Fulereni

Ademir Hujdurović

University of Primorska
UP Famnit

30.08.2012.

Kaj je fuleren?

Fulereni

Kaj je fuleren?

Fuleren je kubični 3-povezavno povezan graf katerega lica so petkotniki in šestkotniki.

Fulereni

Kaj je fuleren?
Fuleren je kubični 3-povezavno povezan graf katerega lica so petkotniki in šestkotniki.
Za katero naravno število n obstaja fuleren z n točkami?

Fulereni

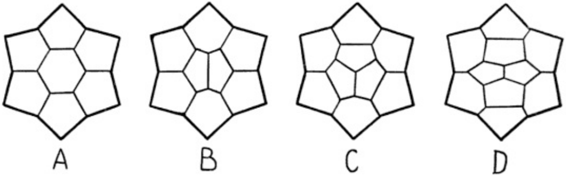
Kaj je fuleren?
Fuleren je kubični 3-povezavno povezan graf katerega lica so petkotniki in šestkotniki.
Za katero naravno število n obstaja fuleren z n točkami?
Leta 1963 sta Gr$\ddot{u}$nbaum in Motzkin pokazala da za vsako sodo naravno število $n \geq 20$, $n \neq 22$, obstaja fuleren z n točkami.

Kaj je fuleren?
Fuleren je kubični 3-povezavno povezan graf katerega lica so petkotniki in šestkotniki.
Za katero naravno število n obstaja fuleren z n točkami?
Leta 1963 sta Gr$\ddot{u}$nbaum in Motzkin pokazala da za vsako sodo naravno število $n \geq 20$, $n \neq 22$, obstaja fuleren z n točkami.
Vemo: v vsakem fulerenu imamo 12 petkotnikov,in k šestkonikov ($k \geq 0$.). Označimo z P_k kubični ravninski graf, ki ima k šestkotnikov in 12 petkotnikov.

Kaj je fuleren?
Fuleren je kubični 3-povezavno povezan graf katerega lica so petkotniki in šestkotniki.
Za katero naravno število n obstaja fuleren z n točkami?
Leta 1963 sta Gr$\ddot{u}$nbaum in Motzkin pokazala da za vsako sodo naravno število $n \geq 20$, $n \neq 22$, obstaja fuleren z n točkami.
Vemo: v vsakem fulerenu imamo 12 petkotnikov,in k šestkonikov ($k \geq 0$.). Označimo z P_k kubični ravninski graf, ki ima k šestkotnikov in 12 petkotnikov.
Za $k = 0$ potrebujemo graf z 20 točkami, in smo že videli da tak graf obstaja (dodekaeder).

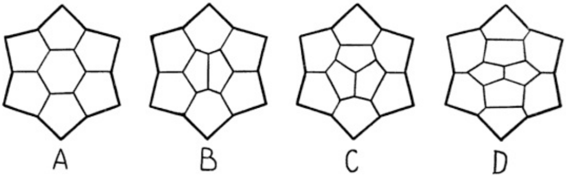
Kaj je fuleren?
Fuleren je kubični 3-povezavno povezan graf katerega lica so petkotniki in šestkotniki.
Za katero naravno število n obstaja fuleren z n točkami?
Leta 1963 sta Grünbaum in Motzkin pokazala da za vsako sodo naravno število $n \geq 20$, $n \neq 22$, obstaja fuleren z n točkami.
Vemo: v vsakem fulerenu imamo 12 petkotnikov,in k šestkonikov ($k \geq 0$.). Označimo z P_k kubični ravninski graf, ki ima k šestkotnikov in 12 petkotnikov.
Za $k = 0$ potrebujemo graf z 20 točkami, in smo že videli da tak graf obstaja (dodekaeder).
Za $k = 1$, oziroma v primeru, ko imamo $n = 22$ točk, ne obstaja ustrezen graf.

Da bi pokazali obstoj grafov P_k za $k \geq 2$ bomo definirali naslednje "osnovne" grafe:



Konstrukcija fulerenov

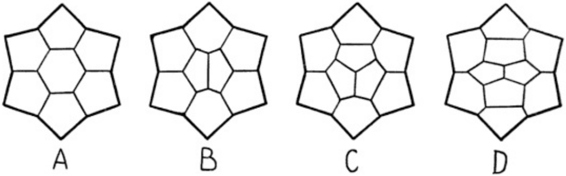
Da bi pokazali obstoj grafov P_k za $k \geq 2$ bomo definirali naslednje "osnovne" grafe:



Narišimo si grafe A, B, C in D na hemisfere, tako da je zunanjost grafov A, B, C in D na ekvatorju (robu).

