XIII. FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2008. március 14-15.

FULLERÉN KOMBINATORIKUS SZERKEZETÉNEK JELLEMZÉSE SPIRÁLKÓD FELHASZNÁLÁSÁVAL

Réti Tamás, Bitay Enikő

Abstract

Combinatorial properties of fullerenes are investigated. Starting with the traditional spiral code, novel topological shape indices are introduced for the structural characterization of fullerenes. It is demonstrated that using appropriately defined shape indices, the stability of fullerenes can be successfully predicted.

Összefoglalás

Fullerének kombinatorikus tulajdonságait vizsgáltuk. A hagyományos spirális kódot felhasználva, új topológiai alaktényezőket származtattunk fullerének topológiai szerkezetének jellemzésére. Demonstráltuk, hogy alkalmasan definiált topológiai alaktényezők segítségével a fullerének stabilitása előre becsülhető, predikálható.

1. Bevezetés

Mint ismeretes a fullerének 5- és 6-szögekből álló poliédereknek tekinthetők. Közös jellemzőjük, hogy egy n csúcsszámú C_n fullerént, (ahol $n \geq 20$, és $n \neq 22$) pontosan $F_5=12$ számú ötszög és $F_6=(n/2)-10$ számú hatszög alkot. Fullerének topológiai szerkezetének jellemzésére számos ún. topológiai alaktényezőt javasoltak és alkalmaztak az elmúlt évtizedben. Ezek részben a fullerén élgráfjának spektrális jellemzői, részben az 5- és 6-szögek egymáshoz kapcsolódását számszerűen jellemző lokális vagy globális topológiai mennyiségek [1-11].

A következőkben olyan új típusú topológiai alaktényezőket definiálunk, amelyek közös sajátossága, hogy egyszerű módon származtathatók, közvetlenül generálhatók a fullerének kódolásához elterjedten alkalmazott spirális kódok felhasználásával. Példákon demonstráljuk, hogy az újonnan bevezetett alaktényezők sikerrel alkalmazhatók különféle fullerén-izomerek stabilitásának előre jelzésére, azaz predikciójára.

2. Fullerének spirális kódja

Fulleréneknek kétféle spirális kódját szokás megkülönböztetni, az ún. teljes és az ún. redukált spirális kódot. Az előbbi az egymással szomszédos 5 és 6-szögek sorozata, az utóbbit kizárólag 12 ötszög pozícióját feltüntető pozitív egész számok sorozata alkotja. A spirális kód definiálásakor mindig 5-szögből szokás kiindulni, azaz definíció szerint az első elem a kódban mindig 5-szöget jelöl [1].

Egy n csúcsszámú fullerén teljes spirális kódjának hossza, azaz elemeinek száma megegyezik a poliéderrel reprezentált fullerén lapjainak F lapszámával, azaz $F=2+2/n$. Következésképpen a C_n fullerén teljes spirális kódját az F komponensű

$$\mathbf{k} = [K_1, K_2, \dots, K_i, \dots, K_F] \quad (1)$$

vektor egyértelműen jellemezi. Például a C_{60} Buckminster fullerén teljes spirális kódját az alábbi, $F=32$ elemszámú számsorozat reprezentálja [1]:

$$[\underline{5}, 6, 6, 6, 6, 6, \underline{5}, 6, \underline{5}, 6, \underline{5}, 6, \underline{5}, 6, \underline{5}, 6, \underline{5}, 6, \underline{5}, 6, 6, 6, 6, 6, \underline{5}] \quad (2)$$

Mivel az ötszögek száma mindig 12, ezért bármely fullerén topológiai szerkezetének kódolásához elégséges csupán az ötszögek előfordulási pozícióját (sorszámát) a teljes spirális kódban megadni. Ezen egyszerűsítés eredményeként származtatjuk a redukált spirális kódot, amely a 12 elemű

$$\mathbf{p} = [P_1, P_2, \dots, P_j, \dots, P_{12}] \quad (3)$$

vektorral azonosítható. Ennek első eleme mindig 1, a többi elem pozitív egész számok szigorúan monoton növekedő sorozata. Nyilván az utolsó P_{12} elem értéke F -nél nagyobb szám nem lehet. A fentiek értelmében a hatvan karbon atomot tartalmazó Buckminster-fullerén redukált spirális kódja: [1,7,9,11,13,15,18,20,22,24,26,32].

