

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA RAČUNALNIŠTVO IN INFORMATIKO,  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Interdisciplinarni univerzitetni študij računalništva in matematike

Matjaž Krnc

# Fulerenski grafi

Diplomsko delo

Delo je pripravljeno v skladu s Pravilnikom o podeljevanju  
Prešernovih nagrad študentom, pod mentorstvom

prof. Risteja Škrekovskega.

Ljubljana, 2011

# Izjava o avtorstvu

Spodaj podpisani Matjaž Krnc, z vpisno številko 63060198, sem avtor diplomskega dela z naslovom *Fulerenski grafi*.

S svojim podpisom zagotavljam, da:

- sem diplomsko delo izdelal samostojno, pod mentorstvom izred. prof. dr. Risteja Škrekovskega,
- so elektronska oblika diplomskega dela, naslov (slov., angl.), povzetek (slov., angl.) ter ključne besede (slov., angl.) identični s tiskano obliko diplomskega dela
- soglašam z javno objavo elektronske oblike diplomskega dela v zbirki "Dela FRI".

Podpis avtorja:

V Ljubljani, dne 9.9.2011



Št. naloge: 00028/2011

Datum: 26.08.2011

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za računalništvo in informatiko ter Fakulteta za matematiko in fiziko izdaja naslednjo nalogo:

Kandidat: **MATJAŽ KRNC**

Naslov: **FUELERENSKI GRAFI**  
**FULLERENE GRAPHS**

Vrsta naloge: Diplomsko delo univerzitetnega študija

Tematika naloge:

V diplomu naj se obravnavajo fullerenski grafi, ki v nanotehnologiji predstavljajo pomembne molekule. Posebej naj se obravnavajo grafovske lastnosti, kot so ciklični prerezi, diameter, prirejanja ter neodvisnostno število teh grafov. Kot osnovno gradivo naj se uporabita članka: F. Kardoš, M. Krnc, B. Lužar and R. Škrekovski, Cyclic 7-edge-cuts in fullerene graphs, J. Math. Chem. 47 (2010), 771–789 in V. Andova, T. Došlič, M. Krnc, B. Lužar, R. Škrekovski, On the Diameter of Fullerene Graphs, Oddano v objavo (2011).

Mentor:

prof. dr. Riste Škrekovski



Dekan Fakultete za računalništvo in informatiko:

prof. dr. Nikolaj Zimic

Dekan Fakultete za matematiko in fiziko:

prof. dr. Andrej Likar



# Zahvala in posvetilo

Zahvaljujem se avtorjem člankov [27] ter [1]  
za soustvarjanje člankov, iz katerih bomo črpali.

Hvala prijateljem in družini za vso podporo.  
Posebej hvala mentorju Risteju ter Vsemogočnemu,  
ki sta mi med pisanjem vestno stala ob strani.

Diplomsko delo posvečam bodoči ženi,  
Sabini.

# Kazalo

Abstract	9
Povzetek	11
<b>1 Uvod</b>	<b>13</b>
<b>2 Osnovno o grafih</b>	<b>15</b>
2.1 Teorija grafov . . . . .	15
2.1.1 Osnovno o grafih . . . . .	15
2.1.2 Formalna notacija grafov . . . . .	16
2.1.3 Operacije nad grafi . . . . .	17
2.1.4 Sprehod, pot ter komponente grafa . . . . .	17
2.1.5 Povezanost grafa . . . . .	18
2.1.6 Podgrafi . . . . .	18
2.1.7 Dominantna množica . . . . .	19
2.1.8 Obarvljivost grafov . . . . .	19
2.1.9 Izomorfizem grafov . . . . .	20
2.1.10 Grafovske invariante . . . . .	21
2.1.11 Matrike grafov . . . . .	21
2.2 Ravninski grafi . . . . .	22
2.2.1 Eulerjeva formula . . . . .	23
2.2.2 Prerez grafa . . . . .	23
2.2.3 Povezanost grafa . . . . .	24
2.2.4 Dualni graf . . . . .	24
2.3 Fulereni . . . . .	25
2.3.1 Osnovno o fulerenih . . . . .	25
2.3.2 Hamiltonost fulerenov . . . . .	27
2.3.3 Spiralna metoda . . . . .	28

---

2.3.4	Stabilnost fulerenov ter njihova uporaba . . . . .	29
2.3.5	Nanocevke . . . . .	31
<b>3</b>	<b>Ciklični prerezi v fulerenih</b>	<b>33</b>
3.1	Ciklični 5- ter 6-prerezi fulerenov . . . . .	33
3.2	Ciklični 7-prerezi v fulerenih . . . . .	36
3.2.1	Degenerirani ciklični 7-prerezi . . . . .	37
3.2.2	Nedegenerirani ciklični 7-prerezi po povezavah . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Nekaj novih rezultatov v fulerenskih grafih</b>	<b>55</b>
4.1	Spodnja meja diametra v fulerenih . . . . .	55
4.2	Zgornja meja diametra v fulerenih . . . . .	60
4.3	Nedvodelnost grafa . . . . .	64
4.4	Neodvisnostno število . . . . .	65
4.5	Najmanjša lastna vrednost . . . . .	67
4.6	Nasičenost grafa . . . . .	68
	<b>Literatura</b>	<b>72</b>

# Abstract

Fullerene graphs are 3-connected 3-regular planar graphs with only pentagonal and hexagonal faces. The name comes from chemistry, where they can be used as a tool for modelling and analysis of carbon molecules. In this thesis, we will first make a basic overview of graph theory, where we focus on the fullerene family of graphs.

Then we will analyze the structure of cyclic edge-cuts of fullerene graphs of sizes 6 and 7, distinguishing between degenerate and non-degenerate cyclic edge-cuts, regarding the arrangement of the 12 pentagons. We will prove that if there exists a non-degenerate cyclic 7-edge-cut in a fullerene graph, then the graph is a nanotube unless it is one of the two exceptions presented. We will determine that there are 57 configurations of degenerate cyclic 7-edge-cuts, and we will list all of them.

In the 3rd chapter of the thesis, we will show that the diameter of a fullerene graph  $G$  of order  $n$  is at least  $\Omega(\sqrt{n})$  and at most  $n/5 + 1$ . Moreover, if  $G$  is not a  $(5, 0)$ -nanotube its diameter is at most  $n/6 + 5/2$ . As a consequence, we improve the upper bound on the saturation number of fullerene graphs. We also report improved lower and upper bounds on the independence number and on the smallest eigenvalue of fullerene graphs.

**Math. Subj. Class. (MSC 2010):** 05C75, 05C12, 92E10

**Keywords:**

graph theory, fullerene, chemical graph theory, diameter, cyclic edge-cut, nanotube, saturation number, independence number



# Povzetek

Fulerenski grafi so 3-povezani 3-regularni ravninski grafi, ki imajo le lica velikosti 5 in 6. Izhajajo iz kemije, kjer služijo kot orodje za analizo ter modeliranje molekul, ki jih sestavlja le ogljik. V tej diplomski nalogi najprej naredimo osnovni pregled čez teorijo grafov, pri čemer se bolj osredotočimo na družino fulerenov.

Nato podrobneje analiziramo strukturo cikličnih prerezov fulerenov velikosti 6 ter 7, pri čemur glede na lego petkotnikov razločujemo med degeneriranimi in nedegeneriranimi cikličnimi prerezi. Dokažemo, da so vsi fulereni ki premorejo nedegeneriran ciklični 7-prerez, razen dveh navedenih izjem, v obliki nanocevke. Poleg tega si sistematično ogledamo vseh 57 različnih konfiguracij degeneriranih cikličnih 7-prerezov.

V drugem delu te diplomske naloge najprej dokažemo, da je diameter poljubnega fulerena  $G$  najmanj  $\Omega(\sqrt{|V(G)|})$  in največ  $\frac{n}{5} + 1$ , če pa  $G$  ni nanocevka tipa  $(5, 0)$ , je diameter največ  $n/6 + 5/2$ . S pomočjo tega rezultata nato pokažemo zgornjo mejo za nasičenost fulerenov. Poleg tega izboljšamo spodnjo mejo za najmanjšo lastno vrednost ter za neodvisnost fulerenskih grafov.

**Math. Subj. Class. (MSC 2010):** 05C75, 05C12, 92E10

**Ključne besede:**

teorija grafov, fuleren, kemijska teorija grafov, diameter, ciklični prerez, nanocevka, nasičenostno število, neodvisnostno število



# Poglavje 1

## Uvod

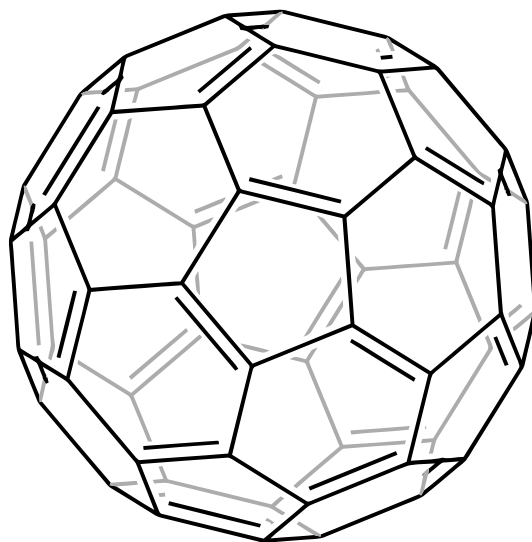
Teorija grafov je eno izmed zelo pomembnih področij v diskretni matematiki. Ukvarja se s posebnimi matematičnimi strukturami, ki jim pravimo *grafi*. Z grafi lahko zelo učinkovito modeliramo odnose v najrazličnejših modelih, na skoraj kateremkoli področju, ki si ga lahko zamislimo... od molekularne kemije, do planiranja urnikov ali trgovskih poti, pa vse do analize socialnih, prijateljskih ter poslovnih odnosov znotraj nekega omrežja.

Začetki teorije grafov segajo že zelo daleč, že v leto 1735, ko se je švicarski matematik Leonhard Euler lotil problema Königsbergških mostov na prav poseben način, tako da je problem modeliral v grafu. Reka Pregel deli mesto Königsberg na štiri dele, ki jih povezuje sedem mostov. Vprašanje je bilo ali se lahko nedeljski sprehajalec sprehodi po vseh sedmih mostovih natanko enkrat tako, da se na koncu vrne v izhodišče. Euler je problem rešil v članku *Sedem mostov Königsberga*, ki je bil objavljen leta 1736. Z njim je postavil temelje sodobne teorije grafov. Kot smo omenili v prvem odstavku, se je teorija enostavnih obhodov z leti močno razširila v več smereh.

V diplomskem delu se bom osredotočil na kemijsko teorijo grafov, ki se ukvarja s preučevanjem grafov, ki po strukturi in nekaterih matematičnih lastnostih odražajo realne kemijske lastnosti ter strukture. Pri tem so v kemijski teoriji grafov najbolj zanimive molekule ogljika, saj lahko le-te zavzamejo ogromno različnih stabilnih struktur. Dolgo so znanstveniki zmotno mislili, da so čiste strukture ogljika le diamant, grafit, ter še nekatera amorfna stanja, dokler niso leta 1985 Harold Kroto, James Heath, Sean O'Brien, Robert Curl in Richard Smalley z univerze v Riceu odkrili prvi fuleren, Buckminsterfulleren  $C_{60}$ , glej sliko 1.1. Za odkritje so leta 1995 dobili tudi Nobelovo nagrado. Od takrat se razvoj fulerenov neprenehoma širi ter dobiva nove in nove razsežnosti.

Fulereni imajo pomembno vlogo tako v sodobnih tehnologijah, kot v naravi, ki nas obdaja. Ogljikova vlakna so zelo lahka ter ekstremno močna, ter se industrijsko upora-

bljajo za izdelavo izjemno trdnih, a kljub temu lahkih materialov. Znanstveniki menijo, da bomo nekoč lahko nekatere vrste fulerenov, ki so v obliki nanocevk, uporabili za mikro transport molekul različnih velikosti. Obstajajo teorije, da se je prvo življenje na zemljo preneslo v ogljikovih žogah, podobnih  $C_{60}$ , na sliki 1.1.



Slika 1.1: Struktura molekule Buckminsterfullerene –  $C_{60}$ . Dvojna črta na sliki predstavlja dvojno ogljikovo vez v molekuli.

# Poglavje 2

## Osnovno o grafih

V tem poglavju na kratko predstavim potrebno predznanje, ki ga mora bralec za razumevanje kasnejših poglavij osvojiti.

### 2.1 Teorija grafov

Graf je najpreprosteje rečeno množica objektov, stvari, ki se imenujejo vozlišča (včasih tudi točke) in so povezane s povezavami. Teorija grafov je veja matematike in računalništva, ki raziskuje značilnosti grafov.

#### 2.1.1 Osnovno o grafih

Naj bo  $V$  končna neprazna množica in naj bo  $E$  poljubna družina dvo-elementnih podmnožic množice  $V$ . Potem lahko bolj formalno opišemo kot par  $G = (V, E)$ . Element  $u, v$  iz množice  $E$  pišemo krajše kot  $uv$ ; temu elementu intuitivno pravimo povezava. Kadar je povezava  $uv$  element množice  $E$ , pravimo, da sta točki  $u$  in  $v$  sosednji v grafu  $G$  in pišemo  $u \sim_G v$  (ali samo  $u \sim v$ ). Za povezavi pravimo, da sta sosednji, če imata kako skupno krajišče. Včasih lahko te definicije tudi malo razširimo. Tako lahko predstavimo usmerjene povezave, kjer relacija sosednosti ni več simetrična (to so *usmerjeni grafi*), ali pa relacijo sosednosti med dvema elementoma posplošimo tako, da ena povezava deluje nad poljubno mnogo elementi (to so *hipergrafi*).

Strukture, ki jih lahko predstavimo z grafi v smislu teorije grafov je moč najti povsod, zato lahko veliko praktičnih problemov prevedemo v jezik grafov. Naj naštejemo nekaj enostavnih primerov:

- Naj bodo znanstveni članki vozlišča v sistemu. Usmerjena povezava iz članka  $A$  do članka  $B$  obstaja le, če  $A$  citira članek  $B$ .
- Naj bodo ljudje vozlišča našega sistema. Povezava med dvema oseba obstaja, če sta ti dve osebi v prijateljskem odnosu.
- Naj bo vseh dvanajst tonskih višin množica vozlišč našega grafa. Povezava naj bo v tem primeru trozvok ali četverzvok, ki zveni dobro glede na glasbeno teorijo. Tak graf je primer hipergrafa, saj v tem primeru povezava ne poteka med dvema vozliščema, temveč med tremi ali štirimi vozlišči.
- Grafe lahko razširimo z vpeljavo uteži, ki so pozitivna števila prirejena vsaki povezavi. Če na primer graf predstavlja mrežo cest ali železniških prog, lahko uteži predstavljajo dolžine vsake ceste, oziroma železniške proge.
- Zelo znana uporaba grafov je v metodi mrežnega planiranja – izračun planiranega trajanja projektov.

Včasih obravnavamo tudi ti. *multigrafe*, ki imajo:

- vzporedne povezave – več povezav nad istim parom točk;
- zanke – povezave, ki imajo obe krajišči enaki.

Kadar želimo poudariti, da govorimo o grafih brez zank in vzporednih povezav, takim grafom rečemo *enostavni grafi*. V tem diplomskem delu bomo vedno govorili le o enostavnih grafih.

### 2.1.2 Formalna notacija grafov

Stopnjo točke  $u$  v grafu  $G$  označimo z  $\deg_G(u)$  ali  $d_G(u)$  in je definirana kot število povezav grafa  $G$ , ki imajo točko  $u$  za svoje krajišče. Točkam stopnje 0 pravimo *izolirane točke*, točkam stopnje 1 pa *listi*. Najmanjšo stopnjo točke grafa  $G$  označimo z  $\delta(G)$ , največjo pa z  $\Delta(G)$ .

**Definicija 2.1** 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.

**Lema 2.2 (O rokovanju.)** Za vsak graf  $G$  velja

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

**Posledica 2.3** Za  $r$ -regularni graf  $G$  velja:

$$r \cdot |V(G)| = 2|E(G)|.$$

**Posledica 2.4** Vsak graf ima sodo mnogo točk lihe stopnje.

**Definicija 2.5** Graf  $G$  je *dvodelen*, če lahko množico točk  $V(G)$  zapišemo kot disjunktno unijo dveh podmnožic  $A, B \subseteq V(G)$  tako, da je za vsako povezavo  $uv \in E(G)$  ena od točk  $u, v$  vsebovana v množici  $A$ , druga pa v množici  $B$ ; kompaktno zapisano

$$E(G[A]) = E(G[B]) = \emptyset.$$

$A$  in  $B$  imenujemo *množici dvodelnega razbitja* grafa  $G$ .

### 2.1.3 Operacije nad grafi

Včasih moramo z grafi operirati ter jih nekoliko spreminjati. Iz grafa  $G$  lahko odstranimo točko  $u \in V(G)$ . Dobimo nov graf  $G - u$ , za katerega velja:

- $V(G - u) = V(G) \setminus u$ ;
- $E(G - u)$  sestavljajo vse povezave iz  $E(G)$ , ki za krajišče nimajo  $u$ .

Iz grafa  $G$  lahko odstranimo tudi povezavo  $e \in E(G)$ . Dobimo nov graf  $G - e$ , za katerega velja:

- $V(G - e) = V(G)$ ;
- $E(G - e) = E(G) \setminus e$ .

### 2.1.4 Sprehod, pot ter komponente grafa

Definirajmo izraze, s katerimi bomo kasneje lažje opisali premikanje po grafu ter strukturo poljubnega grafa.

**Definicija 2.6** Naj bo  $G$  graf in naj velja  $v_0, v_1, \dots, v_k \in V(G)$  ter  $e_1, e_2, \dots, e_k \in E(G)$ . Zaporedje točk in povezav  $S = v_0 e_1 v_1 e_2 v_2 \dots v_{k-1} e_k v_k$ , kjer je  $e_i = v_{i-1} v_i$ , imenujemo *sprehod* v grafu.

Sprehod je enostaven, če so vse povezave  $e_1, e_2, \dots, e_k$  med seboj različne. Enostavni sprehod je *pot*, kadar so vse točke  $v_0, v_1, \dots, v_k$  med seboj različne. Če poleg zgornjega velja tudi  $v_0 = v_k$ , takemu sprehodu pravimo tudi *cikel*.

Ni težko videti, da če obstaja v nekem grafu med poljubnima vozliščima sprehod, obstaja med njima tudi pot.

**Definicija 2.7** *Hamiltonski cikel* grafa  $G$  dobimo, če v  $G$  najdemo sklenjeno pot, ki obišče natanko vsa vozlišča grafa. Grafu, ki premore hamiltonski cikel, pravimo tudi *hamiltonski graf*.

**Definicija 2.8** Točki sta v isti *povezani komponenti*, če med njima obstaja pot.

### 2.1.5 Povezanost grafa

Nekateri grafi imajo več povezav kot drugi. Če že pogledamo primer grafa prijateljev na Facebook-u, ni težko ugotoviti, da so nekateri deli tega omrežja bolj gosto prepleteni kot drugi. V teoriji grafov lahko definiramo lastnost – *povezanost grafa*.

**Definicija 2.9** Graf je *povezan*, če so vse točke v njem v isti povezani komponenti. Graf  $G$  je po točkah  $k$ -povezan, če velja:

- $G$  ima vsaj  $k + 1$  točk;
- Za vsako množico točk  $K \subseteq V(G)$ , moči  $|K| < k$ , velja, da če iz  $G$  odstranimo vse točke iz  $K$ , je graf še vedno povezan.

Največjo konstanto  $k$ , za katero je graf  $k$ -povezan, imenujemo *povezanost* grafa ter to označimo s  $\kappa(G)$ .

### 2.1.6 Podgrafi

Graf  $H$  je *podgraf* grafa  $G$ , če velja

$$V(H) \subseteq V(G) \quad \text{in} \quad E(H) \subseteq E(G).$$

Relacijo označimo z  $H \subseteq G$ . Podgraf  $H$  je *vpel*, če velja  $V(H) = V(G)$ . Podgraf je *induciran* z množico točk  $A \subseteq V(G)$ , če velja:

$$V(H) = A \quad \text{in} \quad E(H) = \{uv \mid uv \in E(G) \text{ in } u, v \in A\}.$$

Tak induciran podgraf lahko označimo tudi z  $H = G[A]$ .

### 2.1.7 Dominantna množica

*Dominantna množica* v nekem grafu je prav posebna podmnožica vozlišč, ki se uporablja v mnogih dokazih, uporabili pa jo bomo tudi v tem diplomskem delu, zato jo tu definiramo.

**Definicija 2.10** Naj bo  $G$  enostaven graf. Množica vozlišč  $U \subset V(G)$  *dominira* graf  $G$ , če velja, da je vsako vozlišče  $v \in V(G)$  bodisi element množice  $U$ , bodisi obstaja vozlišče  $u \in U$ , da velja  $uv \in E(G)$ .

### 2.1.8 Obarvljivost grafov

V teoriji grafov pravimo *barvanje grafa* posebni vrsti označevanju grafovskih objektov (vozlišča, povezave, lica). Tako lahko npr. določimo v grafu vsakemu vozlišču svojo barvo na tak način, da nobena povezava ne povezuje vozlišči z enako barvo. Postopku pravimo barvanje grafa po vozliščih. Problem je zelo življenski, naj opišem en primer:

V današnjem času ima že vsak prenosni računalnik zmožnost povezovanja na brezžična omrežja. Podobno je v današnjem času v vsako večje mesto poplavljen z premnogimi različnimi brezžičnimi omrežji. Na žalost imajo Wi-Fi brezžična omrežja le ozek frekvenčni pas. Da se izognemo interferenci, morajo vsa različna omrežja na nekem prostoru oddajati podatke na enem izmed trinajstih kanalov. Tako lahko problem z lahkoto prevedemo v teorijo grafov:

$V(G)$ : Brezžične dostopne točke;

$E(G)$ : Povezava med dostopnima točkama je natanko takrat, ko obe dostopni točki pokrivata skupno površino (kjer bi potencialno lahko prišlo do interference).

