

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Matematika – 1. stopnja

Ana Mlinar

Fulereni

Delo diplomskega seminarja

Mentor: izr. prof. dr. Riste Škrekovski

Ljubljana, 2011

KAZALO

1. Uvod	4
2. Kemijsko ozadje	4
3. Nekaj pojmov iz teorije grafov	5
4. Konstrukcija fulerenov	8
4.1. Postopek razširjanja	8
4.2. Transformacija leapfrog	9
4.3. Število neizomorfni fulerenov na n vozliščih	10
5. Ciklična povezanost	11
6. Popolna prirejanja	15
7. Zaključek	27
Literatura	27

Fulereni

POVZETEK

Fulerenski graf je kubičen, 3-povezan, ravninski graf, z 12 lici dolžine pet in ostalimi lici dolžine šest. Delo predstavi dva načina za njihovo konstrukcijo. Prvi je postopek razširjanja, s katerim je moč pridobiti fulerene s h ($h \neq 1$) lici dolžine šest, za vsak $h \in \mathbb{N}$ razen večkratnikov števila šest, drugi pa je leapfrog transformacija, s čimer konstruiramo stabilne fulerene z izoliranimi petkotnimi lici. Sledi preučevanje ciklične povezanosti. Fulereni ne vsebujejo cikličnega 3-prereza, niti cikličnega 4-prereza, torej so ciklično 5-povezani grafi. Ključni del diplomskega seminarja je iskanje števila popolnih prirejanj. Fulereni z netrivialnim cikličnim 5-prerezom vsebujejo dve antipodni penta-kapici in spadajo v skupino nanocevi. Za take fulerene na n vozliščih velja, da vsebujejo Hamiltonov cikel in zato vsaj $15 \cdot 2^{\frac{n}{20} - \frac{1}{2}}$ popolnih prirejanj. Fulereni brez netrivialnih cikličnih 5-prerezov imajo vsaj $\frac{n-380}{61}$ disjunktnih, resonantnih lic dolžine šest in zato vsebujejo vsaj $2^{\frac{n-380}{61}}$ popolnih prirejanj.

Fullerenes

ABSTRACT

A fullerene graph is a cubic and 3-connected planar graph that has exactly 12 pentagonal faces and all other faces are hexagonal. This work presents two fullerene constructions. The first is a procedure of extension by which fullerenes with h ($h \neq 1$) faces of length six can be obtained for every $h \in \mathbb{N}$ except multiples of the number six, and the other is leapfrog transformation, constructing stable fullerenes with isolated pentagonal faces. The following topic is about cyclical connectivity. Fullerenes do not contain cyclic 3-cutset, nor cyclic 4-cutset, so they are cyclically 5-edge connected graphs. The key part of this work is counting perfect matchings. Fullerenes containing a nontrivial cyclic 5-edge cutset admit two antipodal pentacaps and belong to a special class of the nanotubes. It is shown that such fullerenes with n vertices have a Hamilton cycle, and as a consequence at least $15 \cdot 2^{\frac{n}{20} - \frac{1}{2}}$ perfect matchings. Fullerenes that have no nontrivial cyclic 5-edge cutset have at least $\frac{n-380}{61}$ disjoint resonant hexagonal faces and therefore at least $2^{\frac{n-380}{61}}$ perfect matchings.

Math. Subj. Class. (2010): 05C70, 05C75

Ključne besede: fulerenski graf, ciklična povezanost, popolno prirejanje, Hamiltonov cikel

Keywords: fullerene graph, cyclical connectivity, perfect matching, Hamilton cycle

1. UVOD

Fulereni so poleg diamanta, grafitu in amfornih oblik (saje, oglje) četrta alotropija ogljika. Zaradi svojih posebnih lastnosti jih proučujejo na številnih področjih. O njihovi pomembnosti govori dejstvo, da je molekulo C_{60} , najslavnejši fuleren, revija Science leta 1991 imenovala za molekulo leta in zapisala, da razvoj znanosti v smeri fulerenov prehiti katerikoli znanstveni dosežek. Od takrat naprej se razvoj le še pospešuje in ni čudno, da so jo kasneje proglasili za molekulo desetletja in leta 1996 za njeno odkritje podelili Nobelovo nagrado.

Delo je razdeljeno na pet sklopov. Prvi bo bralca seznanil z nekaj splošnimi dejstvi o fulerenih, drugi ga bo opremil z osnovnimi pojmi iz teorije grafov. Sledila bo konstrukcija fulerenov, kjer bomo skušali nove fulerene pridobiti po postopku razširjanja in s transformacijo Leapfrog. Dotaknili se bomo tudi števila izomer posameznega fulerena. Četrty sklop bo posvečen ciklični povezanosti, v zadnjem pa nas bo zanimalo, koliko popolnih prirejanj vsebujejo fulereni.

2. KEMIJSKO OZADJE

Leta 1985 so Richard Smalley, Robert Curl in Harry Kroto proučevali produkte, ki jih dobimo z laserskim izparevanjem grafitu. Odkrili so prvi in v naravi najbolj pogost fuleren C_{60} ter ga poimenovali po ameriškem arhitektu Buckminsteru Fullerju, čigar lahke in stabilne palične kupole spominjajo na odkrito molekulo.

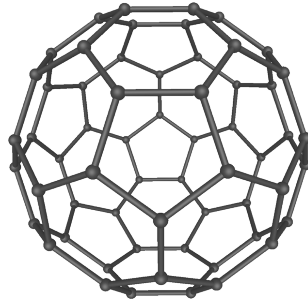


SLIKA 1. Biosfera v Montrealu arhitekta Buckminstra Fullerja.

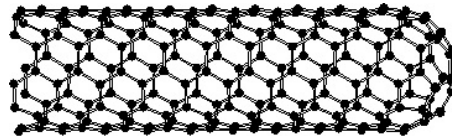
Grafitni deli, ki izparevajo, imajo na robu nezasičene, reaktivne ogljikove vezi. Da bi se oblikovale stabilne ogljikove molekule, se morajo deli skleniti vase, torej se morajo oblikovati molekule v obliki poliedra. Prepričali se bomo, da ne obstajajo poliedri s samimi šestkotnimi ploskvami, medtem ko so trikotniki, štirikotniki, sedemkotniki itd. manj verjetni zaradi kemijskih lastnosti. Fulereni so torej poliedri s samimi ogljikovimi atomi, ki imajo le petkotne in šestkotne ploskve.

Fulerenski poliedri imajo lahko obliko sfere, elipsoida ali cevi. Tistim na sferi pravimo *buckyballs*, njihov najmanjši predstavnik je dodekaeder (dvanajsterec), molekula C_{20} , najslavnejši pa Buckminsterfuleren C_{60} , ki ima obliko nogometne žoge.

Najbolj obetajoči fulereni so zaradi izjemnih lastnosti tisti v obliki cevi. Pravimo jim tudi *nanocevi*. Natezno trdnost imajo skoraj 10-krat večjo kot najboljše materiali danes, pri čemer imajo samo polovico gostote aluminija. Električni tok prevajajo bolje kot baker, s kar tri velikostne rede večjo maksimalno gostoto toka in tudi pri prevajanju toplote nimajo tekmeča. Njihov premer je reda nanometra, v dolžino pa lahko merijo tudi do nekaj centimetrov.



SLIKA 2. Buckminsterfuleren.



SLIKA 3. Nanocev.

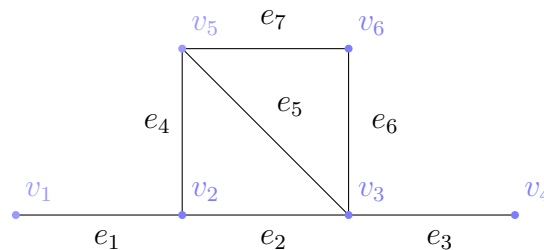
3. NEKAJ POJMOV IZ TEORIJE GRAFOV

Matematična veja, ki proučuje fullerene, je teorija grafov. Za začetek si pogledjmo nekaj osnovnih pojmov s tega področja.

Definicija 3.1. Naj bo V končna neprazna množica in E poljubna družina dvoelementnih podmnožic množice V . Paru $G = (V, E)$ pravimo *graf* na množici vozlišč $V = V(G)$ in z množico povezav $E = E(G)$.

Definicija 3.2. Element $\{v_1, v_2\}$ množice $E(G)$ pišemo krajše kot v_1v_2 . Kadar je par vozlišč v_1v_2 element množice E , torej med njima poteka povezava, pravimo, da sta vozlišči v_1 in v_2 *sosednji* v grafu G . Za povezavi pravimo, da sta *sosednji*, če imata kakšno skupno krajišče. Če nimata skupnega krajišča, sta *neodvisni*.

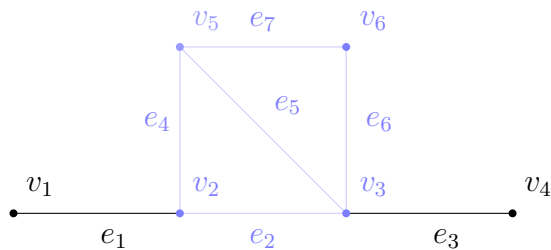
Zgled 3.3. Dani graf G sestavljata množica vozlišč $V(G) = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6\}$ in množica povezav $E(G) = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6, e_7\}$.



SLIKA 4. Primer grafa G .

Definicija 3.4. Graf H je *podgraf* grafa G , pišemo $H \subseteq G$, če velja $V(H) \subseteq V(G)$ in $E(H) \subseteq E(G)$. Podgraf H je *induciran* z množico vozlišč $U \subseteq V(G)$, če velja $U = V(H)$ in $E(H) = \{v_1v_2 \in E(G) | v_1, v_2 \in V(H)\}$. Pišemo tudi $H = G[U]$.

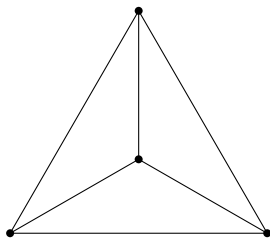
Zgled 3.5. Podgraf H grafa G , na sliki 5 označen z modro barvo, je induciran z množico vozlišč $\{v_2, v_3, v_5, v_6\}$.



SLIKA 5. $H = G[\{v_2, v_3, v_5, v_6\}]$

Definicija 3.6. Stopnja vozlišča v , pišemo $d(v)$, je število povezav grafa G , ki imajo vozlišče v za svoje krajišče. Najmanjšo stopnjo vozlišča grafa označimo z $\delta(G)$, največjo pa z $\Delta(G)$. Graf G je *regularen*, če velja $\delta(G) = \Delta(G)$ in *d-regularen*, če velja $d = \delta(G) = \Delta(G)$. Grafom, ki so 3-regularni, pravimo tudi *kubični grafi*.

Zgled 3.7. Za graf G iz zglada 3.3 je $\delta(G) = 1$ in $\Delta(G) = 3$, na sliki 6 pa je kubičen graf.



SLIKA 6. Primer kubičnega grafa.

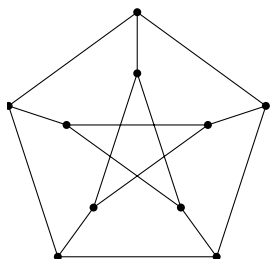
Lema 3.8. (*Lema o rokovanju*) V vsakem grafu je vsota stopenj vozlišč enaka številu povezav, pomnoženem z 2:

$$\sum_{v \in V(G)} d(v) = 2|E(G)|.$$

Dokaz. Ker ima vsaka povezava dva konca, prispeva k vsoti stopenj grafa natanko 2. Rezultat sledi. \square

Definicija 3.9. Graf je *ravninski*, če ga lahko narišemo v ravnini tako, da se nobeni njegovi povezavi ne sekata.

