

# Topología del carbono

Fernando Etayo Gordejuela

[etayof@unican.es](mailto:etayof@unican.es)

Académico Correspondiente de la RAC  
Departamento de Matemáticas, Estadística y Computación,  
Universidad de Cantabria, Santander

**Palabras clave:** fullereno, teorema de Euler, grafo.





## RESUMEN:

El descubrimiento en 1985 de la molécula  $C_{60}$  del carbono, llamada fullereno, revolucionó la química del carbono. En esta nota presentaremos aspectos matemáticos de tales estructuras, centrándonos en propiedades cualitativas: sus propiedades topológicas.

Los fullerenos son estructuras formadas por pentágonos y hexágonos. Partiendo del teorema de Euler y la teoría de grafos se mostrarán algunas consecuencias matemáticas sobre las posibles configuraciones de los fullerenos. Aunque el escrito tiene una naturaleza divulgativa, se enunciarán y demostrarán resultados expresados con rigor matemático. Es ésta también una manera de divulgar cómo se hacen las Matemáticas y cómo se escriben.

## ABSTRACT:

The 1985 discovery of the  $C_{60}$  carbon molecule, called fullerene, revolutionized carbon chemistry. In this note we will present mathematical aspects of such structures, focusing on qualitative properties: their topological properties.

Fullerenes are structures made up of pentagons and hexagons. Starting from Euler's theorem and using graph theory, some mathematical consequences will be shown on the possible configurations of fullerenes. Although the writing is informative in nature, results expressed with mathematical rigor will be stated and proved. This is also a way of disseminating how mathematics is done and how it is written.



## 1. INTRODUCCIÓN Y COMENTARIOS BIBLIOGRÁFICOS

La aparición del fullereno (Kroto et al., 1985) revolucionó la Química del carbono. En años sucesivos, el grafeno, los nanotubos y otros tipos de estructuras de carbono proporcionaron nuevos materiales de propiedades muy ricas que los han hecho apropiados para aplicaciones muy diversas (véase, por ejemplo, (Martín, 1911)).

Desde la propia Química y desde las Matemáticas se han estudiado aspectos cuantitativos y cualitativos de tales estructuras. En esta nota nos centraremos en los de segundo tipo, en particular en los que tienen que ver con la topología de estas estructuras. Nuestro afán no será tanto dotarnos de un extenso aparato matemático para estudiar los fullerenos cuanto de centrarnos en aspectos muy concretos que por su sencillez podamos analizar con detalle, para poder mostrar al público no especializado los fundamentos matemáticos de la topología de los fullerenos. Las referencias (Anova et al., 2016), (Ardanza et al., 2007), (Benedek & Bernasconi, 2004), (García, 2015), (Marusic, 2007) y (Schwerdtfeger et al., 2015) cubren sobradamente los aspectos que vamos a desarrollar aquí, pero queremos aprovechar la ocasión para detallar aquellos aspectos matemáticos del tema que en la Literatura suelen estar obviados.

Las referencias (Álvarez et al., 2013), (Extremiana et al., 2001) y (Massey, 1972) se ofrecen, entre otras muchas posibles, para introducirse respectivamente en la Teoría de Grafos, en el estudio de los poliedros y en el de las triangulaciones, que constituyen el bagaje matemático necesario para abordar este estudio.

## 2. LA TOPOLOGÍA

Dicho con palabras comunes, la Topología es la parte de las Matemáticas que identifica los objetos cuando se pueden deformar de modo continuo para pasar de uno a otro. Así, la esfera y el cubo son topológicamente equivalentes, porque existe una aplicación continua de la una en el otro, biyectiva y de inversa también continua. Basta considerar la esfera circunscrita al cubo y las semirrectas de origen el centro de las dos figuras. Cada una de esas semirrectas corta en un único punto a la esfera y en un único punto al cubo. La aplicación que hace corresponder a cada punto de la esfera el del cubo que está en la misma semirrecta cumple todas las condiciones descritas. Una tal aplicación se llama un *homeomorfismo* y la Topología clasifica objetos por la relación de ser homeomorfos. Para el topólogo, la esfera y el cubo son de la misma clase de objetos.

Obviamente, esfera y cubo tiene propiedades geométricas distintas. Para el *geómetra* son objetos de distintas clases.

La clasificación geométrica de los objetos es en general más fina que la topológica, porque la geometría exige que se preserven cantidades que se pueden medir, como longitudes, áreas, volúmenes y ángulos. Como vamos a estudiar solamente los objetos desde el punto de vista topológico no vamos a profundizar más en esta distinción entre Topología y Geometría.

Citemos dos resultados del siglo XVIII que se consideran precursores de la disciplina topológica y que revelan la naturaleza de los enunciados topológicos.

