O nogometnih žogah ali zakaj matematike zanima tudi kemija

Klavdija Kutnar
Univerza na Primorskem, UP FAMNIT

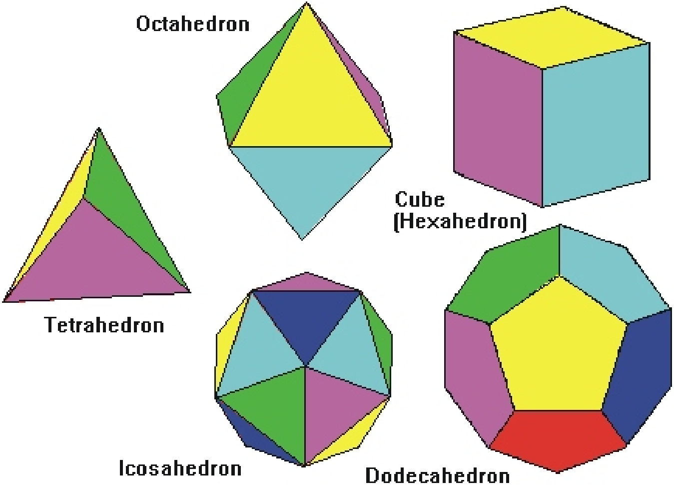
Avgust, 2012

Platonska telesa

Platonsko telo

Telesa, pri katerih se v vsakem oglišču stika enako število robov in enako število mejnih ploskev, ki so med sabo skladni in pravilni večkotniki, imenujemo *platonska telesa* (po grškem mislecu in matematiku Platonu).

Drugo ime zanje je *pravilni poliedri*.
(Grško: poli = mnogo, ederos = rob.)

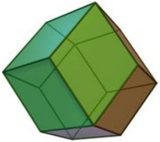

Octahedron
Cube
(Hexahedron)
Tetrahedron
Icosahedron
Dodecahedron

Poliedri

Polieder

Polieder je telo omejeno s končnim številom ploskev, ploskve se stikajo v ravnih robovih, robovi pa se stikajo v ogliščih.

Primeri poliedrov so platonska telesa, piramida in prizma.



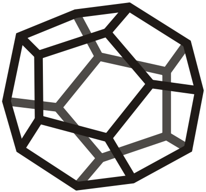
Polieder je lahko

- konveksen, če je vsaka daljica med katerimakoli točkama poliedra v celoti vsebovana v poliedru.
- enakorob, če so vsi robovi iste dolžine.
- pravilni polieder - Platonsko telo.

Fulereni

Fuleren

Fuleren je polieder s petkotnimi in šestkotnimi ploskvami, v katerem se v vsakem oglišču stikajo trije robovi.

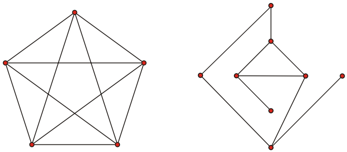


Ime fuleren izvira iz imena ameriškega ekscentričnega arhitekta Buckminstra Fullerja, ki je pogosto konstruiral stekleno-jeklene konstrukcije, sestavljene iz šestkotnikov in petkotnikov v obliki poliedrov.

Grafi

Graf

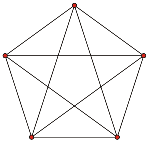
Graf je množica objektov, reči, ki se imenujejo *točke* (vozlišča, vozli) in so povezane s povezavami (robovi, vejami).

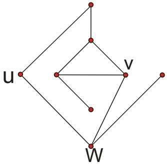


Ravninski graf

Graf je ravninski, če se ga da narisati v ravnini brez sekanja povezav.

Lastnosti grafov





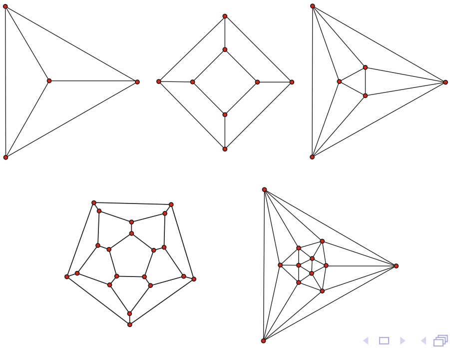
Naj bo X graf.

