

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

FULLERÉNEK SZERKEZETE

Szakedolgozat

Čizmadija Laura

Matematika BSc

Alkalmazott matematikus szakirány

Témavezető:

Bérczi Kristóf

Operációkutatási Tanszék



Budapest, 2011

Tartalomjegyzék

Bevezető	5
1. Fullerének felsorolása	6
1.1. Fullerének felbontása	6
1.2. A foltok listájának előállítása	8
1.3. A foltok tárolása	11
1.4. Izomorfizmus tesztelés	13
2. Rezonáns fullerén gráfok	15
2.1. Fogalmak	15
2.2. A k -rezonáns fullerén gráfok szerkezete	17
3. Maximálisan rezonáns rendszerek	20
3.1. Fogalmak	20
3.2. \mathcal{G} -beli gráfok	21
3.3. 3-rezonáns rendszerek felépítése	24
3.4. A \mathcal{G} -beli maximálisan rezonáns rendszerek	31
Irodalomjegyzék	32

Köszönetnyilvánítás

Ezúttal is szeretném megköszönni témavezetőmnek, Bérczi Kristófnak, hogy lehetőségem volt ezzel a témával foglalkozni, hogy mindig szakított rám időt, és hasznos tanácsokkal, észrevételekkel és segédanyagokkal látott el, melyek segítettek a szakdolgozat elkészítésében.

Nagyon köszönöm csoporttársaimnak, hogy az elmúlt három évben válaszoltak kérdéseimre és sok segítséget nyújtottak ezzel megkönnyítve tanulmányaim elvégzését.

Köszönettel tartozom még családomnak és barátaimnak, hogy mindvégig mellettem álltak és támogattak.

Bevezető

Az első fullerént - C_{60} - 1985-ben fedezték fel. A '90-es években a fullerének tanulmányozása igen népszerűvé vált. Szerkezetük vizsgálatában fontos szerepet kapott a gráfelmélet is.

A fullerének struktúrájának vizsgálata többféleképpen is megközelíthető. Szakdolgozatomban gráfelméleti módszerekkel foglalkozunk, melyek során a fullerénekre mint síkbarajzolható gráfokra tekintünk. A gráfok csúcsai a fulleren molekula szénatomjainak felelnek meg, a gráf élei pedig a molekulabeli kötéseknek.

Fullerének tanulmányozásakor két alapvető célt tartunk szem előtt. Minden lehetséges nem izomorf fulleren konstrukció megismerését, illetve a konstrukciók stabilitásának vizsgálatát. Dolgozatomban az ezen területeken elért eredményeket mutatom be.

Az 1. fejezetben a *fulleren gráfok egy felsoroló algoritmusát* ismertetjük Gunnar Brinkmann és Andreas W.M. Dress eredményei alapján [1]. Maga az algoritmus bonyolult, viszont gyors és képes az összes lehetséges fulleren gráf legenerálására. Az eljárás alapötlete a fulleren gráfok foltokra bontása, és ezen foltok kódolása. A generált fullerének stabilitásukban különböznek. Azon fullerének stabilabbak, melyekre teljesül, hogy az általuk tartalmazott ötszögek izoláltak, azaz minden ötszögnek csak hatszög szomszédjai vannak. Ezeket a fulleréneket IPR-fulleréneknek nevezzük (Isolated Pentagon Rule). Az algoritmus eredményeként megkapjuk az egy adott csúcsszámhoz tartozó IPR-fullerének számát is.

A 2. fejezetben a fulleren gráfokra jellemző *k-rezonanciával* foglalkozunk [3], amely szorosan kapcsolódik azok stabilitásához. Egy gráfot *k-rezonánsnak* nevezünk, ha bármely általa tartalmazott legfeljebb *k* darab diszjunkt hatszöget elhagyva, a megmaradt gráfban létezik teljes párosítás. Fontos kérdés a 3-rezonancia és a *k*-rezonancia kapcsolata, így ebben a fejezetben bemutatjuk azokat a fulleren gráf konstrukciókat, melyekre a 3-rezonancia ekvivalens a *k*-rezonanciával.

Ezután a 3. fejezetben egy benzenoid rendszereken, illetve egy általánosabb \mathcal{G} osztályon vizsgáljuk a problémát. Belátjuk a \mathcal{G} osztálybeli 3-rezonáns gráfok néhány tulajdonságát. Ezen tulajdonságok alapján megadjuk ezen 3-rezonáns gráfok felépítését. Végül igazoljuk, hogy a \mathcal{G} -beli 3-rezonáns gráfok egyben maximálisan rezonánsak is, maximális rezonancia alatt azt értve, hogy a gráf bármely *k* természetes számra *k*-rezonáns.

A stabilitás vizsgálata kapcsán érdemes megemlítenünk az úgynevezett *Kekule* és a *Clar* számokat is [7]. A Kekule szám a fulleren gráf teljes párosításainak száma, a Clar szám pedig a rezonáns minta maximális mérete. Ezen két szám a fullerének stabilitásának szintén fontos mérőszámai, azonban szakdolgozatomban nem térünk ki ezek vizsgálatára.

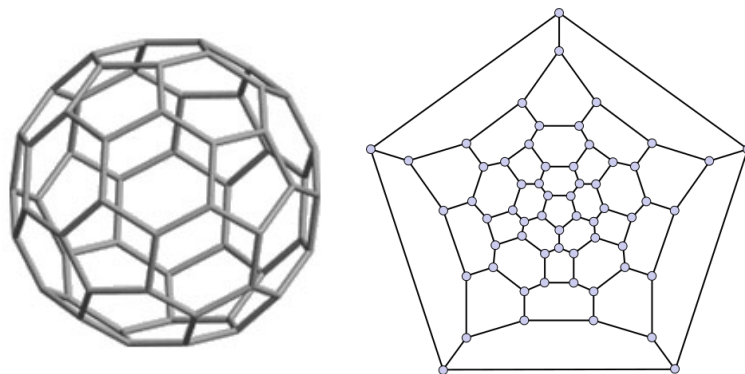
1. fejezet

Fullerének felsorolása

Ebben a fejezetben Gunnar Brinkmann és Andreas W. M. Dress [1] fulleréneket felsoroló algoritmusát mutatjuk be. Az algoritmus bemutatása során először az alapötletet vázoljuk, majd a részleteket is ismertetjük.

1.1. Fullerének felbontása

A **fullerén** egy gömb alakú szénatomokból képzett molekula, melyben minden szénatom pontosan három másik szénatommal szomszédos (lásd 1.1.a ábra). A molekulában a szénatomokból álló lapok hatszög vagy ötszög alakúak. Így a **fullerén gráf** (lásd 1.1.b ábra) egy 3-reguláris síkbarajzolható gráf, melyben a lapok vagy ötszögek, vagy hatszögek. Az Euler formula alapján egy n pontú fullerén gráf pontosan 12 darab ötszöget és $h = \frac{n}{2} - 10$ hatszöget tartalmaz.



1.1. ábra.

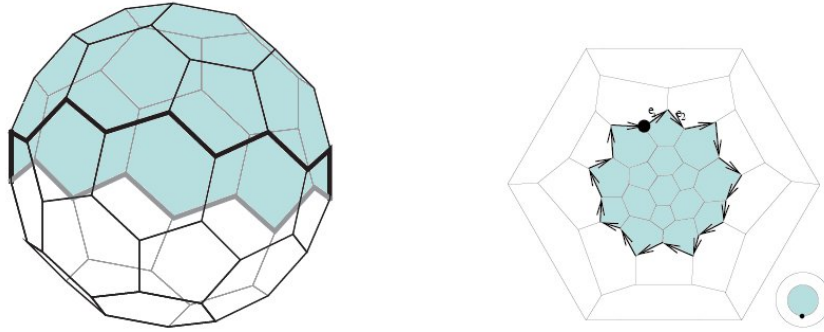
a) Fullerén C60

b) Fullerén gráf C60

Ha egy síkbarajzolt 3-reguláris gráf egy élén haladunk a v végpontja felé, akkor jól definiált, hogy melyik v -ből kiinduló él (amely különbözik attól, amelyen haladunk) lesz a v csúcstól „balra” illetve „jobbra”. Induljunk el egy tetszőleges csúcsból, és az azt tartalmazó élek egyikén haladjunk végig, majd a következő

csúcshoz érve válasszuk ki, hogy jobbra vagy balra haladunk tovább, és ezt így folytassuk, felváltva választva a bal és jobb éleket. Az így kapott alternáló utat **Petrie** útnak nevezzük.

Tegyük fel, hogy az élek amelyeken haladunk, sorra e_1, e_2, \dots . Mivel a gráfunk véges, létezik egy legkisebb $n > 0$, hogy $e_{n+1} = e_{n'}$, ahol $1 \leq n' < n$. Ha $e_{n+1} = e_1$ és $e_{n+2} = e_2$, akkor az e_1, e_2, \dots élek zárt Petrie utat adnak (Jordan-görbe út), amely a gömbi gráfot két részre osztja (lásd 1.2.a,b ábrák). A részeknek cikk-cakkos határuk van, mely pontosan n darab élből áll.

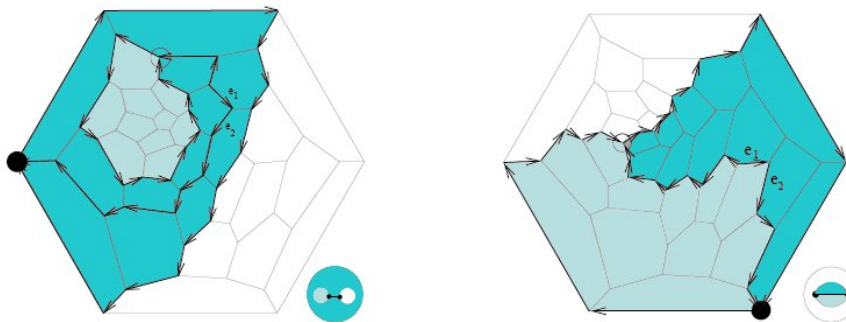


1.2. ábra. [1]

a) Egy fullerén felosztása Jordan-görbe úttal

b) Jordan-görbe út

Ha nem teljesül, hogy $e_{n+1} = e_1$ és $e_{n+2} = e_2$, akkor visszafelé is elindulunk. A lépkedés a következőképpen zajlik: az e_2 éllel kezdjük és balra vagy jobbra lépünk, úgy, hogy a következő él az e_1 legyen. Az e_1 élről tovább haladunk felváltva balra és jobbra lépkedve az e_0, e_{-1}, \dots éleken. A lépegetést addig folytatjuk míg nem lesz egy e_{-m+1} él amelyre $e_{-m+1} = e_{m'}$, ahol $-m < m' \leq n$. Ez az eset egy, az $\{e_{-m}, e_{-m+1}, \dots, e_n\}$ élekből álló Petrie utat eredményez. Az út kezdőéle az e_{-m} és utolsó éle az e_n él. Az útnak pontosan kettő darab 3 fokú csúcsa van (azon csúcsok, ahol az útban metszés volt), a többi csúcs 2 fokú. Ezen utakat homeomorfizmus - folytonos, bijektív leképezés, melynek inverze is folytonos - erejéig 2 osztályba sorolhatjuk, így két típusú utat kapunk. Ezek a típusok a **gomb** és a **szendvics** út (lásd 1.3.a,b ábrát). Mindkettő három részre bontja a gráfot.



1.3. ábra. [1]

a) Gomb út

b) Szendvics út

1.1.1. Tétel. Minden fullerén felbontható két vagy három részre megfelelően választott Petrie utakkal. Ezeket a részeket **foltoknak** nevezzük. Homeomorfizmus erejéig három különböző Petrie út létezik.

Minden folt határútján kijelölünk egy csúcsot - ez a **jelölő csúcs**. Ekkor két foltot akkor és csak akkor mondunk izomorfoknak, ha közöttük létezik olyan izomorfizmus - bijektív leképezés, amely a szomszédos csúcsokat szomszédos csúcsokba képezi - amely a jelölő csúcsokat egymásba viszi.