Če v našem sistemu uspešno najdemo 13-barvanje pripadajočega grafa  $G$ , smo s tem rešili problem.

Barvanje grafov je zelo širok ter zanimiv problem, ki ima tudi veliko aplikativno vrednost. Spodaj sta formalno definirani najpomembnejši barvanji grafov:

#### Barvanje točk

**Definicija 2.11** Naj bo  $G$  poljuben graf, ter  $k \in \mathbb{N}$ . Preslikavi  $f : V(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, k\}$  pravimo  $k$ -barvanje grafa  $G$  po točkah, če za poljubna  $u, v \in V(G)$  velja:  $uv \in E(G) \Rightarrow f(u) \neq f(v)$ . Če ima graf  $k$  barvanje po povezavah, pravimo tudi, da je  $k$ -obarvljiv.

*Kromatično število*,  $\chi(G)$ , je najmanjše število, tako da je  $G$   $\chi(G)$ -obarvljiv.

Določitev kromatičnega števila grafa je v splošnem zelo težak, celo  $NP$ -težak problem. K temu problemu zato pristopamo z določevanjem zgornjih in spodnjih mej, ter z razpoznavanjem lastnosti za kromatično število.

**Trditev 2.12** *Velja:*

1. 1-obarvljivi grafi so natanko grafi brez povezav;

2. 2-obarvljivi grafi so natanko dvodelni grafi;

3.  $\chi(K_n) = n$ ;

4.  $\chi(C_n) = \begin{cases} 2, & \text{če je } n \text{ sod} \\ 3, & \text{drugače.} \end{cases}$

### Barvanje po povezavah

**Definicija 2.13** Naj bo  $G$  poljuben graf, ter  $k \in \mathbb{N}$ . Preslikavi  $f : E(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, k\}$  pravimo  $k$ -barvanje grafa  $G$  po povezavah, če za poljubna  $k, l, m \in V(G)$  velja:  $k \sim l, l \sim m \in E(G) \Rightarrow f(kl) \neq f(lm)$ . Če ima graf  $k$  barvanje po povezavah, pravimo tudi, da je  $k$ -obarvljiv po povezavah.

*Kromatično število,  $\chi'(G)$ , je najmanjše število, tako da je  $G$   $\chi'(G)$ -obarvljiv.*

**Trditev 2.14** *Naslednje trditve so ekvivalentne:*

- Graf je dvodelen;
- Graf je 2-obarvljiv;
- Graf ne vsebuje nobenega lihega cikla.

### 2.1.9 Izomorfizem grafov

Naj bosta  $G$  in  $H$  neka grafa. Preslikava  $f : V(G) \rightarrow V(H)$  je *izomorfizem*, če velja:

- $f$  je bijekcija;
- $uv \in E(G) \Leftrightarrow h(u)h(v) \in E(H)$ .

Za taka grafa pravimo, da sta *izomorfna*, relacijo pa označimo z  $G \simeq H$ . Če funkcija ni identiteta, ter če je graf  $G$  kar enak grafu  $H$ , takemu izomorfizmu pravimo tudi *avtomorfizem*.

### 2.1.10 Grafske invariante

*Invariante grafov* so lastnosti grafa, ki jo imajo vsi grafi, ki so si med sabo izomorfni. Spodaj je naštetih nekaj invariant grafa:

- $|V(G)|$
- $E(G)$
- število komponent
- število točk stopnje  $k$ , za poljuben  $k$
- število trikotnikov
- dvodelnost
- število mostov.

V splošnem izomorfizem dveh grafov ovržemo tako, da najdemo tako invarianto, ki je pri obeh grafih različna. Na pameten in hiter način dokazati izomorfizem dveh grafov pa je zelo težko. V resnici nihče ne zna točno določiti, ali problem določanja izomorfizma spada v razred  $P$  ali  $NP$  polnih problemov.

### 2.1.11 Matrike grafov

Naj bo  $G$  graf z množico točk  $V(G) = v_1, v_2, \dots, v_n$  ter množico povezav  $E(G) = e_1, e_2, \dots, e_m$ .

**Matrika sosednosti**  $A(G)$  je  $n \times n$  matrika, definirana takole:

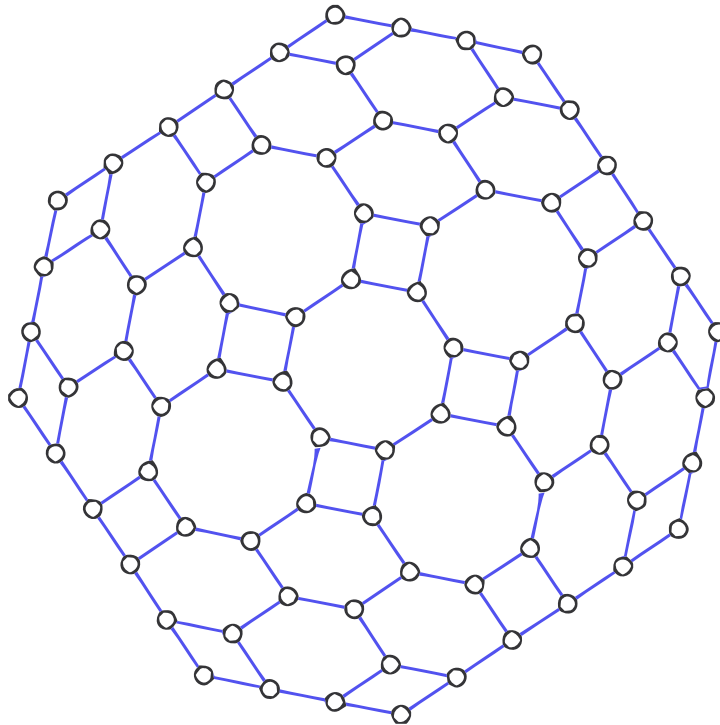
$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad a_{ij} = \begin{cases} 1, & v_i \sim v_j \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

**Incidenčna matrika**  $B(G)$  je  $n \times m$  matrika, definirana takole:

$$\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} \end{bmatrix} \quad a_{ij} = \begin{cases} 1, & v_i \in e_j \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

## 2.2 Ravninski grafi

Graf je *ravninski*, če ga je mogoče narisati v ravnini brez medsebojnega sekanja povezav. Vsaki taki predstavitvi grafa  $G$  v ravnini pravimo *ravninska vložitev* grafa  $G$ .



Slika 2.1: Primer ravninskega grafa.

Vložitev grafa razdeli ravnino na povezane dele, ki jim pravimo *lice*. Eno od teh lic je neomejeno, ter mu pravimo *zunanje lice*. Množico lic grafa  $G$  označimo z  $F(G)$ . Vsako lice meji na nekaj sosednjih lic. *Dolžina lica*  $f$  je število lic, ki ležijo na robu lica  $f$ , kar označimo z  $l(f)$ . Lemo o rokovanju že poznamo, za ravninske grafe pa velja še ena različica.

**Lema 2.15** *Za vsak ravninski graf velja*

$$\sum_{f \in F(G)} l(f) = 2|E(G)|.$$

**Dokaz.** Vsaka povezava grafa  $G$  meji na natanko dve lici. Opazimo lahko, da če seštejemo dolžine vseh lic v grafu  $G$ , pri tem vsako povezavo štejemo natanko dvakrat. Odtod sledi zgornja enakost.  $\square$

### 2.2.1 Eulerjeva formula

**Izrek 2.16 (Eulerjeva formula za enostavne grafe)** *Naj bo  $G$  ravninski graf. Potem velja*

$$|V(G)| - |E(G)| + |F(G)| = 2.$$

**Dokaz.** Izrek bomo dokazali z indukcijo po številu vozlišč. Če je  $|V(G)| = 1$ , potem  $|E(G)| = 0$  ter  $|F(G)| = 1$ . Torej velja

$$1 + 0 + 1 = 2.$$

Poglejmo si še indukcijski korak, ko  $|V(G)| > 1$ . Izberimo poljubno povezavo ter jo skrčimo, da dobimo ravninski graf  $G'$ . Vemo:

- $|V(G')| = |V(G)| - 1$
- $|E(G')| = |E(G)| - 1$
- $|F(G')| = |F(G)|$ .

Od tod sledi:

$$\begin{aligned} |V(G)| - |E(G)| + |F(G)| &= |V(G')| + 1 - (|E(G')| + 1) + |F(G')| \\ &= |V(G')| - |E(G')| + |F(G')| \\ &= 2. \end{aligned}$$

□

Glede na obseg tega diplomskega dela ni potrebe po razširjanju Eulerjevega izreka na ravninske multigrafe ali ravninske grafe z več komponentami.

### 2.2.2 Prerez grafa

Včasih lahko iz grafa odstranimo takšne povezave, da naš graf razpade na več komponent. Množici takšnih povezav pravimo tudi *prerezna množica* grafa. Ker bomo o prerezih v tej diplomski nalogi veliko govorili, je prav, da jih na tem mestu definiramo.

**Definicija 2.17 (Prerez grafa)** Razbitju množice vozlišč nekega grafa na dve disjunktni množici pravimo *prerez grafa*. Množici povezav, ki imajo svoja krajišča v različnih množicah razbitja, pravimo *prerezna množica*. Takim povezavam pravimo tudi *prerezne*

*povezave*. Če v vsaki komponenti razbitega grafa obstaja cikel, takemu prerezu pravimo *ciklični prerez*.

### 2.2.3 Povezanost grafa

Povezanost grafa je zelo široka tema teorije grafov.

**Definicija 2.18** Graf  $G$  je  $k$ -povezan po povezavah, če ga z odstranitvijo poljubnih  $k$ -povezav ne moremo razbiti na dve komponenti. Če je  $k$  najmanjše število robov, tako da v vsaki preostali komponenti obstaja cikel, pravimo, da je graf *po povezavah ciklično  $k$ -povezan*.

Vedeti moramo, da obstaja še povezanost po vozliščih, ki je pa v tej diplomski nalogi ne bomo potrebovali.

### 2.2.4 Dualni graf

**Definicija 2.19 (Dualni graf)** Naj bo  $G$  ravninski graf. *Dualni graf* od grafa  $G$  označimo z  $G^*$ . To je ravninski graf z naslednjimi lastnostmi:

- $V(G^*) = F(G)$ ;
- $E(G^*) = \{uv \mid u, v \in F(G) \text{ in } u, v \text{ sta sosednji lici v } G\}$ .

Iz zgornje definicije lahko opazimo:

- Lice velikosti  $k$  grafa  $G$  ustreza točki stopnje  $k$  grafa  $G^*$ ;
- Točka stopnje  $k$  grafa  $G$  ustreza licu grafa grafa  $G^*$ ;
- Povezava grafa  $G$  ustreza povezavi grafa  $G^*$ ;
- Zanka v  $G$  ustreza mostu v  $G^*$ ;
- Most v  $G$  ustreza zanki v  $G^*$ ;
- Cikel grafa  $G$  ustreza prerezu grafa  $G^*$ ;
- Minimalni prerez grafa  $G$  ustreza minimalnemu ciklu grafa  $G^*$ .

## 2.3 Fulereni

Leta 1985 so Richard Smalley, Robert Curl, James Heath, Sean O'Brien in Harold Kroto odkrili spojino  $C_{60}$ , ki se je kasneje izkazala za prvi fuleren, ti. *Buckminsterfulleren*. Takrat se je začelo kemijsko raziskovanje fulerenov. V kemiji predstavlja *fuleren* molekulo, sestavljeno iz ogljikovih atomov, razporejenih v obliki sfere, elipsoida ali cevke. V fulerenu atomi ogljika tvorijo le petkotnike ter šestkotnike, pri tem pa je vsak atom ogljika povezan z natanko tremi atomi ogljika. Ker vemo, da ima ogljik štiri valenčne elektrone, mora torej biti ena izmed treh vezi okrog vsake fullerenske molekule dvojna.

Matematiki so ime *fulereni* prevzeli iz kemije ter fullerenske grafe intuitivno definirali kot ravninske kubične 3-povezane grafe z lici dolžin 5 in 6.

### 2.3.1 Osnovno o fulerenih

Če označimo naš fullerenski graf z  $G$ , število petkotnih lic s  $p$ , ter z  $h$  število šestkotnih lic, lahko izrazimo osnovne grafske količine na enostavnejši način:

$$|F(G)| = p + h; \quad |V(G)| = (5p + 6h)/3; \quad |E(G)| = (5p + 6h)/2.$$

**Lema 2.20** *Vsak fullerenski graf ima natanko 12 petkotniških lic.*

**Dokaz.** Naj bo  $G$  poljuben fullerenski graf. Zgornje količine števila lic, povezav ter vozlišč vstavimo v Eulerjevo formulo za ravninske grafe. Tako dobimo:

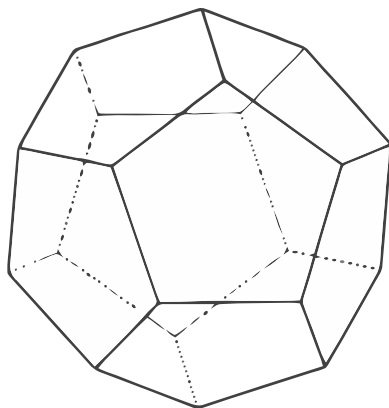
$$|V(G)| - |E(G)| + |F(G)| = \frac{5p + 6h}{3} - \frac{5p + 6h}{2} + p + h = 2.$$

Od tod direktno sledi  $p = 12$ . □

**Posledica 2.21** *S pomočjo zgornjega izračuna lahko lepše izrazimo število vozlišč in povezav v fulerenu:*

$$|V(G)| = 2h + 20 \quad \text{ter} \quad |E(G)| = 3h + 30$$

Slika 2.2 prikazuje najmanjši možni fuleren, ki nima nobenega šestkotnika, torej  $h = 0$  ter  $p = 12$ , tabela 2.1 pa prikazuje število neizomorfni fulerenov glede na zgoraj izražene grafske količine.



Slika 2.2: Prikaz najmanjšega fulerena na 20 točkah, ki je sestavljen iz samih petkotnikov - *dodekaeder*. Ni težko prešteti, da ima dodekaeder 20 vozlišč, 30 povezav ter 12 lic, ki so sami petkotniki.

$ V(G) $	$ E(G) $	$ F(G) $	število lic dolžine 6	število fulerenov
20	30	12	0	1
22	33	13	1	0
24	36	14	2	1
26	39	15	3	1
28	42	16	4	2
30	45	17	5	3
32	48	18	6	6
34	51	19	7	6
36	54	20	8	15
38	57	21	9	17
40	60	22	10	40
42	63	23	11	45
44	66	24	12	89
46	69	25	13	116
48	72	26	14	199
50	75	27	15	271
52	78	28	16	437
45	81	29	17	580
56	84	30	18	924
58	87	31	19	1205
60	90	32	20	1812

Tabela 2.1: Prikaz števila najmanjših neizomorfni fulerenov glede na število vozlišč, povezav, lic ter šestkotnikov.

### 2.3.2 Hamiltonost fulerenov

Matematiki so do sedaj preučevali že mnogo lastnosti fulerenov, npr. nasičenostno število [4], diameter [18], neodvisnostno število [20] ter ciklični prerezi [27], ki si jih bomo tudi mi kasneje podrobneje ogledali. Eden izmed pomembnejših problemov v zvezi s fulereni je tudi vprašanje, če so vsi fulereni hamiltonski grafi.

Računalniško preiskovanje, pa tudi intuicija mnogih matematikov pritrjuje zgornjemu vprašanju, vendar te domneve doslej še nikomur ni uspelo dokazati ali ovreči. Že leta 1973 je Ewald [11] dokazal, da v poljubnem fulerenu  $G$  nek cikel sreča vsa lica, iz česar direktno sledi naslednja lema:

**Lema 2.22** *Najdaljši cikel v fulerenu vsebuje vsaj  $\frac{|V(G)|}{3}$  vozlišč.*

**Dokaz.** Vzemimo Ewaldov cikel [11], ki v nekem fulerenu obiše vsa lica. Največje lice v našem grafu je šestkotnik, ker pa je graf 3-regularen, se cikel vsakega lica dotika v vsaj dveh vozliščih. Torej ni težko videti, da tak cikel vsebuje vsaj  $\frac{2}{6}$  vozlišč.  $\square$

Leta 2002 je T. Došlić v [5] prišel do naslednjega rezultata:

**Lema 2.23** *Vsi fulereni z največ 176 vozlišči so hamiltonski grafi.*

Znano je, da ima vsak ravninski graf tak cikel, ki je tudi dominantna množica, torej ima vsaka povezava tega grafa eno krajišče na takem ciklu. Iz tega dejstva lahko hitro izboljšamo mejo za dolžino najdaljšega cikla v fulerenu.

**Lema 2.24** *Naj bo  $G$  poljuben fulerenski graf. Najdaljši cikel v  $G$  vsebuje vsaj  $\frac{3|V(G)|}{4}$  vozlišč.*

**Dokaz.** Naj bo  $C$  dominirajoči cikel v  $G$ . Ker ima vsaka povezava  $e \in E(G)$  krajišče na ciklu  $C$  in je  $G$  3-povezan, mora biti  $G - C$  množica izoliranih vozlišč. Torej velja:

- Vsaka točka  $v \in V(G - C)$  ima vse tri sosede na ciklu  $C$ ;
- Vsaka točka  $c \in C$  ima vsaj dva soseda, ki prav tako ležita na ciklu  $C$ , ter kvečjemu enega soseda  $s \in V(G - C)$ .

Torej lahko trdimo, da velja

$$|V(G - C)| \leq \frac{|V(G)|}{4}.$$

Dominirajoči cikel torej vsebuje vsaj  $\frac{3|V(G)|}{4}$  vozlišč.  $\square$

Naslednje, do sedaj znane, izboljšave spodnjih mej so prikazane v spodnjem seznamu:

- Jendrol' in Owens [22] sta dokazala spodnjo mejo  $\frac{4n}{5}$ ;
- Král', Pangrác, Sereni in Škrekovski [26] so dokazali spodnjo mejo  $\frac{5n}{6} - \frac{2}{3}$ ;
- Erman, Kardoš in Miškuf [10] so dokazali spodnjo mejo  $\frac{6n+2}{7}$ , za fulerene, ki imajo več kod 380 vozlišč.

### 2.3.3 Spiralna metoda

V času hitre rasti računske moči računalnikov, se je za lažjo predstavitev fulerenov pojavila potreba po kodiranju fulerenov in matematiki so v ta namen razvili mnogo algoritmov za kodiranje fulerenov. Eden izmed teh je tako imenovana spiralna metoda, ki jo v [16] opisujeta Fowler in Manolopoulos. Nekaj časa so matematiki mislili, da velja naslednja hipoteza o spiralni metodi:

**Hipoteza 2.25** *Površino fulerenskega poliedra lahko odvijemo v povezan spiralni trak petkotnikov in šestkotnikov, ki si delijo povezavo, tako da si vsako novo lice na spirali deli povezavo s*

- *svojim predhodnikom na spirali in*
- *prvim licem v dosedanji spirali, ki ima že odprto povezavo.*

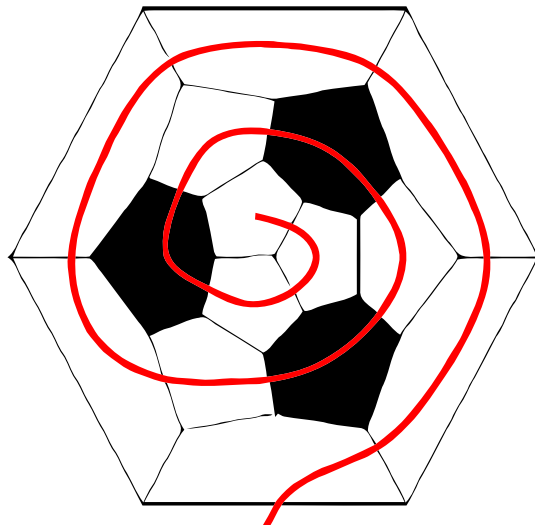
Primer spiralne predstavitve lahko vidimo na sliki 2.3.

Ta metoda nam omogoča preprosto kodiranje fulerenov, vendar ima svoje pomankljivosti. Na žalost je namreč zgornja hipoteza napačna, saj obstaja fuleren na 380 točkah, za katerega ne moremo najti spiralnega zapisa, kljub temu pa imajo skoraj vsi fulereni vsaj en pravi zapis v spiralni metodi. Pogosto pa imajo fulereni veliko spiralnih predstavitev.

**Lema 2.26** *Naj bo  $G$  fulerenski graf. Potem ima  $G$  največ  $6|V(G)|$  spiralnih kod.*

**Dokaz.** Da začnemo spiralno predstavitev, si moramo najprej izbrati začetno lice, nato eno izmed sosednjih lic, ter na koncu določiti orientacijo, v kateri bomo lica označevali. Fuleren na  $n$  vozliščih ima  $\frac{3n}{2}$  povezav, kjer lahko vsako povezavo vidimo tudi kot začetni dve sosednji lici. Pri vsakem takem paru lahko izberemo eno izmed dveh lic za začetno lice ter nato še eno izmed dveh orientacij.

Torej dobimo največ  $\frac{3n}{2} \cdot 2 \cdot 2 = 6n$  spiral. □



Slika 2.3: Primer spiralne predstavitve fulerena. Pripadajoča koda je:

$$(5, 5, 5, 6, 5, 6, 5, 6, 5, 5, 5, 5, 5, 5, 5, 6).$$

Naslednja pomanjkljivost se pojavi, če želimo iz dane spiralne kode konstruirati nove fulerene. Znano je, da za dano število vozlišč  $n$  obstaja  $O(n^9)$  različnih fulerenov, kjer ima po zgornji lemi vsak največ  $6n$  spiralnih kod. To pomeni  $O(n^{10})$  potencialno dobrih spiralnih kod, saj so nekatere lahko med seboj enake. Število možnih kandidatov za kode pa seveda raste bistveno hitreje, saj nam vsako zaporedje dvanaajstih petic in  $\frac{n}{2} - 10$  šestic lahko predstavlja potencialno kodo za nek fuleren. Če povzamemo, imamo  $\binom{\frac{n}{2}+2}{12}$ , torej eksponentno število potencialnih spiralnih kod, ter le  $n^{10}$ , torej polinomsko število dobrih spiralnih kod. Vidimo torej, da iskanje novih fulerenov s pomočjo naključnega generiranja potencialnih spiralnih kod ni zelo preprosto.