3. Spirális kód alapján származtatott topológiai alaktényezők

A spirális kód két változatának felhasználásával különféle topológiai alaktényezők származtathatók, amennyiben feltételezzük, hogy a vizsgált fullerének egy véges halmazára vonatkozóan a spirális kód egyértelműen definiált.

A) Ha teljes spirális kódból indulunk ki, célszerű mindenek előtt megvizsgálni a kódban a két szomszédos szám (egymást követő sokszög-oldalszám) különbségét, nevezetesen a $\Delta K_i = K_{i+1} - K_i$ ($i=1,2,\dots,11$) mennyiségeket. Ezek lehetséges értékei -1, 0 és +1, attól függően, hogy a kódban az 5 és 6 számok milyen sorrendben követik egymást. Defináljuk P_T topológiai alaktényezőt a

$$P_T = \sum_{\{\Delta K_i=1\}} \Delta K_i - \sum_{\{\Delta K_i=-1\}} \Delta K_i \quad (4)$$

összefüggéssel. Az ily módon értelmezett P_T alaktényező, amelyet átmenet-paraméternek (transition parameter) nevezünk, megadja a kódban előforduló (5,6) és (6,5) átmenetek teljes számát, és közvetve információt nyújt a fullerén topológiai szerkezetéről. Amint a későbbiekben demonstrálni fogjuk, egy fullerén annál inkább stabilnak tekinthető, minél nagyobb a P_T egész szám értéke. Amint a (2) kódból megállapítható, a Buckminster-fullerénre vonatkozóan $P_T = 22$. (Ez egyébként a maximális

nagyságú alaktényező, amennyiben valamennyi C 60 izomerre kiszámítjuk P_T értékét.)

B) A (3) formulával reprezentált redukált spirális kód ugyancsak alkalmas topológiai alaktényezők származtatásához. E célból első lépésben a redukált spirális kód elemeiből generálunk egy ún. differenciális spirál-kódot. A differenciális spirál-kód egy 11 elemű $\mathbf{d}$ vektorral reprezentálható, ennek D_j elemeit a $D_j = P_{j+1} - P_j$ ($j=1,2,...11$) képlettel határozhatjuk meg. A definícióból adódóan D_j értékei egy vagy egynél nagyobb pozitív egész számok. A Buckminster-fullerénre vonatkozóan a differenciális spirális kód: [6,2,2,2,2,3,2,2,2,2,6]. A differenciális spirális kódot felhasználva az alábbi két topológiai alaktényezőt értelmeztük:

$$S_P = \sqrt{X_{P,2} - X_{P,1} * X_{P,1}} \quad (5)$$

valamint

$$S_{PR} = 100 \frac{S_P}{X_{P,1}} \quad (6)$$

A fenti képletekben $X_{P,1}$ és $X_{P,2}$ a differenciális spirál-kód komponenseinek első és második momentuma, nevezetesen

$$X_{P,k} = \frac{\sum_{j=1}^{11} D_j^k}{11} \quad (7)$$

ahol $k=1$ és 2 . A két topológiai alaktényező közül (5) a spirál-kód komponenseinek szórását, (6) pedig százalékos relatív szórását definiálja. Mint látni fogjuk, a fentebb bevezetett topológiai alaktényezők alkalmasak a fullerén-stabilitás előrejelzésére. Későbbi vizsgálatainkból arra következtettünk, hogy egy fullerén annál inkább tekinthető stabilnak, minél kisebb S_P illetve S_{PR} értéke.