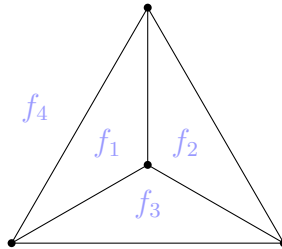
Zgled 3.10. Grafa v prejšnjih zgledih sta oba ravninska, spodnji, Petersenov graf pa je primer neravninskega grafa.



SLIKA 7. Petersenov graf.

Definicija 3.11. Vložitev grafa v ravnino razdeli ravnino na povezane dele, ki jih imenujemo *lica*. Množico lic grafa G označimo s $F(G)$. Dolžina lica f je število povezav, ki ležijo na robu lica in jo označimo z $l(f)$.

Zgled 3.12. Za spodnji graf G je $F(G) = \{f_1, f_2, f_3, f_4\}$ in $l(f_i) = 3$.



SLIKA 8. Lica grafa G .

Definicija 3.13. Graf je *povezan*, če obstaja pot po povezavah med poljubnim parom vozlišč, sicer je *nepovezan*. Nepovezan graf razpade na nekaj disjunktnih podgrafov, ki jih imenujemo *komponente* grafa. Graf je *k-povezan*, če je potrebno odstraniti vsaj k povezav, da graf razpade na več komponent.

Zgled 3.14. Graf G iz zgornjega zgleada je 3-povezan. Z analizo vseh možnosti ugotovimo, da ne glede na to, kateri dve povezavi odstranimo, graf ostane povezan. Je pa moč najti tri povezave, brez katerih G razpade na dve komponenti.

Izrek 3.15. (*Eulerjeva formula*) Naj bo G povezan ravninski graf in naj bodo $v = |V(G)|$, $e = |E(G)|$ in $f = |F(G)|$ po vrsti število vozlišč, število povezav in število lic. Potem je:

$$v - e + f = 2.$$

Dokaz. Dokaz teče tako, da si najprej ogledamo graf z enim samim vozliščem in mu nato dodajamo vozlišča in povezave.

Začetni graf z enim vozliščem ima eno vozlišče, eno lice in nič povezav, zato je $v - e + f = 1 - 0 + 1 = 2$ in Eulerjeva formula zanj velja.

V vsakem od naslednjih korakov se odločimo za eno od dveh možnosti:

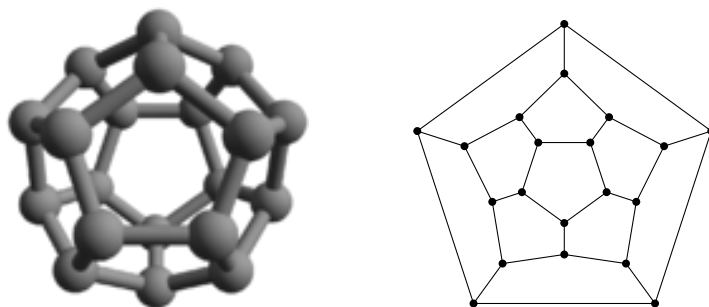
- Dodamo novo vozlišče in povezavo med njim in nekim že obstoječim vozliščem. Pri tem se število vozlišč in robov povečata za ena, število lic pa ostane enako. Dobimo $(v + 1) - (e + 1) + f = v - e + f = 2$ in Eulerjeva formula velja.
- Dodamo povezavo med dve že obstoječi vozlišči. Pri tem se povečata število povezav in lic za ena, število oglišč pa se ne spremeni. Dobimo $v - (e + 1) + (f + 1) = v - e + f = 2$ in izrek je s tem dokazan.

□

Sedaj smo pripravljeni na definicijo fulerenov znotraj teorije grafov.

Definicija 3.16. *Fulerenski graf* je kubičen, 3-povezan, ravninski graf, z vsemi lici dolžin 5 ali 6. V nadaljevanju bomo za fulerenski graf uporabljali izraz *fuleren*.

Taki grafi so primerni modeli za fulerenske molekule: ogljikovi atomi so predstavljeni z vozlišči, kemijske vezi sosednjih atomov pa s povezavami grafa.



SLIKA 9. Molekula in graf najmanjšega fulerena C_{20} .

Trditev 3.17. Vsak fuleren ima natančno 12 lic dolžine 5.

Skica dokaza. Naj bo število lic dolžine pet enako p , število lic dolžine šest enako h , v naj označuje število vozlišč, e število povezav ter f število vseh lic v fulerenu. Vidimo, da velja $f = p + h$. Ker je pet vozlišč na vsakem licu dolžine pet, šest vozlišč na vsakem licu dolžine šest in ker vsako vozlišče meji na tri lica, namreč fuleren je kubičen graf, velja $v = \frac{5p+6h}{3}$. Podobno, ker je pet povezav na vsakem licu dolžine pet, šest povezav na vsakem licu dolžine šest in ker vsaka povezava meji na 2 lici, velja $e = \frac{5p+6h}{2}$. Če sedaj ta spoznanja uporabimo v Eulerjevi formuli $v - e + f = 2$, dobimo

$$p = 12, \quad v = 2h + 20, \quad e = 3h + 30.$$

□

Trditev 3.18. Fuleren z enim samim licem dolžine 6 ne obstaja.

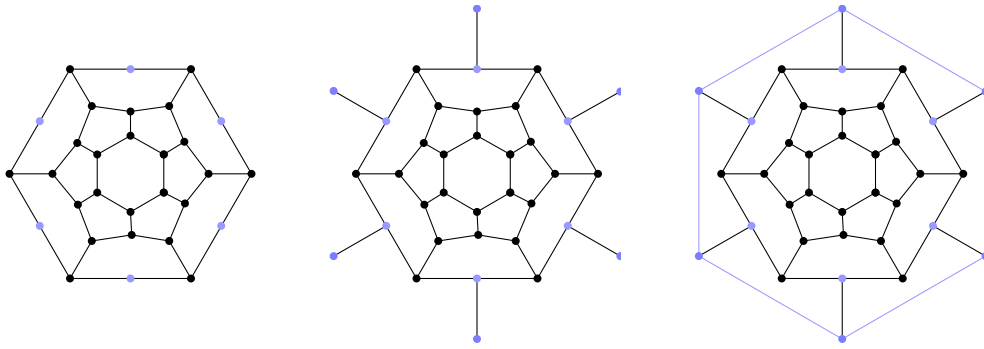
Skica dokaza. Ideja dokaza je konstrukcijska. Začnemo s šestkotnikom in nadaljujemo s samimi petkotniki. Če upoštevamo 3-povezanost fulerenov, vidimo, da je to nemogoče. □

4. KONSTRUKCIJA FULERENOV

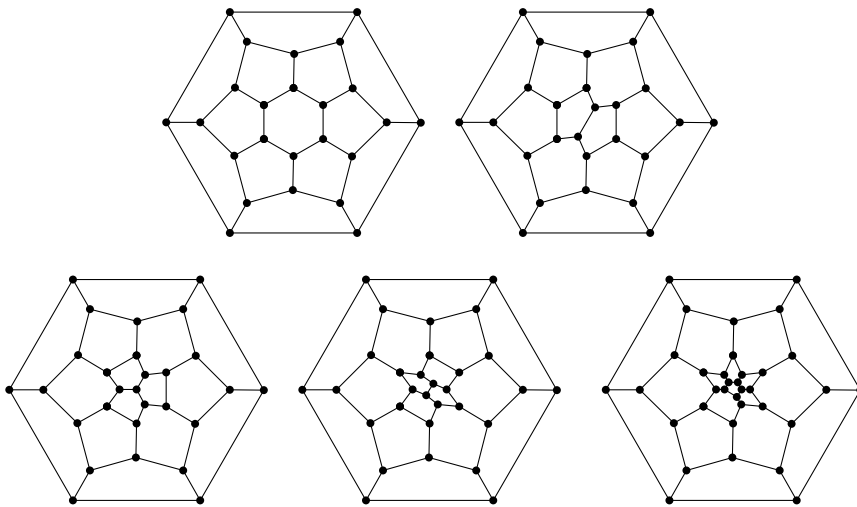
Ugotovili smo, da ima vsak fuleren natanko 12 petkotnih lic in da za število šestkotnikov skoraj (razen $h \neq 1$) ni omejitev. Zanima nas, ali obstaja fuleren z natanko h šestkotnimi lici in kako sploh konstruirati fulerene.

4.1. Postopek razširjanja. Recimo, da je graf F fuleren, katerega lica dolžine šest ima za sosede le lica dolžine pet. Najprej za vsako povezavo šestkotnega lica dodamo vozlišče (glej sliko 10). Tako iz lic dolžine 5 nastanejo lica dolžine 6. Vsakemu novemu vozlišču dodamo povezavo in na koncu vozlišče. Sedaj povežemo konce povezav med sabo. S tem postopkom dobimo nov fuleren s šest več lici dolžine šest in z istim številom lic dolžine pet.

Novo nastali fuleren ima isto lastnost kot prejšnji, zato lahko postopek ponavljamo in dobimo nove fulerene. Na tak način lahko ustvarjamo fulerene s $h = i + 6k$ šestkotnimi lici za vsak $k \in \mathbb{N}$ in i število šestkotnih lic prvotnega fulerena. Slika 11 prikazuje, da števila pokrijejo vsa naravna števila, razen števila 0, za katerega pripadajoči fuleren že poznamo, to je C_{20} , števila 1, za katerega pripadajoči fuleren ne obstaja, in pa večkratnikov števila 6, saj fuleren s šestimi šestkotniki nima zahtevane lastnosti za to konstrukcijo.



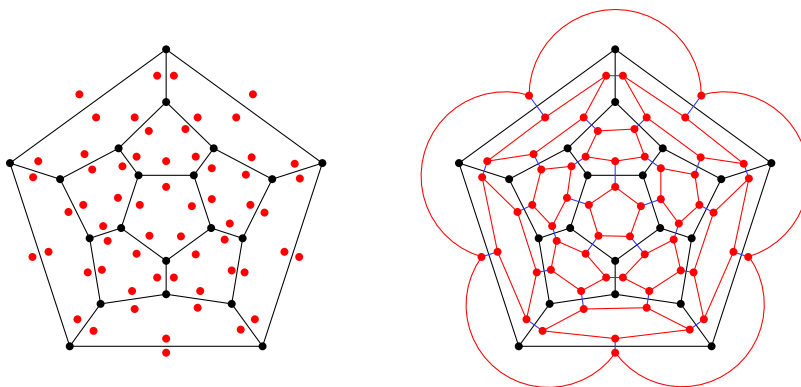
SLIKA 10. Postopek razširjanja na fullerenu C_{24} .



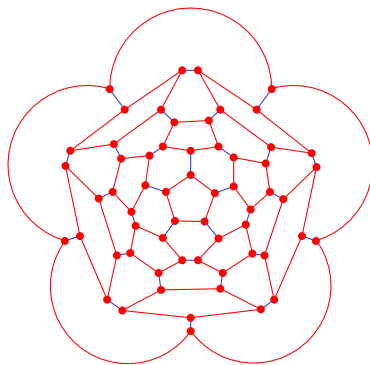
SLIKA 11. Fulereni s $h \in \{2, 3, 4, 5, 7\}$ šestkotnimi lici.