### 2.1 El teorema de Euler

El *teorema de Euler* (1750) establece que para todo poliedro convexo el número de vértices menos el de aristas más el de caras es igual a dos, esto es, escrito como fórmula,  $v-a+c=2$ .

Se puede comprobar fácilmente que esa propiedad la tienen todos los poliedros platónicos, pero también es cierta para poliedros con menos regularidad, como prismas o pirámides. Más aún, para todo poliedro convexo, como hemos escrito en el enunciado. No importa el tamaño, ni los ángulos que formen sus caras. De hecho, la propiedad es cierta para más poliedros: para todos aquéllos que sean homeomorfos a la esfera, aunque no sean convexos.

La cantidad  $v-a+c$ , que se llamará mucho tiempo después *característica de Euler*, es una noción aplicable a superficies curvadas, como la esfera, en las que se haga una descomposición en regiones o *caras*, limitadas por líneas, llamadas *aristas*. Por ejemplo, se puede calcular la característica de Euler de la esfera, que es 2, a partir de la descomposición clásica de un balón de fútbol en pentágonos y hexágonos.



Figura 1: Descomposición poligonal de la esfera.

En efecto, el número de vértices es 60, el de aristas es 90 y el de caras es 32, con lo que  $v-a+c=2$ . Hagamos la cuenta:

- Las caras las contamos con el dedo, y obtenemos





doce pentágonos. Los hexágonos rodean a cada pentágono, por lo que en principio tendríamos cinco hexágonos por cada pentágono, lo que nos daría un total de  $5 \times 12 = 60$  hexágonos, pero como cada uno de ellos toca a tres pentágonos significa que estamos contando cada hexágono tres veces. Así que el número de hexágonos es 20, con lo que el número de caras es  $12 + 20 = 32$ .

- Aristas hay cinco en cada pentágono, lo que hacen  $5 \times 12 = 60$  y de cada vértice de cada pentágono sale una arista más, lo que sumarían 60 más. Pero éstas unen vértices de dos pentágonos distintos, por lo que las estamos contando dos veces. Así que de éstas hay 30 y el número total de aristas es  $60 + 30 = 90$ .
- Vértices hay tantos como vértices en los pentágonos, que son  $5 \times 12 = 60$ , puesto que cada vértice está en un único pentágono.

Hemos hecho la cuenta con todo detalle para poner de manifiesto que con un poco de cuidado y observación tenemos que contar muy poco, pues deducimos las cantidades mediante argumentos sencillos. De hecho, aplicando el teorema de Euler, podemos probar que una descomposición como ésta de la esfera en pentágonos y hexágonos siempre tiene doce pentágonos. Enunciemos con precisión:

**Teorema 1.** *Supongamos que la esfera está descompuesta en regiones pentagonales y hexagonales de modo que en cada vértice concurren tres aristas. Entonces el número de regiones pentagonales es igual a doce.*

*Demostración.* Sabemos, por el teorema de Euler, que  $v - a + c = 2$ . Llamemos  $p$  al número de caras pentagonales y  $h$  al de caras hexagonales. Entonces  $c = p + h$ .

Como cada pentágono tiene 5 aristas, cada hexágono tiene 6 y cada arista está en dos caras, resulta que

$$a = \frac{5p + 6h}{2}$$

De modo similar, como cada pentágono tiene 5 vértices, cada hexágono tiene 6 y cada vértice está en tres caras, se tiene que

$$v = \frac{5p + 6h}{3}$$

Y aplicando ahora el teorema de Euler obtenemos

$$\begin{aligned} 2 &= v - a + c = \frac{5p + 6h}{3} - \frac{5p + 6h}{2} + (p + h) \\ &= \frac{(10 - 15 + 6)p + (12 - 18 + 6)h}{6} = \frac{p}{6} \end{aligned}$$

con lo que  $p=12$ , como queríamos probar.

Por supuesto, el teorema es cierto para cualquier poliedro homeomorfo a la esfera. Por ejemplo, en el dodecaedro

regular resulta que el número de caras pentagonales es doce y que no tiene ninguna cara hexagonal. Podríamos pensar si existe una descomposición similar de la esfera sólo con hexágonos, pero la cuenta anterior lo impide: una tal descomposición tendría cero pentágonos y el número que fuera de hexágonos, lo cual es imposible, según acabamos de demostrar. En 2017 hubo una campaña en el Reino Unido para promover el cambio de las señales de tráfico que indican los estadios de fútbol, y que consisten en un balón de fútbol descompuesto en hexágonos. Figura que es imposible construir, como acabamos de comentar.



Figura 2: Señales matemáticamente imposibles.

En España las correspondientes señales son correctas.



Figura 3: Señal correcta.

