

Stabilnost fulerenov in računalništvo



KATJA BREZNIK, SIMON BREZOVNIK IN JANEZ DOLŠAK

Uvod

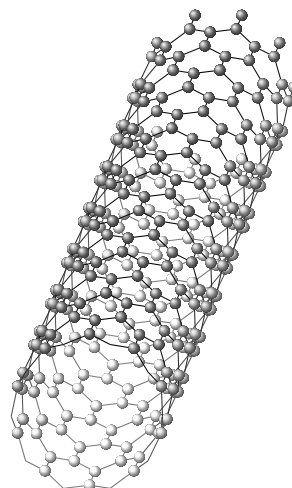
Ste že slišali za kemijsko spojino fuleren? Ali veste, da lahko iz njega izdelamo material, ki je tudi do 200-krat trdnjši od jekla? Ali pa, da lahko fuleren zavira širjenje virusa HIV po telesu?

Fulereni so poleg grafita in diamanta ena izmed oblik ogljikovih molekul. Pojavljajo se v obliki sfere, elipsoida ali cevi. Imajo veliko koristnih lastnosti: so protivirusno aktivni, sposobni prenosa elektronov, prenosa zdravil v našem telesu in so potencialna orodja za ugotavljanje malignosti tumorjev. Prisotni so tudi v povsem vsakdanjih predmetih, npr. v oblačilih, teniških loparjih in v premazu krogel za bowling. Na sliki 1 vidimo primer v naravi najbolj pogostega fulerena, znanega pod imenom Buckminsterfuleren (krajše Buckyball). Odkrili so ga v 80-ih letih prejšnjega stoletja. Tvori ga 60 ogljikovih atomov, ki se povezujejo v obliko prisekanega ikozadra, ki spominja na nogometno žogo. Ime je dobil po arhitektu in izumitelju Buckminsterju Fullerju, ki je v kupolo ene izmed svojih slavnih konstrukcij vključil heksagonske in pentagonske oblike.



SLIKA 1.

Buckyball



SLIKA 2.

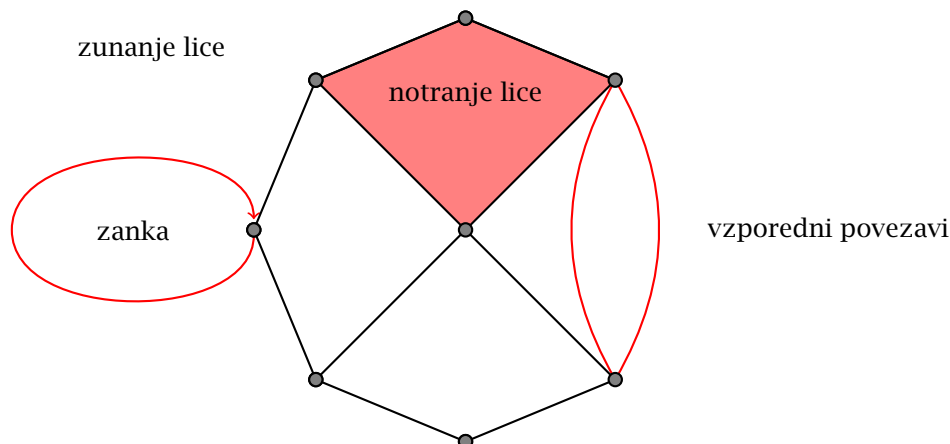
Ogljikove nanocevke

V splošnem obstaja več fulerenov, ki imajo različne lastnosti in dajejo različne možnosti uporabe. Buckminsterfuleren npr. zavira encim HIV-1 proteaza, kar lahko zaustavi širjenje virusa HIV po telesu. Ogljikove nanocevke (slika 2) zaradi velike stabilnosti in nereaktivnosti omogočajo shranjevanje močno reaktivnega elementa vodika, hkrati pa jih zaradi dobre električne prevodnosti uporabljajo tudi v elektroniki. Ker so močnejše in lažje od jekla, jih uporabljajo tudi v vesoljskih plovilih.

