Distance vector of non tubical nanotube fullerenes of type-(5-0)

Amanda Babič, Aljaž Flus

Mentorja Riste Škrekovski, Janoš Vidali

28. marec 2025

1 Uvod

Definicija 1.1 *Vektor razdalje* d_u *je vektor, katerega* i*-ta koordinata predstavlja število vozlišč, ki so od izbranega vozlišča* u *oddaljeni natanko za* i*.*

Definicija 1.2 *Graf fulerena je 3-povezan, 3-regularen ravninski graf, sestavljen izključno iz petkotnih in šestkotnih ploskev.*

Opomba 1.1 *Po Eulerjevi formuli je število petkotnih ploskev vedno 12.*

Definicija 1.3 *Z* L_0 *začetni sloj kot množico vozličš, ki so sosednji s petkotnikom* p*, ki je središčni petkornik na začetku našega nanotuba in definiramo s* $F_0 = \{p\}$*. Za vsak* $j = 1, \ldots, k$ *množica plasti* F_j *vsebuje vse plasti, ki so sosednje z vozlišči iz* L_{j-1} *in niso v* F_{j-1}*. Podobno* L_j *vsebuje vsa vozlišča, ki so sosednja plasti is* F_j *in niso v* L_{j-1}*. Zato je nanotub sestavljen Iz* $k+1$ *plasti, kjer* L_0 *in* L_k *vsebujeta* 5 *vozličš, vsaka vmesna plast pa vsebuje* 10 *vozlišč.*

Definicija 1.4 *Naj bo* $e = uv$ *povezava v grafu* C_{10k}*, kjer je* $u \in L_{j-1}$ *in* $v \in L_j$*. Vozlišču* u *rečemo odhodno vozlišče za* L_{j-1}*, vozlišču* v *pa pravimo da je prihodno vozlišče za* L_j*. Tukaj lahko opazimo, da imamo v vsaki plasti* 5 *odhodnih in* 5 *prihodnid vozlišč, ki se zaporedoma izmenjujejo.*

Definicija 1.5 *Naj bo* G *neprazen končen povezan graf in* v *vozlišče v grafu* G*. Distančna particija* $\pi_d(v)$ *relativno na* v *je skupina disjunktnih množic:*

- $D_0 = v$,
- $D_i = u : d(v,u) = i, i = 1, 2, 3, \ldots, ecc(v)$,
  kjer je $ecc(v)$ *ekscentričnost vozlišča* v*, t.j.* $ecc(v) = \max\limits_{u \in V(G)} d(v,u)$

Definicija 1.6 *Naj bo* G *neprazen končen povezan graf in* v *vozlišče v* G*. Vektor distančne particije* $DV(v) \in \mathbb{N}^{diam(G)}$ *za vozlišče* v *definiramo kot*

$$DV(v) = (n_0(v), n_1(v), \ldots, n_{diam(G)}(v)),$$

kjer je $n_i(v) = |D_i|$ *za* $i = 0, 1, \ldots, ecc(v)$*, in* $n_i(v) = 0$ *za* $ecc(v) < i \leq diam(G)$*.*

V naslednjem delu poročila bomo zaradi večje preglednosti izpustili ničelne komponente vektorja $DV(v)$. Pripomnemo lahko še da bo $n_0(v) = 1$ za vsak $v \in V(G)$

2 Preverjanje izrekov

Lema 2.1 *Če imamo*

$$diam(C_{10k}) = \begin{cases} 2k+1, k=2; \\ 2k, k \in \{3,4\}; \\ 2k-1, k \geq 5. \end{cases}$$

Potem lahko izračunamo ekscentričnosti.
V kodi sva preverila to lemo za zečetnih 20 k in so rezultati pravilni. Iz tega sklepamo da to velja za vse $k \in \mathbb{N}$