- Stopnja $d(v)$ točke v je število povezav s končno točko v.
- Dve točki sta povezani, če sta končni točki skupne povezave.
- Množica sosedov $N(v)$ točke v je množica točk povezanih s točko v.
- $d(v) = |N(v)|$.
- Če so v grafu X vse točke enake stopnje d, pravimo, da je graf *d-regularen*.
- Graf je lahko ravninski, povezan, nepovezan, itd.

Poliedri kot ravninski grafi

Polieder si lahko predstavljamo kot ravninski graf, pri tem so:

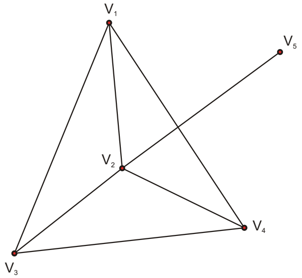
- ogljišča := točke,
- robovi := povezave,
- ploskve :=lica.



Lema o rokovanju

Lema o rokovanju

V poljubnem grafu $X = (V, E)$ velja, da je dvojno število povezav enako vsoti stopenj točk grafa.

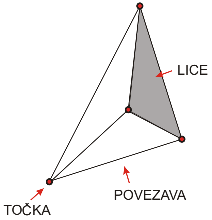


Eulerjeva formula

Eulerjeva karakteristika opisuje odnos med številom povezav, točk in lic povezanega ravninskega grafa.

Eulerjeva karakteristika

Naj bo X povezan ravninski graf. Potem je $|V(X)| - |E(X)| + |F(X)| = 2$, kjer je $V(X)$ množica točk, $E(X)$ množica povezav in $F(X)$ množica lic grafa X.



Fulereni - presek matematike in kemiji

V matematiki

Fulereni ustrezajo kubičnim 3-povezavno povezanim ravninskim grafom, ki imajo petkotna in šestkotna lica.

(Graf je 3-*povezavno povezan*, če moramo odstraniti najmanj 3 povezave, da graf postane nepovezan.)

V kemiji

Fulereni so ogljikove molekule sferičnih oblik s trivalentnim poliedrskim skeletom s petkotnimi in šestkotnimi lici.

Lastnosti fulerenov

Trditev

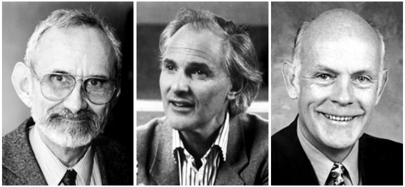
Naj bo F fuleren. Potem ima F natanko 12 petkotnih lic, vsa druga lica pa so šestkotna.

Dokaz.

Uporava Eulerjeve formule. □

Molekula C_{60} - "Buckminsterfullerene"

Leta 1985 so Robert F. Curl, Harold W. Kroto in Richard E. Smalley odkrili molekulo C_{60} ter leta 1996 za odkritje prejeli Nobelovo nagrado za kemijo.

