione, eventualmente con spigoli doppi e loop.

Possiamo descrivere $T(p, q, r)$ in modo più concreto. L'azione del gruppo individua un dominio fondamentale rettangolare $[0, r] \times [0, p] \subset \mathbb{R}^2$ di cui identifichiamo i lati orizzontali, poi quelli verticali facendo coincidere i punti $(0, y)$ e (r, y') quando $y' \equiv y - q \pmod{p}$. Possiamo limitarci a $0 \leq q < p$ senza perdere generalità.

Il Teorema 3.4 di [20] afferma che ogni grafo 6-regolare su un toro è equivalente a $T(p, q, r)$ per qualche valore dei tre parametri. I teoremi successivi dell'articolo descrivono per quali valori dei parametri due grafi di questo tipo sono equivalenti e in quali casi hanno spigoli multipli o loop.

Figura 3.1: La costruzione di $T(5, 2, 4)$; i vertici con numeri uguali sono identificati.



Definiamo $F(p, q, r)$ come il grafo duale di $T(p, q, r)$. Ora consideriamo un fullerenone toroidale F . Il suo duale è un grafo tracciato sulla stessa superficie, con tutte le facce triangolari e tutti i vertici di grado sei, poiché non abbiamo pentagoni. Quindi il duale di F è equivalente ad una triangolazione $T(p, q, r)$. In questo modo abbiamo dimostrato la seguente proposizione, che classifica tutti i possibili fullereni toroidali usando tre parametri naturali.

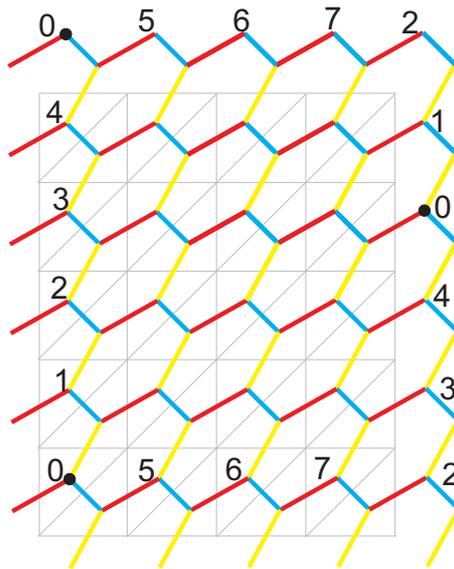
Proposizione 3.1. *Per ogni fullerenone toroidale G esiste una terna di interi naturali p, q, r , con $pr \neq 0$ e $q < p$ tali che il suo grafo duale G' è equivalente a $T(p, q, r)$.*

La classificazione è meno forte di quella relativa alle triangolazioni perché in generale non possiamo dedurre l'equivalenza di due embedding dall'equivalenza dei loro duali. Per il caso in esame questo è vero se p ed r sono entrambi maggiori di 3 perché $T(p, q, r)$ sostanzialmente può essere tracciato in un unico modo: ogni suo automorfismo corrisponde ad un auto-omeomorfismo del toro, cioè il grafo è *faithfully embeddable*, come dimostrato in [20]. Nei casi rimanenti però non siamo in grado di garantire l'equivalenza dei fullereni.

Rispetto al caso dei fullereni planari la classificazione è più semplice perché non sono presenti pentagoni che danno “irregolarità”. Infatti in quel caso siamo stati in grado di dare una classificazione soddisfacente solo quando i pentagoni erano disposti in modo regolare. $F(p, q, r)$ ha pr esagoni, $3pr$ spigoli e $2pr$ vertici.

La costruzione di $T(p, q, r)$ ci permette di introdurre una colorazione particolare per tutti questi fullereni. Dato un fullerene toroidale F , ogni suo spigolo corrisponde ad uno spigolo del suo duale, cioè, a meno di equivalenza, $T(p, q, r)$. Assegniamo i tre colori in modo tale che tutti gli spigoli di $T(p, q, r)$ corrispondenti a segmenti paralleli in \tilde{G} abbiano lo stesso colore. I sei spigoli incidenti ad un vertice qualunque saranno colorati come 123123 (a meno di una trasposizione dei colori), fissata un’orientazione del toro, cioè leggendoli tutti in senso orario sulla superficie esterna del toro. Questo determina una colorazione coerente per F , tutti gli esagoni saranno dello stesso tipo della terza famiglia: con due spigoli per ogni colore e spigoli opposti uguali.