4.2. **Transformacija leapfrog.** Naj bo graf F fuleren. Nov graf $L(F)$ konstruiramo na vozliščih (e, f) , kjer je e povezava in f lice grafa F , ki vsebuje e . Vozlišči (e_1, f_1) in (e_2, f_2) sta sosednji, če drži eden izmed sledečih pogojev:

- $e_1 = e_2$, pri čemer f_1 in f_2 vsebujeta e_1 ,
- $f_1 = f_2$, pri čemer ima e_1 skupno točko z e_2 v grafu F .



SLIKA 12. Leapfrog postopek na fullerenu C_{20} .



SLIKA 13. $L(C_{20}) = C_{60}$ je najmanjši fuleren z izoliranimi petkotniki.

Leapfrog postopek konstruira izoliran fuleren, t.j. dve lici dolžine pet si ne delita povezave. To je zelo koristno za kemike, saj so ugotovili, da sosednja petkotnika zaradi napetosti in elektronskih lastnosti povzročata nestabilnost, zaradi česar so taki fulereni v naravi manj verjetni.

Če je F fuleren s h lici dolžine šest, potem ima, kot smo že pokazali, $v = 2h + 20$ vozlišč in $e = 3h + 30$ povezav. Z E , V in H označimo število povezav, vozlišč in lic dolžine šest v $L(F)$. Opazimo, da za vsako povezavo e v F dobimo dve vozlišči v $L(F)$. Torej: $V = 2e = 6h + 60$, upoštevajmo še kubičnost in lemo o rokovanju,

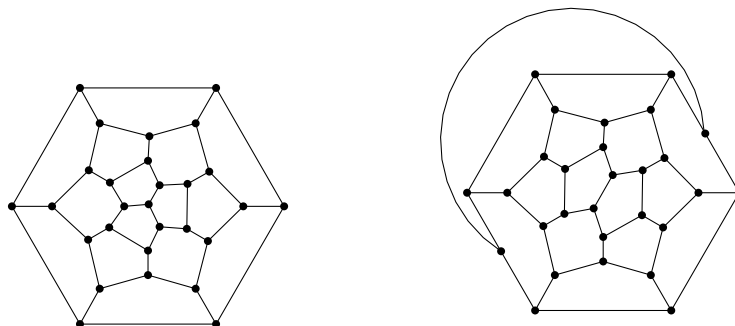
$$\sum_{v \in V(G)} d(v) = 2|E(G)|,$$

dobimo $3(6h + 60) = 2E$ in iz tega $E = 9h + 90$. Vemo, da vsaka povezava meji na dve lici, torej: $5P + 6H = 5 \cdot 12 + 6H = 2E = 2(9h + 90)$ iz česar sledi $H = 3h + 20$.

Tudi ta konstrukcija nam ne da fulerenov, katerih število šestkotnih lic bi bilo deljivo s šest, opazimo pa nekaj drugega. Grafa fulerena C_{60} , dobljena po obeh konstrukcijah, nista enaka. Medtem ko leapfrog transformacija konstruira izoliran fuleren, za prvo to ne velja. Kemiki pravijo, da ima C_{60} (vsaj) dve izomeri, matematiki pa govorimo o (ne)izomorfnosti dveh grafov.

4.3. Število neizomorfni fulerenov na n vozliščih. Fuleren s številom vozlišč ni natanko določen. Obstaja več fulerenov z istim številom vozlišč, ki si med seboj niso enaki. V teoriji grafov ustreza pojmu enakosti pojem izomorfnosti.

Zgled 4.1. Primer dveh neizomorfni fulerenov na 28 vozliščih. Prvi fuleren ima izolirana šestkotna lica, za drugega pa to ne drži.



SLIKA 14. Neizomorfna grafa C_{28} .

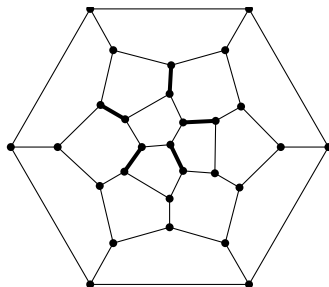
Definicija 4.2. Grafa G_1 in G_2 sta *izomorfnata*, kadar med njima obstaja kakšen *izomorfizem*, t.j. bijektivna preslikava $\phi : V(G_1) \rightarrow V(G_2)$ za katero je $uv \in E(G_1)$ natanko tedaj, ko je $\phi(u)\phi(v) \in E(G_2)$.

Spodnja tabela prikazuje število različnih fulerenov na n vozliščih.

n	Število fulerenov	n	Število fulerenov
20	1	42	45
22	0	44	89
24	1	46	116
26	1	48	199
28	2	50	271
30	3	52	437
32	6	54	580
34	6	56	924
36	15	58	1205
38	17	60	1812
40	40		

5. CIKLIČNA POVEZANOST

Definicija 5.1. Graf je *ciklično k -povezan po povezavah*, na kratko *ciklično k -povezan*, če je potrebno odstraniti vsaj k povezav, da graf razpade na dve komponenti tako, da obe vsebujeta cikel. Tej množici k povezav pravimo *ciklični k -prerez*. Če eden od razpadlih delov grafa vsebuje le k cikel, je pripadajoči ciklični k -prerez *trivialen*.



SLIKA 15. Primer trivialnega cikličnega 5-prereza (odebeljeno).

Hitro vidimo, da v nobenem fulerenem grafu ciklična povezanost ne more biti več kot pet. Namreč, če odstranimo pet povezav ob petkotnem licu (kot na sliki zgoraj), graf razpade na dva dela in oba vsebujeta cikel. Pokazali bomo, da so fulereni ciklično 5-povezani grafi. V pomoč pri dokazovanju nam bo naslednja lema.

Lema 5.2. Naj bo G 3-regularen, 3-povezan in ciklično k -povezan ravninski graf. Potem za vsak ciklični k -prerez $E = \{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ obstajata cikla C' in C'' v komponentah grafa $G - E$, tako da ima vsaka povezava $e_i \in E$ eno krajišče na C' in drugo na C'' .

Dokaz. Naj bo $E = \{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ ciklični prerez grafa G . Potem $G - E$ razpade na dve komponenti G' in G'' , ki vsebujeta cikel. Imenujmo ta cikla C_1 in C_2 . Predpostavimo lahko, da je zunanje lice G ravno zunanje lice G'' (v nasprotnem primeru

izberemo drugačno ravninsko sliko grafa G). Torej G' leži v nekem notranjem licu f_0 grafa G'' . Označimo mejo lica f_0 s C'' in mejo zunanjega lica G' s C' .

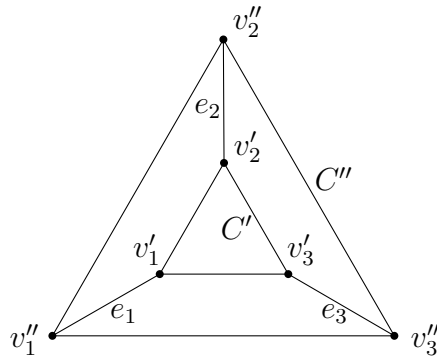
Trdimo, da sta G' in G'' 2-povezana. Če G' ni 2-povezan, obstaja povezava e , brez katere G' razpade na dve komponenti, G'_1 in G'_2 . Naj bo cikel C_1 vsebovan v G'_1 . Po drugi strani mora E vsebovati vsaj dve povezavi z enim krajiščem v G'_2 , sicer bi lahko izbrali manj kot tri povezave, brez katerih bi G razpadel na vsaj dve komponenti, kar nasprotuje 3-povezanosti grafa G . Torej je število povezav iz E z enim koncem v G'_1 največ $k - 2$. Te povezave skupaj z e tvorijo kvečjemu ciklični $(k - 1)$ -prerez grafa G . To je očitno, saj brez teh povezav G razpade na dve komponenti G'_1 in $G - G'_1$, pri čemer G'_1 vsebuje C_1 , $G - G'_1$ pa C_2 . To je protislovje s predpostavko, da je G ciklično k -povezan in zato je G' 2-povezan graf. Podobno dobimo, da je G'' 2-povezan.

Ker je vsako lice 2-povezanega ravninskega grafa omejeno s ciklom, sta C' in C'' cikla. Zaradi ravninskosti grafa G ima vsaka povezava $e_i \in E$ eno krajišče v C' in drugo v C'' . \square

Da fulereni nimajo cikličnih prereзов velikosti manj kot tri je jasno, saj so 3-povezani grafi.

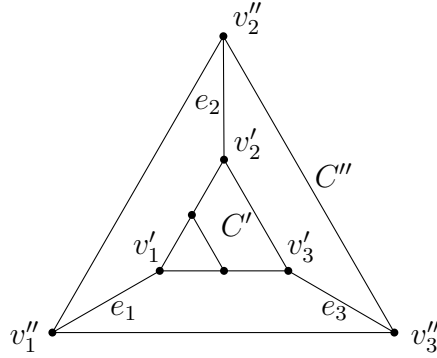
Trditev 5.3. *Fulereni nimajo cikličnega 3-prereza.*

Dokaz. Dokazujemo s protislovjem. Pa recimo, da obstaja fuleren, ki ima ciklični 3-prerez. To pomeni, da obstajajo tri povezave e_1, e_2, e_3 , brez katerih ta fuleren razpade na dve komponenti, s ciklom v vsaki. Po lemi 5.2 obstajata cikla C' in C'' , tako, da ima vsaka povezava e_i , $i \in \{1, 2, 3\}$ eno krajišče na C' in drugo na C'' . Imenujmo ta vozlišča $v'_i \in C'$ in $v''_i \in C''$, $i \in \{1, 2, 3\}$.



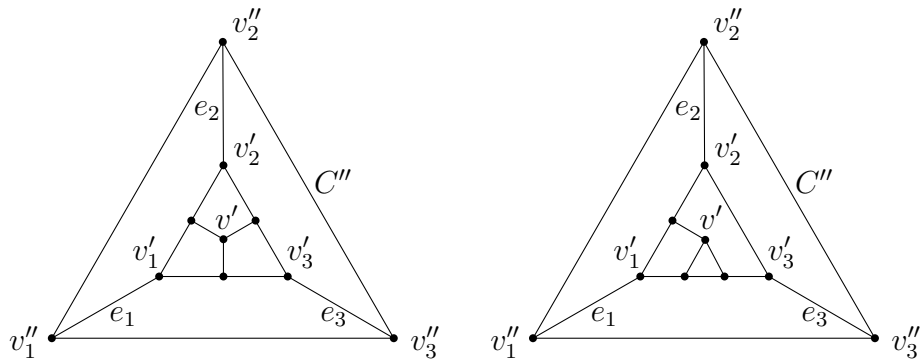
SLIKA 16. Lokalna struktura fulerena F .

Če ne bi bilo nobenih drugih vozlišč na C' , bi bilo C' trikotno lice. To je v nasprotju z definicijo fulerenov. Enako velja za C'' . Označimo sedaj število dodatnih vozlišč na C' in C'' s k' in k'' . Zaradi kubičnosti in 3-povezanosti fulerenov mora biti k' vsaj 3 (prav tako k''). Te lastnosti sicer veljajo tudi v primeru $k = 2$, vendar le, če dodatni vozlišči povežemo med sabo. S tem tvorimo lice dolžine tri in zato ta možnost odpade (slika 17). Torej velja $k' + k'' \geq 6$. Po drugi strani je $k' + k'' \leq 6$, saj na C' in C'' ni mogoče namestiti več kot šest dodatnih vozlišč, na vsakega vsaj tri, ne da bi tvorili lice dolžine več kot šest, natančneje, tvoril bi ga cikel $v'_i v'_{i+1} v''_{i+1} v''_i$. Velja torej $k' = k'' = 3$ in C', C'' sta dolžine šest. Brez škode za splošnost, naj bo C' vsebovan v C'' . Potem je vsako od treh dodatnih vozlišč na C' krajišče povezave, ki gleda v notranjost C' (v nasprotnem primeru kršimo 3-povezanost). Označimo te



SLIKA 17. Lokalna struktura F , ko je $k' = 2$.

povezave z e'_i , $i \in \{1, 2, 3\}$. Če bi dve od teh imeli skupno krajišče v' v notranjosti C' , bi zaradi kubičnosti in 3-povezanosti sledilo, da je v' tudi krajišče tretje povezave. S tem bi prideli vsaj eno trikotno ali štirikotno lice (odvisno, kako razporedimo dodatna vozlišča na C'), kar ni možno.