Kemija fulerenov doživlja vzpon in ob tem je zraslo tudi zanimanje za raziskovanje matematičnih modelov, ki so v pomoč pri določanju stabilnosti fulerenov. To raziskovanje **povezuje kemijo s teorijo grafov in z računalništvom.**

Pojasnimo najprej, kaj pojem kemijske stabilnosti sploh pomeni. Kemijska stabilnost je kriterij, ki določa, kakšna je težnja snovi k ohranitvi kemijske





SLIKA 3.

Primer grafa z označenimi osnovnimi elementi

strukture, ko je snovi dodana neka druga (reaktivna) snov ali pa je ta izpostavljena visokemu tlaku, temperaturi ali svetlobi. Dejstvo je, da večja kot je notranja energija snovi, bolj je snov reaktivna in zato manj stabilna. Več o stabilnosti fullerena si lahko bralec ogleda v [5].

Osnovni pojmi teorije grafov

O grafih je bilo v Preseku že veliko napisanega (npr. [2]). Ponovimo osnovne pojme.

Graf G tvori urejen par $(V(G), E(G))$, pri čemer je $V(G)$ množica vozlišč, $E(G)$ pa množica neurejenih parov vozlišč, ki jih imenujemo povezave grafa. Graf G je končni graf, če ima končno mnogo vozlišč in povezav. Območja grafa G , ki so omejena s povezavami, vključno z zunanjim neomejenim območjem, imenujemo lica.

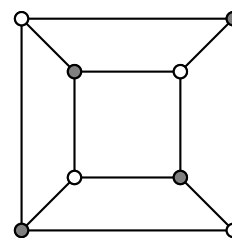
Povezavo v grafu, ki ima obe krajišči enaki, imenujemo zanka. Povezavi, ki imata enaki krajišči, pa imenujemo vzporedni povezavi. Če v grafu ni ne zank in ne vzporednih povezav, pravimo, da je graf enostaven. Na sliki 3 je prikazan graf z označenim licem, zunanjim licem, zanko in vzporednima povezavama.

Ravninski graf je graf, ki ga lahko narišemo v ravnini, tako da se poljubni par povezav seka le v skupnem vozlišču ali pa se ne seka.

Graf G je regularen, če gre iz vsakega njegovega vozlišča enako število povezav. Natančneje grafu, pri katerem iz vsakega vozlišča izhaja natanko k povezav, pravimo k -regularen graf. 3-regularnemu grafu pravimo tudi kubični graf. Primer kubičnega grafa vidimo na sliki 4.

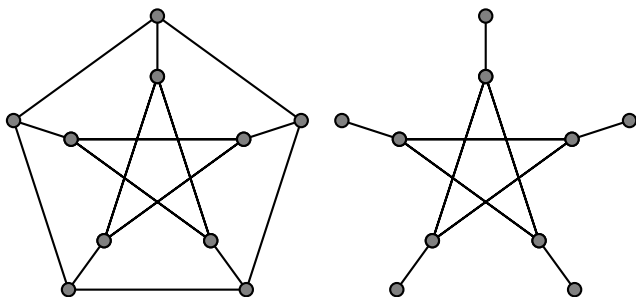
Graf G je dvodelen, če lahko množico njegovih vozlišč $V(G)$ razdelimo v dve disjunktni množici $V_1(G)$ in $V_2(G)$, tako da vsaka povezava e iz $E(G)$ poteka iz vozlišča v_1 iz $V_1(G)$ v vozlišče v_2 iz $V_2(G)$. Na sliki 4 lahko vidimo, da je prikazani graf dvodelen (bela in črna vozlišča predstavljajo disjunktni množici).

Graf H je podgraf grafa G , če velja, da je množica vozlišč $V(H)$ grafa H podmnožica vozlišč $V(G)$ grafa G in da je množica povezav $E(H)$ grafa H podmnožica povezav $E(G)$ grafa G .



SLIKA 4.

Kubični graf



SLIKA 5.

Levo graf in desno njegov vpet podgraf

Graf H je vpeti podgraf grafa G , če je H podgraf grafa G in velja $V(G) = V(H)$ (slika 5).

Predstavljajmo si, da imamo ravninsko risbo povezanega ravninskega grafa G . Potem v tem grafu v notranjosti vsakega lica narišemo po eno točko. Za vsako povezavo e grafa G narišemo črto, ki povezuje točki, ki ležita v licih grafa G , ki si delita povezavo e . Ta črta bo predstavljala povezave, prej določene točke pa vozlišča grafa, ki ga bomo imenovali dualni graf grafa G [4]. Na sliki 6 lahko vidimo, kako iz grafa skonstruiramo njegov dual.