Feltételezve, hogy ismerjük a listát, amely az összes lehetséges foltot tartalmazza, a következőképpen folytatjuk az eljárást. Először felsoroljuk az összes nem izomorf Petrie utat, amelyek előfordulhatnak egy adott méretű fullerén gráfban.

Egy Jordan-görbe utat az éleinek száma teljesen meghatároz. Viszont a gomb és a szendvics út esetében ez nem teljesül. Ezek nem izomorf eseteinek felsorolása is szükséges ahhoz, hogy az útban lévő éleket 3 szegmensbe osszuk. Ezzel írjuk majd le, hogy az út és az utak által alkotott részek alakja is teljesen meghatározott legyen. Tetszőlegesen választunk egy csúcsot a részek határaitól és ezek a csúcsok lesznek a részek kijelölt csúcsai.

Egy fullerént tekintve, a hatszögek számát egyértelműen meghatározza a gráf csúcsainak száma. A hatszögek számát 2 vagy 3 pozitív egész szám összegeként próbáljuk felírni úgy, hogy a gráfot lehetséges legyen az összeadandóknak megfelelő számú hatszöget tartalmazó részekre bontani. Ezt követően megnézzük, hogy a jelölt foltok listájában vannak-e olyan jelölt foltok, amelyek a kapott részeknek felelnek meg, ahol a „megfelel” szó alatt azt értjük, hogy a határút alakja és a hatszögek száma a részben és a foltban megegyezik. Ha ez teljesül, akkor ezeket a foltokat egymáshoz illesztjük (úgy, hogy a jelölő pontok egybeessenek) így megszerkesztve az összes olyan kombinációt, ami egy fullerén kialakulásához vezet.

Ha a jelölt foltokból álló listánk teljes volt, akkor egy, az összes fullerént tartalmazó listát kapunk ezzel a módszerrel.

1.2. A foltok listájának előállítása

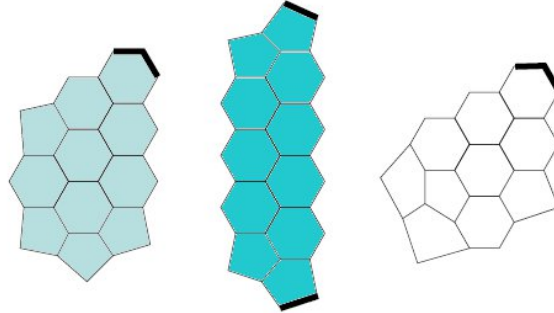
Egy foltot mint gráfot tekintve (a folton belüli éleket és pontokat is figyelembe véve) látható, hogy egy folt határútja 2 és 3 fokú csúcsokból áll. **Stop-él**-nek nevezzük a határútban lévő éleket, melyekre teljesül, hogy mindkét végpontjuk 2 fokú. A folt határútja alternáló részutakból áll, melyeket stop-élek választanak szét. Egy folt határútjában legfeljebb 4 ilyen elválasztó él van. A konstrukció folyamán olyan foltokra lesz szükségünk, amelyek akár 6 stop-élt is tartalmaznak.

Az olyan foltokat, amelyek határútjában nem létezik két szomszédos 3 fokú csúcs, **pszeudo-konvex** foltoknak nevezzük.

1.2.1. Megfigyelés. A Petrie utak a fulleréneket pszeudo-konvex foltokra bontják.

A pszeudo-konvex foltok kódolhatóak. Jelölje k a folt határútjában lévő stop-élek számát ($0 \leq k \leq 6$). Ha egy Jordan-görbe úttal határolt foltot tekintünk, akkor $k = 0$. Így ezt a foltot a 2 fokú (vagy a 3 fokú) csúcsainak száma kódolja. A másik két típusú úttal határolt foltoknál a kódolást egy számsorozat adja meg. Ez a sorozat a_1, a_2, \dots, a_k , ahol a_i a két egymást követő stop-él közötti 3 fokú csúcsok számát jelöli. A kódolás során a 3 fokú csúcsok számolását az óramutató járásával megegyező irányban végezzük,

úgy, hogy az a_1, a_2, \dots, a_k sorozat lexikografikusan maximális legyen. Az 1.4. ábrán lévő három folt az 1.2.c ábrán látható fullerén gráfnak megfelelő foltok kódolását mutatja.



1.4. ábra. [1]

(9,0)

(6,5)

(8,0)

Az Euler formula implicálja, hogy egy k stop-élt tartalmazó foltban pontosan $6 - k$ darab ötszög van. Most az a feladatunk, hogy egy adott S számhoz generáljunk egy listát, amely tartalmazza az összes lehetséges pseudo-konvex foltot, amelyek legfeljebb S darab hatszöget tartalmaznak. Ezt a problémát másképp *PentHex Puzzle* problémának nevezik [2].

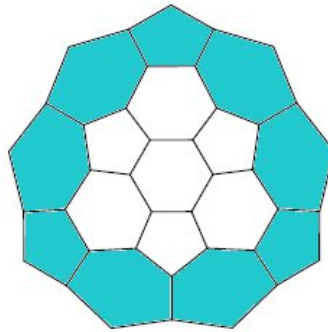
A jelölő pontot úgy válasszuk meg, hogy a folt határútjának egy 2 fokú csúcsa legyen. Ezen csúcsok közül egy olyat választunk, mely egy stop-él végpontja. Ilyen csúcsból több is lehet, így a jelölő csúcs az lesz, amelyiktől elindulva a 3 fokú csúcsok számolását a folt lexikografikusan maximális kódolását kapjuk. Ezt a jelölést **kanonikus folt-jelölésnek** nevezük. A következőkben az ilyen módon jelölt foltok listáját fogjuk előállítani.

A kanonikusan jelölt, pseudo-konvex foltok esetében a tükrözést mint izomorfizmust nem engedélyezük, mivel a foltok egymáshoz „ragasztása” esetén a kapott konstrukciók nem egyeznének meg egymással.

1.2.1. Tétel. *A kanonikusan jelölt, nem izomorf, pseudo-konvex foltok \mathcal{P} osztálya rekurzívan felsorolható izomorfizmus tesztelés nélkül.*

Bizonyítás: Minden folt megkapható egy ötszögből vagy egy hatszögből kiindulva, ezek kiegészítésével. Viszont tekinthetjük ennek a fordítottját, azaz egy \mathcal{P} -beli foltot fogunk leredukálni. Minden egyes \mathcal{P} -beli jelölt foltnak létezik egy egyértelmű **ős-foltja**, viszont egy ős-foltot kiegészítve többféle **utód-foltot** kaphatunk.

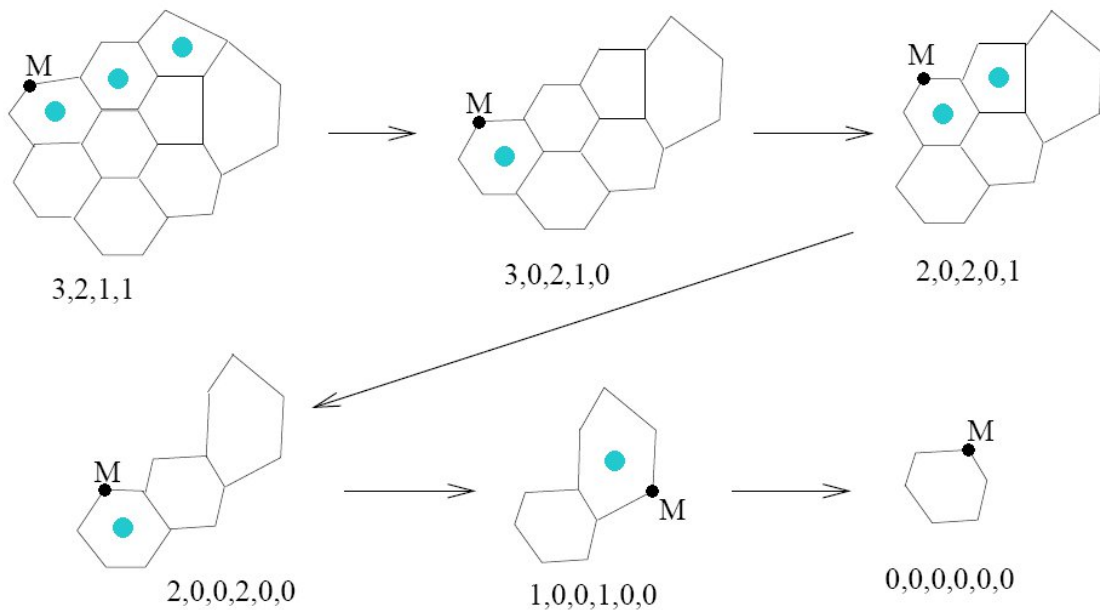
Tegyük fel, hogy adott egy \mathcal{P} -beli kanonikusan jelölt P folt. Bemutatjuk, hogyan kapjuk meg P ős-foltját. Az 1.5. ábrán egy stop-élt nem tartalmazó ($k = 0$) folt látható. Azon hatszögek és ötszögek, melyeknek van metszetük a határvonallal egy úgynevezett **réteget** képeznek (lásd a kék sokszögeket az 1.5. ábrán). Ebben az esetben minden egyes hatszög vagy ötszög és a határvonal metszete a sokszög két szomszédos oldala. A rétegnek megfelelő duális gráf pontjai kört alkotnak (ez annak segítségével igazolható, hogy a folt csak ötszögeket és hatszögeket tartalmaz).



1.5. ábra. [1]

Tehát eltávolíthatjuk a réteget, és az eltávolítást követően a jelölő csúcsot megváltoztatjuk. Az új jelölő csúcsot úgy választjuk, hogy a jelölés továbbra is kanonikus jelölés legyen. Könnyen megmutatható, hogy a redukálással kapott folt is pseudo-konvex.

A réteg eltávolítása után a kódolás nem változik, ha a rétegben csak hatszögek voltak. Különben egy új kóddal rendelkező foltot kapunk, amelyben k egyenlő lesz az eltávolított ötszögek számával. Az új folt mindenképpen \mathcal{P} -beli lesz.



1.6. ábra. [1]

Az 1.6. ábrán egy példa látható a folt redukálására (itt $k > 0$). M a jelölő csúcs. Először azt a sokszöget távolítjuk el, amely tartalmazza a jelölő pontot. Ezután megnézzük, hogy a folt megmaradt része pseudo-konvex folt-e. Ha igen, akkor megállunk, ha nem, akkor a határ mentén a tőle óramutató járásával egyező irányban lévő sokszögeket távolítjuk el sorban, amíg egy pseudo-konvex foltot nem

kapunk (az 1.6. ábrán az eltávolítandó sokszögeket kék ponttal jelöljük). Ez akkor következik be, ha eltávolítjuk az első ötszöget vagy az első hatszöget, amely stop-élt tartalmaz, vagy ha az egész réteget eltávolítottuk ($k = 1$ esetén). Minden ilyen lépésben véges sok sokszöget kell eltávolítani. Belátható, hogy az így kapott új folt összefüggő gráf.

Tehát a \mathcal{P} összes elemének megkonstruálásához egy ötszögből vagy hatszögből indulunk ki, és ennek a módszernek az inverzét alkalmazva megkapjuk az összes legfeljebb S hatszöget tartalmazó foltot. \square

1.3. A foltok tárolása

A futásidő miatt fontos annak eldöntése, hogy egy adott kódhoz és hatszögek számhoz találunk-e megfelelő foltokat, amelyekből Petrie utat tudunk előállítani. A foltok tárolása és kódolása fontos része az implementációnak.

Könnyen látható, hogy egyes pszeudo-konvex foltok nem lehetnek fullerén foltok. Ez a Petrie utak konstrukciójából következik. Azon foltok, amelyekben $k > 4$ és több mint kettő nem nulla is megjelenik a kódolásukban, nem szerepelhetnek mint fullerén foltok. Tehát ezeket a foltokat nem szükséges tárolnunk miután minden utód-foltjukat megszerkesztettük.