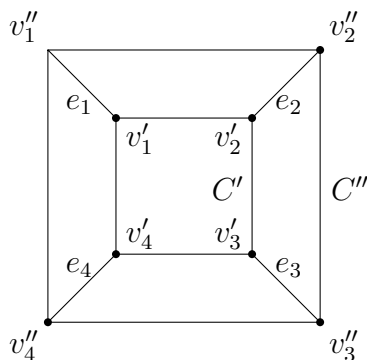


SLIKA 18. Skupno krajišče v' povezav e'_i povzroči trikotna oz. štirikotna lica v F .

Enako argumentiranje kot zgoraj nas pripelje do sklepa, da krajišča e'_i ležijo na ciklu C'_1 , z natančno tremi dodatnimi vozlišči na C'_1 . To lahko ponavljamo v neskončnost, vendar, ker je fuleren končen graf, se moramo na nekem koraku ustaviti. Recimo, da se ustavimo na n -tem koraku, torej pri ciklu C'_n . Ta cikel je lahko trikotno lice, ali pa šestkotni cikel z enim vozliščem v notrajosti. Kot smo videli, nas obe možnosti pripeljeta v protislovje z definicijo fulerenkih grafov. \square

Trditev 5.4. *Fulereni nimajo cikličnega 4-prereza.*

Dokaz. Dokaza se zopet lotimo s protislovjem. Recimo, da ostaja fuleren F , ki ga ima. Izmed vseh cikličnih 4-prerezov izberemo tistega, označimo ga z $E = \{e_1, e_2, e_3, e_4\}$, čigar ena od dveh komponent $F - E$, recimo F' , ima najmanjše število vozlišč. Druga komponenta grafa $F - E$ naj bo F'' . Po lemi 5.2 obstajata cikla C' in C'' v F' in F'' , tako da ima vsaka povezava e_i , $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ eno krajišče na C' in drugo na C'' . Po dokazu te leme lahko sklepamo tudi, da F' leži v notranjosti C'' .



SLIKA 19. Lokalna struktura fulerena F .

Označimo število dodatnih vozlišč na C' in C'' s k' in k'' . Trdimo, da je $k' + k'' \leq 8$, saj bi v nasprotnem primeru tvorili lice dolžine več kot šest (tvoril bi ga cikel $v'_i v'_{i+1} v''_{i+1} v''_i$).

Oglejmo si sedaj podgraf F' in poimenujmo z v' , e' in f' po vrsti njegovo število vozlišč, povezav ter notranjih lic. Naj bo r število vozlišč v notranjosti cikla C' . Potem imamo

$$(1) \quad v' = r + k' + 4$$

in po lemi o rokovanju 3.8

$$(2) \quad 2e' = 3r + 3k' + 8.$$

Vstavimo (1) in (2) v Eulerjevo formulo $v' - e' + f' = 1$ in dobimo

$$(3) \quad f' = e' - v' + 1 = \frac{k' + r + 2}{2}.$$

Naj bo p število lic dolžine pet in h število lic dolžine šest v notranjosti C' . Potem imamo

$$(4) \quad f' = p + h$$

in

$$(5) \quad e' = \frac{5p + 6h + k' + 4}{2},$$

saj vsaka povezava meji na dve lici. Enačbe (2)–(5) nam sedaj dajo

$$p + h = \frac{1}{2}(k' + r + 2)$$

$$5p + 6h = 4 + 2k' + 3r,$$

iz česar dobimo

$$p = k' + 2.$$

Torej je $f' = p + h \geq p = k' + 2$. To pomeni, da je v notranjosti C' vsaj $k' + 2$ lic. Zaradi kubičnosti in 3-regularnosti fulerenov, za vsako dodatno vozlišče na C' obstaja natančno ena povezava, obrnjena v notranjost C' . Označimo množico teh povezav z E' . V notranjosti C' očitno obstaja vsaj eno lice f_1 , katerega meja je disjunktna s ciklom C' . Torej je E' ciklični prerez velikosti k' grafa F , saj ena od komponent, imenujmo jo F^* , vsebuje cikel, ki omejuje lice f_1 , druga pa C' .

Potem velja $|E'| = k' \geq 4$, saj je G ciklično 4-povezan. Če ta razlog apliciramo še na C'' , dobimo $k'' \geq 4$. Zgornja trditev $k' + k'' \leq 8$ nam zato da $k' = k'' = 4$. Torej je velikost cikličnega prereza $|E'| = 4$. Ampak sedaj ima komponenta F^* grafa $F - E'$ manj vozlišč kot F' . To je v nasprotju z našo izbiro F' . \square

Ugotovili smo, da je potrebno odstraniti vsaj pet povezav, da fullerene razpade na dve komponenti, s ciklom v vsaki.

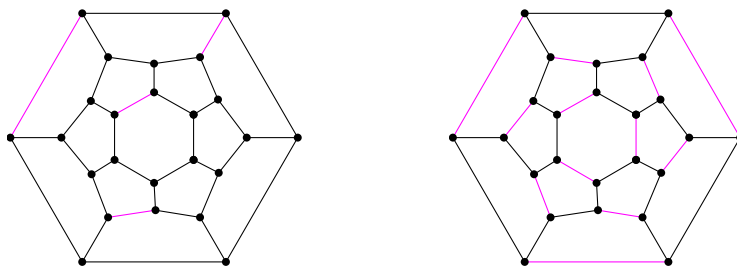
Trditev 5.5. *Fulereni so ciklično 5-povezani.*

Posledica 5.6. *Dolžina najmanjšega cikla v fulerenkih grafih je pet.*

6. POPOLNA PRIREJANJA

Ogljikovi atomi so 4-valentni, torej je natanko ena izmed treh vezi v fulerenu podvojena. Tej množici podvojenih vezi kemiki pravijo *Kekulé struktura*, v teoriji grafov pa to ustreza pojmu popolno prirejanje.

Definicija 6.1. *Prirejanje* v grafu G je množica povezav $M \subset E(G)$, kjer si nobeni dve povezavi iz M ne delita skupnega krajišča. Prirejanje M je *popolno*, če je vsako vozlišče v G krajišče neke povezave v M .



SLIKA 20. Primer prirejanja (levo) in popolnega prirejanja (desno) na fulerenu C_{24} .

Zanima nas, koliko različnih popolnih prirejanj lahko najdemo v splošnem fulerenem grafu, saj je to število indikator za stabilnost fulerenske molekule.

Ker so fulereni kubični grafi, hitro vidimo, da ima vsak fullerene vsaj tri različna popolna prirejanja. Dobimo jih tako, da tri povezave pri vsakem vozlišču pobarvamo z različnimi barvami. Vsako izmed treh barvanj tvori popolno prirejanje, saj so pri takem prirejanju pokrita vsa vozlišča in nobeno prirejanje ne vsebuje vozlišča več kot enkrat.

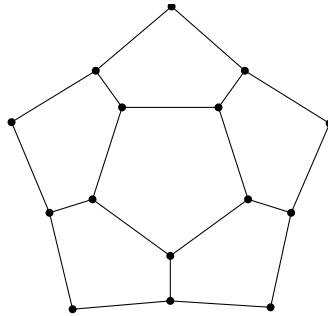
Trditev 6.2. *Število popolnih prirejanj v fulerenih raste eksponentno s številom vozlišč.*

Dokaz je razdeljen na dva dela. Najprej bomo pokazali, da trditev velja za fulerene, ki imajo netrivialne ciklične 5-prereze, potem pa še za fulerene, ki nimajo netrivialnih cikličnih 5-prerezov.

Naj bo C cikel v fulerenu F . Z $\text{Not}(C)$ označimo množico vozlišč v F , ki ležijo znotraj cikla C , z $\text{Zun}(C)$ pa tista vozlišča iz F , ki ležijo zunaj cikla C . Naslednja trditev je takojšnja posledica Eulerjeve formule.

Trditev 6.3. Naj bo C cikel dolžine deset v fulerenu F , tako da obstaja natančno pet vozlišč na C , ki imajo sosede v notranjosti C . Potem obstaja natančno šest lic dolžine 5 v podgrafu, induciranem z $V(C) \cup \text{Not}(C)$. Za število šestkotnih lic ni omejitev.

Najprej bomo pokazali, da vsak fuleren, ki ima netrivialen ciklični 5-prerez, vsebuje dve antipodni penta-kapici. *Penta-kapica* je ravninski graf na 15 vozliščih in s sedmimi lici, od tega je šest lic dolžine pet in eno lice dolžine deset. Dodekader naprimer dobimo iz dveh penta-kapic tako, da identificiramo deset vozlišč na zunanjem obroču obeh penta-kapic. Za pomoč pri dokazovanju nam bo prav prišla naslednja lema.



SLIKA 21. Penta-kapica.

Naj bo $\{f_i; i \in \mathbb{Z}_l\}$ taka množica l lic fulerena F , da je f_i preko povezave e_i sosednji z f_{i+1} , $i \in \mathbb{Z}_l$. Če so povezave iz $\{e_i; i \in \mathbb{Z}_l\}$ neodvisne, pravimo, da $\{f_i; i \in \mathbb{Z}_l\}$ tvori obroč l lic.

Lema 6.4. Naj bo F fuleren, ki vsebuje obroč R petih lic in naj bo C notranji ter C' zunanji cikel R . Potem velja ena od sledečih možnosti:

- C ali C' je lice,
- oba C in C' sta dolžine deset in vseh pet lic obroča R je šestkotnih.

Dokaz. Naj bodo f_0, f_1, f_2, f_3 in f_4 lica obroča R , tako da je f_i sosednji z f_{i+1} , $i \in \mathbb{Z}_5$. Naj bo T množica povezav med temi lici (slika 22). Očitno je T ciklični 5-prerez grafa F in če je T trivialen ciklični 5-prerez, je eno izmed C in C' lice. S tem je prva možnost dokazana. Za dokaz druge možnosti predpostavimo, da T ni trivialen ciklični 5-prerez in da nobeno izmed C in C' ni lice.

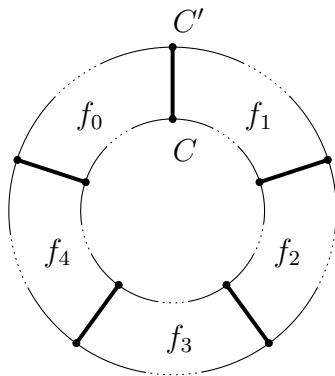
Naj bo $S = \text{Not}(C)$, $S' = \text{Zun}(C')$, l dolžina C in l' dolžina cikla C' . Brez škode za splošnost naj bo $l \leq l'$. V odvisnosti od tega, ali je vseh pet lic v R dolžine pet, ali v drugem skrajnem primeru dolžine šest, ali pa je mogoče nekaj takih z dolžino pet in nekaj takih z dolžino šest, dobimo neenakost

$$(6) \quad 15 \leq l + l' \leq 20.$$

Glede na to, da je T netrivialni ciklični 5-prerez in da C ni lice, mora biti $l \geq 6$.