Figura 3.2: La costruzione di $F(5, 2, 4)$ e la sua colorazione.



Questa colorazione è definita in modo univoco per ogni embedding di $F(p, q, r)$, a meno di permutazioni dei colori. Le classi di spigoli con lo stesso colore corrispondono agli insiemi di spigoli paralleli in \tilde{G} , tutti gli automorfismi del grafo mantengono questa struttura e conservano anche la colorazione. Le traslazioni unitarie t_x e t_y di \tilde{G} lungo le direzioni x e y formano il gruppo

$$\langle t_x, t_y \mid t_y^p = t_x^{\frac{pr}{q}} = t_x^r t_y^{p-q} = t_x t_y t_x^{-1} t_y^{-1} = e \rangle$$

che coincide con il gruppo G_c degli automorfismi di $F(p, q, r)$ che conservano la colorazione senza permutare i colori. Questo gruppo agisce transitivamente sull’insieme degli esagoni e su quello degli spigoli di uno stesso colore.

Esistono simmetrie che conservano la colorazione ma permutano i colori solo quando il grafo ammette altri automorfismi, cioè rotazioni o riflessioni.

Indichiamo con (a, b) il massimo comune divisore di due interi, $(a, 0) = a$.

Assegnando i colori come nella Figura 3.2, si nota che coppie di colori possono formare cicli hamiltoniani. I colori 2 e 3 lo formano solo nel caso $r = 1$, mentre in generale formano r cicli lunghi $2p$ spigoli che si avvolgono lungo una delle circonferenze principali del toro.

I colori 1 e 3 formano (p, q) cicli lunghi $2r \frac{p}{(p, q)}$, si avvolgono $\frac{p}{(p, q)}$ volte lungo direzione orizzontale e $\frac{q}{(p, q)}$ lungo quella verticale.

Per verificarlo percorriamo idealmente uno di questi cammini, numerando i nodi come in figura e partendo dal nodo 0. Alla n -sima volta che raggiungiamo il margine destro della figura, abbiamo percorso $2rn$ spigoli e siamo arrivati al nodo $(nq) \bmod p$. Quindi avremo raggiunto il nodo iniziale quando n vale $\frac{p}{(p, q)}$, dopo aver percorso $2r \frac{p}{(p, q)}$ spigoli. Il numero dei cammini quindi è pari al numero totale degli spigoli di colori 1 e 3 diviso per la lunghezza: $2rp / (\frac{2rp}{(p, q)}) = (p, q)$. Abbiamo percorso la circonferenza orizzontale del toro n volte, quindi abbiamo $n = \frac{p}{(p, q)}$ avvolgimenti in questa direzione. Lungo la circonferenza posta in verticale, vediamo che siamo saliti di $\frac{pq}{(p, q)}$ vertici, quindi abbiamo oltrepassato il lato superiore dell'immagine $\frac{pq}{(p, q)} / p$ volte, questo è il numero degli avvolgimenti in questa direzione.

I colori 1 e 2 formano $(p, r + q)$ cicli lunghi $2r \frac{p}{(p, r+q)}$, si avvolgono $\frac{p}{(p, r+q)}$ volte lungo direzione orizzontale e $\frac{r}{(p, r+q)}$ lungo quella verticale. Questi valori si ricavano in modo analogo quelli precedenti.

Tabella 3.1: I cicli bicromatici su $F(p, q, r)$. I cicli sono hamiltoniani quando il numero di componenti è pari a uno.

| colori | numero componenti | lunghezza | avvolgimenti |
|--------|-------------------|-------------------------|--|
| 1 2 | $(p, r + q)$ | $2r \frac{p}{(p, r+q)}$ | $\frac{p}{(p, r+q)}, \frac{r}{(p, r+q)}$ |
| 1 3 | (p, q) | $2r \frac{p}{(p, q)}$ | $\frac{p}{(p, q)}, \frac{q}{(p, q)}$ |
| 2 3 | r | $2p$ | 1, 0 |

La lunghezza dei cicli hamiltoniani ci fornisce delle informazioni sul gruppo di simmetria del grafo e della colorazione. Condizione necessaria affinché il grafo $F(p, q, r)$, e quindi anche la sua colorazione, sia simmetrico rispetto ad una riflessione è una delle tre uguaglianze $r = (p, q)$, $r = (p, q + r)$ o $(p, q) = (p, q + r)$. Affinché sia simmetrico rispetto ad una rotazione centrata su un vertice o su un esagono devono essere vere tutte e tre le relazioni. Infatti la prima operazione scambia due colori, quindi due righe nella seconda colonna della tabella 3.1 devono essere uguali, la rotazione permuta tre colori, quindi devono essere tutte e tre uguali. Però non è facile in generale trovare una condizione sufficiente abbastanza generale che garantisca l'esistenza di questi automorfismi e la struttura del gruppo non è nota.