### 2.3.4 Stabilnost fulerenov ter njihova uporaba

Matematični opis fulerenskih grafov opisuje ogromen razred grafov, ki bi lahko v naravi predstavljale molekulo iz samih ogljikov. Seveda pa vsak graf iz matematične družine fulerenov ni stabilna kemijska molekula. Stabilnost molekule je v realnem življenju odvisna od zahtevnejših grafovskih invariant, ki segajo globoko v teorijo grafov, med drugim pa tudi motivirajo iskanje novih grafovskih invariant, ki bi bili v dobri korelaciji s stabilnostjo fulerenskih molekul. Naj omenim nekaj fulerenskih lastnosti, ki so v precej dobri korelaciji s stabilnostjo molekul:

**Izoliranost petkotnikov:** Bolj kot so petkotniki v fulerenskem grafu izolirani ter daleč

stran drug od drugega, večja je verjetnost, da bo pripadajoča molekula stabilna.

**Uravnoteženost incidenčne matrike:** Če ima nek fuleren v svoji incidenčni matriki približno polovico lastnih vrednosti pozitivnih (oz. negativnih), je to dober znak, da bo pripadajoča molekula tudi bolj stabilna.

**Število popolnih prirejanj:** Kot smo omenili, vsako vozlišče v fullerenskem grafu meji z natanko eno dvojno vezjo. Ta lastnost je direktno povezana z obstojem popolnega prirejanja v fullerenskem grafu.

V zadnjem desetletju lahko na področju fulerenov opazimo velik napredek tako na matematičnem kot na fizikalnem in kemijskem področju. Motivacija za to je v izrednih lastnostih, ki jih imajo karbonski materiali. So namreč zelo trpežni in odporni na vročino, nekateri pa so tudi superprevodniki. V reviji *Popular science* tako najdemo članek o uporabi fulerenov v oklepni vozilih, človeških ščitih. V reviji *Chemistry and Biology* najdemo članek, ki opisuje fulerene kot lahkoaktivirajoča antibakterijska sredstva, v medicini pa so strokovnjaki že uspeli uporabiti lastnosti fulerenov v boju proti specifični vrsti rakavih celic – *melanoma*.

Ker pa je fullerenskih kemijskih oblik ogromno, jih lahko razdelimo na več podrazredov. Spodaj bom naštel glavne izmed njih:

**Buckyball gruče:** Najmanjši predstavnik je  $C_{20}$  (nenasičen dodekaeder) in najbolj pogost je  $C_{60}$ . Izraz Buckyball v teoriji grafov pomeni fuleren vloženi na sfero, pri čemer si nobeni dve lici dolžine 5 ne delita povezave. Buckyballi so tudi najbolj pogosti fulereni, ki jih najdemo v naravi.

**Dvodelna molekula:** Podoben razred kot Buckyball, le da sta tu dva Buckyballa povezana v eno molekulo z ogljikovo verigo.

**Nanocevke:** Prazne cevčice zelo majhnih dimenzij, ki imajo enojne ali večplastne stene. Potencialna uporaba se pojavlja v elektroniki ter medicini. Več o nanocevkah v [27].

**Megacevke:** Imajo večji diameter kot nanocevke in lahko imajo stene različnih debelin. Potencialna uporaba v kemiji je transport molekul različnih velikosti.

**Polimeri:** S pomočjo visoke temperature in tlaka se ustvarjajo verige (2- ali 3- dimenzijske) ogljikovih atomov.

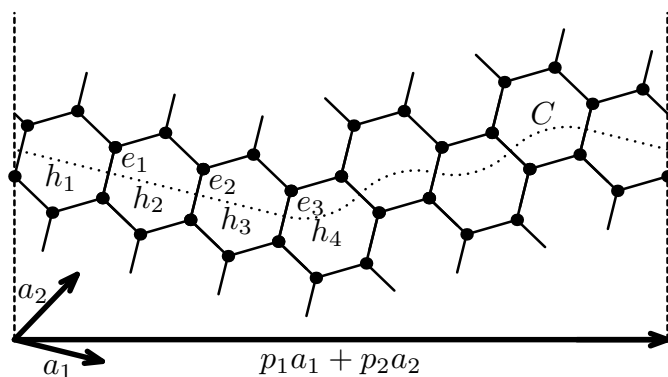
**Nanočebulice:** Sferični delci, ki bazirajo na več ogljikovih ovojih Buckyball jeder. Potencialno področje uporabe so maziva.

V naslednjem razdelku se bomo še podrobneje posvetili specifičnemu razredu – *nanocevkam*, saj bomo tudi v drugem poglavju diplomskega dela v veliki meri govorili o njih.

### 2.3.5 Nanocevke

*Nanocevke* so podrazred množice fulerenov, ki imajo cilindrično obliko, na vsaki strani pa se zaključijo s sferično hamiltonsko strukturo. Zanimiv je tudi razred t.i. *odprtih nanocevk*, več o tem v [35].

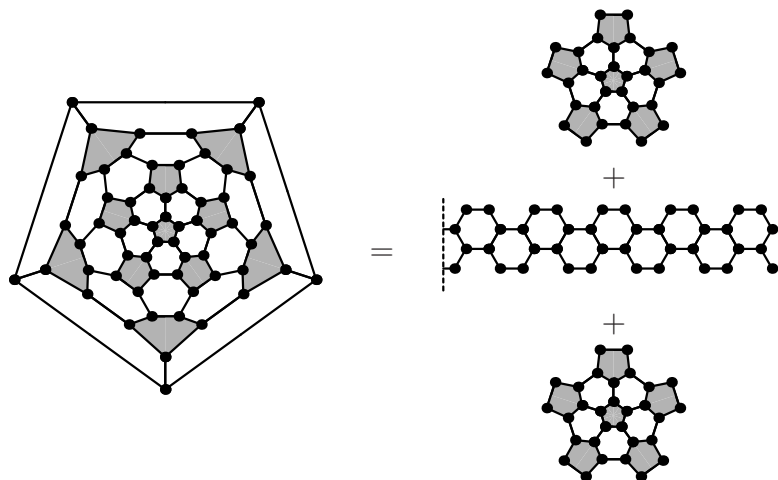
Fulerenski graf je *nanocevka*, če ga lahko ločimo na cilindrični del, ki vsebuje le šestkotnike in dva krovna grafa, izmed katerih vsak vsebuje natanko šest petkotnikov ter morebiti tudi kak šestkotnik. V krovnem grafu se mora vsaj eden od petkotnikov dotikati cilindričnega dela, ki ima sledečo strukturo: Vsebuje obroče šestkotnikov, ki imajo središča v  $h_1, h_2, \dots, h_p$ , ki jih lahko zložimo enega na drugega. Naj bosta  $a_1$  in  $a_2$  dva enotska vektorja pod kotom  $60^\circ$ , tako da lahko za poljubna sosedna šestkotnika v nekem obroču rečemo  $h_i - h_{i-1} = a_1$  ali  $h_i - h_{i-1} = a_2$ . Na tak način dobimo odprto nanocevko, ki ji lahko definiramo tip  $(p_1, p_2)$ , kjer je  $p_j$  število pojavitev enotskega vektorja  $a_j, j = 1, 2$ . Ni težko videti, da lahko vektorja  $a_1$  in  $a_2$  vedno izberemo tako, da  $p_1 \geq p_2$ . Par koeficientov  $(p_1, p_2)$  v enačbi  $r = p_1 a_1 + p_2 a_2$  dobro opiše strukturo take nanocevke. Za boljšo predstavbo glej sliko 2.4. Pravimo, da je  $p_1 + p_2$  *širina* nanocevke.



Slika 2.4: Primer nanocevke tipa  $(6, 2)$ .

Nanocevkam tipa  $(n, 0)$  pravimo, da so *cikcak*; nanocevki tipa  $(n, n)$  pa lahko rečemo tudi *naslonjač* (oba tipa sta zrcalno simetrična). Preostalim nanocevkam brez zrcalne simetrije pa pravimo *kiralne* nanocevke. V luči te definicije lahko vidimo Buckminsterfulleren  $C_{60}$  kot prvega v vrsti družine nanocevk tipa  $(5, 5)$  z enim samim obročem šestkotnikom v cilindričnem delu, glej sliko 2.5.

Nanocevke, ki so zanimive na področju raziskovanja novih materialov, imajo pogosto



Slika 2.5: Buckminsterfulleren –  $C_{60}$  je najmanjša nanocevka tipa  $(5, 5)$ .

razmerje med dolžino in premerom zelo veliko, toda strukturo nanocevk lahko najdemo tudi v mnogih drugih fulerenih. Za dva nedegenerirana ciklična prereza po povezavah pravimo, da sta *vzporedna*, če oba razdelita nanocevko na taki komponenti, ki vsebujeta istih šest petkotnikov, ter če pripadajoča obroča šestkotnikov nimata skupnega lica. Takim obročem šestkotnikov pravimo *plasti*, maksimalno število vzporednih plasti pa predstavlja *dolžino* nanocevk. Cilindrični del nanocevk bi torej lahko opisali tudi kot skupina več vzporednih plasti, ki nimajo skupnih lic.

# Poglavje 3

## Ciklični prerezi v fulerenih

Prva lastnost fulerenov, ki si jo bomo v tej diplomski nalogi podrobneje ogledali, so ciklični prerezi fulerenov po povezavah. Spomnimo se, da bomo vedno obravnavali le prereze po povezavah, jim bomo pravili kar *prerezi*.

Došlić je dokazal, da so fulerenski grafi po povezavah ciklično 4-povezani [5] in 5-povezani [6]. Leta 2006 sta Qi in Zhang [30] predstavila poenostavljen Došlićev dokaz 5-povezljivosti, dokazala pa sta tudi, da so fulereni ciklično 5-povezani. Fulereni ciklično ne morejo biti več kot 5-povezani, saj vsebujejo 12 petkotnikov, tako da imamo najmanj 12 cikličnih 5-prerezov, ki jih dobimo tako, da izberemo 5 povezav, ki obkrožajo vsakega izmed petkotnikov. Seveda lahko na podoben način iz vsakega šestkotnika dobimo ciklični 6-prerez. Poimenujmo takšne 5- ter 6-prereze *trivialni* prerezi. Kardoš in Škrekovski [23] sta karakterizirala vse netrivialne 5- in 6-prereze, neodvisno od tega sta netrivialne ciklične 5-prereze karakterizirala Kuntar in Marušič [28]. V [27] smo karakterizirali tudi 7-prereze. V tej diplomski nalogi naredimo pregled vseh zgoraj omenjenih prerezov v fulerenih. V nadaljevanju bo izraz *prerez* vedno predstavljal ciklični prerez.

### 3.1 Ciklični 5- ter 6-prerezi fulerenov

Ni težko videti, da obroč šestkotnikov v nanocevkki predstavlja nedegeneriran ciklični 6-prerez. V [23] sta Kardoš in Škrekovski dokazala, da so nanocevke edini grafi, ki premorejo ciklične 5- in 6-prereze, kljub temu pa obstajajo fulereni, ki premorejo nedegenerirane ciklične  $k$ -prereze, za nek  $k \geq 7$ . Kardoš, Krnc, Lužar in Škrekovski smo v [27] opisali nedegenerirane ciklične 7-prereze, ter dokazali, da izmed vseh obstajata natanko dva taka, ki nista iz družine nanocevk.

Pomembna definicija v tem razdelku je *prerezni vektor*. Naj bo  $G$  fuleren, v katerem

neki  $k$ -prerez označimo s  $C$  in naj bo  $H$  ena od komponent grafa  $G - C$ , ki naj vsebuje povezave  $C$ . Naj bodo  $e_1 = v_1w_1, e_2 = v_2w_2, \dots, e_k = v_kw_k$  povezave prereza  $C$ , kot se ciklično pojavijo okrog komponente  $H$ , ter naj velja  $v_i \in V(H)$  za  $i = 1, 2, \dots, k$ . Naj bo  $\alpha_i$  dolžina sprehoda po zunanem licu med  $v_i$  in  $v_{i+1}$  minus ena (pri tem predpostavimo, da velja  $v_{k+1} = v_1$ ). Vidimo lahko, da  $\alpha_i = -1$ , če  $v_i = v_{i+1}$ .

V tej diplomski poimenujem zaporedje  $[x_1, x_2, \dots, x_k]$  a *prerezni vektor*  $v(C)$ . Brez težav vidimo, da so vrednosti v tem vektorju lahko le  $-1, 0, 1, 2$  ali  $3$ , saj so velikosti lic v grafu  $G$  lahko le  $5$  ali  $6$ . Za primer vzemimo prerezni vektor konfiguracije 6D02 iz slike 4, ki je enak  $[-1, 1, 0, 0, 0, 1]$ .

Vsak ciklični prerez razdeli graf  $G$  na dve komponenti, izmed katerih imata obe svoj prerezni vektor. Glede na nek prerez  $C$  naj bosta ta dva vektorja  $[x_1, x_2, \dots, x_k]$  ter  $[y_1, y_2, \dots, y_k]$ . Če je  $C$  nedegeneriran, se vse povezave iz  $C$  dotikajo le šestkotnikov, od koder lahko vidimo, da mora veljati  $x_i + y_i = 2$  za  $i = 1, 2, \dots, k$ . Očitno torej en prerezni vektor določa drugega. V zvezi z vsoto prereznega vektorja lahko opazimo še eno lepo lastnost, podano v naslednji lemi.

**Lema 3.1** *Naj bo  $C$  nedegeneriran  $k$ -prerez v fulerenu  $G$  in naj bo  $X = (x_1, x_2, \dots, x_k)$  eden izmed prereznih vektorjev. Potem velja  $\sum_{i=1}^k x_i = k$ .*

Da dokažemo zgornjo lemo, uporabimo razširitev rezultata iz [23, Lema 1], ki ga obnovimo spodaj.

**Lema 3.2** *Naj bo  $C$  ciklični prerez v fulerenu  $G$  in naj bo  $H$  ena izmed komponent grafa  $G - C$ . Naj bosta  $n_1$  in  $n_2$  število vozlišč stopnje ena in dva, naj bo  $f_5$  število petkotnikov,  $l$  pa velikost zunanega lica v  $H$ . Potem  $6 - f_5 = 4n_1 + 2n_2 - l$ .*

**Dokaz.** Naj bo  $m = |E(H)|$ , naj bo  $n_3 = |\{v \in V(H), \deg(v) = 3\}|$  in naj bo  $f_6$  število šestkotnikov v  $H$ . Potem

$$n_1 + 2n_2 + 3n_3 = 2m = 5f_5 + 6f_6 + l.$$

Če uporabimo Eulerjevo formulo, lahko rečemo tudi:

$$n_1 + n_2 + n_3 + f_5 + f_6 + 1 - m = 2.$$

Ko uporabimo ti dve enačbi, dobimo

$$6 - f_5 = 4n_1 + 2n_2 - l.$$

□

**Dokaz leme 3.1.** Naj bo  $H$  spet komponenta  $G - C$ , ki ji pripada prerezni vektor  $X$ . Graf  $H$  ima potem  $n_1$  vozlišč stopnje 1 in  $n_2$  vozlišč stopnje 2, tako da  $2n_1 + n_2 = |C| = k$ .  $H$  ima tudi šest petkotnikov.

Velikost zunanjšega lica  $H$  je

$$l = k + \sum_{i=1}^k \alpha_i = 2n_1 + n_2 + \sum_{i=1}^k \alpha_i.$$

Po drugi strani vemo

$$l = 4n_1 + 2n_2,$$

torej

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i = 2n_1 + n_2 = k,$$

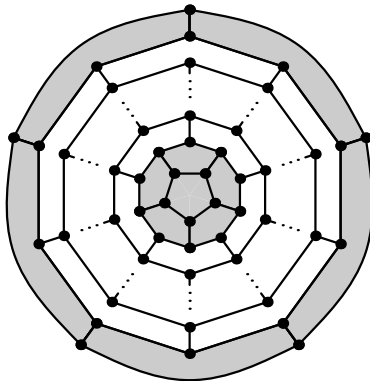
kar dokaže lemo. □

*Tip prereznega vektorja* je kompakten zapis prereznega vektorja, pri katerem izpustimo koordinate z vrednostjo 1, na primer tip prereznega vektorja  $[2, 1, 1, 0, 1, 2, 0]$  je  $[2, 0, 2, 0]$ . Če so v tipu nekega prereznega vektorja zaporedoma sama različna števila, pravimo, da je tak prerez *nanocevičen*. To izhaja iz dejstva, da če se slučajno zgodi, da sta dve zaporedni koordinati v tipu prereznega vektorja enaki, to pomeni, da v prereznem vektorju nastopajo smerni vektorji v vseh treh različnih smereh. Seveda mi vemo, da je fuleren nanocevka natanko takrat, ko obstaja tak ciklični nedegeneriran prerez, ki vsebuje največ dva različna smerna vektorja.

Če je prerez nanotubičen, potem vsako podzaporedje vektorja, ki je oblike  $2, 1, \dots, 1, 0$  in vsebuje  $k$  enic, pomeni v prerezu  $k + 1$  zaporednih pojavitev enotskega vektorja  $a_1$  ter, na enak način, vsako podzaporedje z  $l$  enicami tipa  $0, 1, \dots, 1, 2$  pomeni v prerezu  $l + 1$  zaporednih pojavitev enotskega vektorja  $a_2$ . Zdaj lahko rečemo naslednje:

**Trditev 3.3** *Fuleren ima obliko nanocevke natanko takrat, ko v njem obstaja nanotubičen prerez. Če je ta prerez tipa  $(p_1, p_2)$ , potem je velikost prereza  $p_1 + p_2$ .*

Spodaj bom naštel nekaj znanih rezultatov v zvezi z netrivialnimi cikličnimi 5- in 6-prerezi. Označimo z  $G_k$  družino fulerenskih grafov, sestavljenih iz dveh krovnih grafov, ki ju sestavlja le šest petkotnikov, ter  $k$  plasti šestkotniških obročev, glej sliko 3.1.



Slika 3.1: Grafi  $G_k$  so edini fulereni grafi, ki premorejo netrivialni ciklični 5-prerez.

**Izrek 3.4** *Fuleren ima netrivialen ciklični 5-prerez natanko takrat, ko je izomorfen grafu  $G_k$ , za neko naravno število  $k \geq 1$ .*

Posledično lahko trdimo, da so vsi netrivialni ciklični prerezi v družini fulerenov nedegenerirani. Za razliko od cikličnih 5-prerezov pa obstajajo netrivialni ciklični 6-prerezi, ki so degenerirani.

**Izrek 3.5** *Obstaja natanko sedem neizomorfni grafov, ki lahko nastanejo kot komponente degeneriranih cikličnih 6-prerezov z manj kot šest petkotniki (glej sliko 3.2). Nadalje, grafi z  $i$  petkotniki so enolični za  $i = 0, 1, 2, 3, 4$ , za  $i = 5$  pa obstajata natanko dva taka grafa.*

Nedegenerirani ciklični 6-prerezi imajo, podobno kot pri 5-prerezih, obliko nanocevke. V [23] je podana naslednja karakterizacija:

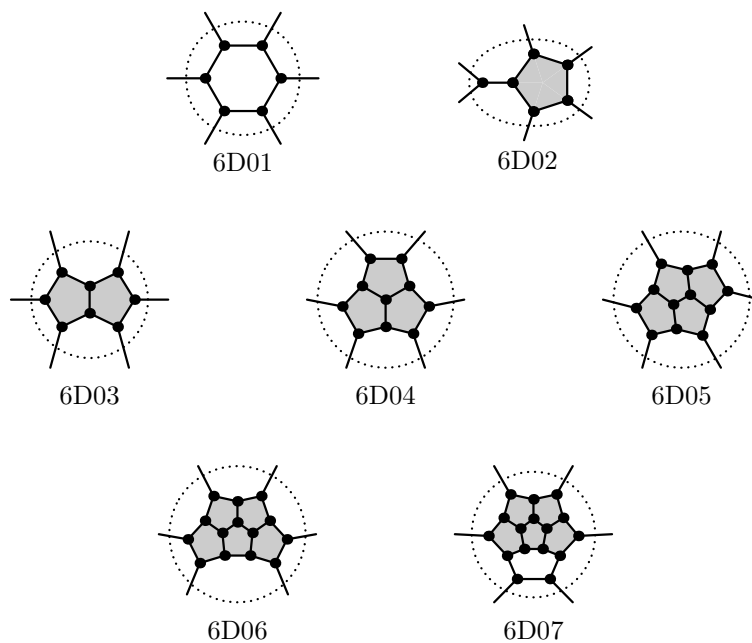
**Izrek 3.6** *Fuleren ima nedegeneriran ciklični 6-prerez natanko takrat, ko ima obliko nanocevke tipa  $(p_1, p_2)$ , kjer velja (a) ali (b):*

(a)  $p_1 + p_2 = 6$ ;

(b)  $p_1 = 5, p_2 = 0$  z vsaj 2 obročema šestkotnikov.

## 3.2 Ciklični 7-prerezi v fulerenih

Do sem smo ponovili rezultat Kardoša in Škrekovskega v [23]. Ugotovili smo, da poleg trivialnih lahko na lep način pridemo do prav vseh fulerenih cikličnih 5- in 6-prerezov. V tem razdelku pa si bomo pogledali, kako je s 7-prerezi.