Če je $l \in \{6, 7\}$, ima ena (v primeru šest) oz. dve (v primeru sedem) povezavi, zaradi 3-regularnosti, svoji krajišči v S . Z izbrisom teh povezav graf F razpade na dva dela, kar je v nasprotju s 3-povezanostjo fulerenov. Zato je $l \geq 8$.

Pa recimo, da je $l = 8$. Potem obstaja množica treh povezav $\{u_1v_1, u_2v_2, u_3v_3\}$, kjer so $u_1, u_2, u_3 \in V(C)$, $u_i \neq u_j$ za $i \neq j$ in $v_1, v_2, v_3 \in S$. Ker je F ciklično 5-povezan, je podgraf F , induciran s S , gozd, tj. graf, ki ne vsebuje nobenega cikla. V nasprotnem primeru bi lahko odstranili zgornje tri povezave in F bi razpadel na



SLIKA 22. Lokalna struktura fulerena F , ki vsebuje netrivialni ciklični 5-prerez.

dva dela, pri čemer bi vsak vseboval cikel, kar nas pripelje v protislovje. Torej je tudi podgraf F , induciran s S in množico $\{u_1, u_2, u_3\}$, gozd. Imenujmo ta graf X . Naj bo $m = |S \cup \{u_1, u_2, u_3\}| = |V(X)|$. Ker so vsa vozlišča v S stopnje tri, nam lema o rokovanju da $2|E(X)| = 3(m - 3) + 3$, po drugi strani pa za gozdove velja enačba $|E(X)| = |V(X)| - p = m - p$, kjer je p število komponent grafa X . Dobimo

$$(7) \quad m = 6 - 2p,$$

iz česar sledi $p = 1$ in zato $m = 4$. Torej je $|S| = 1$ in $v_1 = v_2 = v_3$. To nas pripelje v protislovje s posledico 5.6, saj podgraf, induciran z $V(C) \cup \text{Not}(C)$, vsebuje 3 in/ali 4-cikle.

Predpostavimo sedaj, da je $l = 9$. Potem obstaja množica $\{u_1v_1, u_2v_2, u_3v_3, u_4v_4\}$ štirih povezav, kjer so $u_1, u_2, u_3, u_4 \in V(C)$, $u_i \neq u_j$ za $i \neq j$ in $v_1, v_2, v_3, v_4 \in S$. Ker je F ciklično 5-povezan, je podgraf F , induciran s S , zopet gozd in prav tako podgraf F induciran s S in množico $\{u_1, u_2, u_3, u_4\}$. Slednjega imenujmo X . Naj bo $m = |S \cup \{u_1, u_2, u_3, u_4\}| = |V(X)|$. Podobno kot zgoraj dobimo

$$(8) \quad m = 8 - 2p,$$

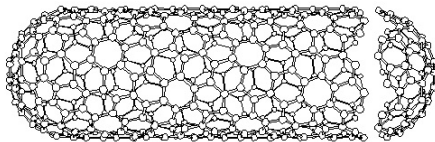
kjer je p število povezanih komponent X . Očitno je $p \leq 2$. Če je $p = 1$, nam (8) da $m = 6$ in tako S vsebuje dve vozlišči. Naj bo $v_1 = v_2$ ter $v_3 = v_4$. X ima dve vozlišči stopnje tri in štiri vozlišča stopnje ena. Ampak ker je $l = 9$, podobno kot v primeru $l = 8$, vidimo, da podgraf, induciran z $V(C) \cup \text{Not}(C)$, vsebuje cikel dolžine štiri, protislovje. Če je $p = 2$, nam (8) da $m = 4$. To pomeni $S = \emptyset$. Naše štiri povezave so torej $u_1u_2 = u_2u_1$ in $u_3u_4 = u_4u_3$, kar pa nas zopet pripelje v protislovje s posledico 5.6.

Upoštevamo (6) in dobimo $l = l' = 10$, ter s tem dejstvo, da so vsa lica f_i , $i \in \mathbb{Z}_5$ obroča R dolžine šest. \square

Naj bo R obroč fulerena F , sestavljen iz lic, z notranjim ciklom C in zunanjim C' . Lice $f \in R$ je tipa $(j) = (j)_C$, če obstaja j vozlišč na f , ki imajo tretjega soseda (tistega, ki ni neposredni sosed na C) v $\text{Not}(C) \cup V(C)$. Ker je f lahko le petkotno ali šestkotno, velja $0 \leq j \leq 2$. Za obroč R , ki vsebuje r lic f_0, f_1, \dots, f_{r-1} , tako da je f_i sosednji z f_{i+1} , $i \in \mathbb{Z}_r$, pravimo, da je tipa $(j_0j_1 \cdots j_{r-1}) = (j_0j_1 \cdots j_{r-1})_C$, če je $f_i \in R$ tipa (j_i) , za vsak $i \in \mathbb{Z}_r$. Na primer, obroč, za katerega je notranji cikel lice, je tipa (00000), če je notranje lice dolžine pet oz. tipa (000000), če je notranje lice dolžine šest.

Trditev 6.5. Naj bo F fuleren z netrivialnim cikličnim 5-prerezom. Potem F vsebuje penta-kapico, natančneje, vsebuje dve disjunktni antipodni penta-kapici.

Opomba 6.6. Fulereni z netrivialnimi cikličnimi 5-prerezi so posebne vrste nanocevki.



SLIKA 23. Primer antipodnih pentakapic v nanocevi.

Dokaz. Naj bo T netrivialen ciklični 5-prerez fulerena F in R obroč, ki ga določa T . R vsebuje pet lic f_0, f_1, f_2, f_3 in f_4 , tako da je f_i sosednji z f_{i+1} , $i \in \mathbb{Z}_5$, preko povezave iz T . Naj bo C zopet notranji, C' zunanji cikel R , $S = \text{Not}(C)$, $S' = \text{Zun}(C')$ in $l = l(C)$ ter $l' = l(C')$. Lema 6.4 nam da $l = l' = 10$. Torej je vseh pet lic obroča R šestkotnih in na C je natančno pet vozlišč, ki imajo soseda v S . Glede na to, kako razvrstimo vozlišča na C , je R lahko sledečih tipov: (11111), (21110), (21101), (22100), (21200), (20210) ali (01022), pri čemer (01022) dobimo iz (21200), če zamenjamo vlogi C in C' . R je lahko torej šestih različnih tipov, ki jih prikazuje slika 24.

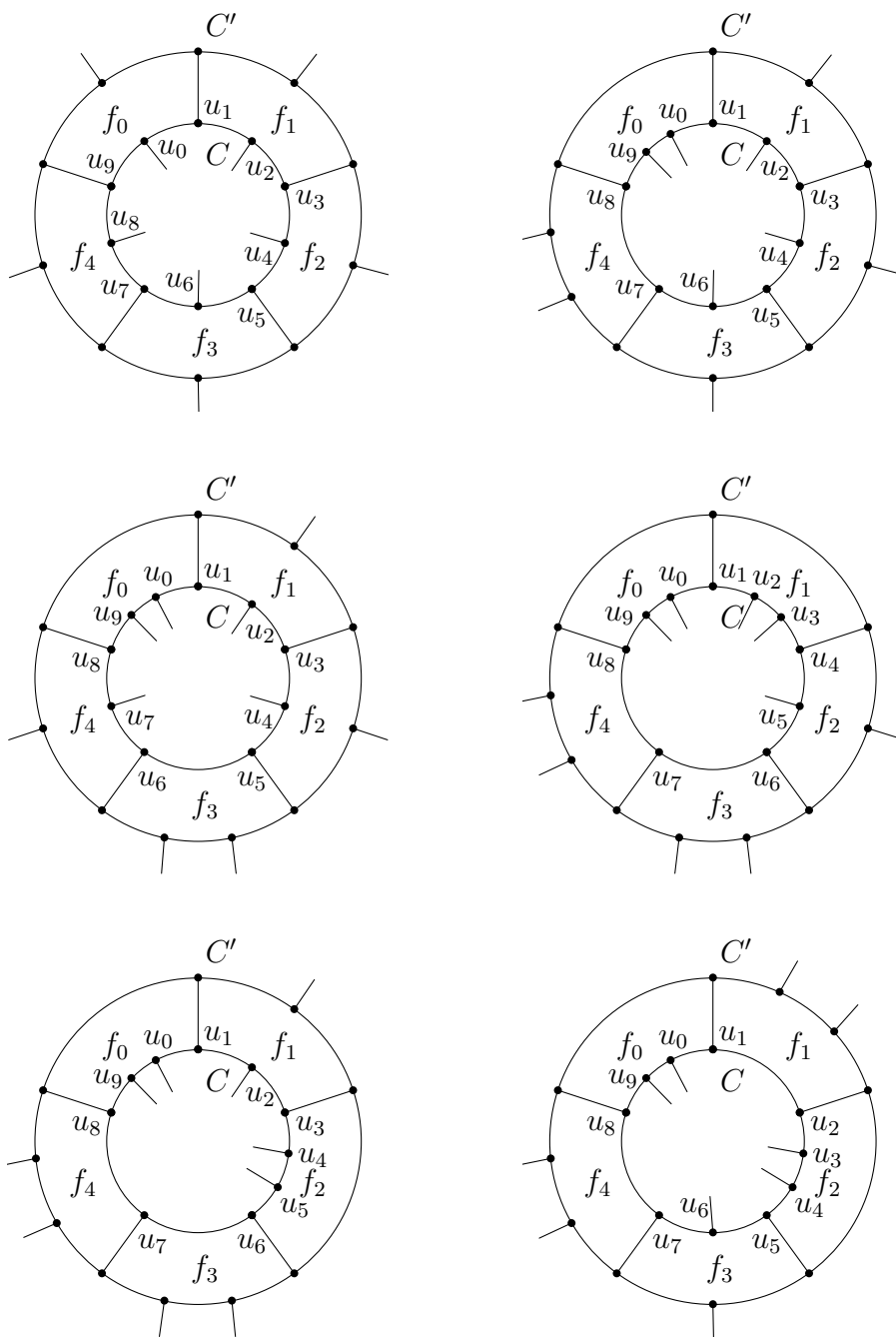
Trdimo, da je R lahko le tipa (11111). Naj bo $C = u_0 u_1 \cdots u_9$. Predpostavimo najprej, da obstajata $i, j \in \mathbb{Z}_{10}$, $j \notin \{i-1, i, i+1\}$, da sta u_i in u_j sosednji vozlišči. Slika 25 prikazuje primer na obroču tipa (21110). Ravninskost in 3-povezanost F implicirata, da $u_i, u_{i+1}, \dots, u_{j-1}, u_j$ ali pa $u_j, u_{j+1}, \dots, u_{i-1}, u_i$ določa lice F , ki ga imenujmo f . S preverjanjem vseh šestih možnosti dobimo, da je R lahko le tipa (21200) ali tipa (22100). Ampak potem $f f_0 f_1 f_2$ tvorijo obroč štirih lic, kar nas pripelje v protislovje s ciklično 5-povezanostjo fulerenov (slika 26).