Pero aún podemos deducir una propiedad más:

**Corolario 2.** *Supongamos que la esfera está descompuesta en regiones pentagonales y hexagonales de modo que en cada vértice concurren tres aristas. Entonces el número de vértices es par y mayor o igual que 20.*

*Demostración.* Con la notación del teorema precedente resulta que como sabemos que  $p=12$  entonces tenemos

$$v = \frac{5p + 6h}{3} = \frac{60 + 6h}{3} = 20 + 2h$$

con lo que se cumple lo que hemos dicho.

El dodecaedro regular tiene 20 vértices, y conforme vayamos añadiendo hexágonos irá creciendo el número de vértices de acuerdo con la fórmula precedente. De hecho, demostraremos más adelante, pero con otro tipo de técnicas matemáticas, que no puede existir una descomposición de la esfera en doce pentágonos y un hexágono, que daría lugar a una descomposición con 22 vértices.

Siempre que descompongamos una esfera en regiones, la característica de Euler de la descomposición será igual a



dos, siendo este número un invariante de la esfera. Si en vez de una esfera tomamos un toro, esto es, la superficie de una rosquilla, su característica de Euler es nula, e igualmente la de todo poliedro homeomorfo a un toro.

## 2.2 El Problema de los puentes de Königsberg

También tiene a Euler como protagonista. La ciudad está situada en las orillas de un río que se divide en dos brazos y sobre una isla. Queda dividida así en cuatro regiones, unidas por siete puentes. El acertijo local era tratar de recorrer los siete puentes de la ciudad sin repetir ninguno. En realidad es un problema en que lo que importa son esos datos, más el de que regiones une cada puente, y no las medidas de los puentes o la separación entre éstos. Euler, dibujando un grafo, demostró en 1736 la imposibilidad de hacer tal recorrido, zanjando para siempre el problema.

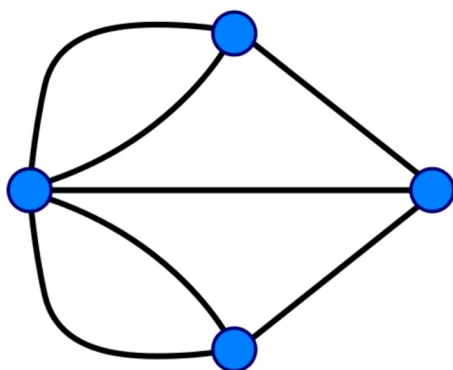


Figura 4: Grafo para resolver el problema de los puentes de Königsberg.

Los puentes están representados por las líneas (llamadas *aristas*) y las cuatro regiones por los puntos (llamados *vértices*). Entre dos vértices hay tantas aristas como puentes haya entre las correspondientes regiones. La figura se llama un *grafo*. Para que haya solución (con salida y llegada en el mismo vértice), todos los vértices del grafo tienen que tener grado par (esto es, número par de aristas en el vértice). El camino resultante se llama un *ciclo euleriano*: pasa por todas las aristas una sola vez. Si los puntos de salida y llegada son distintos, entonces éstos han de tener grado impar y todos los demás deben tener grado par. En el grafo asociado a los puentes de Königsberg los cuatro vértices tienen grado impar, por lo que el recorrido es imposible.

La elección de estos resultados como ejemplos arquetípicos de teoremas topológicos no es casual. Juegan un papel muy importante en el estudio de las propiedades matemáticas de las moléculas del carbono, como veremos más adelante. Como tantas veces a lo largo de la Historia, resultados puramente matemáticos, obtenidos casi por mero placer lúdico, son importantes por sus aplicaciones posteriores. Y también podemos observar que, aunque los resultados

son de fácil comprensión, sus demostraciones requieren pensamiento refinado, puesto que las demostraciones son universales, válidas para todos los conjuntos que están en la situación dada por las hipótesis de los enunciados.

## 3. LOS FULLERENOS

Las formas alotrópicas del carbono son muy variadas. El diamante y el grafito aparecen en la Naturaleza. En la segunda mitad del siglo pasado y principios de éste se fueron descubriendo y obteniendo otras. El *fullereno*  $C_{60}$  fue descubierto en 1985 por Harold Kroto, Robert Curl y Richard Smalley, que recibieron por ello el Premio Nobel de Química en 1996. El carbono puede tener enlaces 31, 22, 211, 1111 (donde el número indica si el enlace es sencillo, doble o triple). Haciendo un modelo matemático en el que los átomos de carbono del fullereno  $C_{60}$  ocupan los vértices y los enlaces son las aristas, los fullerenos son de tipo 211, por lo que cada vértice tiene tres aristas y se disponen espacialmente formando un *icosaedro truncado*, que es el poliedro asociado a un balón de fútbol.