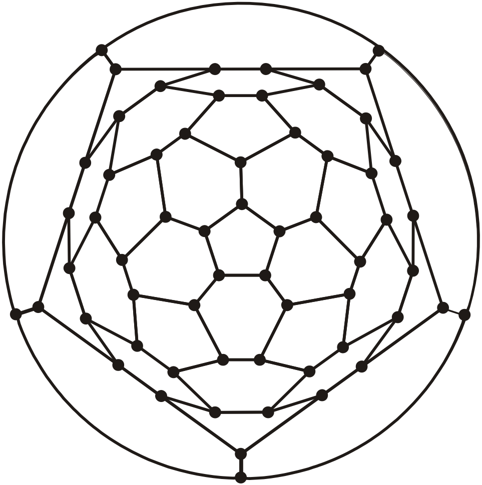


Robert F. Curl Jr. Sir Harold W. Kroto Richard E. Smalley

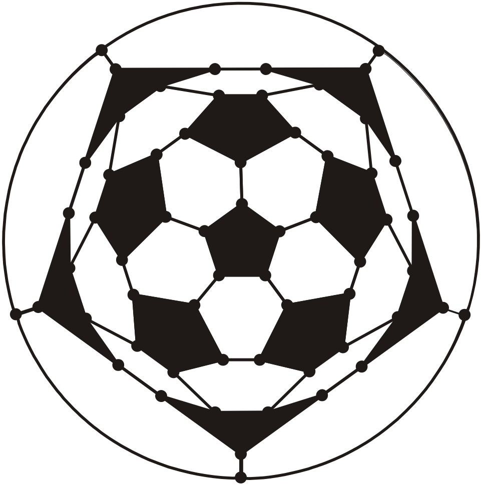
Sir Harold W. Kroto na UP

Computers in Scientific Discovery 6, 21. - 25.8.2012, Portorož.

Molekula C_{60} - “Buckminsterfullerene”



Molekula C_{60} - “Buckminsterfullerene”



FIFA

Med svetovnim nogometnim prvenstvom v Franciji je FIFA ugotovila, da znanstveniki uporabljajo obliko molekule C60 za oglaševanje svoje konference v Montpellieru. Ker je seveda osnova za obliko molekule C_{60} ravno tako prisekani ikozaeder, kot je nogometna žoga, so trdili, da kršijo avtorske pravice. Le dolgotrajna pregovarjanja znanstvenikov in pravnikov, ki so zastopali nogometno federacijo, so preprečila tožbo na sodišču. Dejstvo, da je prisekani ikozaeder omenjen kot eno od trinajstih teles, ki jih je opisal Arhimed v Pappusovem spisu iz 4. stoletja pred našim štetjem, je verjetno pripomoglo, da so pravniki odnehali.

Fulereni - danes

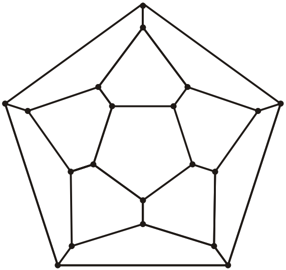
Danes so fulereni že povsem vsakdanje spojine, ki jih je mogoče kupiti pri prodajalcih kemičnih spojin.

Imajo številne zelo zanimive lastnosti, npr. da z vrinjenimi atomi alkalnih spojin postanejo superprevodniki, iz njih je mogoče napraviti feromagnet, obetavni pa so na področju farmacije kot podlaga za zdravila.

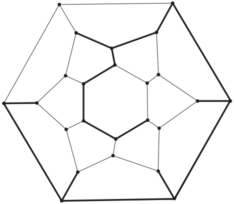
Obstoj fulerenov

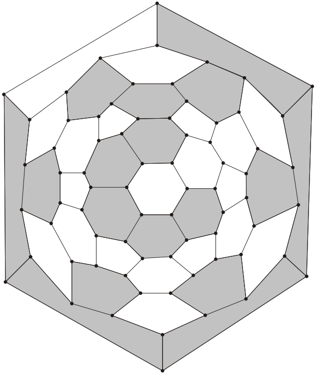
Grünbaum in Motzkin sta leta 1963 dokazala, da obstaja fuleren z n točkami za vsako sodo število $n \geq 20$, z izjemo števila $n = 22$.

Najmanjši fuleren je dodekaeder.