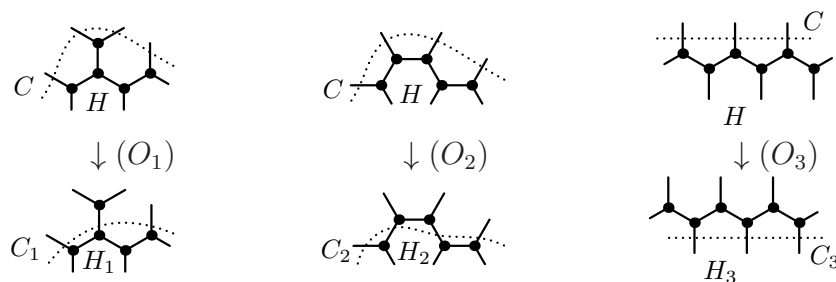


Slika 3.2: Degenerirani ciklični 6-prerezi.

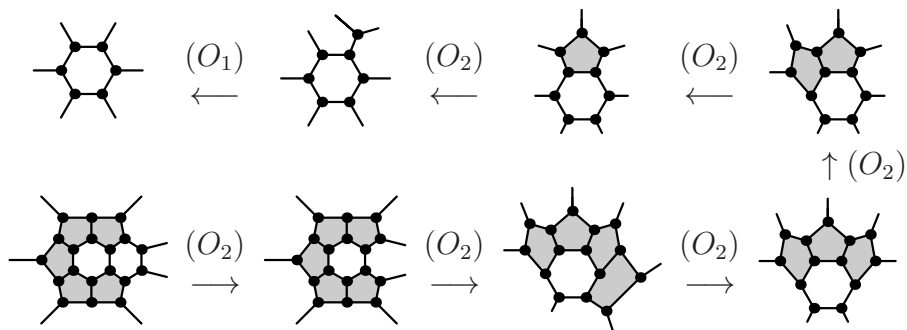
### 3.2.1 Degenerirani ciklični 7-prerezi

Najprej bomo razmišljali o degeneriranih 7-prerezih. Našteli bomo vse degenerirane ciklične 7-prereze in prišli do vseh 57 neizomorfnih grafov, ki lahko nastanejo kot komponente degeneriranega cikličnega 7-prereza z manj kot 6 petkotniki. Pri generiranju konfiguracij smo si pomagali z operacijami  $O_1$ ,  $O_2$  in  $O_3$ , predstavljenimi v [23]. Vsaka izmed operacij  $O_i$ ,  $i \in 1, 2, 3$  rahlo spremeni ciklični  $k$ -prerez  $C$  v nov prerez  $C_i$ . Naštejmo kratke opise teh operacij (primere delovanja operacij lahko vidimo na sliki 3.3):

- ( $O_1$ ) Če komponenta  $H$  vsebuje vozlišče stopnje ena, potem lahko z uporabo  $O_1$  ciklični  $k$ -prerez  $C$  spremenimo v ciklični  $(k - 1)$ -prerez  $C_1$ .
- ( $O_2$ ) Če komponenta  $H$  vsebuje dve sosednji vozlišči stopnje 2, potem lahko z uporabo  $O_2$  ciklični  $k$ -prerez  $C$  spremenimo v ciklični  $k$ -prerez  $C_2$ .
- ( $O_3$ ) Če so vozlišča zunanjsa lica komponente  $H$  zaporedoma stopenj 2 in 3, potem lahko z uporabo  $O_3$  ciklični  $k$ -prerez  $C$  spremenimo v ciklični  $k$ -prerez  $C_3$ .

Slika 3.3: Operacije  $O_1$ ,  $O_2$  in  $O_3$ .

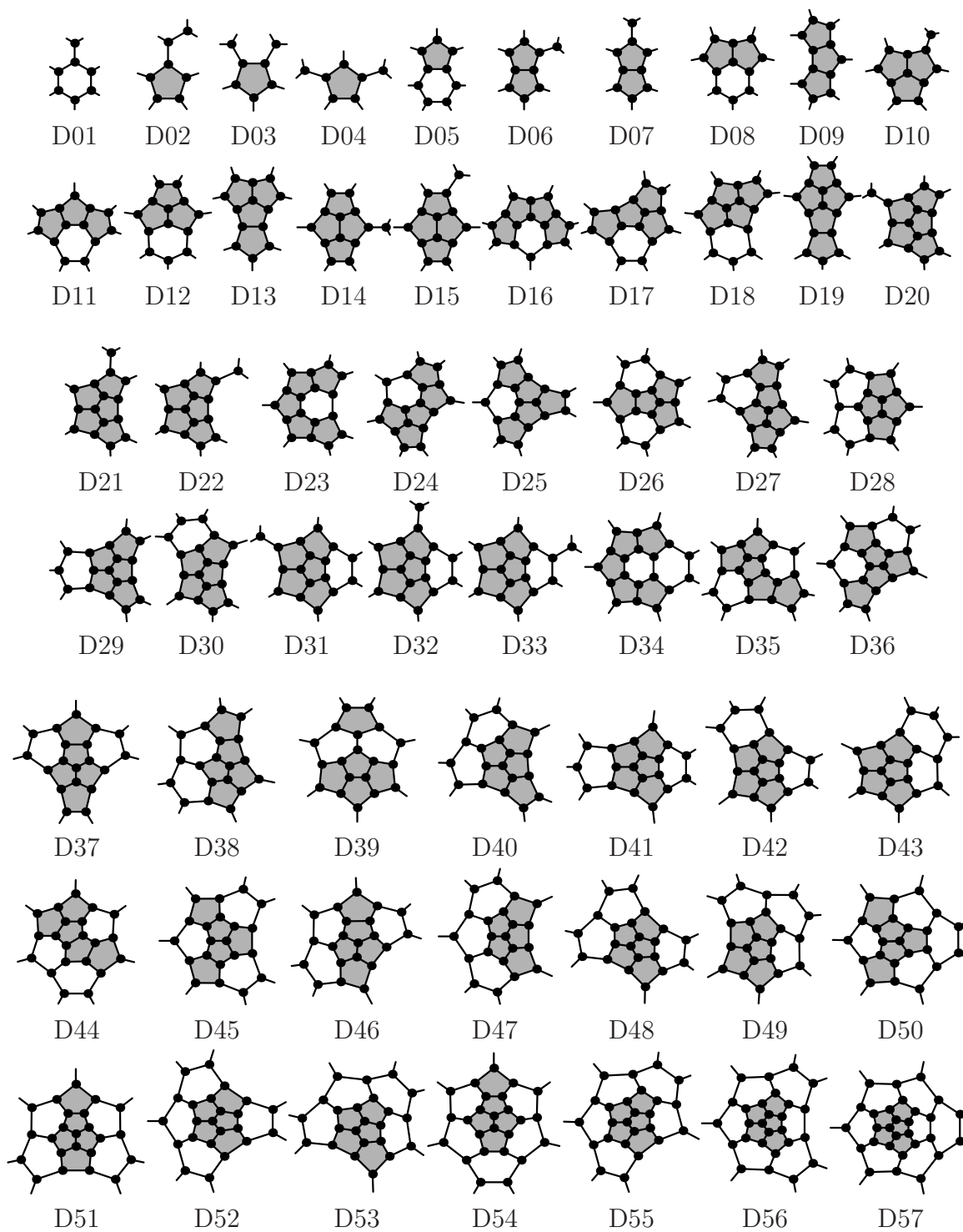
Vse ciklične prereze v fulerenih (glej [23, Theorem 1]) lahko skonstruiramo z uporabo treh operacij. Pri tem se moramo zavedati, da lahko operacijo  $O_3$  uporabimo le takrat, ko komponenta  $H$  že vsebuje natanko šest petkotnikov, zato med rekonstrukcijo degeneriranih cikličnih prerezov iz trivialnih operacije  $O_3$  nikoli ne uporabimo. V sliki 3.4 lahko vidimo primer rekonstrukcije degeneriranega cikličnega 7-prereza, slika 3.5 pa vsebuje seznam vseh degeneriranih cikličnih 7-prerezov po povezavah.



Slika 3.4: Primer konstrukcije.

V tabeli 3.1 za vsakega izmed grafov na sliki 3.5 določimo naslednje lastnosti:

- število petkotnikov ( $f_5$ );
- število šestkotnikov ( $f_6$ );
- število vozlišč ( $v$ );
- prerezni vektor;
- konfiguracije, ki nastanejo ob uporabi operacij  $O_1$  ali  $O_2$ ;
- konfiguracije, ki nastanejo ob uporabi inverzne operacije  $O_2^{-1}$ .



Slika 3.5: Degenerirani ciklični 7-prerezi po povezavah.

cut	$f_5$	$f_6$	$v$	cut-vector	$O_1$	$O_2$	$O_2^{-1}$
D01	0	1	7	$[-1, 1, 0, 0, 0, 0, 1]$	6D01	–	D05
D02	1	0	7	$[-1, 0, 1, 0, 0, 0, 2]$	6D02	–	D05, D06
D03	1	0	7	$[-1, 1, 0, 0, 1, -1, 2]$	6D02	–	D05, D06
D04	1	0	7	$[-1, 1, 0, 1, -1, 1, 1]$	6D02	–	D06, D07
D05	1	1	9	$[0, 0, 0, 1, 0, 0, 1]$	–	D01, D02, D03	D08
D06	2	0	9	$[-1, 1, 0, 1, 0, 0, 2]$	6D03	D02, D03, D04	D08, D09, D10
D07	2	0	9	$[-1, 1, 1, 0, 0, 1, 1]$	6D03	D04	D09, D10
D08	2	1	11	$[0, 0, 1, 0, 1, 0, 1]$	–	D05, D06	D11, D12
D09	3	0	11	$[0, 0, 1, 1, 0, 0, 2]$	–	D06, D07	D11, D13
D10	3	0	11	$[-1, 1, 1, 0, 1, 0, 2]$	6D04	D06, D07	D12, D13, D14, D15
D11	3	1	13	$[0, 1, 0, 1, 0, 1, 1]$	–	D08, D09	D16, D17
D12	3	1	13	$[0, 0, 1, 1, 0, 1, 1]$	–	D08, D10	D17, D18
D13	4	0	13	$[0, 0, 2, 0, 1, 0, 2]$	–	D09, D10	D17, D19
D14	4	0	13	$[-1, 2, 0, 1, 1, 0, 2]$	6D05	D10	D18, D20
D15	4	0	13	$[-1, 1, 1, 1, 0, 1, 2]$	6D05	D10	D18, D19, D20, D21, D22
D16	4	1	15	$[0, 1, 1, 0, 1, 1, 1]$	–	D11	D23, D24, D25
D17	4	1	15	$[0, 1, 0, 1, 1, 0, 2]$	–	D11, D12, D13	D24, D25, D26, D27
D18	4	1	15	$[0, 0, 1, 1, 1, 0, 2]$	–	D12, D14, D15	D27, D28, D29, D30
D19	5	0	15	$[0, 0, 2, 1, 0, 1, 2]$	–	D13, D15	D27
D20	5	0	15	$[-1, 2, 0, 2, 0, 1, 2]$	6D06	D14, D15	D29, D30, D31
D21	5	0	15	$[-1, 1, 2, 0, 1, 1, 2]$	6D06	D15	D30, D32
D22	5	0	15	$[-1, 1, 1, 1, 1, 0, 3]$	6D06	D15	–
D23	5	1	17	$[0, 1, 1, 1, 1, 0, 2]$	–	D16	D34
D24	5	1	17	$[0, 1, 1, 1, 0, 1, 2]$	–	D16, D17	D35
D25	5	1	17	$[0, 1, 1, 0, 2, 0, 2]$	–	D16, D17	D36
D26	4	2	17	$[0, 1, 1, 0, 1, 1, 1]$	–	D17	D35, D36, D37
D27	5	1	17	$[0, 1, 0, 2, 0, 1, 2]$	–	D17, D18, D19	D37, D38
D28	4	2	17	$[0, 1, 0, 1, 1, 1, 1]$	–	D18	D38, D39, D40
D29	5	1	17	$[0, 0, 2, 0, 2, 0, 2]$	–	D18, D20	D40, D41
D30	5	1	17	$[0, 0, 1, 2, 0, 1, 2]$	–	D18, D20, D21	D40, D42
D31	5	1	17	$[-1, 2, 1, 0, 1, 1, 2]$	6D07	D20	D41, D42
D32	5	1	17	$[-1, 2, 0, 1, 1, 1, 2]$	6D07	D21	D42, D43
D33	5	1	17	$[-1, 1, 1, 1, 1, 1, 2]$	6D07	–	D43
D34	5	2	19	$[0, 1, 1, 1, 1, 1, 1]$	–	D23	–
D35	5	2	19	$[0, 1, 1, 1, 1, 0, 2]$	–	D24, D26	D44
D36	5	2	19	$[0, 1, 1, 1, 0, 1, 2]$	–	D25, D26	D45
D37	5	2	19	$[0, 1, 1, 0, 2, 0, 2]$	–	D26, D27	D46
D38	5	2	19	$[0, 1, 1, 0, 1, 1, 2]$	–	D27, D28	D46
D39	5	2	19	$[0, 1, 1, 1, 1, 1, 1]$	–	D28	–
D40	5	2	19	$[0, 1, 0, 1, 2, 0, 2]$	–	D28, D29, D30	D47, D48
D41	5	2	19	$[0, 0, 2, 1, 0, 1, 2]$	–	D29, D31	D48
D42	5	2	19	$[0, 0, 2, 0, 1, 1, 2]$	–	D30, D31, D32	D48, D49
D43	5	2	19	$[0, 0, 1, 1, 1, 1, 2]$	–	D32, D33	D49

cut	$f_5$	$f_6$	$v$	vector	$O_1$	$O_2$	$O_2^{-1}$
D44	5	3	21	[0, 1, 1, 1, 1, 1, 1]	–	D35	–
D45	5	3	21	[0, 1, 1, 1, 1, 0, 2]	–	D36	D50
D46	5	3	21	[0, 1, 1, 1, 0, 1, 2]	–	D37, D38	D51
D47	5	3	21	[0, 1, 1, 0, 1, 2, 1]	–	D40	D52
D48	5	3	21	[0, 1, 0, 2, 0, 1, 2]	–	D40, D41, D42	D52, D53
D49	5	3	21	[0, 1, 0, 1, 1, 1, 2]	–	D42, D43	D53
D50	5	4	23	[0, 1, 1, 1, 1, 1, 1]	–	D45	–
D51	5	4	23	[0, 1, 1, 1, 1, 0, 2]	–	D46	D54
D52	5	4	23	[0, 1, 1, 0, 2, 0, 2]	–	D47, D48	D55
D53	5	4	23	[0, 1, 1, 0, 1, 1, 2]	–	D48, D49	D55
D54	5	5	25	[0, 1, 1, 1, 1, 1, 1]	–	D51	–
D55	5	5	25	[0, 1, 1, 1, 0, 1, 2]	–	D52, D53	D56
D56	5	6	27	[0, 1, 1, 1, 1, 0, 2]	–	D55	D57
D57	5	7	29	[0, 1, 1, 1, 1, 1, 1]	–	D56	–

Tabela 3.1: Degenerirani ciklični 7-prerezi po povezavah.

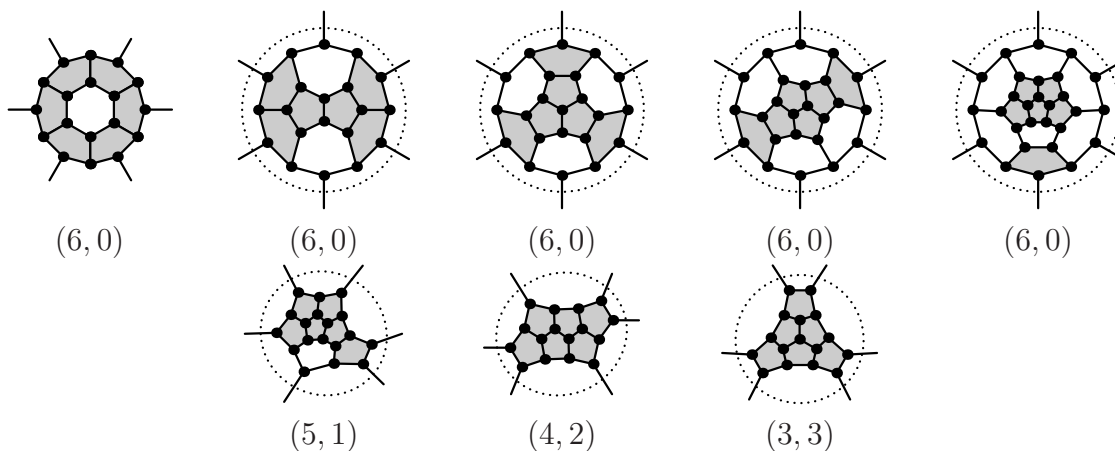
### 3.2.2 Nedegenerirani ciklični 7-prerezi po povezavah

V tem razdelku bomo govorili le o nedegeneriranih cikličnih 7-prerezih po povezavah. Dokazali bomo, da so nedegenerirani ciklični 7-prerezi po povezavah, vsi, razen dveh izjem, vsebovani v fulerenih grafih, ki so v obliki nanocevk. Obstajata torej natanko dva fulerena, ki imata nedegenerirane ciklične 7-prereze po povezavah in nista v obliki nanocevke. Preostale fulerene, ki premorejo nedegeneriran ciklični 7-prerez in so nanocevke, bomo zdaj natančno karaktizirali.

Zaradi ciklične 5-povezljivosti fulerenov po povezavah vemo, da nanocevke z velikostjo prereza  $p_1 + p_2 < 5$  ne obstajajo. Glede nanocevk, za katere velja  $p_1 + p_2 = 5$ , je bilo v [23] že dokazano, da obstajajo le take, ki so tipa  $(5, 0)$ , ter da so njihovi krovni grafi enolično določeni (glej izrek 3.4).

Zato pa obstaja veliko možnih tipov nanocevk za  $p_1 + p_2 = 6$ . Če pogledamo minimalne krovne grafe prerezov tipa  $(6, 0)$ , vidimo da obstaja 5 takih minimalnih krovnih grafov, med 6-prerezi pa so še trije enolični krovni grafi, ki imajo tipe  $(5, 1)$ ,  $(4, 2)$  in  $(3, 3)$ , glej sliko 3.6. Vsi ti krovni grafi so taki, da jih ni mogoče pomanjšati, ne da bi zaradi tega pridobili degenerirano povezavo. Spodaj je najkrajši seznam krovnih grafov, tako da vsi preostali možni krovni grafi nanocevk, za katere velja  $p_1 + p_2 = 6$ , vsebujejo (natanko) enega od teh kot podgraf.

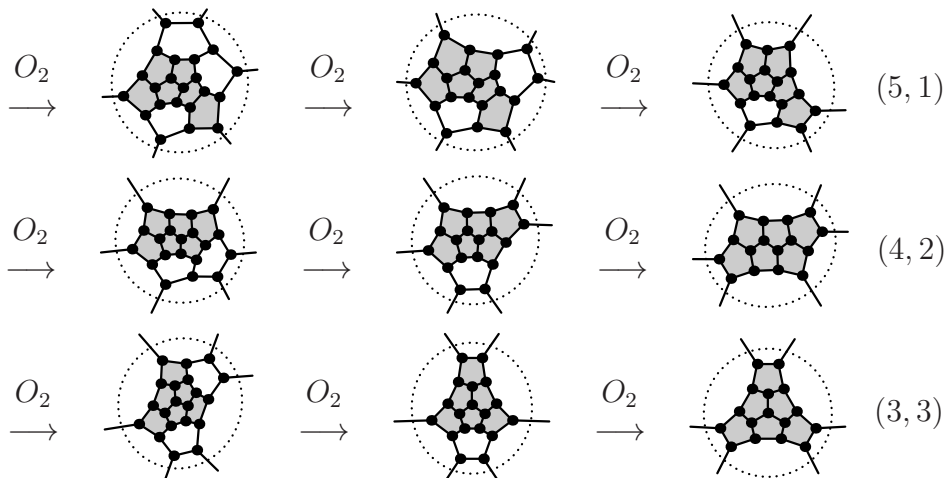
Če želimo ohraniti velikost prereza v neki nanocevki tipa  $(6, 0)$ , lahko uporabimo le operacijo  $O_3^{-1}$ , torej dodamo obroč šestkotnikov. To lahko storimo, saj se v prereznem



Slika 3.6: Najmanjši krovni grafi nanocevk tipa  $(p_1, p_2)$ , kjer  $p_1 + p_2 = 6$ .

vektorju vrednost 2 namreč ne pojavi. Sklepamo, da za ta tip nanocevk torej ni nobenih drugih krovnih grafov.

Krovne grafe, ki tipa  $(p_1, p_2)$ <sup>1</sup>, kjer  $p_2 > 0$ , lahko vedno razširimo le z uporabo  $O_2^{-1}$ , torej z dodajanjem šestkotnika. To je vedno mogoče, saj v pripadajočem prereznem vektorju zagotovo obstaja vsaj ena pojavitev števila 2. Pri tem lahko opazimo, da se tip krovne grafa ne spremeni. Na ta način lahko najdemo še pet krovnih grafov za nanocevk tipa 5, 1 in še dodatnih sedem krovnih grafov tipov (4, 2) ter (3, 3). Za ilustracijo glej sliko 3.7. Če povzamemo, smo skupaj našli  $5 + 6 + 8 + 8 = 27$  različnih krovnih grafov.