Graf K je polni graf, kadar med poljubnim parom različnih vozlišč obstaja povezava. Polni graf, ki ga sestavlja n vozlišč, označimo z K_n . Na sliki 7 vidimo polni graf na dvanajstih vozliščih.

Naj bo M podmnožica množice povezav grafa G . Množici M pravimo prirejanje, če za poljubni različni povezavi iz te množice velja, da nimata skupnega krajišča. Prirejanje M , v katerem je vsako vozlišče grafa krajišče neke povezave iz M , imenujemo popolno prirejanje. Na sliki 8 je primer tega: levo graf in desno njegovo popolno prirejanje (povezave prirejanja so modre in odebeljene).

Naj bo A podmnožica množice vseh povezav grafa G . Če je podgraf $(V(G), E(G) \setminus A)$ grafa G dvodelen, potem pravimo, da je A množica nedvodelnih povezav. Moč najmanjše množice nedvodelnih povezav imenujemo nedvodelnost grafa G .

Potrebovali bomo še pojem poti. Pred tem ponovimo, kaj je sprehod med poljubnima vozliščema v_1 in v_n grafa G . Sprehod je zaporedje vozlišč v_1, v_2, \dots, v_n , kjer sta v_i in v_{i+1} krajišči neke povezave iz $E(G)$, za $i = 1, 2, \dots, n-1$. Če imamo sprehod,

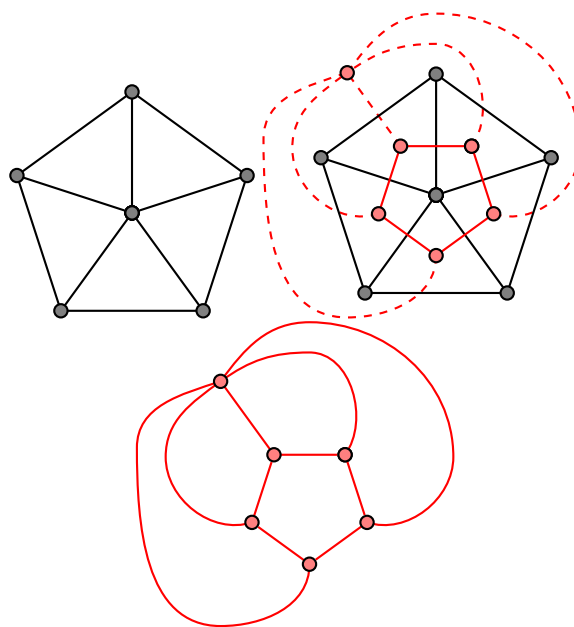
v katerem so vozlišča para različna, govorimo o poti v grafu G in njeno dolžino merimo s številom povezav na tej poti.

Predstavitve problema

Vsakemu fullerenu je mogoče prirediti graf, katerega vozlišča predstavljajo ogljikove atome, povezave pa kovalentne vezi med njimi. Takšen fullerenski graf je ravninski, kubični graf, ki ima 12 pentagonskih lic, vsa ostala pa so heksagonska. Vsi fullerenski grafi so tudi končni in enostavni. Na sliki 9 je prikazana ravninska vložitev fulerena C_{60} .

Preko ugotavljanja nedvodelnosti grafa je mogoče ovrednotiti stabilnost grafu pripadajočega fulerena. Manjša kot je nedvodelnost fullerenskega grafa, večja je njegova stabilnost.

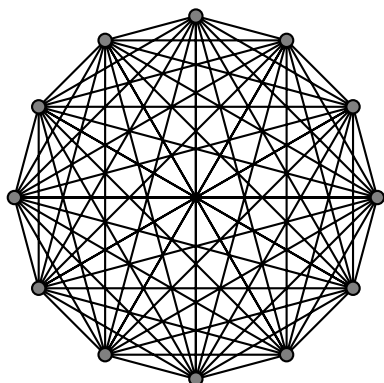
Načinov, kako bi ovrednotili nedvodelnost grafa, je več. Naraven način je štetje povezav, ki kvarijo dvodelnost. Predstavili bomo postopek, ki za fullerenski graf izračuna najmanjše število povezav, ki bi jih bilo potrebno odstraniti, da bi graf postal dvodelen.