Lema 2.2 *Za ekscentričnosti vozlišč v grafu C_{10k} imamo:*

- *Če je $k = 2$, potem je $ecc(v) = 5$ ta vse $v \in V(C_{10k})$.*
- *Če je $k = 3$, potem je $ecc(v) = 6$ ta vse $v \in V(C_{10k})$.*
- *Če je $k \geq 4$ in $v \in L_j^{in} \cup L_{l-j}^{out}$ za $1 \leq j \leq \lfloor k/2 \rfloor$ potem je*

  $$ecc(v) = 2(k-j) + \delta,$$

  kjer je $\delta = 2$ za $(k,j) = (4,2)$, $\delta = 1$ za $(k,j) \in \{(4,1),(5,2),(6,3)\}$ in $\delta = 0$ sicer.
- *Če je $k \geq 4$ in $v \in L_j^{out} \cup L_{k-j}^{in}$ za $0 \leq j \leq \lfloor k/2 \rfloor$ potem je*

  $$ecc(v) = 2(k-j) - 1 + \delta$$

  kjer je $\delta = 2$ za $(k,j) \in \{(4,1),(5,2)\}$, $\delta = 1$ za $(k,j) \in \{(4,0),(5,1),(6,2),(7,3)\}$ in $\delta = 0$ sicer.

Lemo 2 sva preverila in ugotovila, da velja za $k = 2$ in $k = 3$. Vendar pa se pri večjih vrednostih k izkaže, da lema ne drži, pri čemer ni očitne rešitve, kako bi jo ustrezno popravila.

Za $k \geq 2$ in za vsak $j = 0, 1, \ldots, k$ plast L_j razdeli naš nanotub na dva disjuntna dela. Lev del sestavljajo plasti L_i za $i = 0, 1, \ldots, j-1$, desni del pa je sestavljen iz plasti L_i za $I = j+1, \ldots, k$. Z $L(v)$ označimo levo stran particije, z $R(v)$ pa desno stran. Z $D(v)$ pa označimo distančni vektor znotraj plasti L_j.

Trditev 2.1 *Naj bo $k \geq 2$ in naj bo v vozlišče iz grafa C_{10k} tak da velja $v \in L_j, 0 \leq j \leq k$. Potem velja*

$$D(v) = \begin{cases} (1,2,2), \text{če } j \in \{0,k\}, \\ (1,2,2,2,2,1), \text{sicer}, \end{cases}$$

$L(v)$	$v \in L_j^{in}$	$v \in L_j^{out}$
$j = 1$	$[0, 1, 2, 2, 0, 0]$	$[0, 0, 2, 2, 1, 0]$
$j = 2, k = 2$	$[0, 1, 4, 6, 3, 1]$	
$j = 2, k \geq 3$	$[0, 1, 2, 4, 4, 3, 1]$	$[0, 0, 2, 3, 5, 4, 1]$
$j = 3, k = 3$	$[0, 1, 4, 6, 6, 6, 2]$	
$j = 3, k \geq 4$	$[0, 1, 2, 4, 5, 7, 5, 1]$	$[0, 0, 2, 3, 5, 6, 7, 2]$
$j = 4, k = 4$	$[0, 1, 4, 6, 6, 6, 6, 5, 1]$	
$j = 4, k \geq 5$	$[0, 1, 2, 4, 5, 7, 7, 7, 2]$	$[0, 0, 2, 3, 5, 6, 7, 6, 6]$
$j = 5, k = 5$	$[0, 1, 4, 6, 6, 6, 6, 5, 6, 5]$	
$j = 5, k \geq 6$	$[0, 1, 2, 4, 5, 7, 7, 7, 6, 6]$	$[0, 0, 2, 3, 5, 6, 7, 6, 6, 5, 5]$
$6 \leq j \leq k-1, k \geq 7$	$[0, 1, 2, 4, 5, 7, 7, 7, 6, 6, 5^{\#2(j-5)}]$	$[0, 0, 2, 3, 5, 6, 7, 6, 6, 5^{\#2(j-4)}]$
$j = k, k \geq 7$	$[0, 1, 4, 6, 6, 6, 6, 5, 6, 5^{\#(2k-9)}]$	

Tabela 1: Vektorji distančne particije, kjer gledamo samo vektorje ki so levo od našega vozlišča. Notacija $\#5^k$ nam predstavlja število petic zapored na koncu vektorja.

in

$$DV(v) = L(v) + D(v) + R(v).$$

Če imamo $u \in L_j^{in}$ in $v \in L_{k-j}^{out}$ zaradi simetrije velja $R(u) = L(v)$. Velja tudi obratno, če imamo $u \in L_j^{out}$ in $v \in L_{k-j}^{in}$ prav tako velja $R(u) = L(v)$. Zaradi tega je dovlj izračunati samo $L(v)$. Izračuni so objavljeni v Tabela 1.