4. Duális pentagon-távolság mátrix alapján származtatott topológiai alaktényezők

Abból a célból, hogy az imént bevezetett új topológiai alaktényezők diszkriminációs képességét átfogóan minősíteni lehessen, az összehasonlító elemzésekhez felhasználtuk a szakirodalomból már korábban ismert és alkalmazott alaktényezőket is. Ezek közé tartozik a pentagon-index, N_p , a rezisztencia távolság, R_T , az izolációs index, IS [1,4,5,9,10,11], valamint még két további speciális alaktényező (S_V és S_{VR}), amelyek főleg nagy méretű (60-nél nagyobb számú karbon atomot tartalmazó) fullerének strukturális jellemzésekor bizonyulnak hatékonyak. Az utóbbi két topológiai alaktényező értelmezéséhez az ún. duális pentagon-távolság mátrix elemei, pontosabban a mátrixelemek nagyság szerinti eloszlása szolgál kiindulási alapul.

A duális pentagon-távolság mátrix $\mathbf{M_D}$ egy $[12] \times [12]$ méretű kvadratikuss és szimmetrikus mátrix, amelynek főátlójában zérus elemek vannak. A mátrix származtatásához első lépésben a vizsgált fullerén duálisát (azaz a megfelelő duális poliédert) kell előállítani. E duális poliéder pontosan $V_5 = 12$ darab ötfokú csúcsot és $V_6 = (n/2) - 10$ darab hatfokú csúcsot tartalmaz. Második lépésben a 12 darab sorszámozott X_i ($i=1,2,\dots,12$) ötfokú csúcs egymástól való távolságát határozzuk meg. Ezen $d(X_i, X_j)$ távolságok – amely a gráfban a csúcsok közötti legrövidebb út hosszával azonos –, képezik majd az $\mathbf{M_D}$ duális pentagon-távolság mátrix nem-negatív $m_D(i,j)$ elemeit. Az $m_D(i,j)$ elemek értéke 1 vagy ennél nagyobb pozitív szám. Nyilván $m_D(i,j)$ nagyobb egynél, ha mind a 12 ötszög izolált, azaz két ötszögnek nincs közös éle. Legyen f_r azon mátrix-elemek száma, amelynek értéke éppen r , ahol $r \geq 1$ pozitív egész szám. Ekkor

$$\sum_{r \geq 1} f_r = 2 \binom{12}{2} = 2 * 66 = 132 \quad (8)$$

Az (r, f_r) adatpárok egy diszkrét valószínűség eloszlást határoznak meg, ennek statisztikai jellemzői felhasználhatók fullerének topológiai szerkezetének jellemzésére. Felhasználva az (r, f_r) adatpárokat, az alábbi két topológiai alaktényezőt értelmeztük:

$$S_V = \sqrt{X_{V,2} - X_{V,1} * X_{V,1}} \quad (9)$$

és

$$S_{VR} = 100 \frac{S_V}{X_{V,1}} \quad (10)$$

A fenti képletekben $X_{V,1}$ és $X_{V,2}$ a valószínűség eloszlás első és második momentuma, nevezetesen

$$X_{V,k} = \frac{\sum_{r \geq 1} r^k f_r}{132} \quad (11)$$

ahol $k=1$ és 2 . A két topológiai alaktényező közül (9) az r valószínűségi változó szórását, (10) pedig százalékos relatív szórását reprezentálja. A fenti képletekkel definiált topológiai alaktényezők alkalmasak arra, hogy az ötszöglapok egymáshoz viszonyított „távolságának” egyenletességét (illetve a távolságok fluktuációját) számszerűen is jellemezzük. Nem alaptalan az a feltételezés, hogy minél kisebb a $d(X_i, X_j)$ távolságok szórása, annál inkább stabilnak tekinthető egy fullerén. Az 1. ábra példaként a C 40 :1 fullerén izomer, valamint duálisának Schlegel diagramját illusztrálja. A C 40 :1 fullerén izomerre vonatkozóan az $\mathbf{M}_D$ mátrix elemeinek valószínűség-eloszlását az $f_1=40$, $f_2=20$, $f_3=40$, $f_4=30$ és $f_5=2$ adatok reprezentálják, ezek függvényeként számított topológiai alaktényezők: $S_V = 1,181$ és $S_{VR} = 47,35\%$.