SLIKA 6.

Konstrukcija dualnega grafa





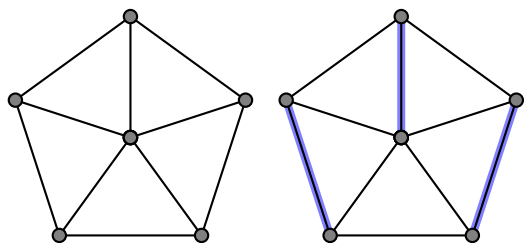
SLIKA 7.

Polni graf K_{12}

Zakaj fullerenski graf ni dvodelen? Ključen kriterij dvodelnosti grafa je odsotnost lihih ciklov, kar pomeni, da fullerenski graf ne more biti dvodelen, saj vsebuje točno 12 pentagonskih lic. Ker so vsi ostali gradniki fullerenskih grafov heksagonska lica, to obenem pomeni, da so pentagonska lica edina ovira do dvodelnosti teh grafov. Pentagonska lica bodo tako ključni objekti v tem postopku.

Imamo fullerenski graf G . Želimo poiskati $\phi(G)$ – najmanjše število povezav, ki kvarijo dvodelnost grafa G .

V nadaljevanju bomo postopek iskanja $\phi(G)$ prikazali na primeru fullerenskega grafa C_{20} (glej sliko 10). Fuleren C_{20} je najmanjši izmed fulerenov in kot vsi fulereni ima natanko 12 pentagonskih lic. Posebnost grafa je, da so to tudi edina lica, ki jih premore, saj C_{20} ne vsebuje nobenega heksagonskega lica.



SLIKA 8.

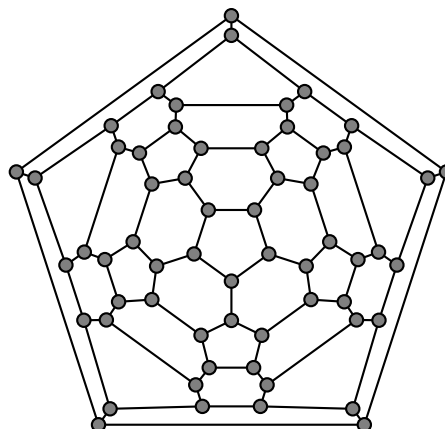
Primer grafa in njegovega popolnega prirejanja

■ Naj bo graf G' dual grafa G .

Spomnimo se, da vsako lice grafa G' ustreza vozlišču grafa G in obratno, kar pomeni, da ima dual fullerenskega grafa vsa vozlišča stopnje 5 ali 6.

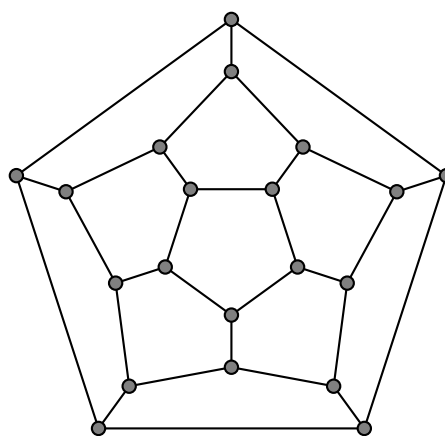
Ponovimo: Lice je neko območje ravninske vložitve grafa in velikost lica merimo s številom povezav, ki ga omejujejo.

Vozlišče grafa G' stopnje 5 leži v pentagonskem licu grafa G . Tako lahko z iskanjem vozlišč stopnje 5 v G' , poiščemo vsa pentagonska lica grafa G (glej sliko 11).



SLIKA 9.

Fuleren C_{60}



SLIKA 10.