Pa recimo sedaj, da obstajata $i, j \in \mathbb{Z}_9$, $i \neq j$, da imata u_i in u_j skupnega soseda v S . Če množico sosedov vozlišča u označimo z $N(u)$, to pomeni $N(u_i) \cap N(u_j) \cap S \neq \emptyset$. Ker je dolžina najmanjšega cikla v F pet, dobimo $3 \leq i - j \leq 5$. Ravninskost in 3-povezanost F kot prej implicirata, da $u_i, u_{i+1}, \dots, u_{j-1}, u_j$ ali pa $u_j, u_{j+1}, \dots, u_{i-1}, u_i$ določa lice f v F . Opazimo, da u_i in u_j ne moreta ležati na sosednjih licih obroča R , torej ima f za soseda eno, ali pa dve lici iz R tipa (0). Če je sosed f tipa (0) eden, je f petkotno lice. V tem primeru f skupaj s štirimi lici obroča R , ki niso tipa (0), tvori obroč petih lic, kar nasprotuje lemi 6.4. Če pa sta soseda f tipa (0) dva, potem f skupaj s tremi neničelnimi lici R tvori obroč štirih lic, kar pa nasprotuje ciklični 5-povezanosti F (slika 27).

Velja torej $N(u_i) \cap N(u_j) \cap S = \emptyset$ in zato $|S| \geq 5$. To pomeni, da tipa (22100) in (21200) na prideta v poštev, saj bi s tem dobili lice dolžine sedem ali več. Če je graf induciran s S in s tem tudi graf induciran s $S + \{u_{i_1}, u_{i_2}, u_{i_3}, u_{i_4}, u_{i_5}\}$ (pri čemer je $\{u_{i_1}, u_{i_2}, u_{i_3}, u_{i_4}, u_{i_5}\}$ množica vozlišč s tretjimi sosedi v $\text{Not}(C) \cup V(C)$) gozd, dobimo

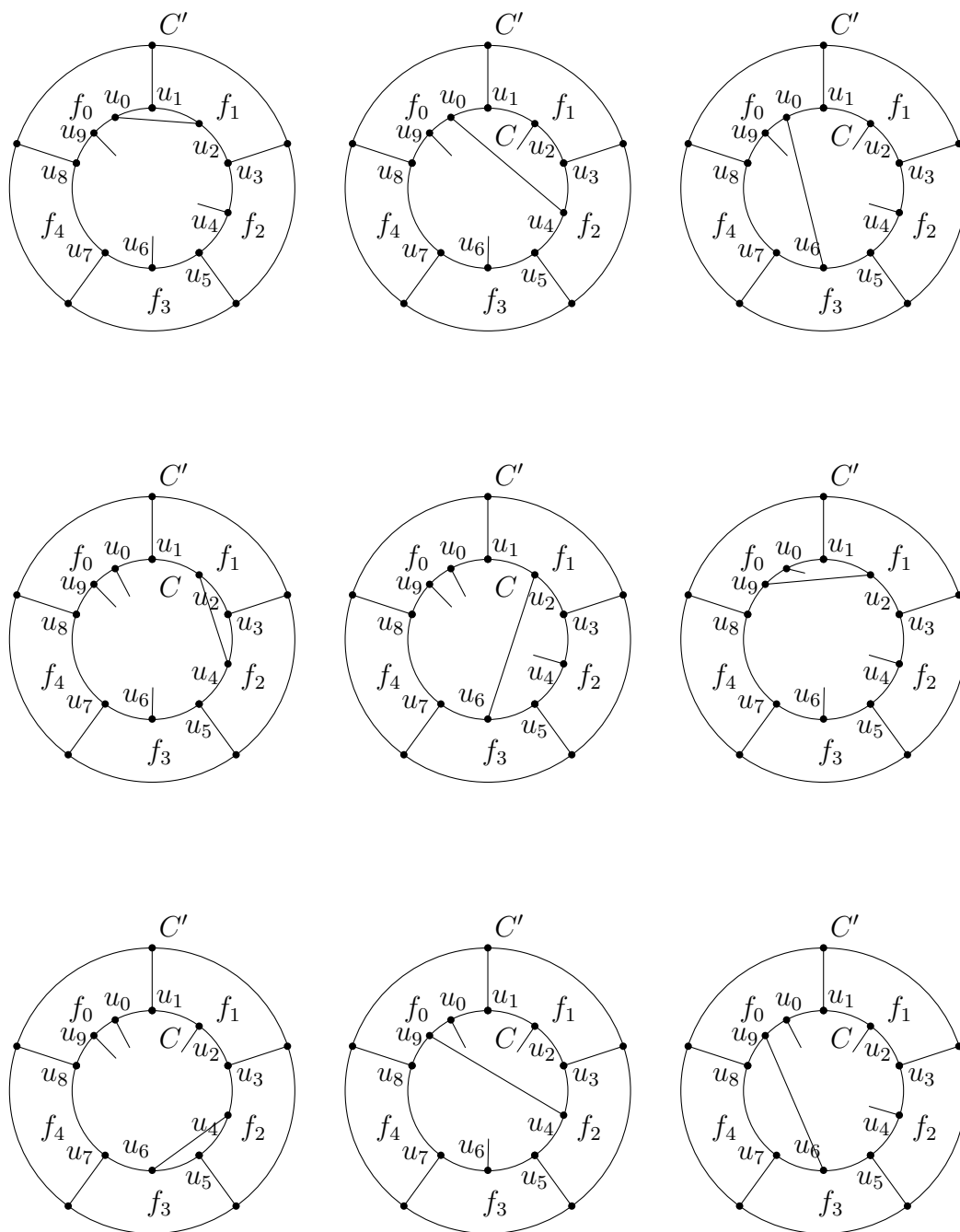
$$(9) \quad |S \cup \{u_{i_1}, u_{i_2}, u_{i_3}, u_{i_4}, u_{i_5}\}| = 10 - 2p,$$

kjer je p število povezanih komponent grafa $F[S + \{u_{i_1}, u_{i_2}, u_{i_3}, u_{i_4}, u_{i_5}\}]$. Ampak, ker je $|S \cup \{u_{i_1}, u_{i_2}, u_{i_3}, u_{i_4}, u_{i_5}\}| \geq 10$ in $p \geq 1$, je to nemogoče. Zato $F[S]$ vsebuje cikel in obstaja obroč petih lic R' , katerega zunanji cikel je C . Po lemi 6.4 je lahko

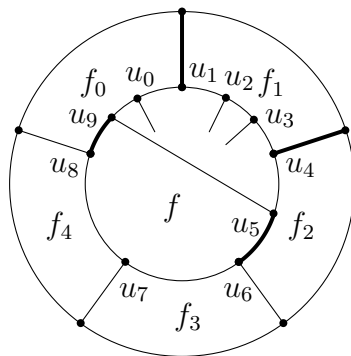


SLIKA 24. Šest možnih tipov R . Po vrsti (11111), (21110), (21101), (22100), (21200) in (20210).

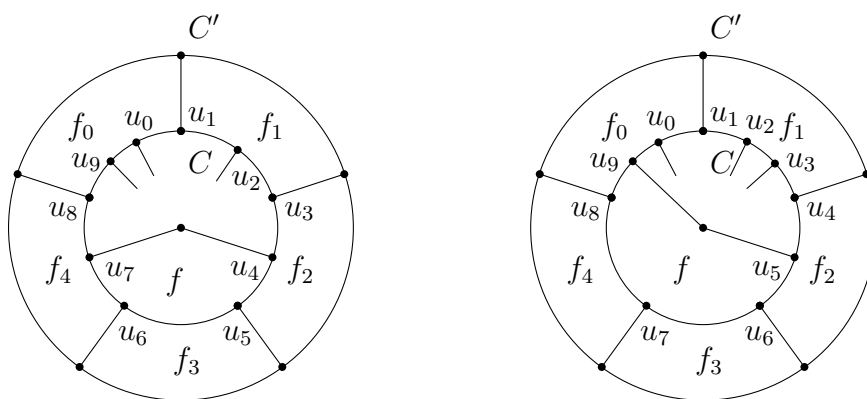
notranji cikel obroča R' petkotno lice in vsa lica R' so petkotna, ali pa so vsa lica v R' dolžine šest. Če velja prvo, je trditev dokazana. V nasprotnem primeru zamenjamo R z R' , nadaljujemo z argumenti zgoraj in upoštevamo, da je F končen graf. Tako pridemo do obroča s petimi lici dolžine pet, kar nam da penta-kapico. Natančneje, ker obroč sosedni obroču tipa (21110), (21101) ali (20210) vedno vsebuje šestkotno lice, se postopek ustavi le, če je R tipa (11111). Pri zunanjem ciklu C' je postopek enak, zato pridelamo dve disjunktni antipodni penta-kapici. \square



SLIKA 25. Slika prikazuje vse možnosti na obroču tipa (21110) za $i, j \in \mathbb{Z}_{10}, j \notin \{i-1, i, i+1\}$, ko sta u_i in u_j sosednji vozlišči. Primeri 1, 4 in 7 odpadejo, saj pridelamo trikotno lice. Enako velja za primer 9, ko pridelamo štirikotno lice. Primer 2 bi brez povezave usmerjene v notranjost C in s krajiščem u_2 razpadel na dva disjunktna grafa, kar nasprotuje 3-povezanosti fullerenskih gafov. Zaradi istega razloga odpadejo tudi ostali primeri.



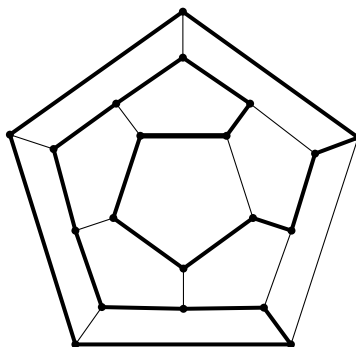
SLIKA 26. Obroč štirih lic v primeru (22100) tvori ciklični 4-prerez, označen odebeljeno.



SLIKA 27. V prvem primeru, ko ima f za soseda eno lice iz R tipa (0), skupaj z f_4, f_0, f_1 in f_2 tvori obroč petih lic. To nasprotuje lemi 6.4, saj notranji cikel novega obroča ni dolžine 10. V dugem primeru, ko f meji na dve lici iz R tipa (0), z f_0, f_1 in f_2 tvori obroč štirih lic, kar pa nasprotuje ciklični 5-povezanosti.

Definicija 6.7. Cikel C v grafu G je *Hamiltonov*, če velja $V(C) = V(G)$.

Zgled 6.8. Dodekaeder vsebuje Hamiltonov cikel.



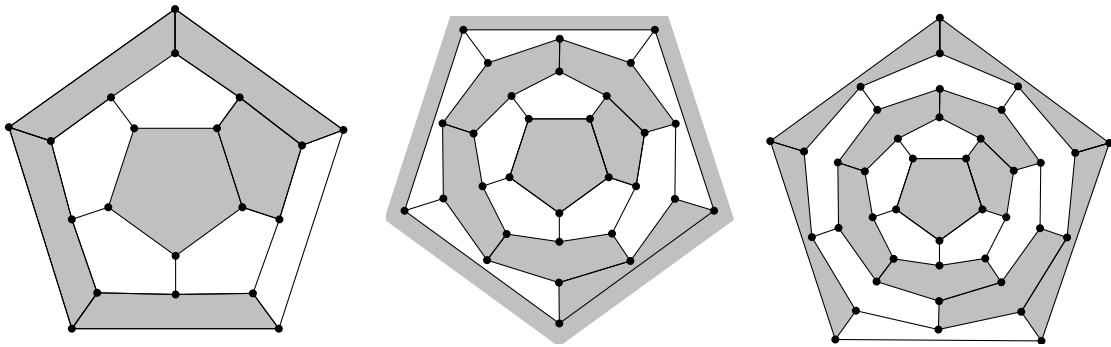
SLIKA 28. Hamiltonov cikel v dodekaedru.