1. ábra. C40 :1 fullerén-izomer (a) és duálisának (b) Schlegel diagramja

A hagyományos valamint az újonnan bevezetett topológiai alaktényezők gyakorlati alkalmazhatóságnak tesztelése és értékelése végett vizsgálatinkat kiterjesztettük konkrét fullerén-izomerek geometriai szerkezetének jellemzésére. E vizsgálatokat alapvetően C40, C84 és C78 típusú fullerén-izomerek stabilitásának predikciójára koncentráltuk.

5. A C40 fullerén izomerek kombinatorikus szerkezetének minősítése

A C40 fullerénnek pontosan 20 izomerje létezik, ezek stabilitását hagyományos alaktényezők (N_p , R_T , IS) felhasználásával többen is elemezték [1-11]. A vizsgálatok arra a következtésekre vezettek, hogy C 40: 1 izomer a legkevésbé stabil, míg leginkább stabil a C 40: 38 izomer. Jelen vizsgálataink eredményeként ugyanezen megállapítás nyert megerősítést. Az **1. táblázat** a hagyományos (N_p , R_T , IS) és újonnan bevezetett topológiai alaktényezők (P_T , S_p , S_{PR} , S_v , S_{VR}) számított értékeit tartalmazza néhány C 40 izomerre vonatkozóan. Ez utóbbiak, mint megállapítható, extrémális (minimum illetve maximum) értékeiket egyértelműen a leginkább stabilnak tekintett C 40: 38 izomerre valamint a legkevésbé stabil C 40: 1 izomerre veszik fel. Egyúttal az is kitűnik, hogy a tradicionális alaktényezők (N_p , R_T , IS) szelektivitása meglehetősen korlátozott.

1. táblázat Néhány C40 izomerre meghatározott topológiai alaktényező

Fullerén izomer	Topológiai alaktényezők							
	N_p	R_T	S_v	$S_{VR} [\%]$	S_p	$S_{PR} [\%]$	P_T	IS
C40 : 1	20	955,2	1,1844	47,35	2,875	150,6	2	3,64
C40 : 2	16	936,9	1,0321	42,30	2,275	119,1	6	2,91
C40 : 24	11	922,7	0,859	36,80	1,192	65,6	11	2,00
C40 : 26	11	922,1	0,838	36,14	1,083	56,7	14	2,00
C40 : 28	12	924,1	0,862	36,68	1,240	64,9	10	2,18
C40 : 31	11	921,4	0,841	36,04	1,164	61,0	12	2,00
C40 : 38	10	920,3	0,800	34,54	0,514	26,9	18	1,82
C40 : 39	10	921,3	0,841	36,04	0,668	35,0	16	1,82
C40 : 40	12	921,5	0,886	36,99	0,900	47,1	14	2,18

A **2. táblázat** az összes, szám szerint negyven C40 izomerre vonatkozóan hat topológiai alaktényező (N_p , R_T , IS illetve P_T , S_p , S_{PR}) számított értékeit tartalmazza.

A táblázat adatai, valamint ez utóbbiak alapján szerkesztett diagramok (**2. ábra**) az előző megállapításokat meggyőzően támasztják alá.

A diagramokból kitűnik, hogy az R_T , P_T , S_p , S_{PR} alaktényezők diszkriminációs képessége minden esetben jobb az legelterjedtebben alkalmazott N_p pentagon indexénél, melyet a szakirodalomban úgy tartanak számon, mint a fullerén-stabilitás legfontosabb kvantitatív mérőszámát.