Konstrukcija fulerenov

Da bi pokazali obstoj grafov P_k za $k \geq 2$ bomo definirali naslednje "osnovne" grafe:



Narišimo si grafe A, B, C in D na hemisfere, tako da je zunanjost grafov A, B, C in D na ekvatorju (robu).
Če združimo dve hemisferi A, dobimo graf P_2.

Konstrukcija fulerenov

Podobno, z združevanjem:

A in B dobimo : P_3

Konstrukcija fulerenov

Podobno, z združevanjem:

$$\begin{array}{lll} \text{A in B} & \text{dobimo} & : P_3 \\ \text{A in C, ali B in B} & & : P_4 \end{array}$$

Konstrukcija fulerenov

Podobno, z združevanjem:

$$\begin{array}{lcl} \text{A in B} & \text{dobimo} & : \mathsf{P}_3 \\ \text{A in C, ali B in B} & & : \mathsf{P}_4 \\ \text{A in D, ali B in C} & & : \mathsf{P}_5 \end{array}$$

Konstrukcija fulerenov

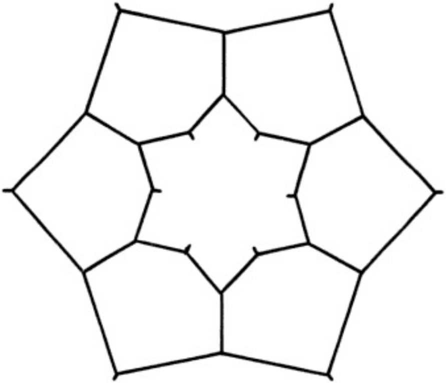
Podobno, z združevanjem:

$$\begin{array}{lll}
\text{A in B} & \text{dobimo} & : P_3 \\
\text{A in C, ali B in B} & & : P_4 \\
\text{A in D, ali B in C} & & : P_5 \\
\text{B in D, ali C in C} & & : P_6
\end{array}$$

Podobno, z združevanjem:

A in B	dobimo	: P_3
A in C, ali B in B		: P_4
A in D, ali B in C		: P_5
B in D, ali C in C		: P_6
C in D		: P_7.

Da bi dobili grafe $P_{j+6i}(2 \leq j \leq 7, i = 1, 2, \ldots)$ naredimo enak postopek kot v primeru za P_j, s tem da med dve hemisferi vstavimo i "pasov"(slika spodaj), ki sestojijo iz 6 šestkotnikov.



Število fulerenov

V prejšnji konstrukciji smo videli, da imamo v nekaterih primerih več različnih fulerenov z istim številom točk. Kako veliko je število različnih fulerenov z istim številom točk?

Število fulerenov

V prejšnji konstrukciji smo videli, da imamo v nekaterih primerih več različnih fulerenov z istim številom točk. Kako veliko je število različnih fulerenov z istim številom točk?

n	20	22	24	26	28	30	32	34
Število fulerenov	1	0	1	1	2	3	6	6

Število fulerenov

V prejšnji konstrukciji smo videli, da imamo v nekaterih primerih več različnih fulerenov z istim številom točk. Kako veliko je število različnih fulerenov z istim številom točk?

n	20	22	24	26	28	30	32	34
Število fulerenov	1	0	1	1	2	3	6	6

Obstaja 1812 različnih fulerenov na 60 točk.

Število fulerenov

V prejšnji konstrukciji smo videli, da imamo v nekaterih primerih več različnih fulerenov z istim številom točk. Kako veliko je število različnih fulerenov z istim številom točk?

n	20	22	24	26	28	30	32	34
Število fulerenov	1	0	1	1	2	3	6	6

Obstaja 1812 različnih fulerenov na 60 točk.
Za $n = 200$ obstaja 214,127,713 različnih fulerenov.