A többi foltot egy fa adatszerkezetben tároljuk. A gyökérből induló ágakat a hatszögek számának megfelelően választjuk. Az i -edik szinten lévő pontból induló élt a határút kódjának i -edik elemének feleltetjük meg. Minden egyes pontban egy foltlista szerepel, pontosan megadott kódolással és hatszögeinek számával, amit a gyökértől a pontig eljutva olvashatunk le. Ez alapján könnyen eldönthető, hogy egy megadott folt kitölthető-e bizonyos számú hatszöggel.

Példaképpen: ha 20 hatszöget tartalmaz a folt és a határának kódja 6, 2, 4, akkor a foltot úgy keressük meg, hogy kiválasztjuk a gyökérből kiinduló 20. ágat, az első szinten lévő 6. ágat, a második szinten lévő 2. ágat és a harmadik szinten lévő 4. ágat.

Számítások alapján kiderült, hogy egy 170 atomot tartalmazó fullerén esetében 11 342 885 darab jelölt foltot generál az algoritmus, ebből 9 968 867 darab tartalmaz 6 db ötszöget.

1.3.1. Tétel. *Az összesen n darab ötszöget és hatszöget tartalmazó pszeudo-konvex foltok konstans méretű tömbben tárolhatóak úgy, hogy a sor elemei egész számok, és egyikük sem haladja meg n értékét.*

Bizonyítás: A spirál algoritmust használjuk. Az 1.2. részhez hasonlóan belátható, hogy ez a folt redukáló algoritmus megfelelő lesz a legalább egy stop-élt tartalmazó pszeudo-konvex foltokra ($k > 0$). A spirális algoritmusnál a folt sokszögeit úgy mond „letekerjük” egy spirálba. A „letekerést” a jelölt sokszöggel kezdjük és az óramutató járásával megegyező irányban tekerjük le egyesével a sokszögeket. Mivel $k > 0$, következik, hogy a folt legfeljebb $p = 5$ darab ötszöget tartalmazhat. Így a spirál algoritmushoz használt kódolás a következő: csak az ötszögek helyét jegyezzük meg, ami legfeljebb 5 tárhelyet foglal egy folt esetén. A folt határútjának kódolása pontosan $6 - p$ darab tárhelyet foglal, és ezen két kód segítségével a folt egyszerűen rekonstruálható (lásd 1.7. ábra).

Nézzük a $k = 0$ esetet. Ekkor a határút teljesen szimmetrikus. Viszont a foltokban megjelenő 6 darab ötszög miatt meg kell nézni a folt automorfizmus csoportjának rendjét. Legyen ez N . Így a nem izomorf

jelölt foltok száma is N lesz. Ezeket a foltokat úgy kapjuk, hogy a határút N darab egymást követő 2 fokú csúcsát választjuk jelölő csúcsnak. Így megkapjuk ennek az egy foltnak megfelelő összes nem-izomorf jelölt foltot.

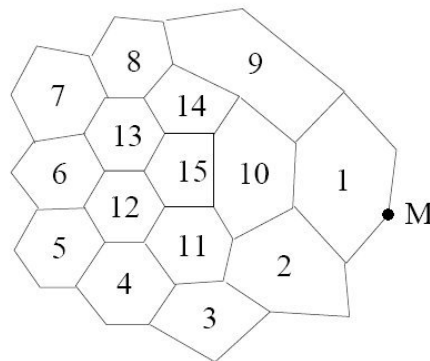
Abban az esetben, ha egy foltban a rétegében nincs ötszög, akkor megkapható egy kisebb foltból hatszög rétegek hozzáadásával. Ez a kisebb folt a **kernel**. A kernel tartalmaz ötszögeket a rétegében. Az eredeti foltban és a kernelnek ugyanaz az automorfizmus csoport felel meg. Így elegendő tárolni a kernelt egy tetszőlegesen kijelölt csúccsal, az automorfizmus csoport rendjét és a hozzáadott hatszög rétegek számát.

A kernelekre is tudjuk alkalmazni a spirál algoritmust. A kezdő sokszög legyen egy ötszög a kernel rétegéből. A „letekerést” elvégezve ismét felírhatunk egy kódot. Így összességében véve egy $k = 0$ típusú folt esetén elegendő tárolni a folt határútjának kódolását, a hozzáadott hatszög rétegek számát, az automorfizmus rendjét és az ötszögek helyét a spirál algoritmus során (az első ötszög mindig az 1-es helyen szerepel).

Az implementáció során a kernel jelölő csúcsának a kezdő 1-es számú ötszög csúcsát választjuk úgy, hogy a spirális algoritmus kódolása lexikografikusan maximális legyen. Ezt **kanonikus alaknak** nevezük és az összes kernelt ilyen alakban tároljuk. Ezen jelöléseknek köszönhetően hatékonyabb konstruálási módszert kapunk a $k = 0$ típusú foltokra mint az előző, 1.2.-es részben.

A $k = 0$ típusú foltot, amely legalább egy ötszöget tartalmaz a rétegében, származtathatjuk $k = 2$ típusú foltból hozzáadva egy hatszögekből álló sort, melynek két vége egy-egy ötszög, vagy pedig származtathatjuk egy $k = 1$ típusú foltból hozzáadva egy réteget, amely hatszögekből és pontosan 1 darab ötszögből áll.

Azon $k = 0$ típusú foltok amelyek rétege nem tartalmaz ötszöget, kódolhatóak a kernel kódjával és a hatszög rétegek számával. \square



1.7. ábra. [1]

A határút kódja: 4, 2, 3

A spirál kód: 3, 14, 15

1.4. Izomorfizmus tesztelés

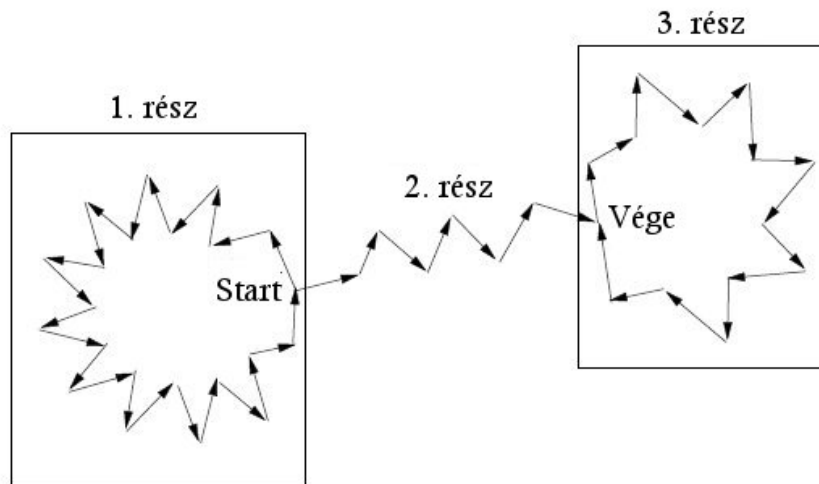
Az előző fejezetben említettük, hogy 170 atomból álló fullerénhez 11 342 885 darab foltot készít az algoritmus. Ezekből 1 802 856 946 fullerént épít fel, amiből 46 088 148 nem izomorf.

A nem izomorf gráfok nagy száma miatt lehetetlen őket mind tárolni. Így az algoritmusnak úgy kellene működnie, hogy egy új fullerén generálása után - anélkül, hogy azt az összes addig generált fullerénnel összehasonlítja - eldönti, hogy erre a fullerénre szüksége van-e. Emiatt definiáljuk a **kanonitás kritériumot**. Így a struktúrák minden izomorfizmus csoportjához pontosan egy darab **kanonikus reprezentáns** fullerént generál az algoritmus.

1.4.1. Tétel. *Létezik n -ben lineáris (struktúrakénti) kanonitás ellenőrzés az adott algoritmussal kapott fullerénekre.*

Bizonyítás: Először tekintsük azt az esetet, amikor a fullerénbeli Petrie utak első két éle e_1 és e_2 egy ötszög oldalai. Minden felépített fullerén esetében először ellenőrizzük, hogy a Petrie út, ami alapján fel lett építve, megkonstruálható-e ilyen e_1 és e_2 élekből kiindulva. Ha ez nem teljesül, akkor az új struktúrát elutasítjuk. Ez az ellenőrzés lineáris az út hosszában.

A többi esetben a fullerénnek megfeleltetünk egy kódot, amely leírja a **generálás történetét**. Ebben a kódban az első szám azt jelöli, hogy milyen hosszú a Petrie út. A második szám leírja, hogy pontosan milyen típusú az út: 1-es, ha Jordan-görbe útról van szó; 2-es, ha gomb útról van szó; és 3-as, ha szendvics útról van szó. A kód többi része az út típusától függ. A következő bekezdésben a gomb út esetét írjuk le bővebben. A többi eset is hasonlóan kezelhető.



1.8. ábra. [1]

A gomb út három részből áll (lásd 1.8. ábra). Tegyük fel, hogy az első rész legalább olyan nagy, mint a harmadik rész. A gomb út irányított útként van megadva. Tegyük fel, hogy az első élről balra fordulunk, hogy a második élen haladjunk végig. A kódban a 3. szám azt jelöli, hogy hány élből áll az első része az útnak, a 4. szám pedig, hogy hány élből áll a 3. rész. Az így kapott kódhoz hozzátesszük az út első

része által „elkerített” folt spirál kódját, a 3. rész által „elkerített” folt spirál kódját és végül a fullerén 3. foltjának spirál kódját.

A fullerén generálás történet kódjának megállapítását követően megpróbáljuk megkeresni az összes lehetséges Petrie utat a fullerénben, melyekre teljesül, hogy e_1 és e_2 egy ötszög két szomszédos éle. Ezen utak alapján rekonstruáljuk a fullerént. Legfeljebb 120 darab ilyen kezdőélekből kapott Petrie út létezik. A kapott fullerénekhez különböző kódok tartoznak. Így csak azt a fullerént fogadjuk el melynek kódja lexikografikusan maximális. Mivel feltettük, hogy az első élről a másodikra jobbra fordulunk, a kódok párjait is meg kell vizsgálnunk.

Mivel legfeljebb 120 Petrie út van és minden kódból lineáris időben származtatható a neki megfelelő második kód, a kanonitás ellenőrzés lineáris lesz a fullerén csúcsainak számában. \square

Egy fullerén akkor is elutasítható ha találunk egy rövidebb utat. Ha sem rövidebb utat nem találunk, sem ugyanilyen hosszú utat egy kisebb típusindexszel, akkor az egész kódot csak azoknál az utaknál kell rekonstruálni amelyeknél a hossz és a típus is ugyanaz mint az eredetié.

2. fejezet

Rezonáns fullerén gráfok

Ebben a fejezetben Dong Ye, Zhongbin Qi és Heping Zhang k -rezonáns fullerén gráfokra vonatkozó eredményeit [3] mutatjuk be. Vázoljuk ezen gráfok szerkezetét és maximális rezonancia tulajdonságát.

2.1. Fogalmak

Legyen F egy fullerén gráf, M pedig az F egy teljes párosítása. Egy C kör az F gráfban M -**alternáló**, ha C élei felváltva M -beli és nem M -beli élek. Az F gráf diszjunkt hatszögeit tartalmazó \mathcal{H} halmaz **rezonáns minta**, ha F -nek létezik egy M teljes párosítása, melyre a \mathcal{H} -beli hatszögek M -alternálóak. Az F fullerén gráf k -**rezonáns**, ha minden i -re ($0 \leq i \leq k$) bármely i darab diszjunkt F -beli hatszög rezonáns mintát képez.

2.1.1. Tétel. *Egy fullerén gráf minden hatszöge rezonáns.*

Egy F fullerén gráf B **töredéke** az F egy részgráfja, amely egy körből és a belsejéből áll. A B töredéket **ötszögűnek** nevezzük, ha az összes belső lapja ötszög. Az F fullerén gráf egy B ötszögű töredéke **maximális ötszögű töredék**, ha B összes szomszédos lapja hatszög. Jelölje $\gamma(B)$ a minimumát annak, hogy a B -beli ötszögeknek hány ötszög szomszédjuk van.