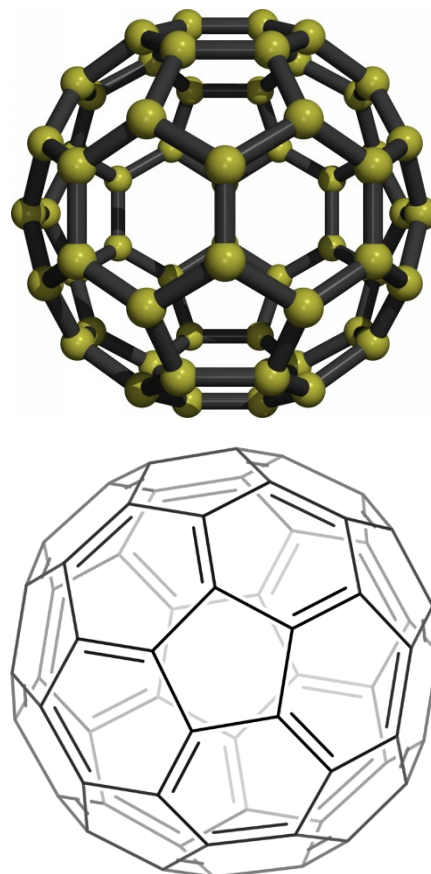


Figura 5: El buckminsterfullereno  $C_{60}$ .

La denominación de la molécula es un homenaje al arquitecto Richard Buckminster Fuller, famoso por sus diseños de cúpulas geodésicas, como la del Pabellón Americano en la Exposición Universal de Montreal del año 1967, que se recuerdan de algún modo la disposición de los átomos en la molécula  $C_{60}$ .



Existen fullerenos de diverso número de átomos, pero cada uno de ellos define descomposición de la esfera en regiones pentagonales y hexagonales de modo que en cada vértice concurren tres aristas. Así que podemos estudiarlos matemáticamente aplicando los resultados de la primera sección. Por ejemplo, en virtud del Corolario 2, todos ellos tendrán número par de vértices, que será mayor o igual que 20, con lo que serán moléculas de la forma  $C_{2n}$ .

El número de fullerenos  $C_{2n}$  diferentes crece de manera muy rápida al aumentar el valor de  $n$ ; por ejemplo, hay 1.812 fullerenos  $C_{60}$ , pero sólo uno de ellos, el llamado *buckminsterfullereno*, que es el icosaedro truncado, no tiene pentágonos adyacentes. Esta propiedad, que demostraremos en la siguiente sección, se denomina *regla del pentágono aislado* (IPR, por sus siglas en inglés) y tiene interés químico porque los fullerenos que la verifican son mucho más estables. Por algo fue éste el primero en ser descubierto.

En la Naturaleza ocurren irregularidades. Por ejemplo, podemos obtener fullerenos en que algunas de sus caras no sean pentagonales ni hexagonales, sino heptagonales. ¿Qué podemos decir de su número? Nuevamente las matemáticas vienen en nuestro auxilio. Razonamos como en la demostración del Teorema 1. Llamamos  $p$ ,  $h$  y  $H$  al número de caras pentagonales, hexagonales y heptagonales, respectivamente. Entonces

$$c = p + h + H ; a = \frac{(5p + 6h + 7H)}{2} ;$$

$$v = \frac{5p + 6h + 7H}{3}$$

con lo que haciendo un cálculo directo se ve que

$$2 = v - a + c =$$

$$\frac{5p + 6h + 7H}{3} - \frac{5p + 6h + 7H}{2} + (p + h + H) = \frac{p - H}{6}$$

lo que significa que  $p - H = 12$ . Así que por cada heptágono que aparezca debe aparecer un pentágono adicional. Si queremos formalizar el resultado, hemos demostrado el siguiente

**Teorema 3.** *Supongamos que la esfera está descompuesta en regiones pentagonales, hexagonales y heptagonales de modo que en cada vértice concurren tres aristas. Entonces el número de regiones pentagonales menos el de regiones heptagonales es igual a doce.*

#### 4. GRAFO DE UN POLIEDRO

Hasta ahora hemos estudiado las propiedades topológicas de los fullerenos empleando de modo sistemático el Teorema de Euler. Vamos a ver que a cada poliedro le podemos asociar un grafo, grafo en el sentido en que el propio Euler introdujo el concepto para resolver el problema de los puentes de Königsberg. Y aplicaremos lo que obtengamos al estudio de los fullerenos.

A cada poliedro homeomorfo a la esfera se le puede asociar un grafo, obtenido al proyectar las aristas del poliedro ortogonalmente sobre el plano que contiene a una de las caras desde un punto exterior al poliedro.