Un **nodo torico** di parametri a e b , interi coprimi, è un cammino che si avvolge rispettivamente a e b volte lungo le due circonferenze principali del

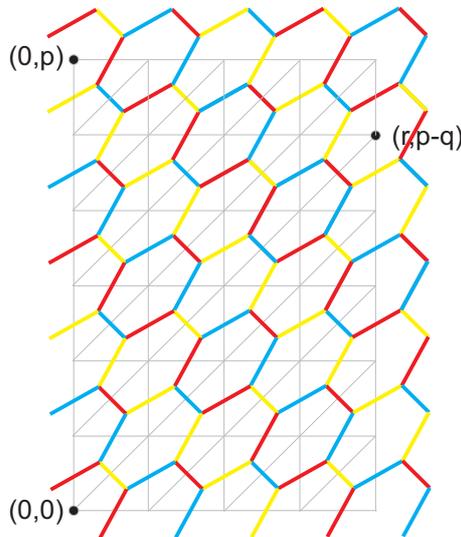
toro. Se i parametri non sono coprimi si ha un link, un insieme di (a, b) componenti connesse annodate tra loro, ciascuna delle quali è un nodo a sua volta.

Dati due numeri coprimi a e b e un numero naturale n possiamo costruire un fullerenone toroidale tale che gli spigoli dei colori 1 e 2 (e allo stesso modo quelli dei colori 1 e 3) formino n nodi torici di parametri a e b e di lunghezza nab , cioè un link torico di parametri na e nb . Supponendo senza perdere generalità che a sia dispari, basta scegliere $F(p, q, r)$ con $p = na$, $q = r = nb$: infatti $(p, r + q) = (na, 2nb) = n$.

Ovviamente molte altre colorazioni sono possibili. Coloriamo la tassellazione esagonale con esagoni della prima famiglia (due colori per ogni esagono). Ogni esagono e corrisponde ad un vertice di \tilde{G} , quindi ad una coppia di interi (x_e, y_e) . Due esagoni e ed f sono colorati in modo uguale se $x_e + y_e \equiv x_f + y_f \pmod 3$. L'esagono $(0, 0)$ corrisponde nella costruzione di $F(p, q, r)$ agli esagoni $(0, p)$ e $(r, p - q)$. Quindi è possibile colorare $F(p, q, r)$ con esagoni della prima famiglia se e solo se p e $r - q$ sono multipli di tre.

Poiché anche questa colorazione è unica il suo gruppo G_p corrisponde al gruppo degli automorfismi del grafo.

Figura 3.3: La colorazione di $F(6, 1, 4)$ con esagoni della prima famiglia.



3.2 I fullereni non orientabili

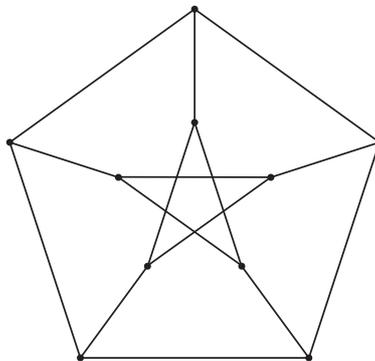
I fullereni possono essere tracciati su due superfici non orientabili: il piano proiettivo e la bottiglia di Klein, rispettivamente con 6 e 0 pentagoni. Poiché queste superfici si ottengono identificando i punti antipodali rispettivamente della sfera o del toro, ognuno di questi fullereni corrisponde ad un fullerenone

di dimensioni doppie, tracciato su una di queste superfici orientabili. In particolare per ogni fullerene tracciato su una superficie orientabile, simmetrico rispetto alla mappa antipodale, esiste un fullerene non orientabile.

Abbiamo una colorazione di questi grafi ogni volta che abbiamo una colorazione del fullerene doppio sulla superficie orientabile, avente gli spigoli opposti colorati allo stesso modo.