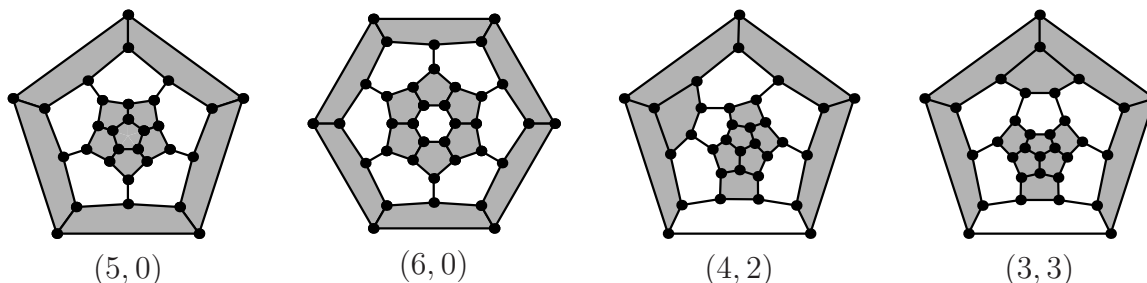
Slika 3.7: Vsi ostali krovni grafi tipa  $p_1 + p_2 = 6$  in  $p_2 > 0$  so izpeljani iz trivialnih z uporabo  $O_2^{-1}$ .

<sup>1</sup>Tip krovne grafa  $G_K$  je enak tipu neke nanocevk, ki se na eni strani zaključijo z  $G_K$ .

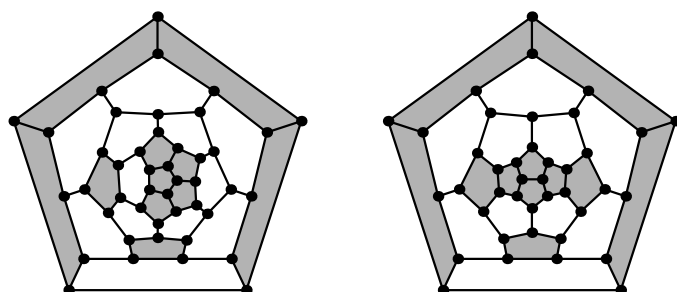
**Izrek 3.7** *Fulerenski graf  $G$  ima nedegeneriran ciklični 7-prerez natanko takrat, ko ima obliko nanocevke tipa  $(p_1, p_2)$  pri čemer velja*

- (a)  $p_1 + p_2 = 7$ ; ali
- (b)  $p_1 + p_2 \leq 6$ , in  $G$  ni izomorfen enemu izmed štirih grafov iz slike 3.8;

razen v primeru, če je  $G$  izomorfen enemu izmed dveh grafov iz slike 3.9.



Slika 3.8: Edini štirje fulereni oblike nanocevke s  $p_1 + p_2 \leq 6$ , ki nimajo nedegeneriranih cikličnih 7-prerezov po povezavah.



Slika 3.9: Edina fulerena, ki nista v obliki nanocevke, vendar vseeno premoreta nedegeneriran ciklični 7-prerez.

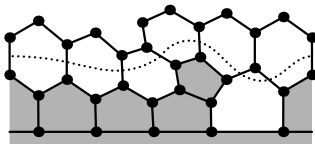
**Dokaz.** Ni težko videti, da oba grafa na sliki 3.9 vsebujeta nedegeneriran ciklični 7-prerez.

Naj bo  $G$  nanocevka tipa  $(p_1, p_2)$ . Tu ne bomo obravnavali primerov, kjer  $p_1 + p_2 \geq 8$ , ker se bo v drugem delu dokaza izkazalo, da ima vsak fuleren, ki vsebuje nedegeneriran ciklični 7-prerez in je nanocevka, debelino kvečjemu 7.

V nanocevkah s  $p_1 + p_2 = 7$  lahko za ciklični 7-prerez uporabimo kar povezave v cilindričnem delu, ki jih je (zaradi načina, po katerem je tip prereza definiran) natanko 7.

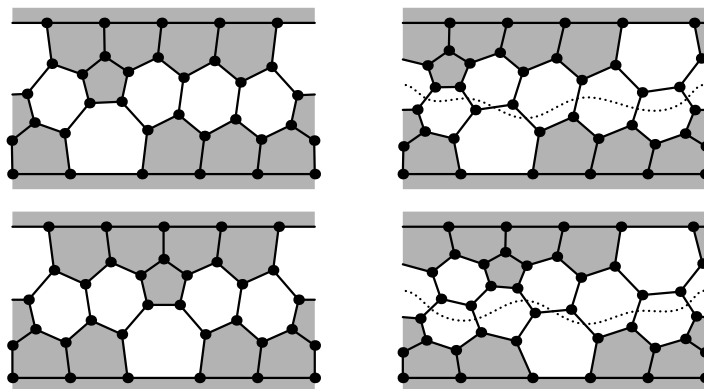
Naj bo zdaj  $p_1 + p_2 = 6$ . Ločeno bomo obravnavali primere tipov  $(5, 1)$ ,  $(4, 2)$ ,  $(3, 3)$  in  $(6, 0)$ .

Nanocevke tipa  $(5, 1)$  imajo vedno take krovne grafe, ki vsebujejo šestkotnik, zato lahko v vseh takih nanocevkah najdemo konfiguracijo, prikazano na sliki 3.10, kjer lahko najdemo nedegeneriran ciklični 7-prerez.



Slika 3.10: Krovni graf nanocevke tipa  $(5, 1)$ , ki vsebuje nedegeneriran ciklični 7-prerez.

V nasprotju s primeri tipa  $(5, 1)$  minimalni krovni grafi nanocevk tipov  $(4, 2)$  ter  $(3, 3)$  ne vsebujejo nobenega 6-lica. Torej vidimo, da obstajajo tudi fulereni takih tipov, ki nimajo nedegeneriranega cikličnega 7-prereza. V resnici je, za oba izmed tipov  $(4, 2)$ ,  $(3, 3)$ , tak fuleren kar najmanjši iz svoje družine fulerenov, medtem ko vsi ostali primerki iz obeh družin fulerenov tak prerez premorejo. Na sliki 3.11 sta prikazana najmanjša predstavnika vsakega izmed obeh tipov.  $\square$



Slika 3.11: Dve najmanjši nanocevki tipov  $(4, 2)$  (zgoraj) in  $(3, 3)$  (spodaj).

Obravnavati moramo le še primer tipa  $(6, 0)$ . Za ta primer obstaja pet možnih krovnih grafov (glej sliko 3.6). Le prvi izmed krovnih grafov na sliki nima 6-lica, sosednjega s prereznimi povezavami, zato mora družina nanocevk, ki ima na obeh koncih cilindra prav ta graf, nujno imeti vsaj dve plasti šestkotniških obročev, saj drugače tak graf ne premore nedegeneriranega cikličnega 7-prereza. V vseh ostalih krovnih grafih s slike 3.6 pa obstajata vsaj dve povezavi, ki nista sosednji z nobenim petkotnikom in sta lahko vsebovani v prerezu.

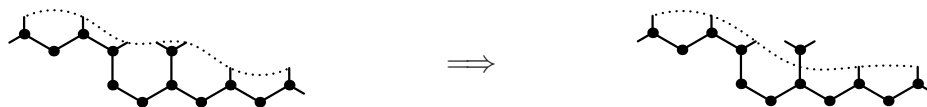
Če  $p_1 + p_2 = 5$ , potem  $p_1 = 5$  in  $p_2 = 0$ . Spomnimo se, da za nanocevke tega tipa obstaja le en sam tak krovni graf. Tu moramo biti pozorni na poseben primer, ko cilindrični del take nanocevke vsebuje le eno plast šestkotnikov med krovni grafoma. Edini robovi v tem grafu, ki niso sosednji s 5-lici, so robovi med šestkotniki znotraj šestkotniškega obroča med krovni grafoma. Takih robov pa je le pet, torej cikličnega 7-prereza tu ni mogoče najti. Če bi po drugi strani ta naša nanocevka vsebovala dve ali več plasti šestkotnikov, bi lahko robove med plastmi uporabili za izgradnjo prereza velikosti 7.

Sedaj bomo dokazali še drugo smer trditve. Naj bo  $G$  fuleren in  $C$  nedegeneriran ciklični 7-prerez v  $G$ . Naj bo  $H$  ena izmed komponent grafa  $G - C$ . Če je  $C$  nanotubičen, potem je po definiciji  $G$  nanocevka, za katero velja  $p_1 + p_2 = 7$ .

Denimo, da je  $C$  nek nedegeneriran ciklični 7-prerez v grafu  $G$ . Zdaj bomo pogledali na prerezni vektor glede na vrednosti, ki se pojavljajo v koordinatah.

Če se v prereznem vektorju pojavi vrednost  $-1$ , to sovpada z vozliščem stopnje 1 v eni izmed komponent. Ni težko videti, da, kadarkoli je prerezni vektor oblike  $[\dots, a, -1, b, \dots]$ , lahko z odstranitvijo pripadajoče točke stopnje 1 v grafu najdemo za eno povezavo krajši ciklični prerez z novim prereznim vektorjem  $[\dots, a-1, b-1, \dots]$  (glej sliko 3.12). Naš nenanocevičen nedegeneriran ciklični 7-prerez lahko torej zaradi pojavitve vrednosti  $-1$  v prereznem vektorju skrajšamo v nedegeneriran ciklični 6-prerez, ki pa je po izreku 3.6 vsebovan v nanocevki. Ker sta oba prereza v istem grafu, je moral biti že začetni graf nanocevka.

Spomnimo se, da vsakemu prerezu pripadata dva prerezna vektorja, kjer velja, da je vsota istoležnih koordinat enaka dve. Tako lahko v grafu  $G$  s prerezom  $C$ , ki v prereznem vektorju  $v(C)$  vsebuje vrednost 3, rečemo, da ima njegov kompliment istoležno koordinato z vrednostjo  $-1$ , iz česar po zgornjem sklepanju sledi, da je  $G$  nanocevka.



Slika 3.12: Če prerezni vektor od  $k$ -prereza vsebuje vrednost  $-1$ , ga lahko spremenimo v  $(k - 1)$ -prerez.

Obravnavati moramo torej le še prerezne vektorje, ki v koordinatah vsebujejo vrednosti iz  $0, 1, 2$ . Denimo, da  $C$  ni nanotubičen prerez, torej vsebuje dve zaporedni koordinati z  $[\dots, 0, 0, \dots]$  ali  $[\dots, 2, 2, \dots]$ . V našem primeru je tip prereznega vektorja lahko le  $[2, 2, 2, 0, 0, 0]$ ,  $[2, 2, 0, 2, 0, 0]$  ali  $[2, 2, 0, 0]$ . V tabeli 3.2 so naštetni vsi možni prerezni vektorji, ki lahko nastanejo iz teh treh tipov.

$[2, 2, 2, 0, 0, 0]$	$[2, 2, 0, 2, 0, 0]$	$[2, 2, 0, 0]$
$[2, 2, 2, 1, 0, 0, 0]$	$[2, 1, 2, 0, 2, 0, 0]$	$[2, 2, 1, 1, 1, 0, 0], [2, 2, 1, 1, 0, 0, 1]$
$[2, 1, 2, 2, 0, 0, 0]$	$[2, 2, 1, 0, 2, 0, 0]$	$[2, 1, 2, 1, 1, 0, 0], [2, 1, 2, 1, 0, 0, 1]$
	$[2, 2, 0, 1, 2, 0, 0]$	$[2, 1, 1, 2, 1, 0, 0], [2, 1, 2, 1, 0, 1, 0]$
	$[2, 2, 0, 2, 0, 0, 1]$	$[2, 1, 1, 1, 2, 0, 0], [2, 1, 1, 2, 0, 1, 0]$

Tabela 3.2: Vsi možni prerezni vektorji, ki imajo nenanocevičen tip prereznega vektorja.

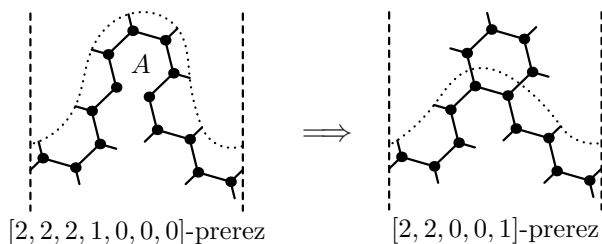
Pripravljeni smo, da dokažemo naslednji izrek:

**Izrek 3.8** *Naj bo  $G$  poljuben fuleren. Za vsak nedegeneriran ciklični 7-prerez po povezavah v grafu  $G$  velja ena izmed spodnjih trditev:*

- Prerez je del nanocevke s  $p_1 + p_2 \leq 7$ ;
- Prerez je del enega izmed dveh posebnih grafov s slike 3.9;
- Prerez je del grafa, ki ne more obstajati.

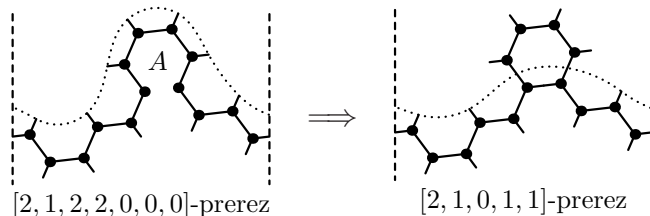
**Dokaz.** Zdaj se bomo sprehodili skozi vsakega izmed možnih nedegeneriranih prereznih vektorjev, ki smo jih našli v tabeli 3.2. Spodnja analiza dokonča trditev, ki jo dokazujemo. Na vseh slikah so prerezi prikazani z pikčasto črto.

**[2,2,2,1,0,0,0]:** Poglejmo si konfiguracijo na sliki 3.13. Opazimo, da lice  $A$  ne more biti petkotnik. Ker je  $A$  6-lice, lahko prerez spremenimo v nedegeneriran ciklični 5-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 2, 0, 0, 1]$ . To je v nasprotju z izrekom 3.4, ki pravi da je edini prerezni vektor nedegeneriranih cikličnih 5-prerezov po povezavah oblike  $[1, 1, 1, 1, 1]$ . Graf s takim prerezom torej ne more obstajati.



Slika 3.13: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 2, 2, 1, 0, 0, 0]$ .

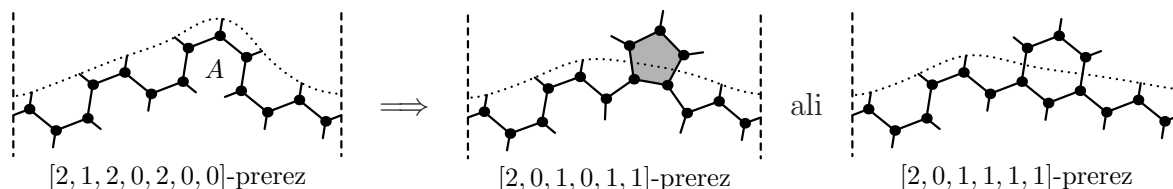
**[2,1,2,2,0,0,0]:** Poglejmo konfiguracijo na sliki 3.14. Podobno kot v prejšnjem primeru mora biti lice  $A$  dolžine 6. Spet dobimo nedegeneriran ciklični 5-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 0, 1, 1]$ , po izreku 3.4 lahko spet trdimo, da takšna konfiguracija ne more obstajati.

Slika 3.14: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 1, 2, 2, 0, 0, 0]$ .

**[2,1,2,0,2,0,0]:** Primer ločimo na dva podprimera glede na velikost lica  $A$  na sliki 3.15.

Če je  $A$  5-lice, lahko naš prerez spremenimo v degeneriran 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 0, 1, 0, 1, 1]$ . Taka konfiguracija pa po izreku 3.5 ne more obstajati, saj sta taka degenerirana prerezna vektorja dolžine 6, ki imata v eni komponenti natanko 5 petkotnikov, le  $[2, 0, 1, 1, 1, 0]$  in  $[0, 1, 1, 1, 1, 1]$ .

Če je  $A$  šestkotnik, lahko naš prerez spremenimo v nedegeneriran 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 0, 1, 1, 1, 1]$ , ki je nanocevičen. Po izreku 3.6 vemo tudi, da se tak prerez zgodi v nanocevkki s  $p_1 + p_2 \leq 6$ . Ni težko opaziti, da je naš graf nanocevka tipa  $(5, 1)$ .

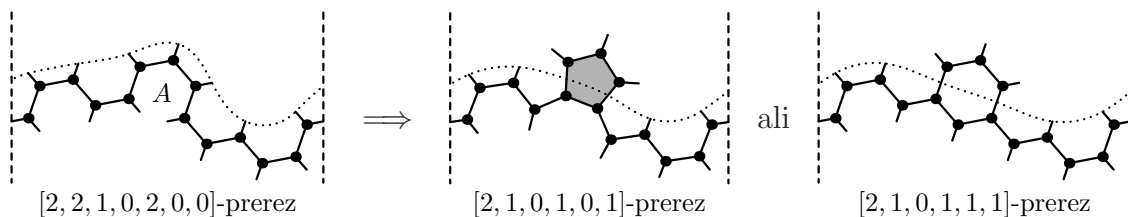
Slika 3.15: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 1, 2, 0, 2, 0, 0]$ .

**[2,2,1,0,2,0,0]:** Primer spet ločimo na dva podprimera glede na velikost lica  $A$  na sliki 3.16.

Če je  $A$  velikosti pet, konfiguracija spet ne more obstajati, saj lahko prerez spremenimo v degeneriran 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 0, 1, 0, 1]$ , po izreku 3.5 pa takega prereza ni.

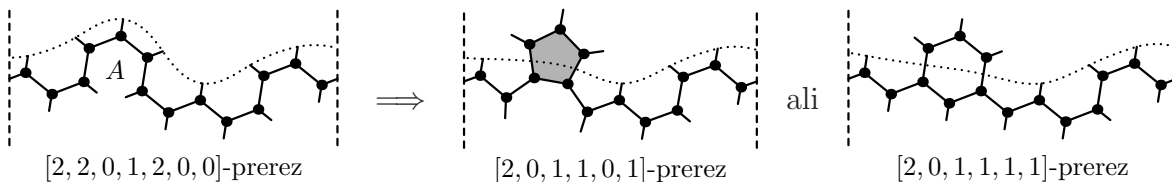
Če pa je  $A$  šestkotnik, lahko naš prerez (podobno kot v zgornjem primeru) spremenimo v nedegeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 0, 1, 1, 1]$ , ki je nanocevičen; opazimo lahko, da je vsebovan v nanocevkki tipa  $(4, 2)$ . Ker je prerez nedegeneriran, novi pridobljeni 6-prerez prereže šest šestkotnikov, ki so obkroženi le s petkotniki. Zato vemo, da v tem primeru ne gre za enega izmed posebnih primerov grafov s slike 3.8.

**[2,2,0,1,2,0,0]:** Primer ločimo na dva podprimera glede na velikost lica  $A$  na sliki 3.17.



Slika 3.16: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 2, 1, 0, 2, 0, 0]$ .

Če je  $A$  petkotnik, smo spet prišli do konfiguracije, ki ne more obstajati. Najdemo lahko namreč nov degeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 0, 1, 1, 0, 1]$ . Če pa je  $A$  šestkotnik, lahko spet najdemo nanocevični prerez s prereznim vektorjem  $[2, 0, 1, 1, 1, 1]$ ; ta je vsebovan v nanocevki tipa  $(5, 1)$ .

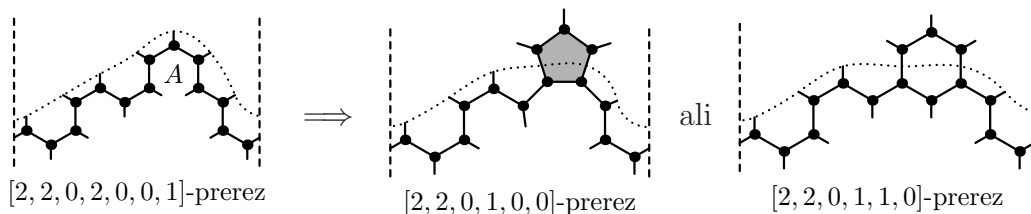


Slika 3.17: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 2, 0, 1, 2, 0, 0]$ .

**$[2, 2, 0, 2, 0, 0, 1]$** : Primer ločimo na dva podprimera glede na velikost lica  $A$  na sliki 3.18.

Če je  $A$  petkotnik, spet pridobimo prerezni vektor  $[2, 2, 0, 1, 0, 0]$ , ki ga je nemogoče realizirati.

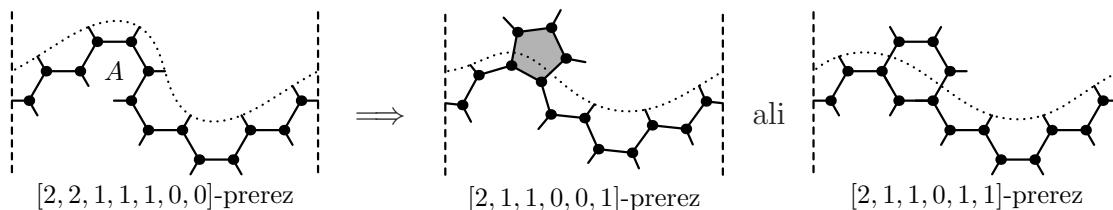
Če je  $A$  šestkotnik, lahko najdemo nedegeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 2, 0, 1, 1, 0]$ . Ta prerez sicer ni nanocevičen, vendar je, po izreku 3.6, vsebovan v nanocevki, za katero velja  $p_1 + p_2 \leq 6$ . Opazimo lahko, da se to zgodi v nanocevkah tipa  $(5, 0)$  z vsaj dvema obročema šestkotnikov v cilindričnem delu.



Slika 3.18: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 2, 0, 2, 0, 0, 1]$ .

**$[2, 2, 1, 1, 1, 0, 0]$** : Če je lice  $A$  na sliki 3.19 petkotnik, lahko najdemo degeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 1, 0, 0, 1]$ , ki je nemogoč za realizacijo.

Če pa je lice  $A$  šestkotno, lahko najdemo nanocevičen prerez z pripadajočim vektorjem  $[2, 1, 1, 0, 1, 1]$ . Ta je vsebovan v nanocevki tipa  $(3, 3)$ . Ker je prerez nede-generiran, novi pridobljeni 6-prerez prereže šest šestkotnikov, ki so obkroženi le s petkotniki. Zato vemo, da v tem primeru ne gre za enega izmed posebnih primerov grafov s slike 3.8.