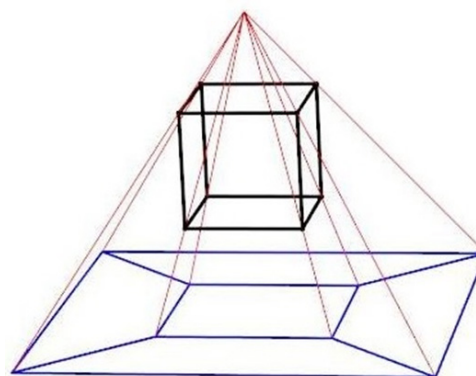


Figura 6: Proyección de Schlegel de un cubo.

La cara más próxima al centro de proyección, se proyecta englobando a todas las demás del grafo resultante. El cubo tiene el grafo indicado en la Figura 6. Este modo de obtener el grafo de un poliedro se llama *Proyección de Schlegel* y fue introducido en 1866 como medio de estudiar polítopos de cuatro dimensiones mediante sus proyecciones en el espacio de tres dimensiones.

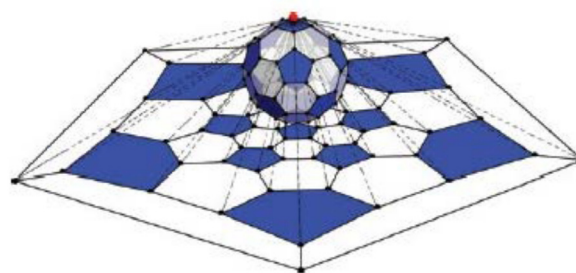


Figura 7: Proyección de Schlegel de un icosaedro truncado.

En particular, a cada fullereno se le asocia de este modo su grafo. Los grafos de los fullerenos son *3- regulares* (o cúbicos). Esto significa que llegan tres aristas a cada vértice (porque los fullerenos tienen un enlace doble y dos simples en cada carbono). Los grafos del icosaedro  $C_{20}$  y del icosaedro truncado  $C_{60}$  son<sup>1</sup>

1 Ilustraciones de R. A. Nonenmacher - Own work, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=4321718>  
Ilustraciones similares han sido elaboradas a partir de ellas.

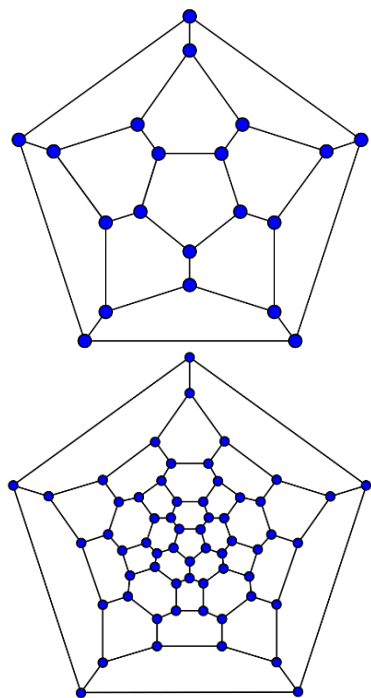


Figura 8: Proyección de Schlegel de un dodecaedro y un icosaedro truncado.

Estamos ya en condiciones de probar el siguiente teorema matemático:

**Teorema 4.** *No existe el fullereno  $C_{22}$ .*

*Demostración.* Sabemos, por el Corolario 2, que de existir tal fullereno tendría que estar compuesto por doce pentágonos y un hexágono. Coloquemos el hexágono en el centro y comencemos a rodearlo de pentágonos. Al final aparece otro hexágono: la cara que engloba a todas las demás:

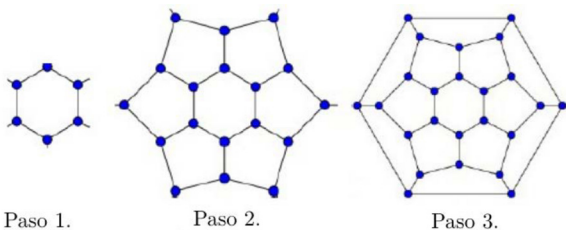


Figura 9: Pasos de la demostración del Teorema 4.

con lo que el número de hexágonos es dos.

También podemos demostrar el siguiente resultado que habíamos anunciado en la sección precedente:

**Teorema 5.** *El buckminsterfullereno  $C_{60}$  que tiene forma de icosaedro truncado, o balón de fútbol, es el fullereno más pequeño que satisface la IPR.*

*Demostración.* Como el número de pentágonos es siempre

igual a doce (por el Teorema 1), lo que tenemos que minimizar es el número de hexágonos.