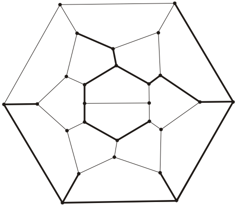


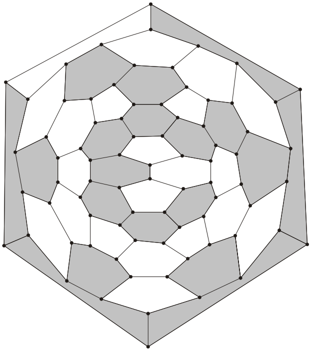
Primeri I





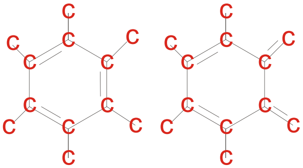
Primeri II





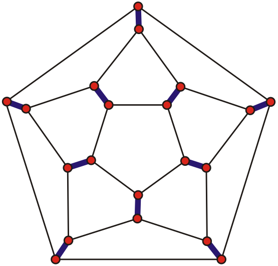
Stabilnost fulerenov

Kekulé struktura = razporeditev dvojnih vezi



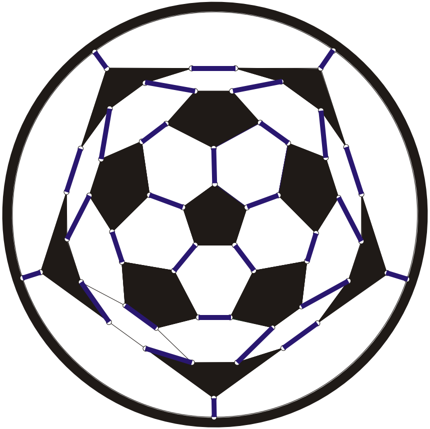
Število Kekulé struktur $\sim$ stabilnost fulerena

Kekulé struktura v dodekaedru



Kekulé struktura $=$ popolno prirejanje v grafu

Popolno prirejanje v “Buckminsterfullerene”



Popolno prirejanje v fulerenih

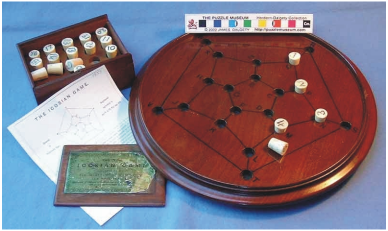
Odprti problem

Naj bo F fuleren. Določi število popolnih prirejanj v F.

Problem trgovskega potnika

Hamiltonova Ikozaedrska igra (1857)

Ali obstaja cikel, ki prepotuje vsako točko natanko enkrat?



W. R. Hamilton in T. P. Kirkman

Hamiltonski cikli

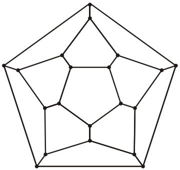
Hamiltonska pot

Hamiltonska pot v grafu je pot, ki vsebuje vse točke grafa.

Hamiltonski cikel

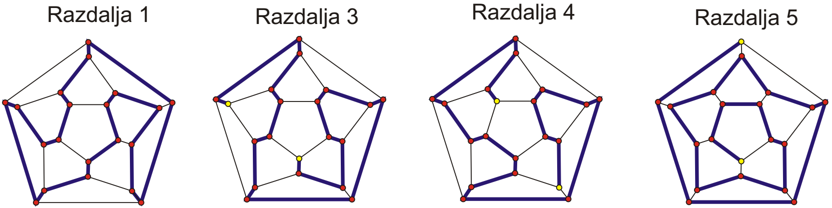
Hamiltonski cikel v grafu je cikel, ki vsebuje vse točke grafa.

Dodekaeder (Ikozaedrska igra) I



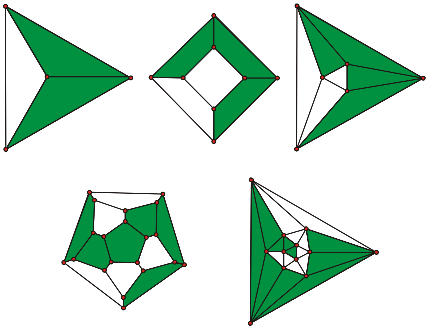
Naj bosta u in v točki dodekaedra. Ali obstaja hamiltonska pot med u in v?

Dodekaeder (Ikozaedrska igra) II



Razdalja 2 ?

Hamiltonski cikli v Platonskih telesih



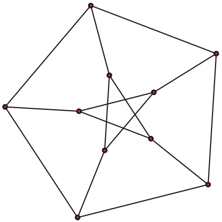
Hamiltonski cikli v fulerenih

Domneva

Vsak fuleren premore hamiltonski cikel.

Domače naloge

- Poišči hamiltonske cikle v platonskih telesih.
- Dokaži, da v dodekaedru ne obstaja hamiltonska pot, katere začetna in končna točka sta na oddaljenosti 2.
- Pokaži, da spodnji graf ne premore hamiltonskega cikla. Ali premore popolno prirejanje?



Hvala!

klavdija.kutnar@upr.si