V Tabela 1 opazimo, da se distančni vektorji razlikujejo za vozlišča znotraj iste orbite. To je posledica dejstva, da so vozlišča lahko bodisi vhodna bodisi izhodna. Vidimo, da je prvo število v vseh vektorjih vedno enako 0, saj upoštevamo le vozlišča v orbitah na levi strani izbranega vozlišča. Pri izhodnih vozliščih opazimo, da je tudi drugi element enak 0, kar pomeni, da sta potrebni vsaj dve potezi, da zapustimo svojo orbito. Poleg tega opazimo, da se distančni vektorji od $k = 7$ naprej stabilizirajo.

Izrek 2.1 *Naj bo $k \geq 10$. Dodatno naj bo $x =$ 'in', če je k sod in $x =$ 'out', če je k lih. Tako lahko izračunamo vektorje distančne particije za vsa vozlišča C_{10k}. Te vektorji so napisani v Tabela 2.*

V Tabela 2 lahko opazimo, da distančni vektor ni odvisen zgolj od tega, ali je vozlišče v vhodno ali izhodno, temveč tudi od tega ali je k sodo ali liho število.

	Vektor distanc DV(v)
$j = 0$ in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 6, 6, 6, 6, 5, 6, 5^{\#(2k-9)}]$
$j = 1, k$ sod in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 7, 7, 7, 7, 6, 6, 5^{\#(2k-12)}]$
$j = 1, k$ sod in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 8, 8, 8, 7, 7, 6, 6, 5^{\#(2k-10)}]$
$j = 1, k$ lih in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 8, 8, 8, 7, 7, 6, 6, 5^{\#(2k-14)}]$
$j = 1, k$ lih in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 7, 7, 7, 7, 6, 6, 5^{\#(2k-12)}]$
$j = 2, k$ sod in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 11, 10, 8, 6, 6, 5^{\#(2k-12)}]$
$j = 2, k$ sod in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 12, 8, 7, 6, 6, 5^{\#(2k-14)}]$
$j = 2, k$ lih in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 11, 10, 8, 6, 6, 5^{\#(2k-14)}]$
$j = 2, k$ lih in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 12, 8, 7, 6, 6, 5^{\#(2k-16)}]$
$j = 3, k$ sod in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 9, 6, 6, 5^{\#(2k-16)}]$
$j = 3, k$ sod in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 12, 7, 6, 5^{\#(2k-14)}]$
$j = 3, k$ lih in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 9, 6, 6, 5^{\#(2k-18)}]$
$j = 3, k$ lih in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 12, 7, 6, 5^{\#(2k-16)}]$
$j = 4, k$ sod in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 8, 5^{\#(2k-16)}]$
$j = 4, k$ sod in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 6, 5^{\#(2k-18)}]$
$j = 4, k$ lih in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 8, 5^{\#(2k-18)}]$
$j = 4, k$ lih in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 6, 5^{\#(2k-20)}]$
$j = 5, k > 12,$ sod in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10, 5^{\#(2k-21)}]$
$j = 5, k > 12,$ sod in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 5^{\#(2k-19)}]$
$j = 5, k > 13,$ lih in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10, 5^{\#(2k-23)}]$
$j = 5, k > 13,$ lih in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 5^{\#(2k-21)}]$
$j > 5, k > 14,$ sod in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(2j-10)}, 5^{\#(2k-4j+1)}]$
$j > 5, k > 14,$ sod in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(2j-9)}, 5^{\#(2k-4j-1)}]$
$j > 5, k > 15,$ lih in $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(2j-9)}, 5^{\#(2k-4j-3)}]$
$j > 5, k > 15,$ lih in $v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(2j-10)}, 5^{\#(2k-4j-1)}]$
$j = \lfloor k/2 \lfloor, k$ sod za vsak $v \in L_j$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(k-10)}, 5]$
$j = \lfloor k/2 \lfloor, k$ lih za vsak $v \in L_j$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(k-11)}, 5]$

Tabela 2: Vektorji distančne particije za graf C_{10k}, kjer je $k \geq 10$. Notaciji $\#5^k$ in $\#10^k$, nam povejo število petic oziroma desetic na koncu distančnega vektorja

3 Indeksi na podlagi distanc v $(5, 0)$ nanotubu

V tem oddelku bomo testirali različne indekse ki jih izračunamo na podlagi distanc v grafu C_{10k}

Definicija 3.1 *Indeks ekscentrične povezanosti za graf G izračunamo tako*

$$\xi_c(G) = \sum_{v \in V(G)} deg_G(v) ecc_G(v),$$

kjer z $deg_G(v)$ označimo stopnjo vozlišča v v grafu G.