Como no puede haber dos pentágonos adyacentes, cada pentágono debe estar rodeado de cinco hexágonos. Tomemos un pentágono inicial. Estará rodeado de cinco hexágonos, que forman un primer anillo que circunda el pentágono inicial. Ahora fijémonos en cada uno de esos hexágonos. Tiene seis polígonos adyacentes, uno por cada arista del hexágono. Como queremos minimizar el número de hexágonos, tres de los polígonos adyacentes deberán ser pentágonos y los otros tres hexágonos, y debiendo estar situados intercalados los pentágonos con los hexágonos, para que no haya dos pentágonos adyacentes. Obtenemos así un segundo anillo alrededor del pentágono inicial, formado por cinco pentágonos y cinco hexágonos. Iteramos el razonamiento y obtenemos otro anillo también formado por cinco pentágonos y cinco hexágonos. Finalmente, el pentágono que engloba toda la configuración junto con cinco hexágonos adyacentes a él.

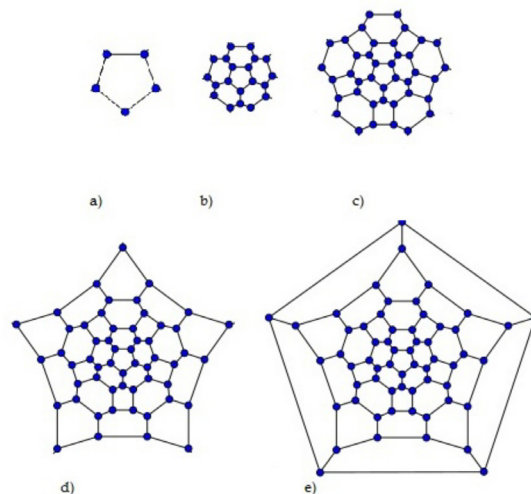


Figura 10: Pasos de la demostración del Teorema 5.

Este es el grafo del fullereno más pequeño que verifica la IPR, que es el del buckminsterfullereno  $C_{60}$ , con sus 12 pentágonos y 20 hexágonos. La demostración está concluida.

### 5. CICLOS EN EL GRAFO DE UN FULLERENO

Un ciclo en un grafo es un camino cerrado de aristas (esto es que empieza y acaba en el mismo vértice). Los grafos de los fullerenos no admiten *ciclos eulerianos* (que pasan por todas las aristas una sola vez, como se planteaba en el problema de los puentes de Königsberg, que Euler resolvió), pues todos sus vértices son de grado tres.

Un ciclo *hamiltoniano* en un grafo es un camino de aristas que empieza en un vértice, pasa por todos los vértices del grafo y vuelve al vértice inicial, sin haber pasado dos



veces por un mismo vértice. Existen fullerenos, como el icosaedro y el icosaedro truncado, en los que con un poco de paciencia podemos dibujar ciclos hamiltonianos. Basta que tomemos sus grafos asociados.

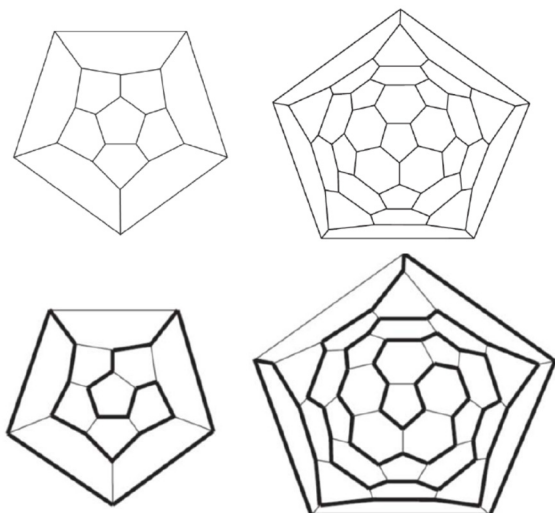


Figura 11: Grafos hamiltonianos en el dodecaedro y en el icosaedro truncado.

Esta propiedad, ¿será cierta en general o hemos sido afortunados al encontrar los ciclos hamiltonianos? Esta cuestión es un problema abierto, del que no hay demostración todavía. El enunciado positivo, todo grafo de un fullereno admite un ciclo hamiltoniano, se conoce como *conjetura de Tait*, y se espera que ciertamente sea la respuesta correcta de la cuestión.

No es difícil demostrar que si debilitamos las hipótesis el resultado es falso: existen poliedros convexos (homeomorfos a la esfera) que no admiten ciclos hamiltonianos. El rombododecaedro es ejemplo de esta situación.

**Teorema 6.** *El rombododecaedro no admite ciclos hamiltonianos.*

*Demostración.* El rombododecaedro tiene doce caras, que son rombos.