Per il piano proiettivo possiamo osservare che non sempre esiste una 3-colorazione per spigoli coerente del grafo. Questo accade già nel caso più semplice di fullerene proiettivo, che è quello costruito identificando i lati opposti di un dodecaedro, corrispondente al grafo di Petersen. Sappiamo infatti che il dodecaedro ha una sola colorazione, a meno di simmetria, e che questa non ha spigoli opposti identici.

Figura 3.4: Il fullerene proiettivo $\mathbb{P}GC_{1,0}$, cioè il grafo di Petersen.



Se prendiamo fullereni proiettivi più grandi invece è possibile trovare una colorazione ammissibile. Chiamiamo $\mathbb{P}GC_{k,l}$ il grafo ottenuto dall'identificazione degli spigoli antipodali di $GC_{k,l}$. Chiaramente è possibile costruire questi grafi solo a partire da poliedri achirali, quindi $k = 0$ oppure $l = k$. Come visto nelle Sezioni 2.3.3 e 2.4.3, $\mathbb{P}GC_{2,0}$ possiede quattro diverse colorazioni, $\mathbb{P}GC_{3,0}$ ne ha 20.972 e $\mathbb{P}GC_{1,1}$ ne ha una sola.

Nei casi in cui non esiste una 3-colorazione, come $\mathbb{P}GC_{1,0}$, il grafo naturalmente rimane comunque 4-colorabile per spigoli per il Teorema di Vizing (vedi Cap. 1).

Ogni fullerene sulla bottiglia di Klein è il risultato dell'identificazione antipodale di un fullerene toroidale. Se consideriamo il dominio fondamentale del toro rappresentato come in Figura 3.1, l'identificazione dei punti antipodali conserva il parallelismo tra due segmenti. Se sul toro è tracciato il grafo $T(p, q, r)$ e se questo è colorato come sopra con spigoli paralleli dello stesso colore, questa proprietà passa al grafo corrispondente tracciato sulla bottiglia di Klein e quindi al suo duale. Poiché tutti i fullereni tracciati su questa superficie si possono ottenere in questo modo, ognuno di essi possiede una colorazione avente ogni esagono con due spigoli per ciascun colore. Notiamo che su una superficie non orientabile non ha senso distinguere tra esagoni

di tipo diverso all'interno di questa famiglia. Questa colorazione ha gruppo delle simmetrie G_p uguale al gruppo degli automorfismi del grafo.

Per ogni grafo di questa classe abbiamo provato l'esistenza di una colorazione con simmetria massima e una buona configurazione di esagoni.

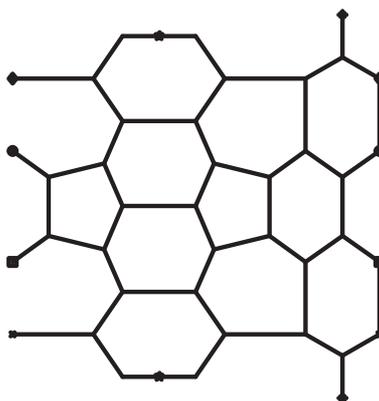
3.3 Un grafo toroidale contenente ettagoni

I fullereni toroidali sono difficilmente costruibili con moduli origami, poiché gli spigoli sulla parte esterna devono essere più lunghi di quelli della parte interna, quindi i moduli non possono essere uguali tra loro. È però possibile costruire poliedri torici contenenti pentagoni sulla parte esterna e “facce a curvatura negativa”, cioè con più di sei lati, nella parte interna. Ad esempio se si usano solo pentagoni, esagoni ed ettagoni il numero di questi ultimi deve essere pari a quello dei pentagoni, per rispettare la formula di Eulero. In questa sezione analizziamo le colorazioni di un poliedro che può essere facilmente costruito.

Un modello abbastanza conosciuto ([16]) è un grafo formato da 240 spigoli, 160 vertici, 10 pentagoni, 60 esagoni e 10 ettagoni. Esistono altri modelli noti di tori che possono essere costruiti con i moduli PHiZZ, sia più grandi (555, 660 spigoli), sia più piccoli (120, 105, 84, 81, 64, 63, 48) usando anche poligoni con un maggior numero di lati.

