3員環・4員環を含む Fullerene 型単体について

鈴木寛*

November 9, 2006

Proposition 1 Γ を連結な平面グラフで各点の次数は 3（すなわち 3-正則）で 3-辺形 p 個、 4-辺形 q 個、5-辺形 r 個、6-辺形 s 個とする。この時、次が成立する。

$$3p + 2q + r = 12.$$

またこの時、頂点の数を v、辺の数を e とすると、

$$2e = 3p + 4q + 5r + 6s, \quad 3v = 3p + 4q + 5r + 6s$$

である。

Proof. 面の数を f とすると、仮定より $f = p + q + r + s$。3 正則なので、Counting Argument により $3v = 2e$、面のを囲む辺の数を数えて、$3p + 4q + 5r + 6s = 2e$ である。これより、$6f = 3p + 2q + r + 2e$ を得る。オイラーの公式 $v - e + f = 2$ に代入すると、$3p + 2q + r = 12$ を得る。 ■

Corollary 2 炭素の単体で各炭素には *3* つの炭素が結合。3 員環 p 個、4 員環 q 個、5 員環 r 個、6 員環 s 個をもつとする。このとき、次が成立する。

$$3p + 2q + r = 12.$$

質問

1. Corollary 2 の状況で $q = 6$ とする。このときは $p = r = 0$。4 員環どうしが接しないようにする 6 員環の最小の点の数は 24 だがそのような単体は理論的に存在しないと言えるのか。

2. Corollary 2 の状況で $r = 12$ としたものが Fullerene だが、たとえば、$q = 1$、$r = 10$ としたものは、Fullerene を生成する段階で、時々混じることはないのか。

3. Corollary 2 の状況で $r = 0$、$q = 6$ であっても、炭素の数が多ければ（すなわち、6 員環がたくさんあれば）存在しても良さそうに思うが、知られているのか。

*Email: hsuzuki@icu.ac.jp, URL http://subsite.icu.ac.jp/people/hsuzuki/