Tiene 14 vértices, de los que 8 vértices son de grado 3 (los blancos de la figura) y 6 de grado 4 (rojos). El grado es, recuérdese, el número de aristas que llegan a cada vértice. Dado un vértice cualquiera, los vértices vecinos tienen color diferente de los del vértice dado. Si hubiera un ciclo hamiltoniano, cada vez que pasara de un vértice a otro debería pasar de un vértice blanco a uno rojo, por lo que debería haber tantos de un color como del otro.

La conjetura de Tait no está demostrada todavía (ni refutada), pero sí estamos en condiciones de demostrar es la siguiente propiedad:

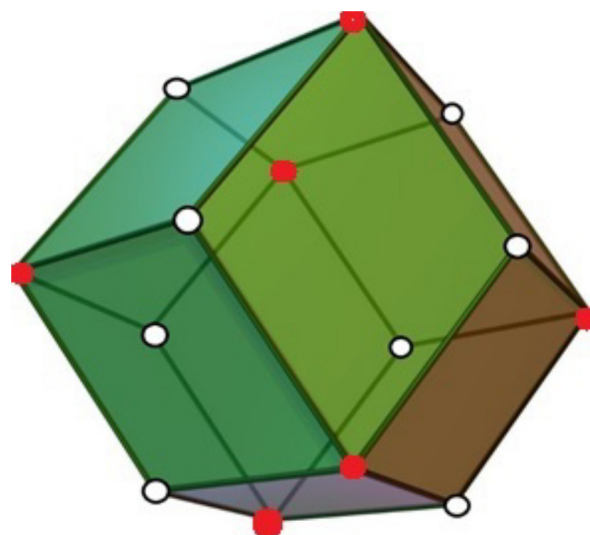


Figura 12: El rombododecaedro.

**Teorema 7.** *Si el grafo de un fullereno admite un ciclo hamiltoniano, entonces se pueden colorear las aristas de tres colores, de modo que las aristas que concurren en cada vértice sean de distinto color.*

*Demostración.* Basta observar la siguiente cadena de razonamientos:

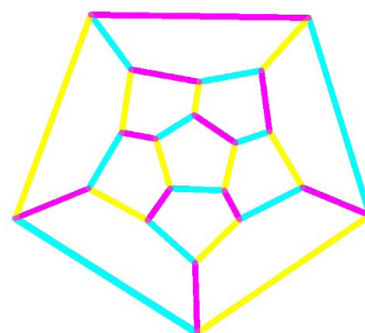


Figura 13: Ciclo hamiltoniano (azul y fucsia) en el dodecaedro.

- Un ciclo hamiltoniano tiene  $2n$  vértices, y, por tanto,  $2n$  aristas. Por lo tanto, se puede colorear alternativamente de dos colores.
- En cada vértice concurren tres aristas: dos que están en el ciclo hamiltoniano y una que no: por tanto, las aristas que no están en el ciclo no están empalmadas entre sí.
- Coloreando las aristas que faltan de un tercer color, ya tenemos el grafo entero coloreado de tres colores.

Y la demostración está concluida.

Y ahora, ¿nos hemos ido demasiado lejos en nuestros devaneos matemáticos o podemos encontrar alguna relación de este resultado con los fullerenos? En Química se llama una *estructura de Kekulé* a la determinación del





enlace doble de entre los tres que salen de cada átomo. En Teoría (matemática) de Grafos se llama *perfect matching* en un grafo a un subgrafo (esto es, a un conjunto de aristas del grafo) que contienen todos los vértices del grafo y de modo que cada vértice está en una sola arista del subgrafo. Por lo tanto, dar una estructura de Kekulé en un fullereno significa dar un *perfect matching* en el grafo asociado al fullereno. Y, uniendo con el resultado precedente, cada vez que definamos un ciclo hamiltoniano en el grafo de un fullereno estamos determinando tres estructuras de Kekulé en el fullereno: las correspondientes a cada color de los tres con que podemos colorear el grafo.

## 6. CONCLUSIONES

Podríamos proseguir el estudio con otras configuraciones de las moléculas del carbono. Por ejemplo, refiriéndonos a las matemáticas del *grafeno*, que es una capa, de un átomo de espesor, de átomos de carbono que forman una malla hexagonal. Matemáticamente hablando, definen una *teselación* del plano. O a los *nanotubos*, que se obtienen enrollando capas de grafeno de manera cilíndrica. Sin embargo, hemos preferido centrarnos en el caso de los fullerenos en que el aparato matemático que hemos necesitado es suficientemente sencillo para realizar una exposición divulgativa. En concreto, hemos podido demostrar:

- Todo fullereno tiene 12 pentágonos.
- Cada heptágono que se incluya supone añadir un nuevo pentágono.
- La no existencia de  $C_{22}$ .
- El buckminsterfullereno  $C_{60}$  es el más pequeño que verifica la regla del pentágono aislado.
- Si el grafo de un fullereno admite un ciclo hamiltoniano, se pueden colorear las aristas de tres colores, admitiendo tres estructuras de Kekulé.