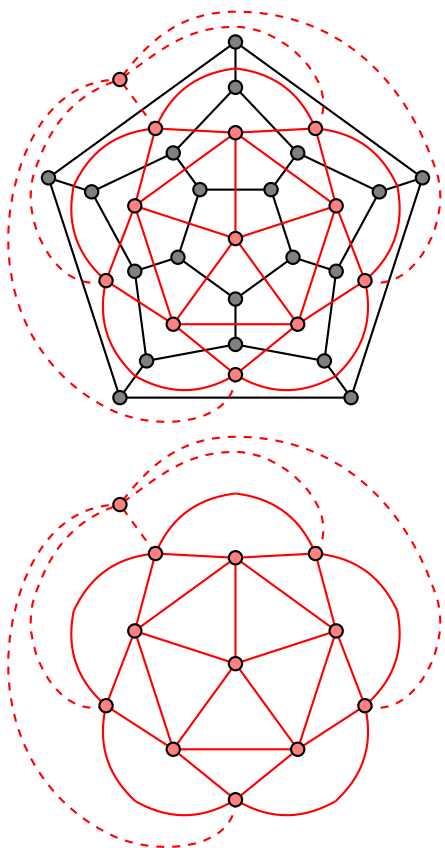
Fuleren C_{20} .

▪ **Označimo nekatere povezave grafa G' .**

Želimo označiti nekatere povezave grafa G' tako, da bodo preostale povezave tvorile vpeti vpeti podgraf s samimi vozlišči sode stopnje.

Opazimo lahko, da če pentagonsko lice kviri dvodelnost grafa G , potem pripadajoče vozlišče grafa G' stopnje 5 kviri vpeti podgraf s samimi vozlišči sode stopnje.

Imenujmo množico označenih povezav grafa G' *ovira*. Najmanjša takšna množica je naša rešitev. Kako jo poiščemo, bomo izvedeli v naslednjem koraku. Lahko pa povzamemo, da v kolikor tako množico povezav grafa G' odstranimo, graf G postane dvodelen. Potem je namreč vsako vozlišče grafa G' sode stopnje in tako vozlišče tvori pripadajoči cikel sode stopnje v grafu G , kar ustreza definiciji dvodelnosti.



SLIKA 11.

Dual fullerena C_{20}

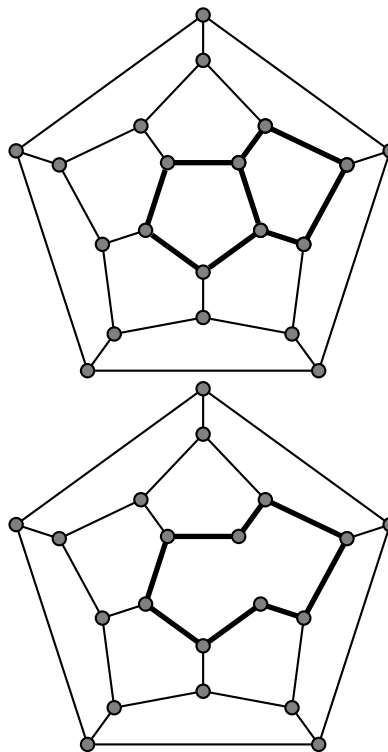
▪ **Poiščimo ovire.**

Poljubno izberemo dve izmed dvanajstih pentagonskih lic v grafu G . Če želimo, da ta del grafa G ne kviri njegove dvodelnosti, moramo odstraniti nekatere povezave tako, da bosta izbrani lici postali skupno lice sode stopnje (glej sliko 12).

V splošnem to storimo tako, da v izbranih pentagonskih licih grafa G označimo vozlišči grafa G' . Razdaljo med njima definiramo kot najmanjše število povezav, ki jih prečkamo, da pridemo od enega do drugega po povezavah grafa G' (glej sliko 13).

Če sedaj odstranimo vse povezave grafa G , ki jih ta pot seka, dobimo skupno lice teh dveh pentagonskih lic. Skupno lice je seveda sode stopnje, saj ga sestavljata dve pentagonski lici in morebitna heksagonska lica (glej sliko 13).

Postopek ponovimo še za preostale poljubno izbrane pare pentagonskih lic. To pomeni, da smo v grafu G' izbrali šest medseboj nepovezanih poti



SLIKA 12.

