

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 od najbolj zanimivih odkritij na področju nanotehnologije in kemije. Med temi strukturami so že posebj zanimivi fulereni tipa $(5, 0)$, ki zaradi svoje posebne geometrije in 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, ter zaključnega dela sestavljenega iz petkotnikov. Te 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 orbit, 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 oddaljena natanko za i .

Definicija 2.2 Graf fullarena 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 Nanocevke so cilindrični fullerenski grafi, pri katerih sta oba konca cilindra zaprta s podgrafoma, sestavljenima iz šestih petkotnikov.

Cilindrični del nanocevke je določen z (p_1, p_2) -vektorjem, ki opisuje način ovijanja neskončne mreže šestkotnikov, da nastane cilindrična struktura. Številki 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.*