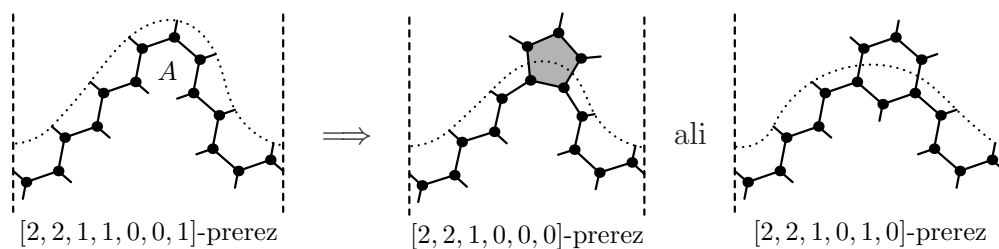


Slika 3.19: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 2, 1, 1, 1, 0, 0]$ .

**[2,2,1,1,0,0,1]:** Oglejmo si lice  $A$  iz slike 3.20.

Če je lice  $A$  petkotnik, lahko najdemo degeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 2, 1, 0, 0, 0]$ , ki je nemogoč za realizacijo.

Če je  $A$  šestkotnik, lahko v grafu najdemo nede-generiran ciklični 6-prerez, za katerega izrek 3.6 pravi, da se lahko zgodi le v nanocevkah. Še več: z lahkoto lahko preverimo, da tak primer ne more obstajati. Opazimo namreč, da je taka nanocevka tipa  $(4, 1)$ . Seveda vemo, da nanocevke teh tipov ne obstajajo.

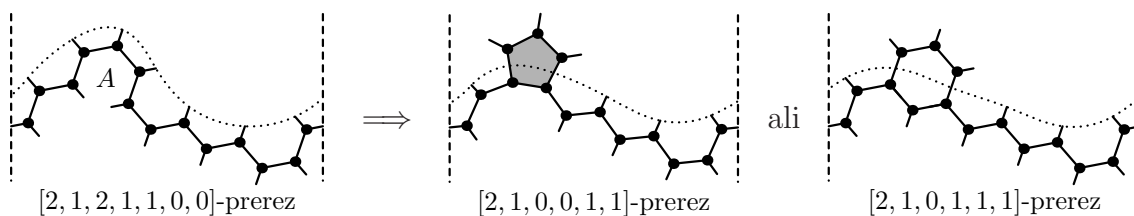


Slika 3.20: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 2, 1, 1, 0, 0, 1]$ .

**[2,1,2,1,1,0,0]:** Če je lice  $A$  na sliki 3.21 petkotnik, lahko najdemo krajši prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 0, 0, 1, 1]$ , ki je po izreku 3.5 nemogoč za realizacijo.

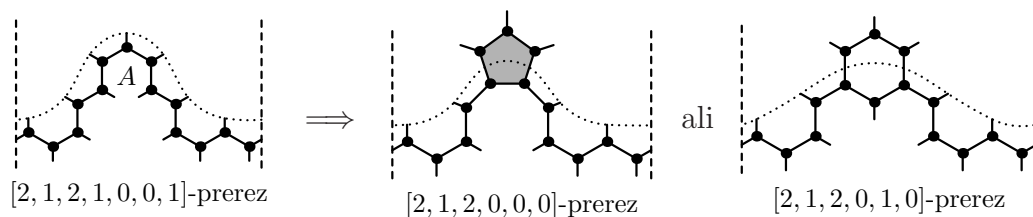
Če je lice  $A$  šestkotnik, lahko najdemo krajši nanocevični prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 0, 1, 1, 1]$ ; pripadajoči prerez se pojavi v družini nanocevk tipa  $(4, 2)$ .

**[2,1,2,1,0,0,1]:** Če je lice  $A$  na sliki 3.22 petkotnik, lahko najdemo krajši prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 2, 0, 0, 0]$ , ki je po izreku 3.5 nemogoč za realizacijo.



Slika 3.21: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 1, 2, 1, 1, 0, 0]$ .

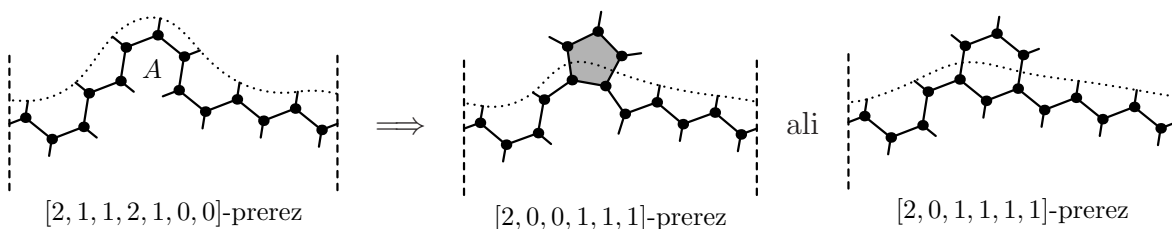
Če je lice  $A$  šestkotnik, lahko najdemo krajši nanocevični nedegeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 2, 0, 1, 0]$ . Ta se lahko pojavi le v družini nanocevk tipa  $(5, 0)$ , z najmanj dvema plastema šestkotnikov.



Slika 3.22: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 1, 2, 1, 0, 0, 1]$ .

**$[2, 1, 1, 2, 1, 0, 0]$** : Če je lice  $A$  na sliki 3.23 petkotnik, lahko najdemo krajši prerez s prereznim vektorjem  $[2, 0, 0, 1, 1, 1]$ , ki je po izreku 3.5 nemogoč za realizacijo.

Če je lice  $A$  šestkotnik, lahko najdemo krajši, nanocevični nedegeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 0, 1, 1, 1, 1]$ , pripadajoč prerez pa najdemo v družini nanocevk tipa  $(5, 1)$ .

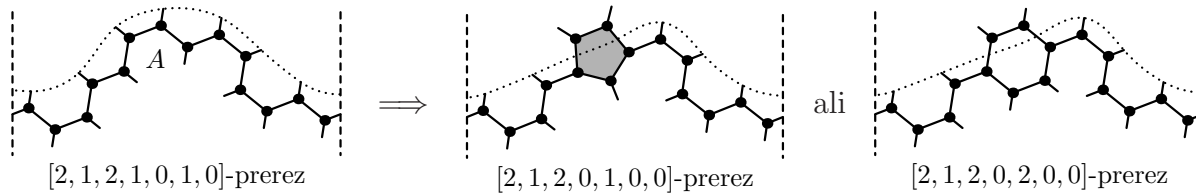


Slika 3.23: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 1, 1, 2, 1, 0, 0]$ .

**$[2, 1, 2, 1, 0, 1, 0]$** : Spet pogledjmo lice  $A$  iz slike 3.24.

Če je  $A$  petkotnik, lahko najdemo degeneriran 7-prerez z komponento petih 5-lic ter nekaj 6-lic s prereznim vektorjem  $[2, 1, 2, 0, 1, 0, 0]$ . Vidimo lahko, da v tabeli vseh degeneriranih 7-prerezov po povezavah 3.1 tega vektorja ni, torej sledi, da takega prereza ni mogoče realizirati.

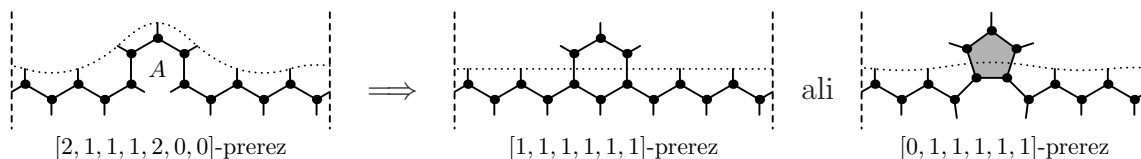
Če je lice  $A$  šestkotnik, lahko najdemo krajši nanocevični nedegeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[2, 0, 1, 1, 1, 1]$ , ki smo ga dobili že zgoraj in za njegov prerez vemo, da se pojavlja v družini nanocevk tipa  $(5, 1)$ .



Slika 3.24: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 1, 2, 1, 0, 1, 0]$ .

**[2,1,1,1,2,0,0]:** Primer spet ločimo glede na velikost lica  $A$ , pri čemer najprej predpostavimo, da je  $A$  šestkotnik.

Pod to predpostavko lahko najdemo krajši nanocevični nedegeneriran ciklični 6-prerez s prereznim vektorjem  $[1, 1, 1, 1, 1, 1]$  (glej sliko 3.25), kjer se pripadajoči prerez pojavi v nanocevkah tipa  $(6, 0)$ . Ker je prerez nedegeneriran, novi pridobljeni 6-prerez prereže šest šestkotnikov, ki so obkroženi le s petkotniki. Zato vemo, da v tem primeru ne gre za enega izmed posebnih primerov grafov s slike 3.8.

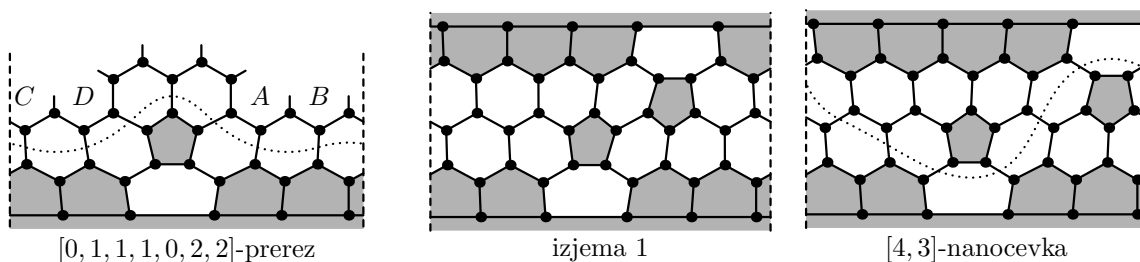


Slika 3.25: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 1, 1, 1, 2, 0, 0]$ .

Predpostavimo zdaj, da je  $A$  petkotne oblike. Najdemo lahko degeneriran 7-prerez s prereznim vektorjem  $[0, 1, 1, 1, 1, 1]$ . Izrek 3.5 pravi, da torej obstaja natanko ena konfiguracija s takim prerezom. V tej konfiguraciji lahko najdemo komponento, sestavljeno iz petih petkotnikov in enega šestkotnika in ji pripada tisti izmed obeh prereznih vektorjev, ki vsebuje koordinato z vrednostjo 0. Slika 3.26 prikazuje dobljeno komponento. Problema ne moremo rešiti na standarden način, saj graf ni nujno nanocevka, očitno pa ga je mogoče realizirati. Da dobimo več informacij, uporabimo drugo stran prereza – komplement originalnega prereznega vektorja  $[0, 1, 1, 1, 0, 2, 2]$ . Naj bodo  $A$ ,  $B$ ,  $C$  in  $D$  lica, kot so označena na sliki 3.26. Ločili bomo nekaj primerov glede na njihove velikosti. V vseh primerih se bomo srečali s prerezom, ki ima dve zaporedni koordinati z vrednostjo 1. Tak prerez označimo s  $C_1$  ter bo potekal skozi lica  $A, B, C, D$  ter skozi najvišja dva šestkotnika, narisana na isti sliki.

Ko so vsa štiri lica šestkotniška, lahko najdemo nanocevičen 6-prerez s prereznim vektorjem  $(1, 1, 1, 1, 1, 1)$ .

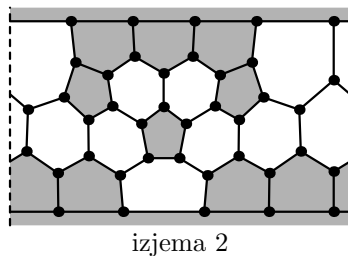
Ko je vsaj eno izmed teh lic petkotno, lahko najdemo degeneriran ciklični prerez. Zaradi izreka 3.5 ter zaradi obstoja dveh zaporednih enic v prereznem vektorju od  $C$  sledi, da je izmed  $A, B, C, D$  eno ali pa sta dve lici petkotne oblike. Če je le eno lice petkotno, potem lahko zaradi simetrije obravnavamo le dva primera:  $\deg(A) = 5$  ali  $\deg(B) = 5$ .



Slika 3.26: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[0, 1, 1, 1, 0, 2, 2]$ : standardna situacija ter primera, ko sta  $A$  ali  $B$  petkotnika.

Če je  $\deg(A) = 5$ , lahko najdemo 6-prerez s prereznim vektorjem  $[0, 1, 1, 1, 1, 1]$ , kar lahko na enoličen način realiziramo s konfiguracijo 6D07 na sliki 3.2. Dobimo graf na sredini slike 3.26, ki je izomorfen levemu grafu na sliki 3.9 in nima nanocevičnega prereza, zato ta fuleren ni nanoceevka.

Podobno, če je  $B$  petkotnik, spet lahko najdemo 6-prerez s prereznim vektorjem  $[0, 1, 1, 1, 1, 1]$ , kar lahko na enoličen način realiziramo z grafom na sliki 3.26, kjer je prikazan njegov nanocevični prerez. Vidimo, da je to nanoceevka tipa  $(4, 3)$ .



Slika 3.27: Graf, pridobljen iz prereznega vektorja  $[0, 1, 1, 1, 0, 2, 2]$ , v primeru ko sta dve izmed lic  $A, B, C, D$  petkotniški.

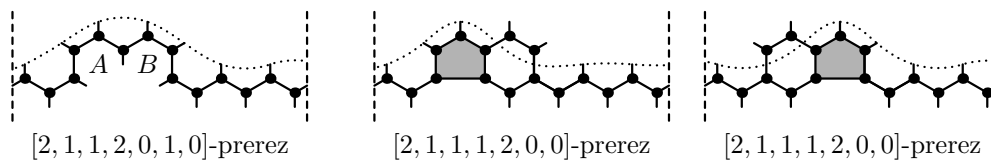
V naslednjem primeru sta izmed lic  $A, B, C$  in  $D$  natanko dve izmed njih petkotnika.

Najdemo lahko degeneriran prerez z štirimi 5-lici v notranjosti. Edina taka konfiguracija ima prerezni vektor  $[1, 1, 0, 1, 1, 0]$ , ki ima med koordinatami z vrednostjo 0 dve koordinati z vrednostjo 1. Iz tega lahko vidimo, da sta petkotniški lici lahko le  $A$  in  $D$ . Tudi ta konfiguracija je enolična in jo lahko vidimo na sliki 3.27. Graf je izomorfen desnemu grafu na sliki 3.9, vendar pa ni nanocevka, saj v njem ne obstaja nanocevičen prerez.

**[2,1,1,2,0,1,0]**: Poglejmo še lici  $A$  in  $B$  na sliki 3.28.

Če sta obe lici šestkotnika, lahko najdemo nanocevični prerez pripadajočim vektorjem  $[1, 1, 1, 1, 1, 1]$ , očitno se pojavlja v nanocevkah tipa  $(6, 0)$ .

Če je vsaj eno izmed označenih lic petkotnik, lahko najdemo degeneriran prerez s prereznim vektorjem, ki ima tri zaporedne koordinate z vrednostjo 1. Edini degeneriran prerez, ki premore prerezni vektor take oblike ima pet petkotnikov v notranjosti, torej je edini primer, ki nam preostane, če je natanko eden izmed  $A$  in  $B$  petkotnik. V takšnem grafu lahko vedno najdemo prerez s prereznim vektorjem  $[2, 1, 1, 1, 2, 0, 0]$ , glej sliko 3.28. Torej so smiselni le primeri iz prejšnjega analize.



Slika 3.28: Prikaz komponente prereznega vektorja  $[2, 1, 1, 2, 0, 1, 0]$ .

S tem zaključimo dokaz izreka 3.8.

□



# Poglavje 4

## Nekaj novih rezultatov v fulerenskih grafih

Spoznali smo že fulerenske grafe in veliko njihovih lastnosti. Vemo tudi, da so lastnosti grafov pogosto tesno povezane s stabilnostjo teh molekul v realnem svetu, zato je bilo veliko lastnosti že natančno preučenih. V tem poglavju si bomo pogledali nekaj novih mej, ki nam dajejo še nekoliko natančnejšo sliko o fulerenih.

Najprej bomo v prvem razdelku pogledali spodnjo mejo diametra fulerenov, nato pa si bomo v sledečih razdelkih s pomočjo te nove spodnje meje podrobneje pogledali še nekatere druge lastnosti fulerenov, kot so *nedvodelnost grafa*, *neodvisnostno število grafa* ter *nasičenostno število grafa*.

Vsebina tega poglavja je nastala na raziskovalnem obisku v Zagrebu, vendar je članek še v pripravi.

### 4.1 Spodnja meja diametra v fulerenih

**Definicija 4.1** Diameter grafa  $G$  ( $D(G)$ ) je največja izmed najkrajših poti med poljubnima vozliščema iz  $V(G)$ ; torej:

$$D(G) = \max_{u,v \in V(G)} d_G(u, v)$$

Včasih diameter označimo tudi z  $\text{diam}(G)$ .

Diameter nekega fulerena je povezan z njegovo obliko: diametri fulerenov z ikozaedrično simetrijo so majhni, po drugi strani pa so diametri nanocevk linearni glede na število vozlišč. Zelo znan rezultat [18], ki govori o diametrih ravninskih grafov glede na

njihovo maksimalno stopnjo pravi, da število vozlišč raste kvečjemu eksponentno glede na diameter:

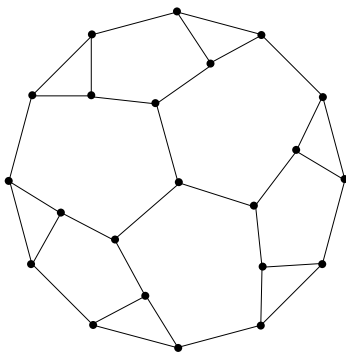
**Trditev 4.2 (Friedman, Pratt)** *Naj bo  $G$  ravninski graf z maksimalno stopnjo 3. Potem ima  $G$  kvečjemu  $2^{\text{diam}(G)+1} - 1$  vozlišč.*

Iz tega direktno sledi logaritemaska spodnja meja za diameter.

**Hipoteza 4.3** *Naj bo  $G$  ravninski kubični graf na  $n$  vozliščih. Potem:*

$$\text{diam}(G) \geq \lceil \log_2(n + 1) \rceil - 1.$$

Na sliki 4.1 lahko vidimo primer grafa, za katerega zgoraj omenjena meja res drži. Logaritemsko obnašanje diametra je namreč tesno povezano s prisotnostjo velikih lic. Zelo intuitivno se je torej vprašati, če za fullerenske grafe, ki imajo velikost lic omejeno s 6, morebiti obstaja boljša spodnja meja diametra.



Slika 4.1: Ravninski kubični graf, v katerem diameter res raste logaritemsko glede na število vozlišč.

Prav zaradi omejitve velikosti lic nam je uspelo pokazati, da je v fulerenih diameter vsaj reda  $\Omega(\sqrt{n})$ . Za ta dokaz je ključno opaziti, da v neskončni šestkotniški mreži število vozlišč, enako oddaljenih od neke točke, raste linearno z razdaljo. V naslednji lemi raziščemo, kako se ta rast obnaša ob prisotnosti petkotnikov. Glavna ideja je v bistvu preprosta, vendar če jo želimo formalizirati, moramo uvesti nekaj nove terminologije.

Naj bo  $G$  fullerenski graf in naj bo  $N_k(x)$  množica takih točk v  $G$ , ki so za  $k$  oddaljene od točke  $x$ . Poimenujmo množico  $N_k(x)$  kar  $k$ -sosesčina, vozlišču iz  $k$ -sosesčine pa recimo  $k$ -vozlišče. Ni težko videti, da ima vsako  $k$ -vozlišče vse svoje sosede v eni izmed  $(k - 1)$ ,  $k$  ali  $(k + 1)$ -sosesčin, torej  $a \in N_k(x) \Rightarrow N(a) \subset N_{k-1}(x) \cup N_k(x) \cup N_{k+1}(x)$ .

Naj bo  $k = d(a, x)$ . Za izbran  $x$  in poljubno vozlišče  $a \neq x$  spodaj definiramo vrednost vozlišča ( $\nu(a)$ ).

$$\nu(a) = \sum_{i \in N(a) \cap V_{k+1}(x)} \frac{1}{|N(i) \cap n_k|}$$

Vidimo lahko, da nam  $\nu(a)$  v bistvu meri število vozlišč, ki jih  $a$  doprinese h  $(k + 1)$ -sosesčini, pri čemer upoštevamo, da če je nekje  $(k + 1)$ -vozlišče sosedno z dvema  $k$ -vozliščema, tako vozlišče  $k$  vrednosti obeh  $k$ -sosedov<sup>1</sup> doprinese le  $\frac{1}{2}$ . Torej velja tudi

$$|N_k(x)| = \sum_{i \in N_{k-1}(x)} \nu(i).$$

**Lema 4.4** Naj bo  $G$  poljuben fuleren in naj bo  $x \in V(G)$ . Potem velja:  $|N_k(x)| \leq |N_{k-1}(x)| + 3$ , kjer je  $k > 1$ .

**Dokaz.** Opazimo, da mora vsako  $k$ -vozlišče imeti vsaj enega soseda iz  $(k - 1)$ -sosesčine. Ker velja  $V_k(x) = \sum_{i \in V_{k-1}(x)} \nu(i)$ , je dovolj pokazati, da:

$$\sum_{i \in V_{k-1}(x)} \nu(i) \leq |n_{k-1}(x)| + 3.$$

Ni težko videti, da velikost  $k$ -sosesčine povečujejo le tista  $(k - 1)$ -vozlišča, ki imajo vrednost večjo kot 1, torej vidimo, da sta problematični le vrednosti  $\frac{3}{2}$  ter 2.