2.1.1. Lemma. ([4]) *Legyen B az F fullerén gráf egy töredéke és W a B határának 2 fokú csúcsainak halmaza. Ha $0 < |W| \leq 4$, akkor $T = F - (V(B) \setminus W)$ erdő, és teljesül, hogy*

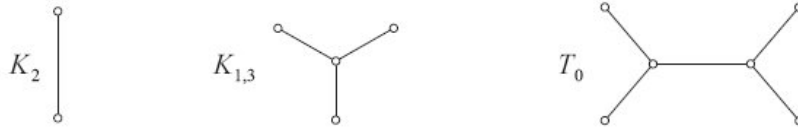
(1) T egy K_2 gráf ha $|W| = 2$;

(2) T egy $K_{1,3}$ gráf ha $|W| = 3$;

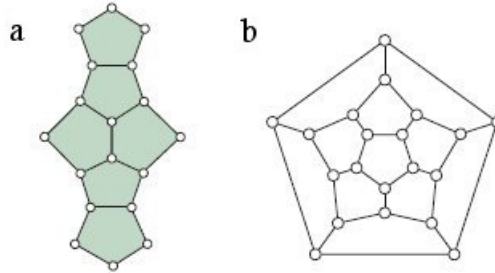
(3) $|W| = 4$ esetén T uniója két K_2 gráfnak, vagy egy 3 hosszú út, vagy megegyezik a T_0 gráffal (lásd 2.1. ábra).

Teknősbékának nevezzük azt az ötszögű B töredéket, amely 6 ötszöget tartalmaz, lásd 2.2.a ábra.

2.1.2. Tétel. *Legyen F egy F_{20} -tól (lásd 2.2.b ábra) különböző fullerén gráf és B ennek maximális ötszögű töredéke. Ekkor B ötszög vagy teknősbéka.*

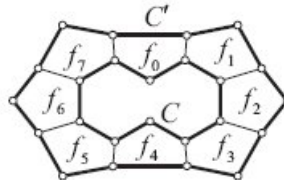


2.1. ábra. [3]



2.2. ábra. [3]

Legyen $\{f_i | i \in \mathbb{Z}_l\}$ l darab ($l \geq 3$) F -beli lap ciklikus sorrendje. Ezen sorrendre teljesüljön, hogy két egymást követő lap f_i és f_{i+1} ($i \in \mathbb{Z}_l$) metszete pontosan egy él - e_i - és két nem szomszédos lap pedig diszjunkt. Az $R := \cup_{i \in \mathbb{Z}_l} f_i$ halmazt F -beli **sokszög gyűrűnek** nevezzük ha $\{e_i | i \in \mathbb{Z}_l\}$ párosítás F -ben, és l -t az R **sokszög gyűrű hosszának** nevezzük, jelölése $l(R)$. Egy R sokszög gyűrűt **ötszög gyűrűnek** nevezünk, ha minden R -beli f_i ötszög, ahol $i \in \mathbb{Z}_{l(R)}$ ($l = 8$ eset, lásd 2.3. ábra).



2.3. ábra. [3]

Legyen R egy ötszög gyűrű F -ben, amely az $f_1, f_2, \dots, f_{l(R)}$ ötszögekből áll. R -t az F gráf részgrájaként tekintve R -nek létezik két lapja, amely különbözik minden f_i lapjától ($i = 1, 2, \dots, l(R)$). Feltehetjük, hogy az R gyűrű külső és belső határai sorra C és C' (lásd 2.3. ábra). Ekkor jelölje $s(R)$ a C -hez tartozó 2 fokú csúcsok számát és $s'(R)$ a C' -hez tartozó 2 fokú csúcsok számát. Ezen értékekre teljesül, hogy $s(R) \leq s'(R)$. Ezen kívül $s'(R) + s(R) = l(R)$, $s(R) \leq \lfloor \frac{l(R)}{2} \rfloor$, $s(R) \neq 1$ és $s'(R) \neq 1$.

Legyen $\tau(F) := \min\{l(R) | R \text{ az } F \text{ ötszög gyűrűje}\}$. Például F_{20} esetében $\tau(F_{20}) = 5$.

2.1.2. Lemma. *Bármely ötszög gyűrűt tartalmazó F fullerén gráfra teljesül, hogy $5 \leq \tau(F) \leq 12$.*

Bizonyítás: Mivel tudjuk, hogy F pontosan 12 darab ötszöget tartalmaz, következik, hogy $\tau(F) \leq 12$. Továbbá ha F tartalmaz egy R ötszög gyűrűt, melyre $l(R) \leq 4$, $s(R)$ és $s'(R)$ tulajdonságai alapján,

és az alapján, hogy F nem tartalmaz négyszög lapot, következik, hogy $s(R) = s'(R) = 2$. Így tehát $l(R) = 4$. A 2.1.1.(1) lemma alapján F -nek létezik éle, amely összeköti az R gyűrű C -ben lévő két 2 fokú csúcsot. Ezen él és az R gyűrű C határában lévő élei egy legfeljebb négyszög lapot képeznek F -ben, ami ellentmondás. Így következik, hogy $\tau(F) \geq 5$. \square

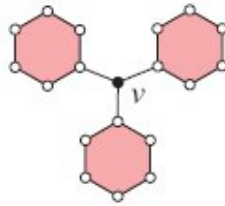
2.1.3. Lemma. *Nem létezik F fullerén gráf melyre $\tau(F) = 7$.*

2.1.4. Lemma. *Egy F fullerén gráf, melyre $\tau(F) = 11$ nem 3-rezonáns.*

2.2. A k -rezonáns fullerén gráfok szerkezete

Az előző részben leírt eredmények alapján azon F fullerén gráfok konstrukcióját írjuk majd le, melyekre teljesül, hogy $5 \leq \tau(F) \leq 12$, $\tau(F) \neq 7$, és $\tau(F) \neq 11$.

Tekintsük a G^* gráfot (lásd 2.4. ábra). A G^* gráf tiltott részgráfja a 3-rezonáns F fullerén gráfnak. G^* három hatszöge rezonáns minta, mivel törölve a három hatszöget a v izolált pont lesz. Legyen f az F fullerén gráf egy lapja. A $v \notin f$ csúcs szomszédos az f lappal, ha f határában létezik legalább egy csúcs, mely szomszédos v -vel. Így a tiltott részgráf egy gráf mely tartalmaz egy pontot és a ponttal szomszédos három diszjunkt hatszöget.



2.4. ábra. [3]

2.2.1. Tétel. *Ha F egy 3-rezonáns fullerén gráf, akkor $|V(F)| \leq 60$.*

Bizonyítás: Mivel F 3-rezonáns, következik, hogy F nem tartalmaz G^* típusú részgráfot. Így bármely $v \in V(F)$ csúcs szomszédos legalább egy F -beli ötszöggel. Mivel a csúcsokhoz injektív módon rendeljük hozzá az ötszögek csúcsait és F pontosan 12 darab ötszöget tartalmaz, következik, hogy $|V(F)| \leq 12 \times 5 = 60$. \square

Ha az F fullerén gráf f ötszöge nem eleme egy F -beli ötszög gyűrűnek, akkor f egy F -beli maximális ötszögű töredék eleme. Pontosabban, ha F egy 3-rezonáns fullerén gráf, amely nem tartalmaz ötszög gyűrűt, akkor a 2.1.2. tétel alapján F maximális ötszögű töredéke vagy egy ötszög vagy pedig egy teknősbéka.

2.2.1. Lemma. *Legyen F fullerén gráf, mely nem tartalmaz ötszög gyűrűt. Ekkor F akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha F az F_{36}^1 fullerén gráf (lásd 2.5.a ábra) vagy a C_{60} fullerén gráf (lásd 2.5.b ábra), amelyekre teljesül, hogy bármely $k \geq 3$ -ra k -rezonánsak.*

Most tekintsük azokat az F fullerén gráfokat melyek tartalmaznak ötszög gyűrűt. A [3]-ban bebizonyított lemmákat összefoglalva a következő eredményeket kapjuk.

1. eset $\tau(F) = 5$ vagy 6:

F akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha F megegyezik az F_{20} (lásd 2.2.b ábra) vagy az F_{24} gráffal (lásd 2.6. ábra).

2. eset $\tau(F) = 8$

F akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha F megegyezik az F_{28} gráffal (lásd 2.7.a ábra).

3. eset $\tau(F) = 9$

F akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha F megegyezik az F_{32} gráffal (lásd 2.7.b ábra).

4. eset $\tau(F) = 10$

F akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha F megegyezik az F_{36}^2 (lásd 2.8.a ábra) vagy pedig az F_{40} gráffal (lásd 2.8.b ábra).

5. eset $\tau(F) = 12$

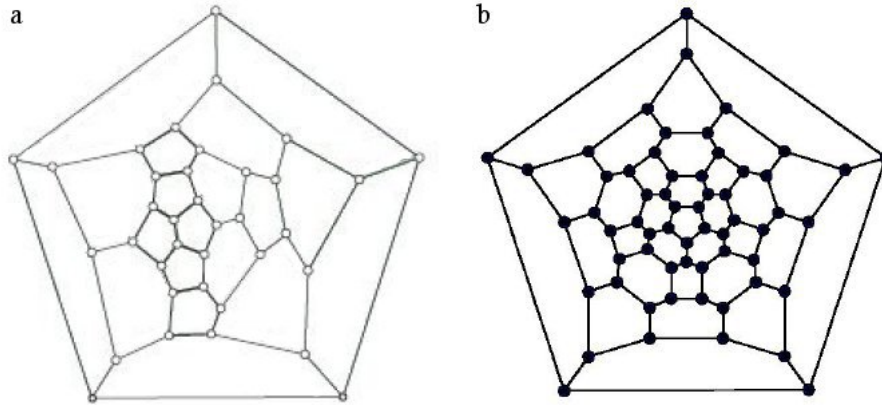
F akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha F megegyezik az F_{48} gráffal (lásd 2.9. ábra).

Tehát összegezve, a 3-rezonáns F fullerén gráfok a felsorolt 9 típusúak lehetnek. Ezen 9 típusú gráfra teljesül, hogy bármely $k \geq 3$ -ra k -rezonánsak. Így a következő tételt kapjuk.

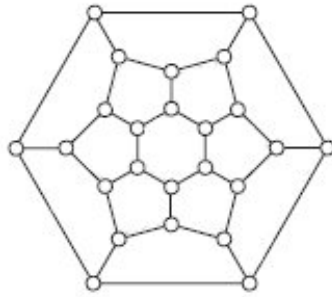
2.2.2. Tétel. Egy F fullerén gráf akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha F megegyezik a következő gráfok egyikével: F_{20} , F_{24} , F_{28} , F_{32} , F_{36}^1 , F_{36}^2 , F_{40} , F_{48} , C_{60} . Ezen 9 gráf mindegyikére teljesül, hogy k -rezonáns bármely $k \geq 3$ -ra.

A 2.2.2. tétel alapján kapjuk a következőt.

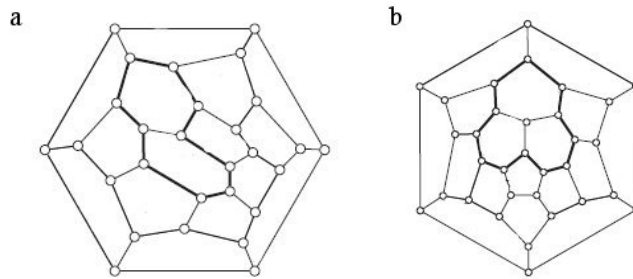
2.2.3. Tétel. Az F fullerén gráf akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha k -rezonáns bármely $k \geq 3$ -ra.