Definicija 3.2 *Indeks sosednje ekscentričnosti povezanosti za graf G izračunamo tako*

$$\xi^{ad}(G) = \sum_{v \in V(G)} \frac{SG(v)}{ecc_G(v)},$$

kjer z $SG(v)$ označimo seštevek stopenj vozlišč, ki so sosenja vozlišču v.

Definicija 3.3 *Prvi Zagrebški indeks povezanosti je definiran kot*

$$\xi_1(G) = \sum_{uv \in E(G)} (ecc_G(u) + ecc_G(v)),$$

in drugi Zagrebški indeks povezanosti je definiran kot

$$\xi_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} (ecc_G(u) ecc_G(v)).$$

Izrek 3.1 *Naj bo $k \geq 8$. Potem velja:*

1. $\xi_c(C_{10k}) = 45k^2 - 15k$,
2. $90 \cdot \ln(2) \leq \xi^{ad}(C_{10k}) \leq 90 \cdot (\ln(2k-1) - \ln(k-1))$,
3. $\xi_1(C)_{10k} = 45k^2 - 15k$
4. $\xi_2(C_{10k}) = 35k^3 - \frac{45}{2}k^2 + \delta$, *kjer $\delta = -5k + 10$, če je k sodo in $\delta = 15/2 - 5k$, če je k liho.*

Ta izrek sva preverila in res drži v vseh primerih. Opazila pa sva tudi da druga točka velja za $k \geq 6$.

Definicija 3.4 *Wienerjev indeks je definiran kot vsota distanc v grafu G*

$$W(G) = \sum_{\{u,v\} \in V(G)} dist(u, v).$$

Hiper Wienerjev indeks je definiran kot

$$WW(G) = \sum_{\{u,v\} \in V(G)} (dist(u, v) + dist^2(u, v)).$$

Recipročni komplementarni Wienerjev indeks je definiran kot

$$RCW(G) = \sum_{\{u,v\} \in V(G)} \frac{1}{diam(G) + 1 - dist_G(u, v)}.$$

Izrek 3.2 *Naj bo $k \geq 10$ in t tak, da velja $10 \leq t \leq 2k - 1$. Tedaj velja:*

$$\begin{aligned}
W_1(C_{10k}) &= 15k, & W_2(C_{10k}) &= 30k, \\
W_3(C_{10k}) &= 45k - 30, & W_4(C_{10k}) &= 60k - 80, \\
W_5(C_{10k}) &= 70k - 135, & W_6(C_{10k}) &= 70k - 180, \\
W_7(C_{10k}) &= 65k - 220, & W_8(C_{10k}) &= 60k - 230, \\
W_9(C_{10k}) &= 55k - 250, & W_t(C_{10k}) &= 50k - 25t.
\end{aligned}$$

Izrek drži.

Izrek 3.3 *Naj bo $k \geq 10$. Tedaj velja:*

$$\begin{aligned}
W(C_{10k}) &= \frac{100}{3}k^3 + \frac{1175}{3}k - 670, \\
WW(C_{10k}) &= \frac{100}{3}k^4 + \frac{100}{3}k^3 - \frac{25}{3}k^2 + \frac{10175}{3}k - 7200, \\
RCW(G) &= R_k + 50k - 250.
\end{aligned}$$

Pravilna formula za R_k je:

$$R_k = \sum_{i=1}^{9} \frac{W_i(C_{10k})}{2k - i}.$$

Izrek 3.4 *Naj bo $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0, 1\}$. Označimo*

$$W_9^\alpha = \sum_{t=1}^{9} t \cdot W_t(C_{10k}).$$

Tedaj velja:

$$W_9^\alpha + L < W^\alpha(C_{10k}) < W_9^\alpha + P,$$

kjer sta L in P spodnja in zgornja meja, določeni na sledeč način:

$$L = \begin{cases} \frac{50k}{\alpha+1}\left((2k)^{\alpha+1} - 10^{\alpha+1}\right) - \frac{25}{\alpha+2}\left((2k-1)^{\alpha+2} - 9^{\alpha+2}\right) & \text{če } \alpha < 0, \alpha \neq -1, -2 \\ \frac{50k}{\alpha+1}\left((2k-1)^{\alpha+1} - 9^{\alpha+1}\right) - \frac{25}{\alpha+2}\left((2k-1)^{\alpha+2} - 9^{\alpha+2}\right) & \text{če } 0 < \alpha < 1 \\ \frac{50k}{\alpha+1}\left((2k-1)^{\alpha+1} - 9^{\alpha+1}\right) - \frac{25}{\alpha+2}\left((2k)^{\alpha+2} - 10^{\alpha+2}\right) & \text{če } \alpha > 1 \\ 50k\left(\ln(2k) - \ln(10)\right) & \text{če } \alpha = -1 \\ -50k\left((2k)^{-1} - 10^{-1}\right) - 25\left(\ln(2k-1) - \ln(9)\right) & \text{če } \alpha = -2 \end{cases}$$

$$P = \begin{cases} \frac{50k}{\alpha+1}\left((2k-1)^{\alpha+1} - 9^{\alpha+1}\right) - \frac{25}{\alpha+2}\left((2k)^{\alpha+2} - 10^{\alpha+2}\right) & \text{če } \alpha < 0, \alpha \neq -1, -2 \\ \frac{50k}{\alpha+1}\left((2k)^{\alpha+1} - 10^{\alpha+1}\right) - \frac{25}{\alpha+2}\left((2k)^{\alpha+2} - 10^{\alpha+2}\right) & \text{če } 0 < \alpha < 1 \\ \frac{50k}{\alpha+1}\left((2k)^{\alpha+1} - 10^{\alpha+1}\right) - \frac{25}{\alpha+2}\left((2k-1)^{\alpha+2} - 9^{\alpha+2}\right) & \text{če } \alpha > 1 \\ 50k\left(\ln(2k-1) - \ln(9)\right) - 50k + 250 & \text{če } \alpha = -1 \\ -50k\left((2k-1)^{-1} - 9^{-1}\right) - 25\left(\ln(2k) - \ln(10)\right) & \text{če } \alpha = -2 \end{cases}$$

Kljub večkratnim preverjanjem in različnim pristopom nikakor ne uspe priti do pravilnega rezultata, kjer bi izrek veljal.

Zanimivo pa je, da izrek drži za vse α, razen za $\alpha = -2$, če odstranimo $W9$ iz ocen:

$$L < W^\alpha(C10k) < P.$$

To kaže na morebitno napačno vključitev W_9 v meje ali potrebo po drugačnem načinu upoštevanja tega člena.

Na zagovoru bodo predstavljeni tudi različni indeksi in njihove lastnosti. S pomočjo grafov bo analiza še bolj nazorna, kar omogoča boljše razumevanje strukture in povezav v nanotubih.

Pogledali si bomo sledeče indekse:

1. **Recipročno komplementarni Wienerjev indeks**:

$$RCW(G) = \sum_{u,v \in V(G)} \frac{1}{d + 1 - \mathrm{dist}_G(u,v)}$$

2. **Sum-Balaban indeks**:

$$SJ(G) = \frac{m}{m - n + 2} \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{(w(u) + w(v))^{1/2}}$$

3. **Generaliziran Wienerjev indeks**:

$$W_\lambda(G) = \sum_{u,v \in V(G)} \mathrm{dist}^\lambda(u,v)$$

4. **Indeks ekscentrične povezanosti**:

$$\xi_c(G) = \sum_{v \in V(G)} \deg_G(v) \cdot \mathrm{ecc}_G(v)$$

5. **Indeks sosednje ekscentričnosti**:

$$\xi_{\mathrm{ad}}(G) = \sum_{v \in V(G)} \frac{\mathrm{SG}(v)}{\mathrm{ecc}_G(v)}$$

6. **Prvi ekscentrični povezovalni indeks**:

$$\xi_1(G) = \sum_{uv \in E(G)} (\mathrm{e}_G(u) + \mathrm{e}_G(v))$$

7. **Drugi ekscentrični povezovalni indeks**:

$$\xi_1^*(G) = \sum_{uv \in E(G)} (\mathrm{e}_G(u) \cdot \mathrm{e}_G(v))$$