Questo grafo viene suddiviso in *tiles*, un certo numero di parti identiche che si susseguono lungo la circonferenza principale maggiore del toro; in questo caso ci sono 5 tiles da 48 spigoli ciascuno. Vogliamo colorare i 5 tile in modo identico, quindi ne coloriamo uno solo ricordandoci di identificare i lati opposti del tile a due a due, come nel dominio fondamentale del toro.

Figura 3.5: 48-Tile del toro: i lati opposti sono identificati.



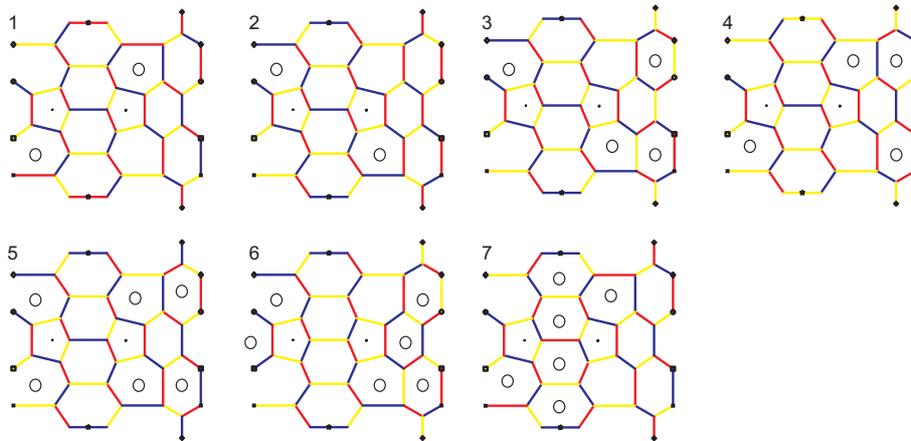
In generale gli ettagoni possono avere 18 tipi di 3-colorazioni diverse, divise in tre famiglie (1212123, 1213123, 1213132), ma qui per ogni tile ne abbiamo solo due, quindi non ci interessa molto vedere come si comportano; lo stesso vale per i pentagoni.

Si vede (cf. Figura 3.5) che il tile gode di simmetria centrale intorno al punto medio dello spigolo che unisce i due pentagoni (S_1), ma anche rispetto a due simmetrie assiali, una che scambia le due ‘facce’ del toro (S_2) e una che agisce lungo la circonferenza principale del toro (S_3). Componendo queste due si ottiene la prima: $S_2 \circ S_3 = S_3 \circ S_2 = S_1$. Si può vedere anche a mano che non ci sono colorazioni stabili per S_2 , o per S_3 , neppure a meno di permutazione dei colori.

Calcolando tutte le colorazioni, si osserva che esistono 74 3-colorazioni per il toro identiche sui cinque tiles, a meno di permutazione dei tre colori. Alcune di queste saranno identificate dalle tre simmetrie viste.

Guardando i dettagli del risultato si vede che non esistono colorazioni senza esagoni della seconda famiglia. Esistono 14 colorazioni simmetriche rispetto alla simmetria centrale S_1 . Queste 14 sono a due a due identificate da S_2 (e quindi anche da S_3) ed eventualmente (in sei coppie su sette) dalla permutazione (23) dei colori. Non esistono invece colorazioni trasformate in sé stesse dalla composizione di S_1 con una permutazione dei colori diversa dall’identità.

Figura 3.6: Le sette colorazioni S_1 -simmetriche: il cerchio indica gli esagoni della seconda famiglia.



Tra queste sette colorazioni tre non hanno cicli hamiltoniani, mentre in tre casi ce n’è uno solo che si avvolge attorno alle circonferenze principali, maggiore e minore, rispettivamente 4 e 5 volte, 1 e 10 volte, 1 e 5 volte. Nel caso rimanente esistono due cicli con 1 e 5 avvolgimenti.

Nell’unica colorazione (numero 2) tra quelle S_1 -simmetriche ad avere un ciclo hamiltoniano che si avvolge con più di un giro lungo la circonferenza maggiore, la presenza di questo ciclo hamiltoniano è molto evidente nel modello piegato: i moduli del primo colore si dispongono tra due tratti del ciclo hamiltoniano approssimativamente lungo le circonferenze minori del toro e creano un effetto “binari del treno” molto particolare.