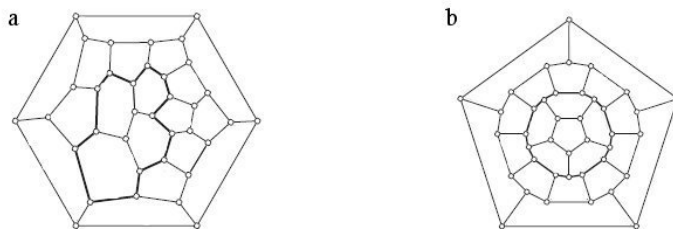
2.5. ábra. [3] a) F_{36}^1 , b) C_{60}



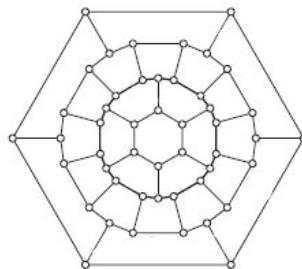
2.6. ábra. [3] F_{24}



2.7. ábra. [3] a) F_{28} , b) F_{32}



2.8. ábra. [3] a) F_{36}^2 , b) F_{40}



2.9. ábra. [3] F_{48}

3. fejezet

Maximálisan rezonáns rendszerek

Benzenoid rendszer-nek nevezzük azon kétszeresen összefüggő síkgráfokat melyek belső lapjai hatszögek. Az 1990-es években M. Zheng belátta, hogy a benzenoid rendszerek 3-rezonánsak és maximálisan rezonánsak is. Ebben a fejezetben Saihua Liu és Heping Zhang [5] 3-rezonáns rendszerek felépítésével kapcsolatos eredményeit mutatjuk be.

3.1. Fogalmak

Egy C kör a G gráfban **M-alternáló**, ha C élei felváltva elemei és nem elemei a gráf egy M teljes párosításának. Egy, a G gráf diszjunkt hatszögeiből álló \mathcal{H} halmazzal **rezonáns mintának** nevezünk, ha G -ben létezik M teljes párosítás, amelyre a \mathcal{H} -ban lévő hatszögek határai M -alternálóak. A G gráfot **k -rezonánsnak** mondjuk, ha bármely i ($0 \leq i \leq k$) darab G -beli diszjunkt hatszögekből álló F halmaz rezonáns mintát képez, vagy ezzel ekvivalensen $G - F$ -ben létezik teljes párosítás. Egy G gráf **maximálisan rezonáns**, ha minden k -ra ($k \geq 1$) k -rezonáns.

M. Zheng a következő eredményt igazolta.

3.1.1. Tétel. ([6]) *Egy benzenoid rendszer akkor és csak akkor 3-rezonáns, ha felépíthető k darab speciális típusú (lásd 2.2. rész) benzenoid rendszerből $k - 1$ összeragasztás művelettel úgy, hogy minden összeragasztás esetén az egyedüli jelölt élek a ragasztott élek lesznek.*

A következőkben belátjuk, hogy hasonlóképpen felépíthetőek a benzenoid rendszerektől általánosabb 3-rezonáns rendszerek is.

Tekintsünk egy zárt felszínt, azaz egy felszín és a határának unióját. A zárt felszín tartalmazhat „lyukakat”, azaz nyílt lemezeket, melyek el lettek távolítva a felszínről. Például egy fullerén gráf esetében a „lyukaknak” az ötszögek felelnek meg. A lyukakat a rezonancia vizsgálat során nem vesszük figyelembe.

Most tekintsük a síkbeli gráfot (sokszög rendszert), a rendszer végtelen sokszögét tekintsük „lyuknak” és zárjuk ki a rezonáns mintából. Így a következőkben **lapnak** a gráf véges sokszögeit nevezzük. Definiáljuk a \mathcal{G} **osztályt**, amely a kétszeresen összefüggő, síkbeli páros gráfokat tartalmazza, melyekre teljesül, hogy minden lapjuk legalább hatszög és minden belső csúcsuk 3 fokú, a többi csúcsuk pedig 2 vagy 3 fokú. \mathcal{G} tartalmazza az összes benzenoid rendszert.

Egy \mathcal{G} -beli G gráf 1-rezonáns akkor és csak akkor, ha G minden éle eleme egy G -beli teljes párosításnak.

Először néhány alapvető \mathcal{G} -beli 3-rezonáns gráfot tekintünk, melyek segítségével fel tudjuk majd építeni az összes \mathcal{G} -beli 3-rezonáns gráfot.

3.2. \mathcal{G} -beli gráfok

Belső duálisnak azt a $D(G)$ gráfot nevezzük, amelyet a G gráf duálisából kapunk a végtelen lapnak megfelelő csúcs kihagyásával. $D(G)$ minden lapjának megfelel egy G -beli belső csúcs, melynek foka 3, így $D(G)$ minden belső lapja háromszög (lásd 3.2.b ábra).

3.2.1. Tétel. *Legyen $G \in \mathcal{G}$. Ekkor G határán legalább 6 darab 2-fokú csúcs van.*

Bizonyítás: Legyen k_1 , k_2 és k_3 a G -ben lévő 2-fokú, a G -határán lévő 3-fokú és a G belső 3-fokú csúcsainak száma. Legyen $n = |V(G)|$, $m = |E(G)|$ és f a lapok száma. Ekkor:

$$n = k_1 + k_2 + k_3$$

és

$$2m = 2k_1 + 3(k_2 + k_3) = 3n - k_1.$$

Mivel a G gráf határának pontjainak száma $k_1 + k_2$, következik

$$\sum_{i \geq 6} i f_i + k_1 + k_2 = 2m,$$

ahol f_i a belső i -szögek (lapok) száma G -ben. Ekkor

$$n = \frac{2m + k_1}{3} = \frac{\sum_{i \geq 6} i f_i + 2k_1 + k_2}{3}.$$

Másrészt

$$f = \sum_{i \geq 6} f_i + 1.$$

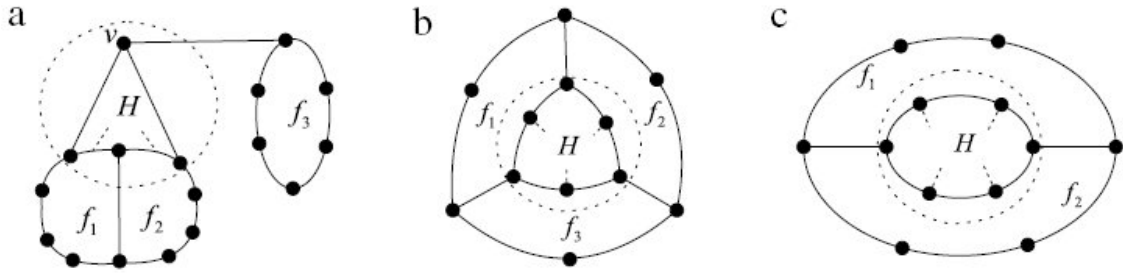
Most a G -re vonatkozó Euler formulát felírva $n - m + f = 2$, azaz

$$\frac{(\sum_{i \geq 6} i f_i + 2k_1 + k_2)}{3} - \frac{(\sum_{i \geq 6} i f_i + k_1 + k_2)}{2} + \sum_{i \geq 6} f_i + 1 = 2,$$

azaz

$$6 + k_2 - k_1 = \sum_{i \geq 6} (6 - i) f_i \leq 0.$$

Mivel $k_2 \geq 0$, következik, hogy $k_1 \geq 6$. \square



3.1. ábra. [5]

3.2.1. Következmény. $G \in \mathcal{G}$ nem tartalmazza a következő részgráfokat:

- (a) két szomszédos f_1, f_2 lapot, amelyek tartalmazzák a v csúcs két különböző szomszédját, viszont v -t nem (lásd 3.1.a ábra);
- (b) három páronként szomszédos lapot, melyek páronként vett metszete 1-1 él, melyeknek nincs közös végpontjuk (lásd 3.1.b ábra);
- (c) két olyan lapot melyek metszete 1-nél több élt tartalmaz (lásd 3.1.c ábra)

Bizonyítás: Ha a G gráf tartalmazná ezen részgráfok egyikét, akkor a H gráfot is tartalmazná (lásd 3.1. ábra), viszont H -ban kevesebb mint 6 darab 2-fokú csúcs van, ami ellentmond a 3.2.1. tételnek. \square

3.2.1. Lemma. Ha a $G \in \mathcal{G}$ gráfban létezik egy belső csúcs, melynek mindhárom szomszédja belső csúcs, akkor G nem 3-rezonáns.

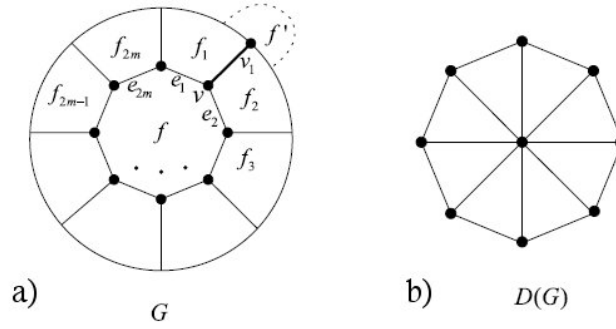
Nem szétválasztható 3-rezonáns gráfnak azon gráfokat nevezzük, melyek nem tartalmaznak **szétválasztó lapokat**, azaz nincs bennük olyan lap, melyet kihagyva a gráfból a gráf legalább 2 komponensre esik szét. Egy f lap a gráfban **belső lap**, ha minden pontja belső pont.

A következő lemmát a későbbiekben használjuk fel:

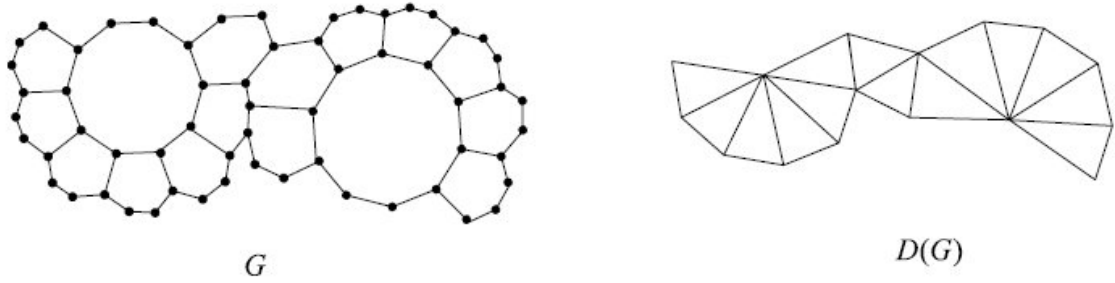
3.2.2. Lemma. Legyen G egy \mathcal{G} -beli nem szétválasztható 3-rezonáns sokszög rendszer. Ha G -nek létezik belső lapja, akkor $D(G)$ egy páratlan számú csúcsot tartalmazó „kerék”.

Bizonyítás: Legyen f a G gráf belső lapja és legyenek f szomszédos lapjai f_1, f_2, \dots, f_{2m} ($m > 2$) mint a 3.2.a ábrán. Tegyük fel, hogy $f \cap f_i = e_i$ ($1 \leq i \leq 2m$). Ekkor a 3.2.1.b következmény alapján teljesül, hogy f_i és f_j akkor és csak akkor szomszédosak, ha $i = j \pm 1$, vagy pedig $i, j \in \{1, 2m\}$. Legyen v_i a $V(f_i)$ és $V(f_{i+1})$ metszete, amely nem f -beli. Tegyük fel, hogy G gráfnak létezik ezen lapokon kívül egy f' lapja. Legyen f' a v_1 -et tartalmazó lap, amely szomszédos f_1 -el és f_2 -vel is. Legyen $v = e_1 \cap e_2$. Ekkor v egy belső csúcs G -ben, melynek mindhárom szomszédja belső csúcs. Ez ellentmondáshoz vezet a 3.2.1. lemma alapján (mivel feltettük, hogy G 3-rezonáns). Tehát következik, hogy G lapjai $f, f_1, f_2, \dots, f_{2m}$, azaz $D(G)$ egy páratlan számú csúcsot tartalmazó „kerék”. \square

Háromszög lánc alatt olyan kétszeresen összefüggő síkgráfot értünk, mely t_1, t_2, \dots, t_n háromszögekből áll úgy, hogy t_i és t_j -nek ($1 \leq i < j \leq n$) akkor és csak akkor van közös élük, ha teljesül, hogy $j = i + 1$ (a 3.3. ábrán látható $D(G)$ gráf egy háromszög lánc).