Najprej bomo pokazali, da vozlišč z vrednostjo 2 v našem grafu, razen v 1-sosesčini ni. Vzemimo torej poljubno vozlišče  $y$ , da velja  $\nu(y) = 2$ , in naj bo to vozlišče v  $k$ -sosesčini, kjer je  $k > 1$ . Vozlišče  $y$  ima natanko dva  $(k + 1)$ -sosedna, ki ju označimo z  $a_1$  in  $a_2$ ; tretjega soseda iz  $(k - 1)$ -sosesčine pa označimo z  $b$ . Ker  $a_1$  in  $a_2$  razen  $y$  nimata nobenega drugega  $k$ -sosedna, morajo vse najkrajše poti med njima ter vozliščem  $x$  nujno potekati skozi  $y$ . Seveda mora imeti tudi  $b$  vsaj enega  $(k - 2)$ -sosedna, ki ga označimo s  $c$ . Naj bo  $f$  tisto lice, ki se dotika točk  $c, b$  in  $y$ , ter brez škode za splošnost recimo, da se  $f$  dotika tudi  $a_1$ . Poglejmo si zdaj pot med  $x$  in  $a_1$ , ki gre mimo  $b$  ter poteka po drugi strani lica  $f$ . Glede na velikost lica  $f$  ločimo dva primera:

$|f| = 6$ : Našli smo alternativno pot med  $x$  in  $a_1$ .

$|f| = 5$ : Našli smo celo krajšo pot med  $x$  in  $a_1$ , dolžine  $k$ .

---

<sup>1</sup>Intuitivno je  $k$ -sosed poljubno sosednje  $k$ -vozlišče.

V obeh primerih omenjena pot ne gre skozi  $y$ , torej smo dobili protislovje.

Sedaj vemo, da je največja vrednost vozlišč v  $k$ -soseščini ( $k > 1$ ) lahko kvečjemu enaka  $\frac{3}{2}$ ; takim vozliščem bomo rekli tudi *težka* vozlišča. Zdaj bomo pokazali, da če je neko  $k$ -vozlišče težko, potem obstaja na razdalji 2 še en natančno določen  $(k - 2)$ -sosed, ki je težak.

Vzemimo torej poljubno težko vozlišče  $y$ , torej  $\nu(y) = \frac{3}{2}$ , in naj spet velja  $k = d(x, y) : k > 1$ . Spet vidimo, da ima  $y$  natanko dva  $k + 1$ -sosed, ki ju označimo z  $a_1$  in  $a_2$ , pri čemer je naj bo  $a_1$  povezan še z nekim drugim  $k$ -vozliščem. Podobno kot zgoraj ima  $y$  natanko enega  $(k - 1)$ -sosed, ki ga označimo  $b$ , ta pa ima vsaj enega  $(k - 2)$ -sosed, ki ga označimo s  $c$ .

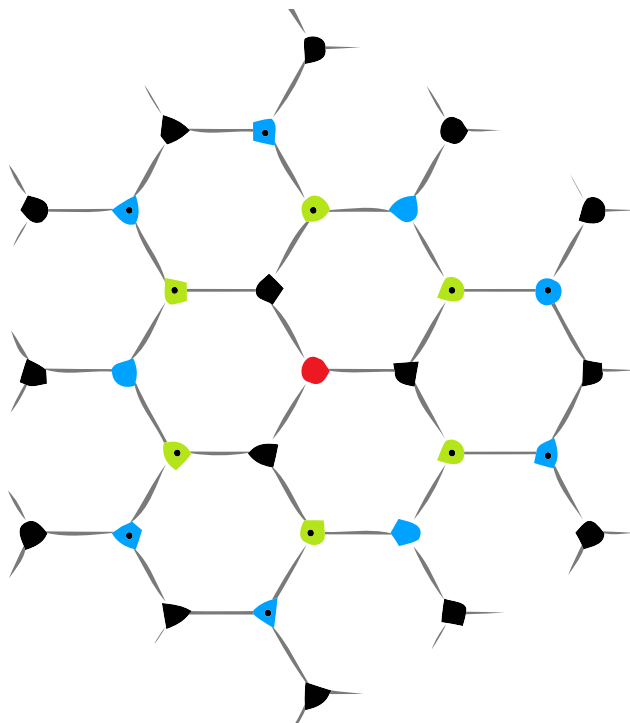
Podobno kot zgoraj naj bo  $f$  lice, ki se dotika vozlišč  $y, b$  ter  $c$ . Ni težko videti, da če se  $a_1$  dotika lica  $f$ , potem lahko na drugi strani lica  $f$  najdemo alternativno pot do  $a_1$ , ter pridemo do popolnoma enakega protislovja kot v prejšnjem primeru. Torej sklepamo, da se  $f$  nujno dotika vozlišča  $a_2$ . Označimo vozlišče  $d$  tako, da si na licu  $f$  vozlišča zaporedno sledijo:  $a_2, y, b, c, d$ . Če se sprehajamo po licu  $f$  ni težko videti, da  $d_G(d, a_2) \leq 2$ , ker pa je  $a_2$  v  $(k + 1)$ -soseščini, mora veljati tudi:

$$\begin{aligned} d_G(x, c) + d_G(c, d) + d_G(d, a_2) &\geq k + 1; \\ k - 2 + 1 + d_G(d, a_2) &\geq k + 1; \\ d_G(d, a_2) &\geq 2. \end{aligned}$$

Če zgornji dve trditvi povežemo, dobimo  $2 \geq d_G(d, a_2) \geq 2$ , kar pomeni, da je  $d$  iz  $(k - 1)$ -soseščine. Opazimo, da je vozlišče  $c$  težko; rekli bomo tudi, da  $c$  *tvori*  $y$ . Če dobro pogledamo, vidimo, da tvorjenje poteka v natanko določeni smeri, v obeh korakih namreč le sledimo tisti povezavi, ki k vrednosti trenutnega vozlišča doprinese 1. Želimo torej vedeti, koliko težkih vozlišč je lahko v neki  $k$ -soseščini, pri tem pa vemo, da je vsako težko  $k$ -vozlišče tvorjeno iz natanko določenega težkega  $(k - 2)$ -vozlišča. Zaradi enolično določenega tvorjenja tudi ni težko videti, da težko  $(k - 2)$ -vozlišče ne more tvoriti dveh težkih  $k$ -vozlišč.

Ker je, ne glede na graf in mesto začetka, število težkih vozlišč tako v 2-soseščini, kot v 3-soseščini kvečjemu enako 6 (dovolj je pogledati najslabši možni primer šestkotniške mreže na sliki: 4.2), lahko glede na zgornji razmislek trdimo, da v nobeni nadaljni soseščini ni več kot šest težkih vozlišč. Tako pridemo do naslednje neenakosti, ki smo jo želeli dokazati:

$$\sum_{i \in V_{k-1}(x)} \nu(i) \leq 6 \cdot \frac{3}{2} + (|N_{k-1}(x)| - 6) \cdot 1 = |N_{k-1}(x)| + 3.$$



Slika 4.2: Šestkotniška mreža, v kateri je začetno vozlišče rdeče, z zeleno in modro pa sta pobarvani 2- in 3-soseščina, v katerih so s črno piko označena težka vozlišča. Vidimo, da je v obeh soseščinah le šest težkih vozlišč.

□

Naslednji izrek nam da spodnjo mejo za diameter v fulerenih.

**Izrek 4.5** *Naj bo  $G$  poljuben fuleren. Potem velja  $\text{diam}(G) = \Omega(\sqrt{|V(G)|})$ .*

**Dokaz.** Naj velja  $n = |V(G)|$ . Za vsako vozlišče  $v \in V(G)$  obstaja obstaja tako število  $k \in \mathbb{N}$  da nobeno vozlišče iz  $V(G)$  ni oddaljeno od  $v$  za več kot  $k$ , torej  $k =$

$\max_{i \in V(G)} d_G(i, v)$ . Po zgornji lemi ni težko videti, da spodnja neenakost drži:

$$n = \sum_{i=0}^k n_i(v) \leq 1 + \sum_{i=1}^k i \cdot 3 = 1 + 3 \frac{k(k+1)}{2}.$$

Iz zgornje enačbe lahko hitro izrazimo  $k \geq -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{2}{3}n - \frac{5}{12}}$ , po drugi strani pa ni težko videti, da je  $k$  vedno manjši ali kvečjemu enak diametru grafa, torej  $\text{diam}(G) \geq k$ , iz česar dobimo dokaz izreka.  $\square$

Naj na tem mestu spomnim, da govorimo o spodnji meji diametra. Pri nanocevkah, o katerih smo veliko govorili v prejšnjem poglavju, je diameter pogosto veliko večji, celo asimptotično linearen glede na število vozlišč. O zgornji meji diametra bomo govorili v naslednjem razdelku.

## 4.2 Zgornja meja diametra v fulerenih

V tem razdelku dokažemo naslednji izrek:

**Izrek 4.6** *Naj bo  $F$  fuleren na  $n$  vozliščih. Potem,*

$$\text{diam}(F) \leq \frac{n}{6} + \frac{5}{2},$$

*razen v primeru, če je  $F$  nanocevka tipa  $(5,0)$ . V tem primeru lahko izrazimo  $n$  kot  $n = 10k$ ,  $k \in \mathbb{N}$ , ter velja:*

$$\text{diam}(F) = \begin{cases} \frac{n}{5} + 1, & k = 2; \\ \frac{n}{5}, & k \in \{3, 4\}; \\ \frac{n}{5} - 1, & k \geq 5. \end{cases}$$

Preden nadaljujemo, predstavimo še nekaj potrebnih definicij in notacij. Če sta si vozlišči  $x$  in  $y$  sosedni, to zapišemo kot  $x \sim y$ . Naj bo  $F$  fullerenski graf in naj bo  $v$  poljubno vozlišče v njem. Definirajmo  $L_0^v = \{v\}$  kot začetno plast ter  $F_0^v$  kot množico lic, sosednjih s  $v$ . Zdaj lahko induktivno definiramo še  $L_i^v$  kot množico vozlišč, sosednjih z  $F_{i-1}^v$ , ki niso vsebovana v  $L_{i-1}^v$ . Podobno naj bo  $F_i^v$  množica lic, sosednjih z  $L_i^v$ , ki niso vsebovana v  $F_{i-1}^v$ . Za povezavo  $e = uw$ ;  $u, w \in V(F)$  pravimo, da je *vhodna povezava* v  $L_i^v$ , če  $u \in V(L_{i-1}^v)$  in  $w \in V(L_i^v)$ . Če je  $e$  vhodna povezava v  $L_i^v$ , potem tudi rečemo, da je  $e$  *izhodna povezava* iz  $L_{i-1}^v$ . Vozlišče  $u$  je v tem primeru *izhodno vozlišče*,  $w$  pa

*vhodno vozlišče*. Opazimo lahko, da vozlišče ne more biti vhodno in izhodno hkrati, ter da vozlišča v zadnji plasti niso nikoli izhodna (lahko se tudi zgodi, da nobeno izmed njih ni vhodno).

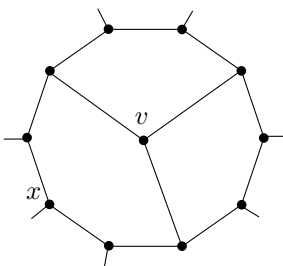
V definicijah 2.17 ter 2.18 smo že definirali izraza ciklični prerez ter ciklično povezanost po povezavah, v prejšnjem poglavju pa smo videli, da drži naslednja trditev:

**Trditev 4.7** *Vsi ciklično po povezavah 5-povezani fulereni imajo enolično strukturo nancevke tipa  $(5, 0)$ . Vsi preostali fulereni so ciklično po povezavah 6-povezani.*

Ker je vsako lice v  $F$  dolžine 5 ali 6 ter vsako vozlišče stopnje 3, takoj sledi naslednja lema:

**Lema 4.8** *Za vsako vozlišče  $x \in V(L_{i+1}^v)$ ,  $i \geq 1$ , obstaja vozlišče  $y \in V(L_i^v)$ , tako da  $d(x, y) \leq 2$ .*

Neenakost v zgornji lemi je tesna natanko takrat, ko je  $x$  izhodno vozlišče, saj v nasprotnem primeru obstaja vozlišče  $y \in V(L_i^v)$ , tako da  $x \sim y$ . Opazimo tudi, da če  $x \in V(L_1^v)$ , potem je  $d(x, v)$  lahko tudi 3 (glej sliko 4.3).



Slika 4.3: Vozlišče  $v$  je začetno vozlišče –  $L_0^v = \{v\}$ . Lica, sosednja z  $v$ , pripadajo množici  $F_0^v$ ; vozlišča, sosednja z  $F_0^v$  (razen  $v$ ) pa tvorijo prvo plast  $L_1^v$ . Razdalja med  $v$  in  $x \in L_1^v$  je tri.

Če to združimo z lemo 4.8, lahko trdimo:

**Lema 4.9** *Naj bo  $x \in V(L_i^v)$ . Potem  $d(v, x) \leq 2i + 1$ .*

Zdaj bomo pokazali, da če je množica  $L_i^v$  dovolj majhna, je množica  $L_{i+2}^v$  prazna, tj. ko pridemo do “konca” fulerena.

**Lema 4.10** *Naj bo  $i \geq 2$  in  $|V(L_i^v)| < 12$ . Potem velja  $L_{i+2}^v = \emptyset$ .*

**Dokaz.** Predpostavimo najprej, da  $L_i^v$  inducira graf, ki ne premore cikla. V tem primeru velja  $F_i^v = \emptyset$ , torej velja tudi  $L_{i+1}^v = L_{i+2}^v = \emptyset$ , kar smo hoteli pokazati.

Denimo torej, da v grafu, induciranim z  $L_i^v$ , obstaja nek cikel, ter ga označimo s  $C$ . Po trditvi 4.7 mora obstajati vsaj 5 vhodnih povezav v  $L_i^v$ .

Če je teh povezav natanko pet, potem je  $C$  kar 5-lice oziroma je  $F$  nanocevka tipa  $(5, 0)$ . Torej sledi  $L_{i+1}^v = L_{i+2}^v = \emptyset$ .

Če pa je teh vhodnih povezav v  $L_i^v$  šest ali več, imamo kvečjemu pet izhodnih povezav iz  $L_{i+1}^v$ . S podobnim argumentom pridemo do dejstva, da  $L_{i+1}^v$  ne vsebuje cikla ali pa vsebuje cikel  $C'$ , ki je 5-lice v  $F$ .  $\square$

Oglejmo si še naslednjo lemo, ki govori o razdaljah med zadnjimi plastmi.

**Lema 4.11** *Naj bo  $x$  vozlišče v zadnji plasti  $L_k^v$ . Potem mora obstajati vozlišče  $y \in L_{k-1}^v$ , tako da  $d(y, x) \leq 3$ .*

**Dokaz.** Iz leme 4.10 vemo, da je  $L_{k+2}^v$  prazna množica. Torej, tudi če  $L_{k+1}^v$  ni prazen, ne premore nobenega izhodnega vozlišča iz njega. Torej je vsako vozlišče iz  $L_{k+1}^v$  sosedno nekemu vozlišču  $y$  iz  $L_k^v$ . Poleg tega lema 4.8 pravi, da obstaja tako vozlišče  $z$  v  $L_{k-1}^v$ , da  $d(y, z) \leq 2$ , torej  $d(x, z) \leq 3$  (pri tem je vozlišče  $y$  izhodno vozlišče).  $\square$

Zdaj lahko začnemo z glavnim dokazom izreka 4.6.

**Dokaz izreka 4.6.** Naj bo  $F$  poljuben fullerenski graf. Izrek bomo dokazali v dveh delih. V prvem delu bomo dokazali, da je diameter od  $F$  kvečjemu  $\frac{n}{6} + \frac{5}{2}$ , če  $F$  ni nanocevka tipa  $(5, 0)$ . V drugem delu bomo zgornjo mejo za diameter dokazali še za nanocevke tipa  $(5, 0)$ .

Denimo torej, da  $F$  ni nanocevka tipa  $(5, 0)$ . Naj bo  $v$  poljubno vozlišče v  $F$ . Dokazali bomo, da  $d(u, v) \leq \frac{n}{6} + \frac{5}{2}$  za vsako vozlišče  $u \in V(F)$ .

Naj bo  $L_k^v$  prva taka plast, ki vsebuje manj kot 12 vozlišč glede na vozlišče  $v$ . Po lemi 4.10 je torej ena izmed plasti  $L_k^v$  oz.  $L_{k+1}^v$  zadnja plast v našem fulerenu. S pomočjo leme 4.9, lahko določimo razdaljo od  $v$  do izhodnega vozlišča  $x \in V(L_{k-1}^v)$ :

$$d(v, x) \leq 2(k-1) + 1 = 2k - 1. \quad (4.1)$$

To je torej razdalja od  $v$  do zadnje plasti s kvečjemu 12 vozlišči. Ko določimo še preostalo dolžino med izhodnim vozliščem  $x$  ter "konce" fulerena, bo prvi del dokaza končan.

Naj bo  $d_M$  maksimalna razdalja med vozlišči v zadnji plasti ter izhodnim vozliščem v  $L_{k-1}^v$  plasti, ter naj bo  $C_m = |V(L_k^v) \cup V(L_{k-1}^v)|$ . Glede na  $d_M$  ločimo tri primere.

- $d_M = 3$ : Po lemi 4.8 lahko tako sklepamo, da  $L_{k+1}^v \neq \emptyset$ , torej  $|V(L_{k+1}^v)| \geq 1$ . Zaradi nepraznosti  $L_{k+1}^v$  vemo tudi, da  $L_k^v$  ne vsebuje cikla. Po trditvi 4.7 mora obstajati najmanj šest vhodnih vozlišč v  $L_k$ . Ker je vsaj eno vozlišče v plasti  $L_{k+1}^v$ , so v  $L_k$  vsaj tri izhodna vozlišča. Sledi  $C_m \geq 10$ .
- $d_M = 2$ : Očitno je, da je v tem primeru  $L_{k+1}^v = \emptyset$ . Naj bo  $x \in L_k^v$  tako vozlišče, da je njegova razdalja do najbližjega vozlišča iz  $L_{k-1}^v$  enaka 2. Po definiciji  $x$  ne more biti vhodno vozlišče, zato lahko po trditvi 4.7 sklepamo, da je v  $L_k^v$  vsaj sedem vozlišč. Sledi  $C_m \geq 7$ .
- $d_M = 1$ : V tem primeru je  $V(L_k^v)$  zadnja plast, torej  $C_m \geq 1$ .

S pomočjo izračunanih mej lahko končno izračunamo diameter. Po (4.1) je diameter od  $F$  enak:

$$\text{diam}(F) \leq d(v, x) + d_M \leq 2k - 1 + d_M, \quad (4.2)$$

kjer je  $x$  izhodno vozlišče plasti  $L_{k-1}^v$ . Po drugi strani za fuleren  $F$  z  $n$  vozlišči velja:

$$n = |V(L_0^v)| + |V(L_1^v)| + \sum_{i=2}^{k-1} |V(L_i^v)| + |V(L_k^v) \cup V(L_{k+1}^v)| \leq 1 + 10 + 12(k-2) + C_m,$$

ali

$$k \leq \frac{1}{12}(n + 13 - C_m). \quad (4.3)$$

Iz (4.2) in (4.3) dobimo

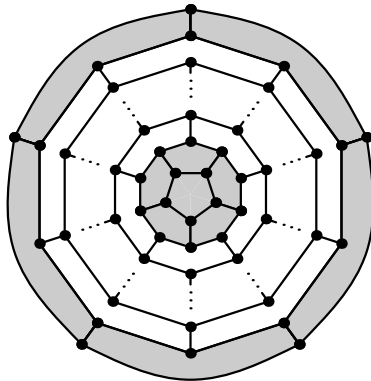
$$\text{diam}(F) \leq \frac{n}{6} + \frac{1}{6}(13 - C_m) - 1 + d_M = \frac{n}{6} + C. \quad (4.4)$$

Zdaj bomo zgoraj izračunane rezultate, vključili v (4.4) ter določili zgornjo mejo za konstanto  $C$ . Največja konstanta se zgodi pri  $d_M = 3$ , kjer velja  $C_m \geq 10$ , iz česar sledi, da  $C \leq \frac{5}{2}$ . S tem je prvi del dokaza izreka 4.6 zaključen.

Denimo zdaj, da je  $F$  nanocevka tipa  $(5, 0)$  na  $n$  vertices. Opazimo, da je  $n \equiv 0 \pmod{10}$  oz. da za število vozlišč velja  $n = 10k$ ,  $k \in \mathbb{N}$ . Diameter grafa je v določen z najbolj oddaljenima vozliščema, v tem primeru ta vozlišča pripadata različnima krovnioma grafoma in ležita na samih 5-licih. Ni težko izračunati, da izrek drži za  $k \in \{2, 3, 4, 5\}$ .

Za  $k > 5$  bomo izrek dokazali z indukcijo glede na število vozlišč. Naj bo  $k \geq 5$  ter predpostavimo, da izrek drži za vse  $(5, 0)$ -nanocevke na  $10k$  vozliščih. Nanocevko tipa

$(5, 0)$  na  $10(k+1)$  vozliščih lahko pridobimo tako, da v cilindrični del grafa dodamo še eno vzporedno<sup>2</sup> plast šestkotnikov. Ta konstrukcija nam zgradi  $(5, 0)$ -nanocevko z dodanimi desetimi vozlišči (glej sliko 4.4).



Slika 4.4: Primer  $(5, 0)$ -nanocevke.

Po lemi 4.8 vidimo, da se naš diameter poveča za 2 oz.

$$\text{diam}(F') = \text{diam}(F) + 2 = \frac{10k}{5} - 1 + 2 = \frac{10(k+1)}{5} - 1,$$

s čemer je naš dokaz dokončan. □

### 4.3 Nedvodelnost grafa

**Definicija 4.12** Poljuben graf je  $k$ -nedvodelen, če obstaja taka množica povezav  $E_0$  moči  $k$ , da je  $G - E_0$  dvodelen graf.

*Nedvodelnost* grafa  $G$ ,  $\varphi(G)$  je najmanjše tako število  $k$ , da je graf  $G$   $k$ -nedvodelen.