La colorazione numero 5 è l’unica in cui gli esagoni opposti secondo S_2 , e quindi anche S_3 , sono della stessa famiglia. In tutti gli altri casi

ci sono esattamente due esagoni della seconda famiglia S_2 —opposti a due della terza o della quarta. Questo significa che la colorazione 5 è quella che ha la miglior simmetria rispetto al piano che taglia il toro lungo la sua circonferenza principale maggiore.

Ringrazio vivamente il Prof. Pernazza per la grande disponibilità dimostrata nell'aiutarmi a progettare, scrivere e correggere questa tesina.

Bibliografia

- [1] G. Brinkmann and A. W. M. Dress. Penthex puzzles: A reliable and efficient top-down approach to fullerene-structure enumeration. *Advances in Applied Mathematics*, 21:473–480, 1998.
- [2] F. Chung, B. Konstant, and S. Sternberg. Groups and the buckyball. In J.-L. Brylinski, R. Brylinski, V. Guillemin, and V. Kac, editors, *Lie Theory and Geometry*. Birkhauser, 1994.
- [3] F. Chung and S. Sternberg. Mathematics and the buckyball. *American Scientist*, 81:56–71, 1993.
- [4] H. S. M. Coxeter. Virus macromolecules and geodesic domes. In J. C. Butcher, editor, *A spectrum of mathematics*, pages 98–107. Oxford University Press/Auckland University Press, 1971.
- [5] M. Deza, P. W. Fowler, A. Rassat, and K. M. Rogers. Fullerenes as tiling of surfaces. *Journal of chemical information and computer sciences*, 40:550–558, 2000.
- [6] R. Diestel. *Graph theory*. Springer-Verlag, 2000. Electronic edition.
- [7] M. Dutour and M. Deza. Goldberg-Coxeter construction for 3- or 4-valent plane graphs. Slides, <http://www.liga.ens.fr/~dutour/Presentations/GoldbergSeminar.pdf>.
- [8] M. Dutour and M. Deza. Goldberg-Coxeter construction for 3- or 4-valent plane graphs. *The Electronic Journal of Combinatorics*, 11, 2004.
- [9] P. Erdős and R. J. Wilson. On the chromatic index of almost all graphs. *Journal of combinatorial theory, series B*, 23:255–257, 1977.
- [10] G. Fijavž. Minor-minimal 6-regular graphs in the Klein bottle. *European Journal of Combinatorics*, 25:893–898, 2004.
- [11] S. Fiorini and R. J. Wilson. *Edge-colourings of graphs*. Pitman, 1977.
- [12] M. Fujita, R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. Formation of general fullerenes by their projection on a honeycomb lattice. *Physical Review B*, 45(23):13 834–13 836, 1992.
- [13] M. Goldberg. A class of multisymmetric polyhedra. *Tohoku Mathematical Journal*, 43:104–108, 1937.

- [14] F. Harary. *Graph theory*. Addison-Wesley, 1969.
- [15] T. C. Hull. Counting and 3-edge-coloring spherical buckyballs. Slides, presented at the Joint Meetings of the AMS and the MAA, San Antonio, TX, Jan. 12-15, 2006.
- [16] T. C. Hull. <http://kahuna.merrimack.edu/~thull/>.
- [17] F. Kardoš, D. Král', J. Miškuf, and J.-S. Sereni. Fullerene graphs have exponentially many perfect matchings. *submitted to Journal of Mathematical Chemistry*.
- [18] R. B. King and M. V. Diudea. The chirality of icosahedral fullerenes: a comparison of the tripling (leapfrog), quadrupling (chamfering), and septupling (capra) transformations. *Journal of Mathematical Chemistry*, 39:597–604, 2006.
- [19] A. M. Livshits and Yu. E. Lozovik. Cut-and-unfold approach to fullerene enumeration. *Journal of chemical information and computer sciences*, 44:1517–1520, 2004.
- [20] S. Negami. Uniqueness and faithfulness of embedding of toroidal graphs. *Discrete Mathematics*, 44:161–180, 1983.
- [21] G. Szekeres. Polyhedral decomposition of cubic graphs. *Bulletin of the Australian Mathematical Society*, 8:367–387, 1973.
- [22] W. P. Thurston. Shapes of polyhedra and triangulations of the sphere. In C. Rourke I. Rivin and C. Series, editors, *Geometry and Topology Publications, The Epstein Birthday Schrift*, volume 1, pages 511–549. Warwick University, 1998.
- [23] Wikipedia, <http://en.wikipedia.org/>.