Združevanje dveh pentagonskih lic v fullerenu C_{20}





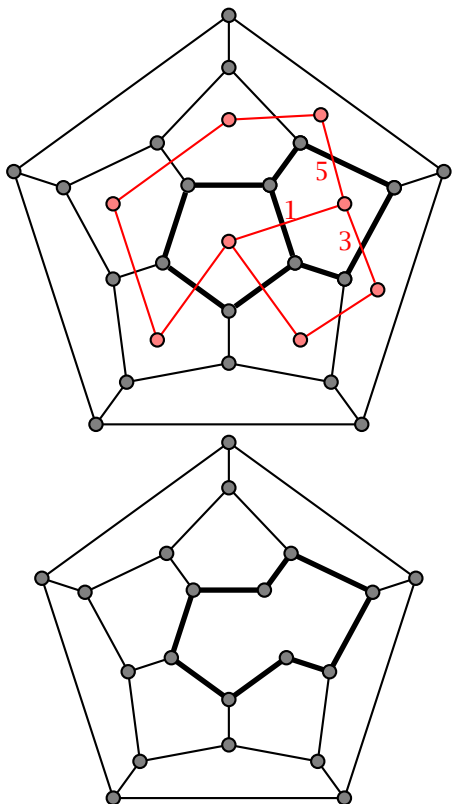
in unija teh predstavlja *oviro*. Če sedaj odstranimo vse povezave grafa G , ki jih ta *ovira* seka, dobimo dvodelni graf G (glej sliko 14).

■ **Najmanjša izmed ovir**

V prejšnjem koraku smo poiskali eno izmed *ovir*. Naš namen je poiskati najmanjšo med njimi.

Tukaj si pomagamo s polnim grafom na 12 vozliščih $K_{12}(G)$, v katerem vsako vozlišče predstavlja pentagonsko lice grafa G in vsaka povezava pot med pripadajočima vozliščema stopnje 5 v grafu G' . Povezavam grafa $K_{12}(G)$ dodamo uteži tako, da teža povezave med dvema vozliščema ustreza dolžini najkrajše poti v grafu G' med njima (glej sliko 15).

Sedaj grafu $K_{12}(G)$ poiščemo popolno prirejanje z najmanjšo vsoto uteži.



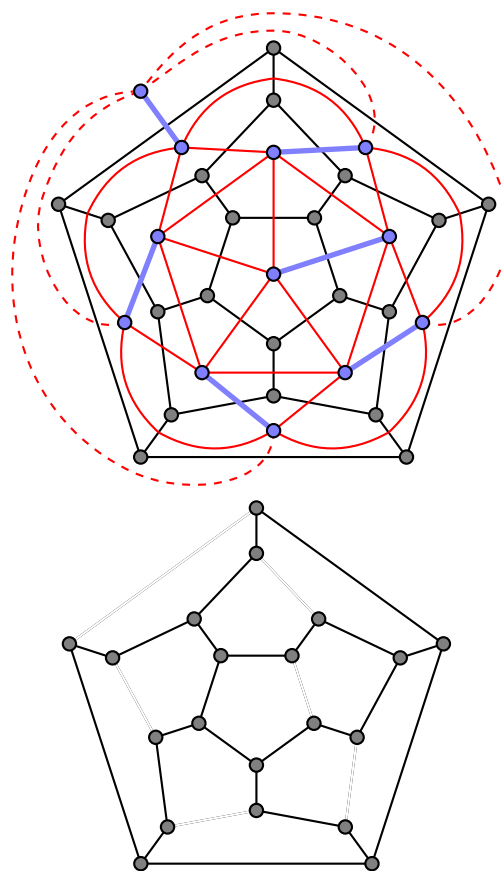
SLIKA 13.

Primeri poti različnih dolžin v dualu. Izberemo najkrajšo pot ter odstranimo povezave fullerena C_{20} , ki jih ta seka.

Ponovimo: *Prirejanje je popolno*, če se vsako vozlišče grafa v množici prirejanja pojavi natanko enkrat. In najmanjše prirejanje je tako, da ne obstaja prirejanje, katerega vsota uteži poti bi bila manjša. Tako dobimo unijo šestih povezav grafa $K_{12}(G)$, katerih vsota uteži je najmanjša možna, kar je prikazano na sliki 15.