2. táblázat Topológiai alaktényezők a negyven C40 izomerre vonatkozóan

Fullerén Izomer	Topológiai alaktényezők					
	Np	RT	PT	SP	SPR [%]	IS
C40 : 1	20	955,2	2	2,875	150,6	3,64
C40 : 2	16	936,9	6	2,275	119,1	2,91
C40 : 3	18	944,0	4	2,314	121,2	3,27
C40 : 4	15	932,0	6	1,781	93,3	2,72
C40 : 5	14	931,1	8	1,730	90,6	2,55
C40 : 6	14	929,6	8	1,975	103,5	2,55
C40 : 7	15	930,1	6	2,021	105,8	2,72
C40 : 8	15	932,5	8	1,975	103,5	2,72
C40 : 9	13	926,9	8	1,240	64,9	2,36
C40 : 10	13	926,9	12	0,996	52,2	2,36
C40 : 11	15	929,3	10	1,083	56,7	2,72
C40 : 12	13	925,8	9	1,192	65,6	2,36
C40 : 13	13	926,8	10	1,240	64,9	2,36
C40 : 14	12	924,1	8	1,730	90,6	2,18
C40 : 15	12	923,8	10	1,676	87,8	2,18
C40 : 16	13	924,6	9	1,696	93,3	2,36
C40 : 17	13	924,2	10	1,676	87,8	2,36
C40 : 18	14	926,3	6	1,781	93,3	2,55
C40 : 19	13	924,3	9	1,696	93,3	2,36
C40 : 20	12	925,8	9	1,696	93,3	2,18
C40 : 21	12	925,7	14	0,793	41,5	2,18
C40 : 22	12	924,5	14	0,900	47,1	2,18
C40 : 23	13	926,4	12	0,996	52,2	2,36
C40 : 24	11	922,7	11	1,192	65,6	2,00
C40 : 25	12	924,1	10	1,240	64,9	2,18
C40 : 26	11	922,1	14	1,083	56,7	2,00
C40 : 27	12	923,3	14	1,083	56,7	2,18
C40 : 28	12	924,1	10	1,240	64,9	2,18
C40 : 29	11	921,9	10	1,240	64,9	2,00
C40 : 30	12	923,0	11	1,192	65,6	2,18
C40 : 31	11	921,4	12	1,164	61,0	2,00
C40 : 32	14	927,3	10	1,443	75,6	2,54
C40 : 33	14	928,0	10	1,443	75,6	2,54
C40 : 34	12	923,1	9	1,446	80,6	2,18
C40 : 35	11	922,1	14	0,900	47,1	2,00
C40 : 36	11	921,4	16	0,668	35,0	2,00
C40 : 37	11	921,5	15	0,716	39,4	2,00
C40 : 38	10	920,3	18	0,514	26,9	1,82
C40 : 39	10	921,3	16	0,668	35,0	1,82
C40 : 40	12	921,5	14	0,900	47,1	2,18

2. ábra. Korrelációs összefüggések C 40 fullerén-izomerekre érvényes topológiai alaktényezők között

6. A C84 és C78 fullerén izomerek kombinatorikus szerkezetének minősítése

A nagy méretű, azaz 60-nál több karbon atomot tartalmazó fullerén izomerek-kombinatorikus jellemzése problematikusabb, jóval bonyolultabb feladat, mint a kis méretű fulleréneké. Ez szorosan összefügg azzal a körülménnyel, hogy a kis méretű fullerének nem tartalmaznak izolált ötszöget, viszont ezzel szemben a nagy méretű fullerének között stabilitás szempontjából épp azok a kedvezők, amelyekben minden ötszög izolált. Kézenfekvő felismerés, hogy a nagy méretű fullerének közül elég

azok vizsgálatára szorítkozni, amelyekben valamennyi ötszög izolált (ezek az ún. IPR fullerének). Sajnos a topológiai alaktényezők többsége (ezek közé tartozik az N_p pentagon index is) eleve alkalmatlan arra, hogy az IPR fullerének kombinatorikus szerkezetét kellő megbízhatósággal jellemezzük, minősíthessük.

A vázolt megfontolásokból kiindulva, vizsgálatainkat C84 és C78 típusú fullerénekre koncentráltuk, ezek közül is csak az IPR izomerekre. A C84 és C78 izomerek stabilitásának előrejelzésével többen is foglalkoztak [1,6,7,9]. Az egyik legfontosabb és leginkább használatos topológiai alaktényezőként tartják számon a σ_h paramétert, amelyre hexagon szomszédossági index eloszlás szórása (the standard deviation of the hexagon neighbor index distribution) néven szokás hivatkozni [1]. Ez egy statisztikai mennyiség, amely egy fullerénben az ötszögekkel szomszédos hatszögek számát, pontosabban fogalmazva ennek szórását reprezentálja.