Trditev 6.9. Naj bo F fuleren z netrivialnim cikličnim 5-prerezom ali dodekaeder. Potem F vsebuje Hamiltonov cikel. Velja:

- če je število šestkotnih lic v F liho, potem obstaja pot lic, ki vsebuje natančno dve petkotni lici iz vsake od penta-kapice. Meja te poti določa Hamiltonov cikel v F in
- če je število šestkotnih lic v F sodo, potem obstaja pot lic, ki vsebuje natančno šest petkotnih lic, in sicer dve iz prve in štiri iz druge penta-kapice. Meja te poti določa Hamiltonov cikel v F .

Dokaz. Po trditvi 6.5 fuleren F vsebuje dve antipodni penta-kapici. Po dokazu trditve 6.5 lahko sklepamo, da med tema kopicama obstajajo obroči s petimi šestkotnimi lici, kratko šestkotniški obroči, tako da za vsak tak obroč drži naslednje: v vsakem šestkotnem licu obroča obstaja vozlišče, ki ima soseda znotraj obroča in vozlišče, ki ima soseda zunaj obroča.

Naj bo h število lic dolžine šest v F . Velja $h = 5r$, kjer je r število šestkotniških obročev v F . Dokaz bo tekel z indukcijo na r . Če je $r = 0$, je F dodekaeder in pot lic, ki porodi Hamiltonov cikel očitno obstaja. To velja tudi za $r \leq 2$ (slika 29).

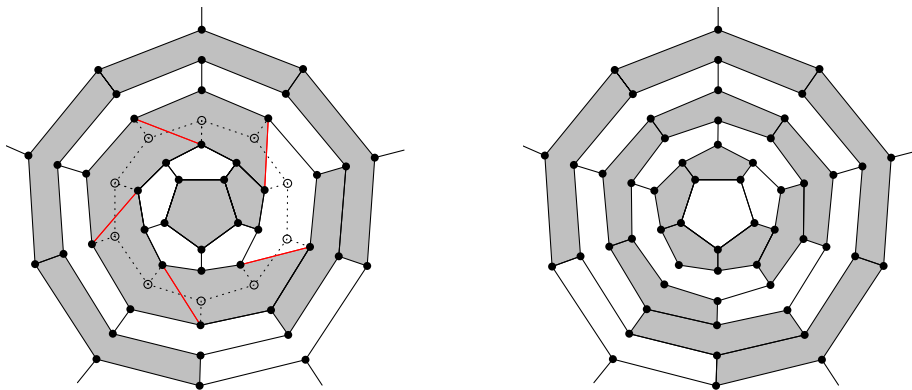


SLIKA 29. Pot lic, ki določa Hamiltonov cikel za $r = 0$, $r = 1$ in $r = 2$.

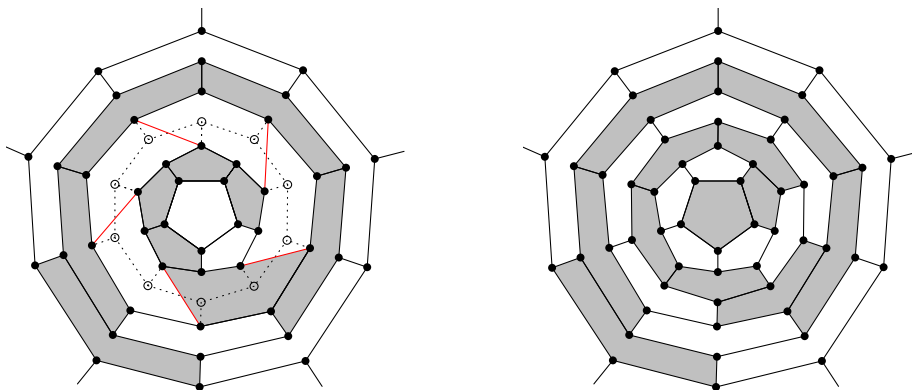
Recimo sedaj, da naša trditev velja za fulerene z $r > 2$ in pokažimo, da velja tudi za fulerene z $r + 1$ šestkotniškimi obroči. Označimo z R šestkotniški obroč, ki meji na eno od penta-kapic in z R' šestkotniški obroč sosedeni z R . Naj bo C_0 notranji in C_1 zunanji cikel obroča R . C_1 je torej notranji cikel R' , C_2 pa naj bo zunanji cikel R' . Iz fulerena z $r + 1$ dobimo fuleren z r šestkotniškimi lici na sledeč način: odstranimo vozlišča cikla C_1 in s tem povezave, katerih krajišča so to bila, ter povežemo vozlišča stopnje dva, kot prikazujeta sliki 30 in 31. Dobljeni fuleren označimo z \overline{F} .

Če je $r + 1$ sodo, je r liho. Po indukciji obstaja Hamiltonova pot v \overline{F} , ki jo tvori pot lic z natančno dvema petkotnima licema v vsaki penta-kapici. Brez težav sedaj konstruiramo pot lic v F z natančno šestimi petkotnimi lici, ki določa Hamiltonov cikel v F (slika 30).

Če pa je $r + 1$ liho, je r sodo. Po indukciji obstaja Hamiltonova pot v \overline{F} , ki jo tvori pot lic z dvema petkotnima licema v eni in štirimi petkotnimi lici v drugi penta-kapici. Zopet konstruiramo pot lic v F z natančno dvema petkotnima licema v vsaki penta-kapici in tako dobimo Hamiltonov cikel (slika 31). \square



SLIKA 30. Lokalna struktura Hamiltonovega cikla v \bar{F} na levi ter lokalna struktura Hamiltonovega cikla v F na desni, za $r + 1$ sodo.



SLIKA 31. Lokalna struktura Hamiltonovega cikla v \bar{F} na levi ter lokalna struktura Hamiltonovega cikla v F na desni, za $r + 1$ liho.

Opazimo, da pot lic v fulerenu z netrivialnim cikličnim 5-prerezom, konstruirana v zgornjem dokazu, ni enolična. S pomočjo slike 32 vidimo, da drži naslednja trditev.

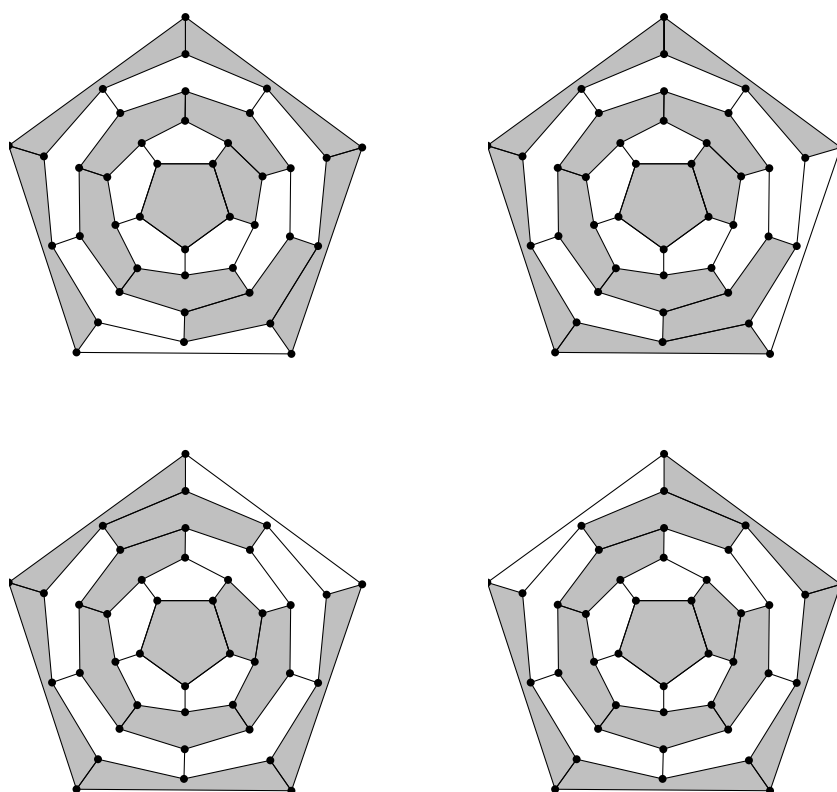
Trditev 6.10. *Naj bo F fuleren z netrivialnim cikličnim 5-prerezom. Naj bo r število šestkotniških obročev v F . Velja:*

- če je r sodo, je število različnih Hamiltonovih ciklov v F vsaj $5 \cdot 2^{\frac{r}{2}+1}$ in
- če je r liho, je število različnih Hamiltonovih ciklov v F vsaj $5 \cdot 2^{\frac{r+1}{2}}$.

Vsak Hamiltonov cikel določa tri popolna prirejanja v F . Če upoštevamo še dejstvo, da je število šestkotniških obročev v fulerenu z netrivialnim cikličnim 5-prerezom $r = \frac{n}{10} - 2$, kjer je n število vozlišč v F , dobimo naslednjo posledico.

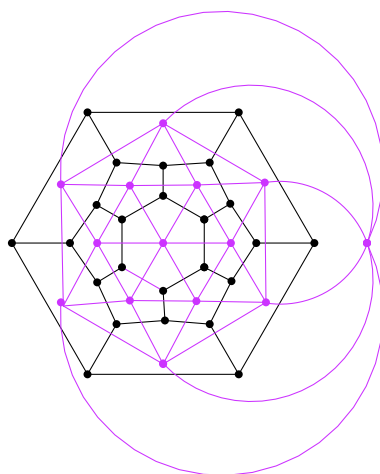
Posledica 6.11. *Naj bo F fuleren z n vozlišči z netrivialnim cikličnim 5-prerezom. Potem je število popolnih prirejanj v F vsaj $15 \cdot 2^{\frac{n}{20}-\frac{1}{2}}$.*

S tem je zaključen prvi del našega dokaza. Drugi del se tiče fulerenov, ki nimajo netrivialnih cikličnih 5-prerezov.



SLIKA 32. Štiri različne poti lic za fuleren F z $r = 2$, za izbrano petkotno lice poleg osrednjega lica dolžine pet. Ker lahko petkotno lice izberemo na pet načinov, ima fuleren vsaj $5 \cdot 2^{\frac{5}{2}+1} = 20$ različnih Hamiltonovih ciklov.

Definicija 6.12. Dual ravninskega grafa G je graf G^* , ki ima za vozlišča lica grafa G , povezave pa dobimo tako, da za vsako povezavo $e \in E(G)$ dodamo povezavo med licema, na robu katerih leži.



SLIKA 33. Primer duala C_{24}^* , narisano z vijolično barvo.

Definicija 6.13. Lice dolžine šest je *resonantno*, če ga omejujejo tri povezave popolnega prirejanja.

Zgled 6.14. V zgledu popolnega prirejanja na sliki 20, sta obe šestkotni lici resonantni.

Trditev 6.15. Naj bo F fuleren z n vozlišči, ki nima netrivialnih cikličnih 5-prerezov. Tedaj je število popolnih prirejanj v F vsaj $2^{\frac{n-380}{61}}$.

Opomba 6.16. Za fulerene z majhnim številom vozlišč je boljša linearna meja $\lceil \frac{3(n+2)}{4} \rceil$, zato se omejimo na fulerene z več kot 380 vozlišči.

