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

Amanda Babič, Aljaž Flus

Mentorja Riste Škrekovski, Janoš Vidali

13. 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*

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

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

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 $v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 6, 5^{\#(2k-20)}]$
$j = 5, k > 12, \text{sod in } v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10, 5^{\#(2k-21)}]$
$j = 5, k > 12, \text{sod in } v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 5^{\#(2k-19)}]$
$j = 5, k > 13, \text{lih in } v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10, 5^{\#(2k-23)}]$
$j = 5, k > 13, \text{lih in } v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 5^{\#(2k-21)}]$
$j > 5, k > 14, \text{sod in } v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(2j-10)}, 5^{\#(2k-4j+1)}]$
$j > 5, k > 14, \text{sod in } v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(2j-9)}, 5^{\#(2k-4j-1)}]$
$j > 5, k > 15, \text{lih in } v \in L_j^{out}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(2j-9)}, 5^{\#(2k-4j-3)}]$
$j > 5, k > 15, \text{lih in } v \in L_j^{in}$	$[1, 3, 6, 9, 12, 14, 14, 13, 12, 11, 10^{\#(2j-10)}, 5^{\#(2k-4j-1)}]$
$j = \lfloor k/2 \lfloor, k$ 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: Vewktorji 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