3.2. ábra. [5]



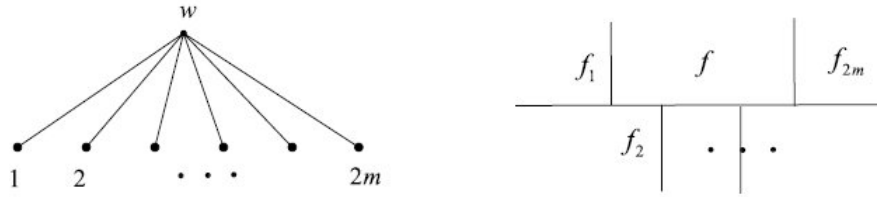
3.3. ábra. [5]

3.2.3. Lemma. *Legyen G egy \mathcal{G} -beli 3-rezonáns nem szétválasztható gráf. Ha G -nek nincs belső lapja, csak belső pontja, akkor $D(G)$ háromszög lánc, melynek 2 végcsúcsa 2-fokú, viszont a többi csúcsa mind páratlan fokú. $D(G)$ páros számú háromszögből áll.*

Bizonyítás: G -nek nincs belső lapja és nem szétválasztható, így G belső pontjai egy T fát képeznek. Valójában T egy út a 3.2.1. lemma alapján. $D(G)$ háromszög lapjai egy-egy T -beli pontnak felelnek meg, így mivel T út, következik, hogy $D(G)$ háromszög lánc.

Az első és az utolsó $D(G)$ -beli háromszögre teljesül, hogy van egy-egy 2 fokú csúcsuk. A többi $D(G)$ -beli csúcs viszont legalább 3 fokú, mivel minden háromszög, az elsőt és az utolsót kivéve, szomszédos 2 másik háromszöggel.

Most belátjuk, hogy $D(G)$ minden csúcsa, kivéve az első és az utolsó háromszögbeli 2 fokú csúcsokat, páratlan fokú. Tegyük fel, hogy létezik $w \in V(D(G))$, hogy w foka $2m (\geq 4)$. Legyen f a w -nek megfelelő lap $D(G)$ -ben és f_1, f_2, \dots, f_{2m} az f szomszédos lapjai sorban (lásd 3.4.a ábra). Mivel G -nek nem létezik belső lapja, feltehető, hogy $f_1 \cap f_{2m} = \emptyset$. A 3.2.1.b következményből látszik, hogy f_i és f_j diszjunktak minden $i \neq j \pm 1$. G nem tartalmaz szétválasztó lapot, ezért f_i és f_{i+1} minden $i = 1, 2, 3, \dots, 2m-1$ -re szomszédos lapok. Így $\bigcup_{i=1}^{2m} f_i \cap f$ egy $2m$ hosszú P út. Ekkor $G - f_1 - f_{2m}$ tartalmaz egy páratlan komponent: $f - P$. Így G nem 2-rezonáns, ami ellentmondás. Következik, hogy $D(G)$ minden pontja - kivéve a végpontokat - páratlan fokú.



3.4. ábra. [5]

Jelölje a $D(G)$ -beli háromszögek számát h . Ekkor $|V(D(G))| = h + 2$, ahol a két végpont 2 fokú csúcs, a többi viszont páratlan fokú. Következik, hogy G gráf csúcsainak fokszám-összege h darab páratlan szám és két darab 2-es összegéből áll. Mivel a fokszámok összege egy gráfban páros, következik, hogy h páros. \square

Egy G gráfbeli P utat **láncnak** nevezünk, ha P minden pontja - kivéve a két végpontot - 2 fokú, és a végpontok nem 2 fokúak G -n belül. A lánc páratlan (páros) ha páratlan (páros) számú élből áll.

3.3. 3-rezonáns rendszerek felépítése

D-típusú (dupla lánc) $G \in \mathcal{G}$ gráfon olyan gráfot értünk, mely nem tartalmaz szétválasztó és belső lapokat, viszont tartalmaz belső csúcsokat. **F-típusú (virág)** $G \in \mathcal{G}$ gráfon olyan gráfot értünk, amely nem tartalmaz szétválasztó lapokat és tartalmaz belső lapokat. A **T-típusú (fa)** gráfnak azon gráfokat nevezzük, melyeknek $D(G)$ duálisa fa, és nem tartalmaznak páros láncokat. Az **O-típusú** gráf egy páros kör.

3.3.1. Megjegyzés. Nem léteznek 3-fokú csúcsok azon részgráfokban, melyeket F-típusú, D-típusú vagy O-típusú rendszerek belső pontjai alkotnak.

Legyen $G \in \mathcal{G}$. \mathcal{R} **páros fedése** G -nek, ha \mathcal{R} olyan feszítő részgráf, mely független lapokból és páratlan G -beli utakból áll, ahol az utakra teljesül, hogy minden pontjuk G határának egy 2 fokú pontja.

3.3.1. Lemma. Legyen G síkbeli gráf és \mathcal{R} egy páros fedés. Ekkor bármely $S \subseteq \mathcal{R}$ -re S -ben és $G - S$ -ben is létezik teljes párosítás, melynek élei \mathcal{R} -beliek.

Ekkor a következő eredményt kapjuk.

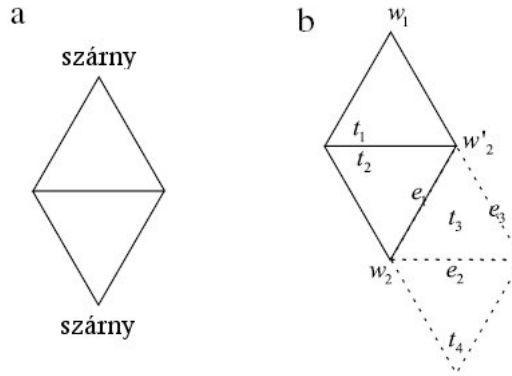
3.3.2. Lemma. Legyen G egy O-típusú, F-típusú vagy D-típusú rendszer. Ekkor G -nek létezik páros fedése.

Bizonyítás:

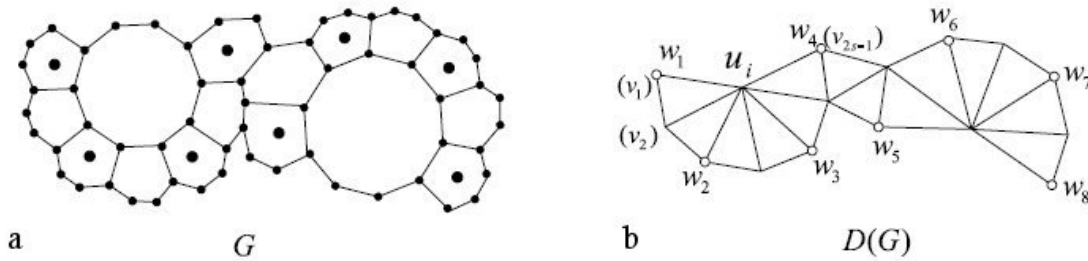
O-típus esete: G páros kör. Ebben az esetben a kör mindkét teljes párosítása 1-1 páros fedést ad.

F-típus esete: Legyen f a G -gráf belső lapja, amely létezik az F-típus definíciója alapján. Legyenek $f_1, f_2, \dots, f_{2m-1}, f_{2m}$ az f szomszédos lapjai sorban, úgy, hogy két egymást követő szomszédos egymással, és az utolsó szomszédos az elsővel is. Ezek a lapok lefedik az f lap összes csúcsát és az ezekhez a lapokhoz tartozó többi csúcsot is. Tekintsük a $G - \bigcup_{i=1}^m f_{2i-1}$ gráfot, ez a gráf páratlan utak független uniója,

azaz $P_2 \cup P_4 \cup \dots \cup P_{2m}$, ahol $P_{2i} \subseteq f_{2i}$ ($1 \leq i \leq m$). Így $\{f_1, f_3, \dots, f_{2m-1}, P_2, P_4, \dots, P_{2m}\}$ a G egy páros fedése. Hasonlóképpen $\{f_2, f_4, \dots, f_{2m}, P_1, P_3, \dots, P_{2m-1}\}$ is páros fedése G -nek, ahol $P_j = (G - \bigcup_{i=1}^m f_{2i}) \cap f_j$ ($j = 1, 3, \dots, 2m - 1$).



3.5. ábra. [5]

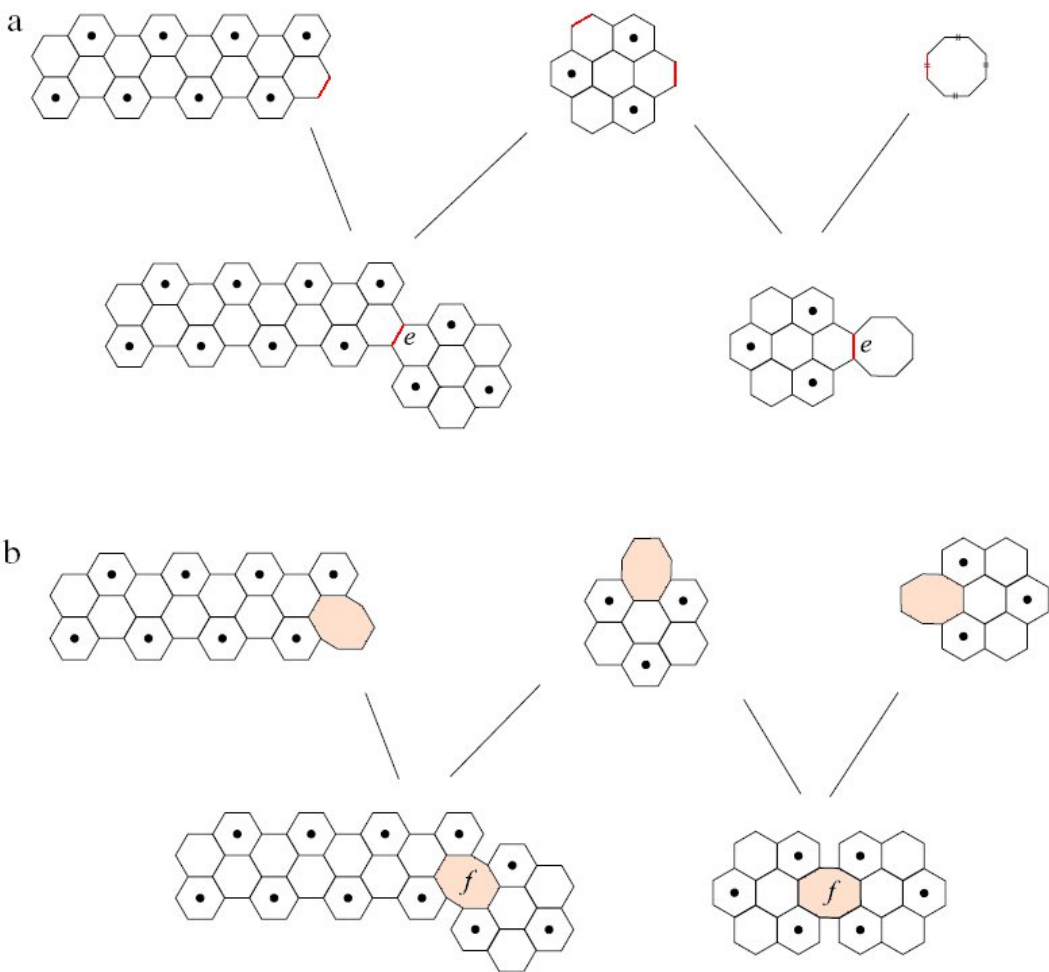


3.6. ábra. [5]

D-típus esete: Tekintsük $D(G)$ -t. $D(G)$ t_1, t_2, \dots, t_{2n} háromszögekből álló háromszög lánc a 3.2.3. lemma alapján. Nevezzük **sárkánynak** a $t_{2i-1} \cup t_{2i}$ uniót ($1 \leq i \leq n$). Ekkor $D(G)$ -ben pontosan n darab sárkány van, amelyek páronkénti metszete vagy egy él, vagy egy csúc, vagy pedig üres halmaz. A k_i ($1 \leq i \leq n$) sárkányban lévő 2 fokú csúcsokat nevezzük **szárnyaknak** (lásd 3.5.a ábra). A sárkány másik két csúcsa 3 fokú és a sárkányt képező két háromszög közös élének végpontja. Tekintsük a k_1 sárkányt, és legyenek ennek szárnyai a w_1 és w_2 csúcsok. Ezen csúcsok egyike eleme a k_2 sárkánynak, legyen ez például a w_2 csúc. Belátjuk, hogy ekkor w_2 szárnya k_2 -nek is. Tegyük fel, hogy nem. Ekkor $w_2 = t_2 \cap t_3 \cap t_4$ (lásd 3.5.b ábra). Tegyük fel, hogy $t_2 \cap t_3 = e_1 = w_2 w'_2$, $t_3 \cap t_4 = e_2$ és a t_3 háromszög harmadik éle e_3 . Ekkor e_3 $D(G)$ határbeli éle, mivel t_3 legfeljebb kettő háromszöggel határos, így w'_2 foka 4. Ami ellentmondás, mert w'_2 foka páratlan. Így beláttuk, hogy w_2 a k_2 sárkány szárnya is és $w_2 \notin t_4$. Ha tekintjük k_2 másik szárnyát - w_3 - akkor ugyanígy belátható, hogy w_3 szárnya k_3 -nak is. Ezt folytatva minden w_i ($i = 2, 3, \dots$) szárnyra belátható, hogy szárnya a k_{i-1} és k_i sárkányoknak és 3 fokú.

