

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

Amanda Babič, Aljaž Flus

Mentorja Riste Škrekovski, Janoš Vidali

19. 12. 2024

1 Uvod

Nanostrukture, kot so fulereni, predstavljajo eno najbolj zanimivih odkritij na področju nanotehnologije in kemije. Med temi strukturami so še posebej zanimivi fulereni tipa $(5, 0)$, ki zaradi svoje posebne geometrije in ostalih lastnosti omogočajo vpogled v kompleksne topološke in matematične strukture. Ti fulereni so definirani z $n = 10k$ oglišči in imajo premer $\frac{n}{5} - 1$. Njihova geometrija vključuje dolg cilindrični del, sestavljen iz šestkotnikov, ki je na obeh straneh zaključen s šestimi petkotniki. Ti grafi so simetrični, kar bomo uporabili v nadaljevanju naloge. Razumevanje razdalj med točkami v teh grafih je ključno za odkrivanje njihovih lastnosti. V tem okviru so vozlišča grafov razporejena v k ločenih orbitah, pri čemer vsaka orbita vsebuje točno 10 vozlišč.

Glavni cilj te naloge je čim bolj natančno izračunati vektor razdalj za izbrano vozlišče iz vsake orbite.

2 Definicije

Definicija 2.1 Vektor razdalje d_u je vektor, katerega i -ta koordinata predstavlja število oglišč, ki so od izbranega oglišča u oddaljeni natanko za i .

Definicija 2.2 Graf fulerena je 3-povezan, 3-regularen ravninski graf, sestavljen izključno iz petkotnih in šestkotnih ploskev.

Opomba 2.1 Po Eulerjevi formuli je število petkotnih ploskev vedno 12.

Definicija 2.3 *Nanocевke so cilindrični fullerenski grafi, pri katerih sta oba konca cilindra zaprta s podgrafoma, ki sta sestavljena iz šestih petkotnikov.*

Cilindrični del nanocевke je določen s (p_1, p_2) -vektorjem, ki opisuje način ovijanja neskončne mreže šestkotnikov, da nastane cilindrična struktura. Števili p_1 in p_2 označujeta koeficiente linearne kombinacije enotskih vektorjev a_1 in a_2 , pri čemer $p_1 a_1 + p_2 a_2$ povezuje isto točko na mreži, ko jo zavijemo v cilindrično obliko.

Opomba 2.2 *Predpostavimo, da velja $p_1 \geq p_2$, s čimer se izognemo simetričnemu opisu iste konfiguracije.*

Definicija 2.4 *Wienerjeva dimenzija grafa je število različnih vrednosti razdalj med pari oglišč v grafu.*

Opomba 2.3 *Za graf tipa $(5, 0)$ z $n = 10k$ oglišči velja, da je Wienerjeva dimenzija enaka k , če je $k \geq 3$.*

Zaradi simetrije grafa tipa $(5, 0)$ je mogoče predvideti, da se vozlišča razporejajo v določene "razdaljne razrede". Wienerjeva dimenzija to potrjuje, saj zbere vse vozlišča z enakimi razdaljami v iste razrede.

To poenostavi analizo razdalj v grafu. Namesto da za vsak par vozlišč obravnavamo njihove razdalje posamično, lahko uporabimo Wienerjevo dimenzijo za njihovo kategorizacijo.