Število fulerenov

V prejšnji konstrukciji smo videli, da imamo v nekaterih primerih več različnih fulerenov z istim številom točk. Kako veliko je število različnih fulerenov z istim številom točk?

n	20	22	24	26	28	30	32	34
Število fulerenov	1	0	1	1	2	3	6	6

Obstaja 1812 različnih fulerenov na 60 točk.
Za $n = 200$ obstaja 214,127,713 različnih fulerenov.
Ko število n narašča, je število fullerenov približno $\frac{1}{2}n^9$

Definition

Za množico točk N v danem grafu X rečemo da je **neodvisna** če nobeni dve točki iz N nista povezani.

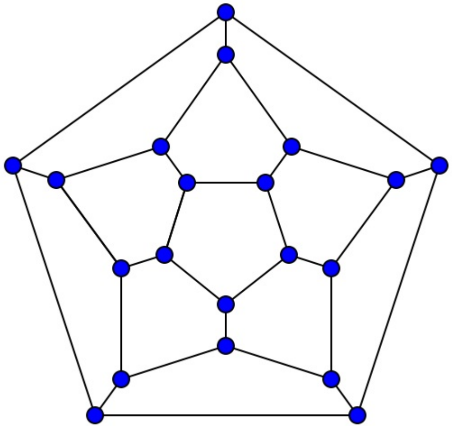
Neodvisne množice točk

Definition

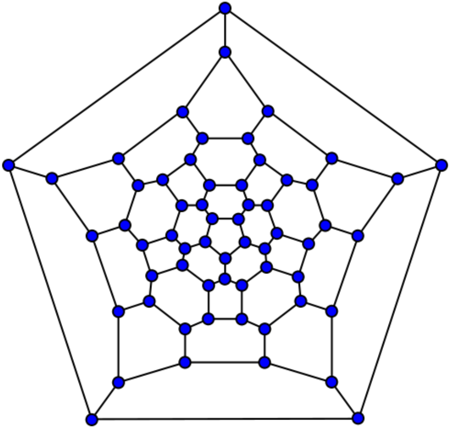
Za množico točk N v danem grafu X rečemo da je **neodvisna** če nobeni dve točki iz N nista povezani.
Neodvisna množica točk z največ elementi se imenuje **največja neodvisna množica točk**. Število elementov v največji neodvisni množici točk označujemo z $\alpha(X)$.

Dodekaeder

Poišči največjo neodvisno množico točk v dodekaedru.

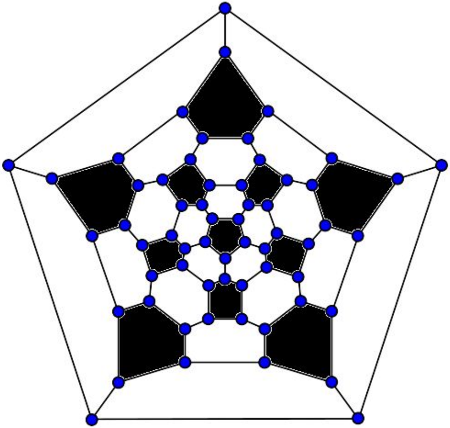


Poišči največjo neodvisno množico točk v C_{60}.



Nogometna žoga, ali C_{60}

Poišči največjo neodvisno množico točk v C_{60}.



Spodnja in zgornja meja za $\alpha(X)$

Za vsak fuleren X na n točkah, veljata naslednji meji za največje število neodvisnosnih točk:

$$3n/8 \leq \alpha(X) \leq n/2 - 2$$

Število fulerenov C_n s številom neodvisnoti $n/2 - x$.

n	x						n	x					
	7	6	5	4	3	2		7	6	5	4	3	2
20	-	-	-	-	-	1	48	-	-	-	17	177	5
24	-	-	-	-	1	-	50	-	-	-	25	241	5
26	-	-	-	-	-	1	52	-	-	-	83	347	7
28	-	-	-	-	1	1	54	-	-	1	122	448	9
30	-	-	-	-	2	1	56	-	-	1	257	656	10
32	-	-	-	-	3	3	58	-	-	2	379	816	8
34	-	-	-	-	5	1	60	-	1	6	736	1058	11
36	-	-	-	-	14	1	62	-	-	6	1081	1288	10
38	-	-	-	-	15	2	64	-	-	18	1799	1631	17
40	-	-	-	1	36	3	66	-	-	24	2558	1881	15
42	-	-	-	-	42	3	68	-	-	59	3955	2300	18
44	-	-	-	3	80	6	70	-	1	97	5395	2639	17
46	-	-	-	10	102	4							