A C84 fullerénnek 24 kombinatorikusan különböző változata létezik [1]. Közülük legstabilabbnak a C84: 22 izomert tekintik, ezt követi stabilitás szempontjából a C84: 23 izomer [7,9].

3. táblázat C84 IPR izomerekre meghatározott topológiai alaktényezők

Fullerén Izomer	Topológiai alaktényezők		
	σ_h	SP	SPR [%]
C84 : 1	0,927	2,745	70,23
C84 : 2	0,781	2,712	69,38
C84 : 3	0,545	2,037	53,35
C84 : 4	0,600	1,898	49,71
C84 : 5	0,600	2,234	57,15
C84 : 6	0,600	2,968	75,93
C84 : 7	0,484	3,315	84,81
C84 : 8	0,484	1,543	41,39
C84 : 9	0,484	1,898	49,71
C84 : 10	0,415	1,800	47,14
C84 : 11	0,484	2,234	57,15
C84 : 12	0,415	2,466	63,09
C84 : 13	0,484	2,065	52,83
C84 : 14	0,600	1,872	51,48
C84 : 15	0,415	2,875	73,54
C84 : 16	0,484	1,832	46,86
C84 : 17	0,545	1,898	49,71
C84 : 18	0,600	1,772	48,73
C84 : 19	0,484	2,109	53,94
C84 : 20	0,781	1,667	45,83
C84 : 21	0,331	1,863	49,99
C84 : 22	0,331	1,240	31,72
C84 : 23	0,331	1,527	39,98
C84 : 24	0,484	1,564	40,01

A **3. táblázat** a σ_h paramétert valamint az újonnan bevezetett S_p és S_{PR} topológiai alaktényezők számított értékeit tartalmazza a 24 darab C84 izomerre vonatkozóan. E topológiai jellemzők közötti sztochasztikus kapcsolatot a **3. ábra** diagramjai demonstrálják.

3. ábra. A C84 fullerén-izomerekre meghatározott topológiai alaktényezők közötti korrelációs összefüggések

Mint megállapítható, a stabilitás valószínűségét tekintve, az a kedvező, ha mindhárom topológiai alaktényező értéke kicsi. A σ_h paraméter diszkriminációs képessége korlátozott abban a tekintetben, hogy minimális értéke három izomerhez is (C84: 21, C84: 22 és C84: 23 izomerekhez) hozzárendelhető. Ezzel szemben az S_p és S_{PR} topológiai alaktényezők minimuma kizárólag a C84: 22 izomerhez tartozik, tökéletes egyezésben a fizikai modelleken alapuló stabilitási számítások eredményével [1,7,9].

A C78 fullerénnek öt IPR izomerje létezik [1]. Az öt közül hármat sikerült kísérletileg ténylegesen is előállítani, nevezetesen a C78: 1, C78: 2 és C78: 3 izomereket [7,9]. A C78 izomerek stabilitásának előrejelzésére több kísérlet is történt, a kapott eredmények azonban nem meggyőzőek, sőt meglehetősen ellentmondásosak [7,9]. Vizsgálataink is ezt a tapasztalatot látszanak igazolni. A **4. táblázat** az öt IPR izomerre vonatkozóan a σ_h paraméter, valamint az újonnan bevezetett S_p , S_{PR} , S_V és S_{VR} topológiai alaktényezők számított értékeit tartalmazza. A σ_h és S_{PR} paraméterek alapján arra következtethetünk, hogy a C78: 5 izomer a legstabilabb. Az S_{PR} és S_{VR} alaktényezők szerint végezve a rangsorolást viszont azt kapjuk eredményül, hogy a C78: 1 izomer tekinthető leginkább stabilnak. Ezzel szemben a C78: 1 és C78: 5 izomerek stabilitása egyformán a legjobbnak ítéltető, amennyiben az értékelés alapjául az S_p alaktényezőt választjuk.