V [7] je bilo pokazano, da lahko nedvodelnost fullerenskega grafa učinkovito izračunamo s pomočjo minimalno-uteženega popolnega prirejanja v nekoliko transformiranem originalnem fullerenu. V istem članku lahko preberemo tudi, da za poljuben fullerenski graf  $G$  velja  $\varphi(G) \geq 6$ , ter da je ta spodnja meja ostra. Avtorji tudi pokažejo, da v fulerenih z ikozaedrično simetrijo velja  $\varphi(G) \sim \sqrt{|V(G)|}$  (glej [7], Proposition 11 in Corollary 12). Tudi če pogledamo numerične rezultate vse kaže na to, da nedvodelnost od  $G$  glede na  $|V(G)|$  asimptotično ne more rasti hitreje, kot so avtorji predlagali v naslednji hipotezi, ki je prav tako v [7]:

<sup>2</sup>Več podrobnosti o vzporednih prerezih smo opisali v prejšnjem poglavju.

**Hipoteza 4.13** *Naj bo  $G$  fullerenski graf. Velja:*

$$\varphi(G) \leq \sqrt{\frac{12n}{5}}.$$

Med pisanjem članka smo avtorji mislili, da lahko s pomočjo leme, podobne lemi 4.4 na enostaven način dokažemo tudi hipotezo o nedvodelnosti, vendar se je izkazalo, da zadeva ni tako preprosta. Pred nekaj meseci so Dvořák, Lidický in Škrekovski v [9] dokazali spodnji izrek, ki aproksimacijsko potrди zgornjo hipotezo 4.13.

**Izrek 4.14** *Naj bo  $G$  fullerenski graf z  $n$  vozlišči. Potem je*

$$\varphi(G) \approx O(\sqrt{n}).$$

Izrek 4.14 bomo v nadaljnjih razdelkih uporabili pri dokazovanju nekaterih drugih izboljšanih mej.

## 4.4 Neodvisnostno število

Naslednja lastnost, ki jo bomo pri fulerenih preučili je neodvisnostno število [13].

**Definicija 4.15** Množica  $I \subseteq V(G)$  je *neodvisna*, če za vsaki dve vozlišči  $u, v \in I$  velja  $uv \notin E(G)$ . *Neodvisnost* grafa  $G$  ( $\alpha(G)$ ) je moč največje neodvisne množice od  $G$ .

Neodvisnost fulerenskih grafov je pritegnila veliko pozornosti ne le zaradi korelacije s stabilnostjo ogljikovih molekul [13], temveč tudi v kontekstu raziskovanja neodvisnih množic kot potencialnih modelov za spajanje kemijskih struktur, kot so prosti radikali ali halogenski atomi. Tesna zgornja meja za neodvisnost grafa fulerenskih grafov je bila ugotovljena v [5], in sicer  $\alpha(G) \leq \frac{n}{2} - 2$ .

Spodnje meje za vse 3-obarvljive grafe so bile grafe iz enostavne meje  $\alpha(G) \geq n/3$  v [21] bistveno izboljšane na  $\alpha(G) \geq \frac{3}{8}n$ . Še boljša meja  $\alpha(G) \geq \frac{n}{2} - C\sqrt{n}$  je bila ugotovljena v [20], vendar le za poseben razred ikozaedričnih fulerenov.

Trenutno še ne poznamo nobene tesne spodnje meje za fulerenske grafe. Najboljša meja,  $\alpha(G) \geq \frac{3}{8}n$ , ki jo lahko najdemo v [21] namreč ni nič boljša od splošne spodnje meje za poljubne ravninske kubične grafe brez trikotnikov. Numerični poskusi kažejo, da ta meja še zdaleč ni optimalna, ter namigujejo, da je spodnja tipa  $\alpha(G) \geq \frac{n}{2} - C\sqrt{n}$ . Ta opazovanja so objavljena v dveh hipotezah doktorske disertacije od S. Daugherty ([2], stran 96). Prva od obeh hipotez pravi, da je minimalno možno neodvisnostno število

fulerena dosežena pri ikozaedričnih fulerenih, druga hipoteza pa poda točno napoved spodnje meje neodvisnostnega števila pri fulerenih.

**Hipoteza 4.16** ([2], **Conjecture 5.5.2**) *Naj bo  $G$  fullerenski graf. Potem*

$$\alpha(G) \geq \frac{n}{2} - 3\sqrt{\frac{|V(G)|}{15}}.$$

Opazimo lahko, da je konstanta  $\frac{3}{\sqrt{15}}$  točno polovična konstanta  $\left(\sqrt{\frac{12}{5}}\right)$  iz hipoteze 4.13.

Tu imamo še eno hipotezo, ki opisuje relacijo med diametrom ter neodvisnostnim številom ter se pojavi med hipotezami v Graffiti [17]:

**Hipoteza 4.17** ([17], **Conjecture 912**) *Za vsak fullerenski graf  $G$  drži, da  $\alpha(G) \geq 2(\text{diam}(G) - 1)$ .*

Zdaj bomo v splošnem za vse fullerenske grafe dokazali asimptotično ostro spodnjo mejo za neodvisnostno število ter s tem v izreku 4.18 potrdili hipotezo 4.16, nato pa v trditvi 4.19 za dovolj velike fulerene potrdili hipotezo 4.17.

**Izrek 4.18** *Obstaja fiksna konstanta  $C > 0$ , tako da velja  $\alpha(G) \geq \frac{n}{2} - C\sqrt{n}$ , kjer je  $G$  poljuben fullerenski graf na  $n$  vozliščih.*

**Dokaz.** Naj bo  $G$  fullerenski graf na  $n$  vozliščih. Z uporabo zgornje meje  $\varphi(G)$  ([9]) lahko vidimo, da pametna odstranitev največ  $C'\sqrt{n}$  robov (tu je  $C'$  konstanta) iz grafa  $G$  povzroči pridobitev dvodelnega vpetega podgrafa  $G'$ . Vsaj ena od obeh komponent dvodelnega grafa  $G$  vsebuje vsaj  $\frac{n}{2}$  vozlišč in očitno je to neodvisna množica grafa  $G'$ . Poimenujmo to neodvisno množico z  $W'$ , množico odstranjenih robov pa  $M$ . Vemo, da je množica odstranjenih robov prirejanje (glej [7]), ter da je vsaka povezava iz  $M$  v celoti vsebovana v eni izmed obeh komponent dvodelnega grafa  $G'$ . Tudi v najslabšem možnem primeru, če je vsaka povezava iz  $M$  vsebovana v komponenti na vozliščih  $W'$ , je povezav iz  $M$  kvečjemu  $C'\sqrt{n}$ . Vidimo torej, da vozlišča množice  $W'$ , ki se ne dotikajo nobenega izmed robov iz  $M$ , tvorijo neodvisno množico v grafu  $G$ , ki ima moč vsaj  $\frac{n}{2} - C\sqrt{n}$ .  $\square$

Izreka 4.6 in 4.18 nam podata naslednjo trditev.

**Trditev 4.19** *Naj bo  $G$  fullerenski graf na  $n$  vozliščih. Če je  $n$  dovolj velik, potem*

$$\alpha(G) \geq 2(\text{diam}(G) - 1).$$

**Dokaz.** Z uporabo mej, dobljenih v izreku 4.6 ter 4.18 ni težko videti, da za dovolj velik  $n$  držijo naslednje neenakosti:

$$\alpha(G) \geq \frac{n}{2} - C\sqrt{n} \geq 2\left(\frac{n}{5} + 1\right) - 1 \geq 2(\text{diam}(G) - 1).$$

□

Trditev 4.19 torej za vse dovolj velike fullerene potrди tudi hipotezo 4.17.

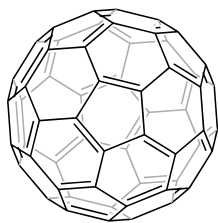
## 4.5 Najmanjša lastna vrednost

Naslednja lastnost, ki jo obravnavamo, je najmanjša lastna vrednost fullerenskega grafa.

**Definicija 4.20** Naj bo  $G$  poljuben graf in naj bo  $A(G)$  njegova matrika sosednosti. Če je  $\lambda$  lastna vrednost matrike  $A(G)$ , pravimo, da je  $\lambda$  lastna vrednost grafa  $G$ .

V [15] so Fowler, Hansen in Stevanović postavili naslednjo hipotezo o najmanjši lastni vrednosti fulerenov:

**Hipoteza 4.21** Med vsemi fulereni s 60 ali več vozlišči ima Buckminsterfullerene –  $C_{60}$  (glej sliko 4.5) največjo minimalno lastno vrednost.



Slika 4.5: Buckminsterfullerene – fuleren z največjo minimalno lastno vrednostjo.

Opazimo lahko, da sta hipotezi 4.21 in 4.13 med sabo povezani z rezultatom o Laplaceovih lastnih vrednostih (Godsil, Royle, [19] stran 293):

**Izrek 4.22** Naj bo  $G$  poljuben graf na  $n$  vozliščih. Potem velja:  $\text{bip}(G) \leq \frac{n}{4}\mu_{\infty}(G)$ .

Z  $\text{bip}(G)$  smo označili število povezav v maksimalnem dvodelnem podgrafu od  $G$ , torej  $\text{bip}(G) = |E(G)| - \varphi(G)$ .  $\mu_{\infty}(G)$  je največja Laplaceova lastna vrednost grafa  $G$ . O Laplaceovih lastnih vrednostih lahko preberemo več v 13. poglavju [19], za potrebe v tem

poglavju pa bo dovolj, če poznamo enakost  $\mu_\infty(G) = 3 - \lambda_n(G)$ , kjer je  $\lambda_n(G)$  najmanjša lastna vrednost grafa  $G$ .

Če to relacijo priključimo v izrek 4.22, lahko v luči enakosti  $\text{bip}(G) = \frac{3}{2}n - \varphi(G)$  dobimo naslednjo zgornjo mejo za  $\lambda_n(G)$  v odvisnosti od  $\varphi(G)$ :

$$\lambda_n(G) \leq -3 + \frac{4}{n}\varphi(G).$$

Če zdaj upoštevamo izboljšano zgornjo mejo  $\varphi(G)$ , pridemo takoj do naslednje zgornje meje najmanjše lastne vrednosti fullerenskih grafov.

**Izrek 4.23** *Naj bo  $G$  fullerenski graf na  $n$  vozliščih. Potem obstaja konstanta  $C$ , tako da velja:*

$$\lambda_n(G) \leq -3 + \frac{C}{\sqrt{n}}$$

Posledično lahko tako za vse dovolj velike fullerenske grafe pritrdilno odgovorimo hipotezi 4.21.

## 4.6 Nasičenost grafa

Zadnja lastnost, ki jo v tem poglavju obravnavam, je *nasičenost grafa*, ki je povezana s prirejanji. Spomnimo se definicije prirejanja ter nekaj sorodnih pojmov:

**Definicija 4.24** *Prirejanje* je taka množica  $M \subseteq E(G)$ , kjer poljubni dve povezavi iz  $M$  nimata skupnega vozlišča.

Vozlišču, ki se dotika neke povezave iz  $M$  pravimo, da je *pokrito* z  $M$ .

Včasih imamo v grafu  $G$  tako prirejanje, da ga ne moremo povečati z nobeno izmed preostalih povezav iz  $E(G)$ . Takemu prirejanju pravimo tudi *maksimalno prirejanje*.

*Popolno prirejanje* je tako prirejanje, ki v nekem grafu pokrije vsa njegova vozlišča. Vsako popolno prirejanje je hkrati torej tudi maksimalno.

O popolnih prirejanjih v fullerenskih grafih je zapisanih veliko zanimivih člankov, ki analizirajo njihovo strukturo, velikost ter ostale lastnosti ([25, 5, 24]), po drugi strani pa je bilo posvečene zelo malo pozornosti razredu maksimalnih prirejanj, kljub temu da so ta prirejanja potencialno uporabna v določenih matematičnih modelih absorbiranja dimerov.

**Definicija 4.25** *Nasičenost* grafa  $G$ ,  $s(G)$ , je velikost najmanjšega možnega izmed vseh maksimalnih prirejanj.

Nasičenost fullerenskih grafov opisuje Došlić v svojih člankih [5, 8], kjer postavi naslednjo spodnjo ter zgornjo mejo za nasičenostno število:

**Izrek 4.26** *Obstaja končna konstanta, da za vsak fullerenski graf  $G$  na  $n$  točkah velja:*

$$\frac{3n}{10} \leq s(G) \leq \frac{n}{2} - c \log_2 n.$$

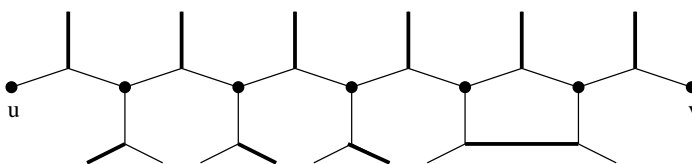
V tem razdelku bomo z uporabo novega rezultata o spodnji meji diametra za fulerene izboljšali zgornjo mejo za nasičenostno število.

**Izrek 4.27** *Naj bo  $G$  poljuben fullerenski graf na  $n$  vozliščih. Potem obstaja taka konstanta  $c > 0$ , da  $s(G) \leq \frac{n}{2} - C\sqrt{n}$ .*

**Dokaz.** Naj bo  $G$  fullerenski graf na  $n$  vozliščih. Za njegov diameter  $D(G)$  lahko uporabimo spodnjo mejo:

$$D(G) \geq D_0 = C\sqrt{n}.$$

Vzemimo torej taki dve vozlišči  $v_0$  in  $v_{D_0}$ , ki sta na razdalji  $D_0$ , ter označimo neko najkrajšo pot med njima s  $P$ . Zaporedoma označimo vozlišča na najkrajši poti med  $u_0$  in  $v$  z  $u_0, u_1, \dots, u_{D_0-1}, v$ , ter jih razdelimo na množici  $I_0, I_1$ , glede na sodost oz. lihost njihovega indeksa, ter pri tem opazimo, da velja  $|I_0| = \left\lceil \frac{(D_0+1)}{2} \right\rceil$ .



Slika 4.6: Neodvisna množica na  $c\sqrt{n}$  vozliščih.

Naj bo  $M_0$  množica takih povezav, za katere velja eden izmed spodnjih pogojev:

1. Povezava je iz  $E(G - I_0)$  in se dotika neke točke iz  $I_1$ ;
2. Povezava je iz  $E(G - I_0)$  in je v  $G$  sosednja neki povezavi, ki se dotika poljubne točke iz  $I_0$ . Pri tem pazimo, da se te povezave ne dotikajo med sabo (za lažjo predstavbo glej sliko 4.6).

Označimo z  $M$  poljubno maksimalno prirejanje, ki ga razširimo iz množice  $M_0$ . Velikost dobljenega prirejanja ne more preseči  $\frac{(n-|I_0|)}{2}$ . Vidimo, da je  $M_0$  tudi maksimalno prirejanje v  $G$ , zato si pogledjmo zgornjo mejo velikosti tega prirejanja, iz česar sledi pravilnost izreka.

$$\frac{(n - |I_0|)}{2} = \frac{n}{2} - \frac{\left\lceil \frac{(C\sqrt{n}+1)}{2} \right\rceil}{2} \approx \frac{n}{2} - c\sqrt{n}.$$

□

# Novi izzivi

V zadnjih razdelkih smo postavili tesno spodnjo mejo diametra fullerenskih grafov, ter s pomočjo tega rezultata v kombinaciji z nedavnim rezultatom o nedvodelnosti vsaj delno potrdili še hipoteze 4.13, 4.21, 4.16 ter 4.17.

Kateri pa so še ostali problemi, podobni zgornjim; torej ne preveč težki ter ne preveč dolgi? Zelo verjetno je, da bo spodnja meja diametra uporabna še pri izboljševanju drugih invariant, koreliranih z razdaljo, ki jih tukaj ne obravnavamo, npr. njihova ekscentričnost ali razdaljne vsote. Tehnike, ki smo jih uporabili pri dokazovanju, bi lahko uporabili tudi na drugih razredih grafov, npr. na razširjenih družinah fulerenov. Še en izziv bi lahko bil tudi točen izračun rasti v lemi 4.4, iz česar bi sledila točna<sup>3</sup> spodnja meja diametra ter verjetno še nekaj z njo povezanih točnih mej. Tudi opazovanje fulerenov z izoliranimi petkotnimi lici bi lahko bilo porodilo drugačne meje; taki fulereni imajo namreč večje prereze po povezavah, zato bi intuitivno morali imeti manjše diametre.

V tem diplomskem delu sem poskušal na zanimiv način prikazati nekaj precej svežih ugotovitev na področju kemijske teorije grafov, ter predstaviti nekaj še odprtih izzivov.

Iskreno upam, da Vam je bilo branje tega diplomskega dela v veselje in v izziv.

---

<sup>3</sup>Ne le aproksimacijsko točna, kot smo to naredili v [1].



# Literatura

- [1] V. Andova, T. Došlić, M. Krnc, B. Lužar, R. Škrekovski, *On the Diameter of Fullerene Graphs*, v pripravi.
- [2] S. M. Daugherty, *Independent Sets and Closed-Shell Independent Sets of Fullerenes*, Ph. D. thesis, University of Victoria, 2009.
- [3] T. Došlić, *On lower bounds of number of perfect matchings in fullerene graphs*, J. Math. Chem. **24** (1998), 359–364.
- [4] T. Došlić *Saturation number of fullerene graphs*, J. Math. Chem. **24** (1998), 359–364.
- [5] T. Došlić, *On some structural properties of fullerene graphs*, J. Math. Chem. **31** (2002), 187–195.
- [6] T. Došlić, *Cyclical edge-connectivity of fullerene graphs and  $(k, 6)$ -cages*, J. Math. Chem. **33** (2003), 103–112.
- [7] T. Došlić, D. Vukičević, *Computing the bipartite edge frustration of fullerene graphs*, Discrete Appl. Math. **155** (2007), 1294–1301.
- [8] T. Došlić, *Saturation number of fullerene graphs*, J. Math. Chem. **43** (2008), 647–657.
- [9] Z. Dvořak, B. Lidický, R. Škrekovski, *Bipartizing fullerenes*, arXiv:1106.0420v1, preprint.
- [10] R. Erman, F. Kardoš, J. Miškuf, *Long cycles in fullerene graphs*, J. Math. Chem. published online.
- [11] G. Ewald, *On shortness exponents of families of graphs*, Israel J. Math. **16** (1973), 53–61.

- [12] S. Fajtlowicz, *Written on the Wall (A List of Conjectures of Graffiti)*, po želji na voljo pri avtorju.
- [13] S. Fajtlowicz, C. E. Larson, *Graph-Theoretic Independence as a Predictor of Fullerene Stability*, Chem. Phys. Letters **377** (2003), 485–490.
- [14] P. W. Fowler, S. Daugherty, W. Myrvold, *Independence number and fullerene stability*, Chem. Phys. Lett. **448** (2007), 75–82.
- [15] P. W. Fowler, P. Hansen, D. Stevanović, *A note on the smallest eigenvalue of fullerenes*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **48** (2003), 37–48.
- [16] P. W. Fowler, D. E. Manolopoulos, *An Atlas of Fullerenes*, Clarendon, Oxford, 1995.
- [17] P. W. Fowler, K. M. Rogers, S. Fajtlowicz, P. Hansen and G. Caporossi, *Facts and conjectures about fullerene graphs: leapfrog, cylindrical and Ramanujan fullerenes*, In: A. Betten, A. Kohnert, R. Laue and A. Wassermann, Editors, Algebraic Combinatorics and Applications, Springer, Berlin (2000).
- [18] E. Friedman, R. W. Pratt, *New bounds for largest planar graphs with fixed maximum degree and diameter*, preprint.
- [19] C. Godsil, G. Royle, *Algebraic Graph Theory*, Springer, New York, 2001.
- [20] J. E. Graver, *The independence number of fullerenes and benzenoids*, European J. Combin. **27** (2006), 850–863.
- [21] C. H. Heckman, R. Thomas, *Independent sets in triangle-free cubic planar graphs*, J. Combin. Theory B **96** (2006), 253–275.
- [22] S. Jendrol' and P. J. Owens, *Longest cycles in generalized Buckminsterfullerene graphs*, J. Math. Chem. **18** (1995), 83–90.
- [23] F. Kardoš, R. Škrekovski, *Cyclic edge-cuts in fullerene graphs*, J. Math. Chem. **22** (2008), 121–132.
- [24] F. Kardoš, D. Kral', J. Miškuf, J.-S. Sereni, *Fullerene graphs have exponentially many perfect matchings*, J. Math. Chem. **46** (2009), 443–447.
- [25] D. J. Klein and X. Liu, *Theorems for carbon cages*, J. Math. Chem. **33** (1992), 199–205.

- [26] D. Kral, O. Pankrac, J.-S. Sereni, R. Škrekovski, *Long cycles in fullerene graphs*, J. Math. Chem. **45** (2009), 1021–1031.
- [27] F. Kardoš, M. Krnc, B. Lužar, R. Škrekovski *Cyclic 7-edge-cuts in fullerene graphs*, J. Math. Chem. **47** (2) (2010), 771–789.
- [28] K. Kutnar and D. Marušič, *On cyclic edge-connectivity of fullerenes*, Discrete App. Math. **156**(10) (2008), 1661–1669.
- [29] B. Lužar, *Injektivna barvanja grafov*, Diplomsko delo (2008).
- [30] Z. Qi, H. Zhang, *A note on the cyclical edge-connectivity of fullerene graphs*, J. Math. Chem. **43** (2008), 134.
- [31] J. Qian and F. Zhang, *On the number of Kekulé structures in capped zigzag nanotubes*, J. Math. Chem. **38** (2005), 233–246.
- [32] R. Škrekovski, *Diskretne strukture 2*, Zapiski s predavanj (2008).
- [33] Weisstein, Eric W., *Graph*, From MathWorld—A Wolfram Web Resource.  
<http://mathworld.wolfram.com/Graph.html>
- [34] R. J. Wilson, J. J. Watkins, *Uvod v teorijo grafov*, Knjižnica Sigma (1997).
- [35] F. Zhang and L. Wang, *k-resonance of open-ended carbon nanotubes*, J. Math. Chem. **35** (2004), 87–103.