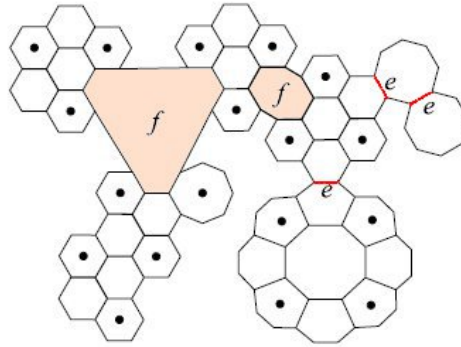
Jelölje a k_n sárkány második szárnyát w_{n+1} . Mivel egy sárkány két szárnya diszjunkt, következik, hogy a $W = \{w_1, w_2, \dots, w_{n+1}\}$ halmaz független pontokat tartalmaz. Emiatt a W elemeinek megfelelő G -beli lapok egy R diszjunkt lapokat tartalmazó halmazzal alkotnak. Legyen $H = \{h_1, h_2, \dots, h_t\}$ azon

G -beli lapok halmaza, melyek $D(G)$ -beli nem-szárny pontoknak felelnek meg. Legyen u_i az a $D(G)$ -beli csúcs melynek a h_i lap felel meg ($1 \leq i \leq t$). u_i -nek páratlan számú szomszédja van, és ezek a csúcsok egy $P = v_1 v_2 \dots v_{2s-1}$ utat alkotnak. Kell, hogy $v_1 \in W$. Ha ez nem teljesülne, akkor v_2 lenne szárny, mivel minden $D(G)$ -beli háromszöghöz tartozik egy szárny. v_2 ebben az esetben azon sárkány szárnya lenne, amely tartalmazza az u_i és a v_1 csúcsokat (amelyek nem szárnyai). Ennek a sárkánynak a másik szárnya v'_2 , amely úgyszintén szomszédos az u_i és v_1 csúcsokkal. Mivel $D(G)$ síkgráf, következik, hogy $v'_2 \notin \{v_1, v_2 \dots v_{2s-1}\}$. $v_1, v_2 \dots v_{2s-1}$ szomszédai u_i -nek a feltételezésünk szerint, így ellentmondásra jutottunk, azaz $v_1 \in W$. Tudván, hogy minden háromszög eleme egy szárnynak, $v_{2j-1} \in W$ minden $1 \leq j \leq s$ esetén (lásd 3.6.b ábra).



3.7. ábra. [5]

$\{v_1, v_3 \dots v_{2s-1}\} \subseteq W$ és ezen csúcsoknak megfelelő G -beli lapok az R halmaz egy részhalmazát alkotják. Így $G - R$ komponensei páratlan utak, egy-egy ilyen P_i út egy-egy h_i -nek része. Továbbá a P_i csúcsai G -ben 2 fokú csúcsok. Következik, hogy $R \cup \{P_1, P_2, \dots, P_t\}$ páros fedése G -nek. A 3.6.a ábrán adott egy példa G páros fedésére, a fedő lapok pontokkal vannak jelölve. \square



3.8. ábra. [5]

Legyenek G_1 és G_2 F-, D- vagy O-típusú gráfok, melyek páros fedése sorra \mathcal{R}_1 és \mathcal{R}_2 . Az \mathcal{R}_i -beli ($i = 1, 2$) utak mindegyike tartalmaz teljes párosítást. Egy ilyen teljes párosításban szereplő él a G_i gráf **M-élének** nevezünk. Egy páros fedésében szereplő lapot **fedő lapnak** nevezünk, míg azokat a lapokat, melyek határa páros fedésbeli utakat tartalmaz **nem-fedő lapoknak** nevezünk. D- vagy F-típusú G gráf esetén a nem-fedő lapoknak páratlan számú szomszédos lapjuk van.

Definiáljuk a összeragasztás és átfedés műveleteket.

G_1 és G_2 gráfok **összeragasztása** az e él mentén (jelölés: $G_1 \vee_e G_2$) a G_1 és G_2 gráfok összeillesztését jelenti 1-1 általuk tartalmazott M-él mentén úgy, hogy az összeragasztás elvégzése után ez a két él egybeesik és az így létrejött új (közös) él lesz az e él (lásd 3.7.a ábra).

G_1 és G_2 gráfok **átfedése** az f lap mentén (jelölés: $G_1 \vee_f G_2$) a G_1 és G_2 gráfok összeillesztését jelenti 1-1 általuk tartalmazott nem-fedő lap mentén úgy, hogy az összeillesztés során a két nem-fedő lap egymásra kerül és így az új f lapot képezik. A művelet elvégzése során, nem képződhetnek 3-nál nagyobb fokú csúcsok vagy páros láncok (lásd 3.7.b ábra).

G_1 és G_2 közös élét, avagy lapját **összeragasztott élnek**, avagy **átfedő lapnak** nevezünk.

Legyenek G_1, G_2, \dots, G_r D-, F- vagy O-típusú gráfok és legyenek az \mathcal{R}_i -k ezen gráfok páros fedései sorban ($1 \leq i \leq r$). Összesen $r-1$ darab összeragasztás és átfedés művelettel a G_1, G_2, \dots, G_r gráfokból felépítünk egy G gráfot. Az $r-1$ darab operációt párossával végezzük el a gráfokra úgy, hogy a kapott G gráf egy \mathcal{G} -beli összefüggő gráf legyen. Az itt szereplő G_i ($1 \leq i \leq r$) gráfokat a G gráf **szegmenseinek** nevezük. A G gráf felépítése során, lehetséges, hogy egy szegmensen több összeragasztás vagy átfedés műveletet végzünk el (lásd példa: 3.8. ábra).

Legyen G egy \mathcal{G} -beli gráf. G egy részgráfját, mely nem tartalmaz szétválasztó lapokat **nem-szétválasztó komponensnek** nevezük. Ezt a részgráfot maximálisnak nevezük, ha őt G más részgráfja nem tartalmazza. Legyen S a gráf csúcsainak egy részhalmaza. Ekkor egy G -beli S -**lebenynek** azt a gráfot nevezük, melynek csúcsai az S -beli pontok és a $G-S$ egy komponensének pontjai. f -**lebenynek** nevezük a $V(f)$ -lebenyt, ahol f G -beli lap.

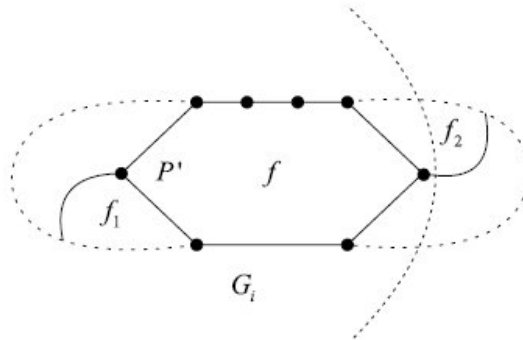
3.3.1. Tétel. Minden $G \in \mathcal{G}$ 3-rezonáns sokszög rendszer felépíthető összesen r darab F-típusú, D-típusú és O-típusú 3-rezonáns gráfból elvégezve rajtuk $r-1$ összeragasztás és átfedés műveletet.

Bizonyítás: Legyenek a G gráf maximális, nem szétválasztható komponensei G_1, G_2, \dots, G_t . Elég belátnunk, hogy minden G_i ($1 \leq i \leq t$) F-, D- vagy T-típusú.

t szerinti indukciót alkalmazunk. A $t = 1$ esetben a tétel triviálisan igaz, mivel G egy 3-rezonáns, nem szétválasztható gráf. Feltesszük, hogy az állítás igaz minden t -nél ($t \geq 2$) kisebb egészre. Tekintsük a t esetét. Válasszunk egy tetszőleges G -beli f nem szétválasztó lapot. Ekkor minden f -lebeny \mathcal{G} -hez tartozik. Be kell látnunk, hogy minden f -lebeny 3-rezonáns.

3.3.1. Állítás. *Legyen f bármely G -beli szétválasztó lap. Ekkor a G -beli, f lapon lévő láncok páratlanok, és az f lap 3 fokú csúcsai páratlan utakat határoznak meg.*

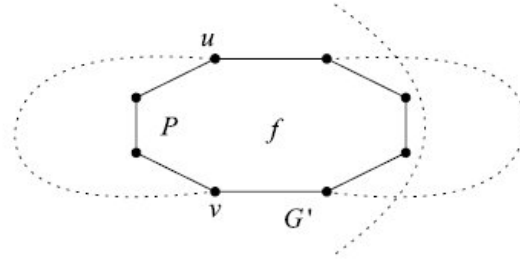
Bizonyítás: Tegyük fel, hogy létezik egy P páros lánc f -en. Mivel f szétválasztó lap, P két végpontja a h_1 és h_2 diszjunkt lapokhoz tartoznak. h_1 és h_2 két különböző f -lebenyhez tartozó lapok. Így $G - h_1 - h_2$ tartalmaz páratlan komponenset, melyet a P lánc belső csúcsai alkotnak. Ebből következik, hogy G nem 2-rezonáns, ami viszont ellentmondás. Másrészt, tegyük fel, hogy f -nek páratlan számú 3 fokú csúcsa van egy G' f -lebenyben. Legyen P' ezen csúcsok által alkotott páratlan út f -en. Ekkor $G' - f$ komponensei a $G - f$ -nek is komponensei. Mivel G 1-rezonáns, $G' - f$ páros számú csúcsból áll. De ekkor $G - f_1 - f_2$ -nek, ahol f_1 és f_2 a gráf két kiválasztott lapja (lásd 3.9. ábra), páratlan számú csúcsa van ebben az f -lebenyben, ami úgyszintén ellentmondás. \square



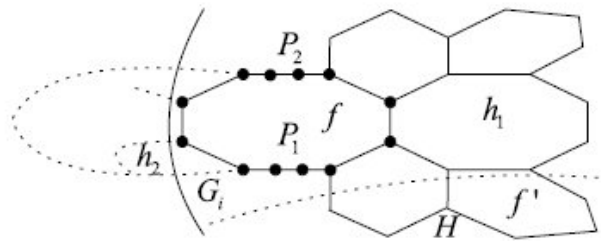
3.9. ábra. [5]

Legyen G' egy G -beli f -lebeny. Ekkor G' -ben léteznek páros fokú csúcsok. Ha ez nem teljesülne, akkor $G - f$ -ben létezne páratlan komponens, ami lehetetlen. Legyen P az az f -beli út, melyet az f lap G' -beli 3 fokú csúcsai képeznek, és legyen P két végpontja u és v (lásd 3.10. ábra). Ekkor a 3.3.1. állítás alapján P egy páratlan út. Állítjuk, hogy G' 3-rezonáns. Ehhez elegendő megmutatni, hogy egy legfeljebb három G' -beli diszjunkt lapból álló F halmaz esetén $G' - F$ minden komponensében létezik teljes párosítás.