Izbrane povezave grafa $K_{12}(G)$ pomenijo izbrane poti grafa G' . Če seštejemo povezave grafa G , ki jih te poti sekajo, dobimo taisto vsoto. To je torej najmanjše število povezav v grafu G , ki bi jih bilo potrebno odstraniti, da bi G postal dvodelen.

Tako smo izračunali oceno stabilnosti fullerena, ki ga predstavlja graf G .

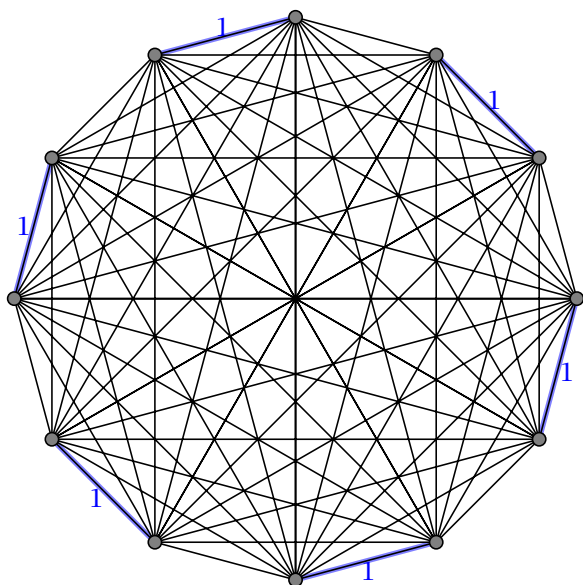


SLIKA 14.

Izberemo šest medsebojno nepovezanih poti duala in odstranimo povezave osnovnega grafa, ki jih ta pot seka. Dobimo dvodelni vpeti podgraf fullerena C_{20} .

V računalniškem svetu je ta postopek možno rešiti v polinomskem času. Najzahtevnejši del postopka je poiskati uteži v grafu $K_{12}(G)$, ki so razdalje med vozlišči stopnje 5 v G' . Ta del je možno rešiti v linearnem času $O(n)$. Potrebno je le še poiskati najmanjše popolno prirejanje, česar časovna zahtevnost je v splošnem $O(n^3)$, a ker ima naš graf $K_{12}(G)$ vedno 12 vozlišč, je časovna zahtevnost konstantna $O(12^3)$ ne glede na velikost grafa G . Torej je skupna časovna zahtevnost postopka $O(n)$.

Izjemna in vsestranska uporabnost molekule fulerena motivira in navdušuje mnoge raziskovalce, zato verjamemo, da boste o njej spoznali še veliko zanimivega.



SLIKA 15.

Grafu $K_{12}(C_{20})$ dodamo uteži. Zaradi simetrije so povezave vsakega vozlišča enako obtežene, in sicer v zaporedju: 1, 2, 1, 2, 1, 3, 2, 1, 1, 2, 1, 2. Če sedaj poiščemo najmanjše popolno prirejanje, dobimo unijo šestih disjunktnih povezav, katerih vsota uteži je 6.

Literatura

- [1] T. Došlič in W. D. Vukičević, *Computing the bipartite edge frustration of fullerene graphs*, Department of Informatics and Mathematics, Faculty of Agriculture, University of Zagreb, 2006.
- [2] M. Kren, *Prirejanja grafov in maturantski ples*, Presek 39 5, Ljubljana, 2011–2012.
- [3] R. Wilson in W. J. Watkins, *Uvod v teorijo grafov*, DMFA – založništvo, Ljubljana, 1997.
- [4] T. Malec, *Ravninski grafi* (seminarska naloga), Fakulteta za matematiko in fiziko, str. 12, Ljubljana, 2007.
- [5] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus in P. C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, San Diego, 1996.

× × ×

Križne vsote

REŠITEV S STRANI 12

↓ ↓ ↓

| | | | | | | | | |
|----|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| | 5 | 19 | | | | | | |
| 13 | 4 | 9 | | | | 3 | 14 | |
| 9 | 1 | 8 | 11 | | 8 | 2 | 6 | |
| | | 7 | 2 | 5 | 14 | 5 | 1 | 8 |
| | | | 15 | 6 | 1 | 8 | | |
| | | | | 15 | 9 | 6 | | |

× × ×

www.dmfa.si

www.dmfa-zaloznistvo.si

www.presek.si

www.obzornik.si