4. táblázat C78 IPR izomerekre meghatározott topológiai alaktényezők

Fullerén Izomer	Topológiai alaktényezők				
	σ_h	SP	SPR [%]	SV	SVR [%]
C78 : 1	0,6914	1,772	52,68	1,048	32,77
C78 : 2	0,6396	2,641	74,49	1,062	33,22
C78 : 3	0,4496	1,920	52,80	1,084	33,60
C78 : 4	0,8276	1,823	50,12	1,072	33,69
C78 : 5	0,2534	1,772	48,73	1,084	33,60

Úgy tűnik, hogy a stabilitás megbízható predikciója a C78 fullerén-izomerek estében még további intenzív kutatómunkát igényel.

8. Összefoglalás, következtetések

Fullerén kombinatorikus szerkezetének jellemzésére új típusú topológiai alaktényezőket definiáltunk. Ezek diszkriminációs képességét C40, C84 és C78 fullerén-izomerek egy véges halmazán teszteltük, hatékonyságukat és szelektivitásukat összehasonlítottuk a szakirodalomból már ismert, tradicionális alaktényezőkkel. Vizsgálataink alapján bebizonyosodott, hogy az újonnan bevezetett topológiai alaktényezők (P_T , S_P , S_{PR} , S_V és S_{VR}) szelektivitása meglehetősen nagy, és sikerrel alkalmazhatók egyes fullerén-izomerek stabilitásának előrejelzésére. A C36 fullerén tizenöt izomerjének kombinatorikus szerkezetét elemezve sikerült igazolni, hogy a legstabilabbnak a C36:14 izomer tekinthető, amelyhez az újonnan bevezetett topológiai alaktényezők minimuma (nevezetesen $P_T=14$, $S_P=0,617$ és $S_{PR}=35,7\%$) tartozik [12].

Irodalom

- [1] P. W. Fowler and D. E. Manolopoulos: An Atlas of Fullerenes, Clarendon Press, Oxford, 1995.
- [2] P.W. Fowler and F. Zerbetto: Charging and equilibrium of fullerene isomers, Chemical Physics Letters, Vol. 243 (1995) p. 36-41.
- [3] E.E.B. Campbell, P.W. Fowler et al.: Decreasing cost of pentagon adjacency for larger fullerenes, Chemical Physics Letters, Vol. 250 (1996) p. 544-548.
- [4] E. Albertazzi, C. Domene et al: Pentagon adjacency as a determinant of fullerene stability, Phys. Chem. Chem. Phys., Vol. 1, (1999) p. 2913-2918.
- [5] P. W. Fowler: Resistance Distances in Fullerene Graphs, Croat. Chem. Acta, Vol. 75 (2002) p. 401-408.
- [6] F. Torrens: Computing the Permanent of the Adjacency Matrix for Fullerenes, Internet Electronic Journal of Molecular Design, Vol. 1 (2002) p. 351-359.

- [7] S. Fajtlowitz and C.E. Larson: Graph-theoretical independence as a predictor of fullerene stability, Chemical Physics Letters, Vol. 377 (2003) p. 485-490.
- [8] M. F. Dinca, S. Ciger et al.: Stability Prediction of C₄₀ Fullerenes, Carpathian J. Math. Vol. 20 (2004) No.2, p. 211-221.
- [9] T. Doslic: Bipartivity of fullerene graphs and fullerene stability, Chemical Physics Letters, Vol. 412 (2005) p. 336-340.
- [10] T. Reti and K. Böröczky: Topological Characterization of Cellular Structures, Acta Polytechnica Hungarica, Vol.1 (2004) p. 59-85.
- [11] T. Reti and I. Zsoldos: A Possible Extension of the Aboav-Weaire Law, Materials Science Forum, (2005), Vol. 473-474, pp. 389-398.
- [12] T. Reti and E. Bitay: Publikálás alatt

Dr. Réti Tamás

Budapest Polytechnic, Budapest
H-1081 Budapest, Népszínház u. 8, Hungary
E-mail: Reti.tamas@bmk.bmf.hu

Dr. Bitay Enikő

Sapientia – Erdélyi Magyar Tudományegyetem
Műszaki és Humántudományok Kar, Marosvásárhely
E-mail: ebitay@gmail.com