Dokaz. Ideja dokaza je, da najdemo tako popolno prirejanje M v F , ki ima vsaj $\frac{n-380}{61}$ disjunktinih, resonantnih lic dolžine šest. Ker lahko v vsakem takem šestkotniku zamenjamo prirejanje neodvisno od ostalih šestkotnikov, je takih prirejanj $2^{\frac{n-380}{61}}$.

Dualni graf F^* fulerena F je triangulacija v ravnini z 12 vozlišči stopnje pet in ostalimi vozlišči stopnje šest. Naj bo $U = \{u_1, u_2, \dots, u_{12}\}$ množica vozlišč stopnje pet. Naš cilj je konstruirati tako množico vozlišč $W \subset V(F^*)$ stopnje šest, da bo veljalo:

- razdalja med v in v' v F^* mora biti vsaj 5, za vse $v, v' \in W$, pri čemer $v \neq v'$,
- razdalja med v in u v F^* mora biti vsaj 3, za vse $v \in W$ in $u \in U$.

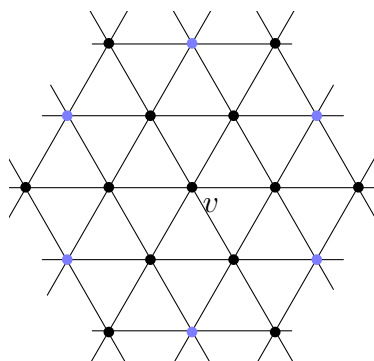
Množico W dobimo z naslednjim algoritmom: postavimo $W_0 = \emptyset$. Z belo barvo pobarvamo vsa vozlišča na razdalji največ dva od u_i , za vsak $i \in \{1, 2, \dots, 12\}$. Ostala vozlišča naj bodo črna. Bela vozlišča ne morejo biti elementi množice W . Za vsak $u_i \in U$ je največ pet vozlišč, ki so od u_i oddaljeni za ena in največ deset vozlišč, ki so oddaljeni za dva. Torej smo pridelali največ $12 \cdot (1 + 5 + 10) = 192$ belih vozlišč. Ker imajo naši fulereni vsaj 380 vozlišč, je zagotovo še kakšno črno. Izberemo črno vozlišče v_k in ga dodamo množici $W_k := W_{k-1} \cup \{v_k\}$. Sedaj z belo pobarvamo vsa vozlišča, ki so za največ štiri oddaljena od v_k . Hitro vidimo, da za vsako vozlišče v pridelamo kvečjemu $1 + 6 + 12 + 18 + 24 = 61$ belih vozlišč. Ta algoritem ponavljamo, dokler ne zmanjka črnih vozlišč.

Množica W vsebuje vsaj $\frac{V(F^*)-192}{61} = \frac{f-192}{61}$ vozlišč, kjer je f število lic fulerena F . Če uporabimo Eulerjevo formulo in Lemo o rokovanju, dobimo $f = \frac{n}{2} + 2$, kar nam da $|W| \geq \frac{n-380}{122}$.

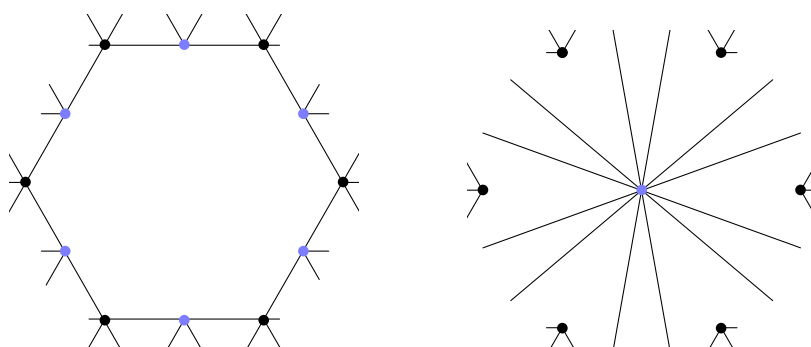
Zdaj pa si pogledjmo, kako konstruirati prirejanje v F z veliko disjunktinimi, resonantnimi lici dolžine šest. Naj bo $v \in W$ in $R(v)$ množica vozlišč, ki so za največ dva oddaljena od v (slika 34). Vozlišča na razdalji dva od v tvorijo cikel dolžine 12 v F^* . Naj bo množica $R'(v)$ množica šestih neodvisnih vozlišč iz $R(v)$ narisanih z modro barvo na sliki 34. Ker F nima netrivialnih cikličnih 5-prerezov, so vsa vozlišča iz $R'(v)$ različna med sabo in tvorijo neodvisno množico v F^* .

Množice $R'(v)$ so za vsak $v \in W$ paroma disjunktne, saj je med elementi množice W razdalja vsaj pet. Sledi konstrukcija ravninskih grafov H_0 in H . Za vsak $v \in W$ izbrisemo v in njegovih šest sosedov ter dobljeni graf označimo s H_0 . Dalje identificiramo šest vozlišč množice $R'(v)$ in s tem dobimo graf H (slika 35).

Definicija 6.17. Preslikava $f : V(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, k\}$ je *k-barvanje vozlišč* grafa G , če velja, da nobeni dve sosednji vozlišči nista enako obarvani. Če ima G k -barvanje pravimo, da je G *k-obarvljiv*.

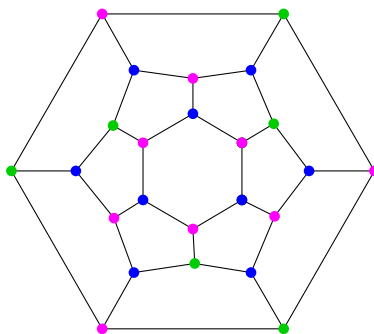


SLIKA 34. $R(v)$ in šest vozlišč $R'(v)$.



SLIKA 35. Lokalna zgradba grafov H_0 in H .

Zgled 6.18. Fuleren C_{24} je primer 3-obarvljivega grafa.

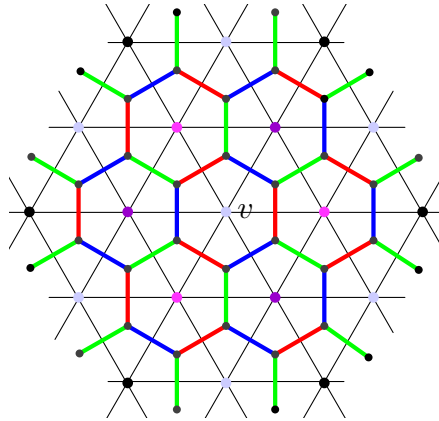


SLIKA 36. 3-obarvljiv C_{24} .

Po izreku štirih barv, ki pravi, da se da vsak ravninski graf pobarvati s štirimi barvami, je H 4-obarvljiv. Barvanje H inducira barvanje H_0 tako, da je šest vozlišč množice $R'(v)$ pobarvanih z isto barvo. Imenujmo to barvo 1. Zdaj pa razširimo to barvanje na barvanje grafa F^* . Najprej pobarvamo vsa vozlišča v z barvo 1. Za vsak $v \in W$ je le še šest nepobarvanih vozlišč grafa F^* in to je natanko 6-cikel, ki ga tvorijo sosedi vozlišča v . Vsako izmed teh vozlišč ima 3 sosede pobarvane z 1 in enega soseda druge barve (barva 2). Za vsako tako vozlišče sta torej možni dve barvi (barva 3 in 4). Neobarvan cikel pobarvamo izmenično s tema barvama in dobimo barvanje grafa F^* .

Definicija 6.19. Preslikava $g : E(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, k\}$ je k -barvanje povezav grafa G , če velja, da nobeni dve sosednji povezavi nista enako obarvani.

Sedaj 4-barvanje vozlišč F^* inducira 3-barvanje povezav grafa F . Kako to vidimo? Opazimo, da imamo v F^* šest različnih tipov povezav: 12, 13, 14, 23, 24 in 34. Disjunktne povezave v F , ki ustrezajo povezavam v F^* tipov 12 in 34 pobarvamo z barvo a , tiste, ki ustrezajo tipom 13 in 24 z b in ostale, torej tiste, ki ustrezajo tipom 14 in 23 z barvo c (slika 37). Ker je graf F kubičen, vsak barvni razred a , b , in c tvori popolno prirejanje v F .



SLIKA 37. 3-bravanje povezav grafa F .

Naj bo f pripadajoče lice vozlišča $w \in F^*$, sosedna vozlišča $v \in W$. Ker ima w tri sosede v F^* pobarvane z barvo 1, so pripadajoče povezave na robu lica f pobarvane z enako barvo. Torej je lice f resonantno pri enem od treh popolnih prirejanj, tvorjenih z barvnimi razredi a , b ali c .

Obstaja šest takih resonantnih lic za tri popolna prirejanja za vsak $v \in W$. Skupaj je tako $6|W|$ resonantnih lic, torej ima eno od prirejanj vsaj $2|W| \geq \frac{n-380}{61}$ resonantnih lic.

Preverimo še, da so resonantna lica istega barvnega razreda vedno disjunktna. Pa recimo, da dve lici nista disjunktne. Torej pripadata sosedoma w in w' , ki sta oba soseda $v \in W$. Ampak povezavi, ki pripadata vw in vw' sta različnih barv in ravno v tej barvi sta lici resonantni. Torej sta šestkotnika, ki pripadata w in w' resonantna v različnih barvnih razredih, oz. za različna popolna prirejanja. Naša trditev je s tem dokazana. \square

7. ZAKLJUČEK

Letos mineva 26 let od odkritja fulerenov in v tem času so znanstveniki po vsem svetu razvozlali kar nekaj skrivnosti na to temo. Še vedno pa ostaja veliko odprtih vprašanj. Eno izmed najbolj zanimivih je poseben primer Barnettove domneve, ki pravi, da imajo vsi fulereni Hamiltonov cikel. Mi smo dokazali, da ga zagotovo imajo tisti z netrivialnim cikličnim 5-prerezom. Na odgovor, ali to velja tudi za ostale, pa bo potrebno še malce počakati.

LITERATURA

- [1] K. Kutnar, D. Marušič, *On cyclic edge-connectivity of fullerenes*, Discrete Appl. Math. **156** (2008) 1661–1669.

- [2] F. Kardoš, D. Král', J. Miškuf, J. S. Sereni, *Fullerene graphs have exponentially many perfect matchings*, J. Math. Chem. **46** (2009) 443–447.
- [3] T. Došlić, *On lower bounds of number of perfect matchings in fullerene graphs*, J. Math. Chem. **24** (1998) 359–364.
- [4] Z. Qi, H. Zhang, *A note on the cyclical edge-connectivity of fullerene graphs*, J. Math. Chem. **43** (2008) 134–140.
- [5] T. Pisanski, *Fullereni*, Obzornik mat. fiz. **41** (1994) 1–7.
- [6] P. W. Fowler, D.E. Manolopoulos, *An atlas of fullerenes*, Dover Publications, Inc., New York, 2006.
- [7] M. Juvan, P. Potočnik, *Teorija grafov in kombinatorika*, DMFA-založništvo, Ljubljana, 2007.
- [8] R. J. Wilson, J. J. Watkins, *Uvod v teorijo grafov*, DMFA-založništvo, Ljubljana, 1997.
- [9] N. Trdin, *Fulereni in njihova uporaba*, dostopno na <http://ucilnica0910.fmf.uni-lj.si/mod/forum/discuss.php?d=1036>.
- [10] *Fullerene*, [ogled 12. 5. 2011], dostopno na <http://en.wikipedia.org/wiki/Fullerene>.
- [11] *Montreal Biosphère*, [ogled 12. 5. 2011], dostopno na http://en.wikipedia.org/wiki/Montreal_Biosphre.