## APÉNDICE: EL TEOREMA DE EULER

La exposición toma como punto de partida el teorema de Euler, que establece que para todo poliedro convexo el número de vértices menos el de aristas más el de caras es igual a dos, esto es, escrito como fórmula,  $v-a+c=2$ . Más aún, afirma que para toda descomposición poligonal de la esfera en regiones esa cantidad, la característica de Euler de la descomposición poligonal es dos, con lo que este número es un invariante de la esfera. Como todo teorema matemático, esta afirmación requiere demostración y no basta con mostrar que se satisface en todos los ejemplos que uno pueda proponer. La demostración requiere de los siguientes pasos, que esbozamos:

- La esfera se puede triangular, esto es, hacer una descomposición en regiones cada una de las cuales sea homeomorfa a un triángulo. Esto es obvio, pues tenemos muchas descomposiciones triangulares de la esfera. Por ejemplo, las que definen tetraedro, octaedro e icosaedro.
- Si en un triángulo de una triangulación se toma un punto interior y se definen tres triángulos pequeños, la característica de Euler de la triangulación no varía, puesto que el número de vértices ha aumentado en uno, el de aristas en tres y el de caras en dos (han aparecido tres caras "pequeñas" y ha desaparecido una "grande"):

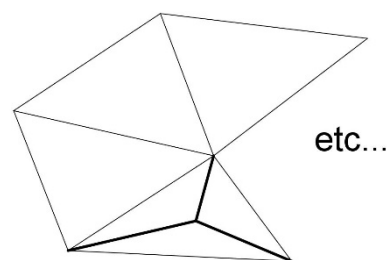


Figura 14: Invarianza de la característica de Euler.

- Por el mismo tipo de razonamiento que el del argumento precedente, toda descomposición poligonal origina (de muchos modos) una descomposición triangular, que tiene la misma característica de Euler que la poligonal. Además, dos triangulaciones de la esfera tienen la misma característica de Euler, porque siempre podemos obtener una nueva triangulación que sea refinamiento de cada una de las dos dadas y que, por el punto anterior, tendrá la misma característica que cada una de ellas:

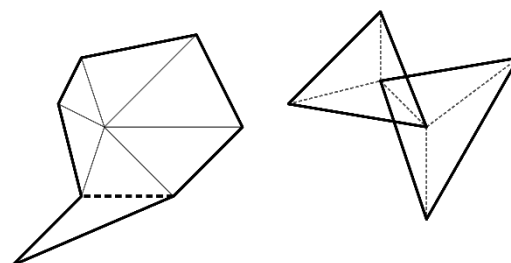


Figura 15: Invarianza en descomposiciones poligonales y subdivisión común a dos triangulaciones.

Por lo tanto, todas las descomposiciones poligonales de la esfera tienen la misma característica de Euler. Basta comprobar que para una de ellas la característica es dos para poder asegurarlo ya para todas.



## REFERENCIAS

- Alvarez Nuñez, M. F. (2013). *Teoría de grafos*.
- Andova, V., Kardoš, F., & Škrekovski, R. (2016). Mathematical aspects of fullerenes. *Ars Mathematica Contemporanea*, 11, 353-379.
- Ardanza-Trevijano, S., Arsuaga, J., Crespo, J. A., Extremiana, J. I., Hernández, L. J., Rivas, M. T., ... & Vázquez, M. (2007). Invariantes topológicos en el ADN, los Fullerenos y la Teoría de Elección Social. *La gaceta de la RSME*, 10, 611-632.
- Benedek, G., & Bernasconi, M. (2004). Fullerenes: topology and structure. *Dekker Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology: Volume 2. D-Mec*, 1235.
- Extremiana Aldana, J. I., Paricio, L. J. H., & Rodríguez, M. T. R. (2001). Poliedros. In *Margarita matemática en memoria de José Javier (Chicho) Guadalupe Hernández* (pp. 139-167). Universidad de La Rioja.
- García Fernández, S. (2015). *Las Matemáticas del Fullerenos*.
- Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F., & Smalley, R. E. (1985). C<sub>60</sub>: buckminsterfullerene. *nature*, 318(6042), 162-163.
- Martín, N. (2011). Sobre fullerenos, nanotubos de carbono y grafenos. *Arbor* (187), 115-131.
- Marušič, D. (2007). Hamilton cycles and paths in fullerenes. *Journal of chemical information and modeling*, 47(3), 732-736.
- Massey, W. S. (1972). *Introducción a la topología algebraica*. Reverté.
- Schwerdtfeger, P., Wirz, L. N., & Avery, J. (2015). The topology of fullerenes. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 5(1), 96-145.