Legyen H a $G' - F$ tetszőleges komponense. Ha $f \in F$, akkor H a $G - F$ -nek is komponense. Mivel G 3-rezonáns, következik, hogy H -ban létezik teljes párosítás. Most tegyük fel, hogy $f \notin F$. Ha $f - P \not\subseteq H$, akkor H komponense $G - F$ -nek, és így H -ban létezik teljes párosítás. Feltehető, hogy $f - P \subseteq H$. Legyen M egy $G - F$ -beli teljes párosítás. Ha u és v csúcsok közül csak az egyik - például u - van párosítva az $f - P$ -beli szomszédjával M -ben, akkor következik, hogy $|V(G') \setminus V(f - (P - u))|$ páros, mivel ezek



3.10. ábra. [5]



3.11. ábra. [5]

a csúcsok F -el vagy M -el fedve vannak. Viszont $|V(f - (P - u))|$ páratlan, így $|V(G')|$ is páratlan, ami ellentmondás.

Így mivel $|V(G')|$ páros, következik, hogy egy $G - F$ -beli M párosításon belül u és v csúcsok közül vagy mindkettőnek, vagy egyiknek sem létezik szomszédja $f - P$ -ben. Abban az esetben ha M -ben u -nak és v -nek is létezik $f - P$ -beli szomszédja, akkor H -ban létezik teljes párosítás, amely uniója $M \cap E(H - (f - (P - u - v)))$ -nek és $f - (P - u - v)$ teljes párosításának. Abban az esetben ha M -ben u -nak és v -nek sem létezik $f - P$ -beli szomszédja, akkor a H -beli teljes párosítás $M \cap E(H - (f - P))$ -nek és $f - P$ teljes párosításának az uniója. Így H -nak létezik teljes párosítása. Tehát az f -lebeny 3-rezonáns.

Most felhasználhatjuk az indukciós hipotézist. Az f -lebeny maximális, nem szétválasztható komponensei F -, D - vagy T -típusúak. Így minden f -lebeny minden maximális nem szétválasztható G_i ($1 \leq i \leq t$) komponense F -, D - vagy T -típusú.

A fentiek alapján, a G gráfot a G_1, G_2, \dots, G_t gráfokból kapjuk átfedés műveleteket végezve. A bizonyítás befejezéséhez a következőket igazoljuk.

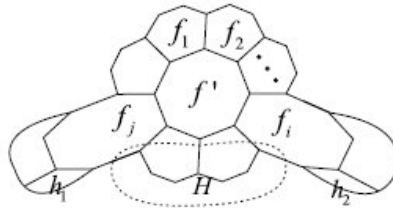
3.3.2. Állítás. *Legyen f egy G -beli szétválasztó lap. Ha f egy D -típusú G_i -beli lap, akkor f nem-fedő lap G_i -ben.*

Bizonyítás: Tegyük fel, hogy f a G_i gráf \mathcal{R}_i páros fedésének fedő lapja a 3.3.2. lemmának megfelelően. Ekkor az f lap megfelel egy $D(G_i)$ -beli w szárnynak. Ugyanígy a w -t tartalmazó sárkány másik szárnyának - w' -nek - megfelel egy f' G_i -beli lap. Legyen h_1 az f egy szomszédos lapja és H a $G - f - h_1$ azon komponense, amely tartalmazza az $f' - h_1$ -et (lásd 3.11. ábra). Ekkor $V(H)$ uniója a $G - f - f'$ néhány komponense által tartalmazott pontoknak és a $V(f' - h_1)$ -nek. Mivel G 3-rezonáns, $G - f - f'$

komponensei párosak. Továbbá $|V(f' - h_1)|$ páros. Így $|V(H)|$ is páros és ezenfelül a G -beli f -hez tartozó láncok páratlanok. Legyen P_1 egy f -hez tartozó páratlan lánc, melynek egyik végpontja szomszédos egy H -beli csúccsal, és legyen h_2 a P_1 másik végpontját tartalmazó lap, amely egy, a h_1 -et nem tartalmazó f -lebenyben van. Jelölje H' a $G - h_1 - h_2$ azon komponensét, amely tartalmazza H -t. Ekkor $|V(H')| = |V(H)| + |V(P_1)| - 1$. Így $|V(H')|$ páratlan ami ellentmondás, hiszen G 2-rezonáns. Így következik, hogy f nem lehet G -beli fedő lap. \square

3.3.3. Állítás. Egy F -típusú G_j esetén, legyen S azon G_j -beli lapok halmaza, melyek szétválasztó lapjai G -nek. Ekkor $S \subseteq \{f_1, f_3, \dots, f_{2m-1}\}$, vagy pedig $S \subseteq \{f_2, f_4, \dots, f_{2m}\}$, ahol f_1, f_2, \dots, f_{2m} G_j -beli lapok, amelyek a G -beli f' lap egymást követő szomszédos lapjai. Az S -beli lapok nem-fedő lapok, ha a G_j páros fedésének részeként tekintjük őket.

Bizonyítás: Elég belátni, hogy S -ben nincs olyan f_i és f_j lap, amelyek esetén i és j különböző paritásúak. Ha létezne S -ben f_i és f_j , melyekre i és j paritása különböző ($i < j$), feltéve azt is, hogy $f_t \notin S$ minden $i < t < j$ -re, akkor $G - h_1 - h_2 - f'$ -nek lenne egy H páratlan komponense (h_1 -et és h_2 -t úgy választjuk, mint a 3.12. ábrán). Így ellentmondásra jutottunk. \square

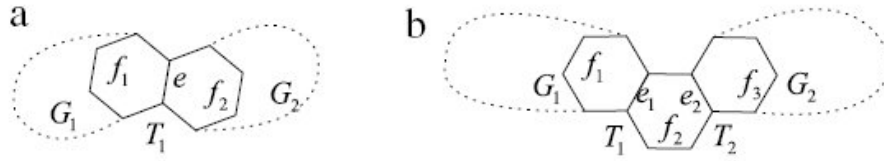


3.12. ábra. [5]

3.3.4. Állítás. A lap-átfedés művelet elvégzése T -típusú G_i -n és G_j -n tekinthető összeragasztás műveletnek.

Bizonyítás: Mivel G_i egy G -beli T -típusú maximális nem szétválasztható komponens, G_i két páros lap uniója melyeknek léteznek közös e élük. Legyenek ezek a lapok f_1 és f_2 . Ekkor $G_i = f_1 \vee_e f_2$, melyben minden páros kör O -típusú. Tegyük fel, hogy G_j maximális nem szétválasztható komponens G -ben, melynek G_i -vel létezik közös lapja - f_1 . Ha valamilyen páros f_0 lapra és e_0 élre $G_j = f_0 \vee_{e_0} f_1$, akkor e és e_0 az f_1 ugyanazon teljes párosításához tartoznak, mivel G -ben nem létezik páros lánc. Így $G_i \cup G_j = f_0 \vee_{e_0} f_1 \vee_e f_2$. Másrészt, f_1 nem-fedő lap G_j -ben a 3.3.1. és 3.3.2. állítások alapján. Mivel f_1 -en nem létezik páros lánc, e egy M -él G_j -ben. Ekkor $G_i \cup G_j = f_2 \vee_e G_j$. A 3.13. ábrán két példa látható. \square

A 3.3.2. és 3.3.3. állításból és az átfedés művelet definíciójából következik, hogy F - vagy D -típusú G_i és G_j gráfokon végzett lap-átfedés művelet tekinthető átfedés műveletnek. Így ezen állítások és a 3.3.4. állítás alapján a bizonyítást befejeztük. \square



3.13. ábra. [5] a) $G_1 \cup T_1 \cup G_2 = G_1 \vee_e G_2$; b) $G_1 \cup T_1 \cup T_2 \cup G_2 = G_1 \vee_{e_1} f_2 \vee_{e_2} G_2$ ahol $T_i = f_i \cup f_{i+1}$ ($i = 1, 2$)

3.4. A \mathcal{G} -beli maximálisan rezonáns rendszerek

3.4.1. Lemma. *Legyen G egy F -típusú, D -típusú vagy O -típusú sokszög rendszer. Ekkor G k -rezonáns bármely $k \geq 3$ -ra.*

Bizonyítás: Ha G egy O -típusú gráf, akkor szükségképpen maximálisan rezonáns. Tegyük fel, hogy a G gráf D - vagy T -típusú. Ekkor a 3.3.2. lemma alapján G -nek létezik páros fedése - \mathcal{R} . A maximális rezonancia definícióját tekintve elegendő belátni, hogy $G - F$ -ben létezik teljes párosítás G -beli diszjunkt lapok bármely F halmazára. Mi valójában egy erősebb állítást fogunk belátni: $G - F$ -ben létezik teljes párosítás, amelyben csak \mathcal{R} -beli élek szerepelnek.

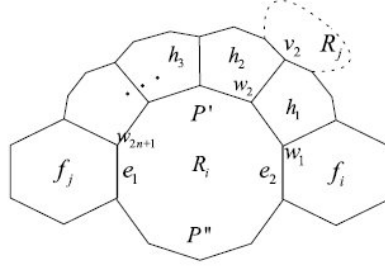
Legyen $\mathcal{R}' := \{R_i \in \mathcal{R} : R_i \in F \text{ vagy pedig } R_i \text{ szomszédos valamely } F\text{-beli lappal}\}$. Ekkor $\mathcal{R}' \subseteq \mathcal{R}$ és így $G - \mathcal{R}'$ -ben létezik M teljes párosítás, amely élei \mathcal{R} -beliek. Ha minden $R_i \in (\mathcal{R}' \setminus F)$ -re $E(F) \cap E(R_i)$ részhalmaza R_i teljes párosításának, akkor $\mathcal{R}' - F$ -ben létezik teljes párosítás - M' . Így $M \cup M'$ olyan teljes párosítása a $G - F$ -nek, amely csak \mathcal{R} -beli éleket tartalmaz.

Be kell még látnunk, hogy $E(F) \cap E(R_i)$ valóban részhalmaza R_i teljes párosításának minden $R_i \in (\mathcal{R}' \setminus F)$ esetén. Vegyük észre, hogy minden \mathcal{R} -beli út különböző G -beli belső laphoz tartozik. Így ha egy \mathcal{R} -beli útnak van közös pontja F -fel, akkor ez az út egy F -beli laphoz tartozik. Tegyük fel, hogy valamely $R_i \in (\mathcal{R}' \setminus F)$ esetén léteznek olyan $f_i, f_j \in F$ lapok - melyek szomszédosak R_i -vel, hogy ezen lapok és az R_i közös élei, e_1 és e_2 , két különböző R_i -beli teljes párosításhoz tartoznak. Így $R_i - e_1 - e_2$ két páratlan útból áll, legyenek ezek P' és P'' . Ezenfelül teljesül, hogy f_i és f_j diszjunktak. Ekkor P' és P'' hossza legalább kettő. Mivel R_i nem elválasztó lap, következik, hogy vagy P' pontjai, vagy pedig P'' pontjai G -belső pontjai. Az általánosság megsértése nélkül feltehető, hogy P' pontjai G belső pontjai. Legyen $P' = w_1 w_2 \dots w_{2n+1}$ ($n \geq 1$) és $w_r w_{r+1} = h_r \cap R_i$, $1 \leq r \leq 2n$ (lásd 3.14. ábra). h_r -nek és h_{r+1} -nek w_{r+1} -en kívül létezik még egy közös csúcsa v_{r+1} .

Mivel v_2 3 fokú csúcs és R_i nem fedi, létezik $R_j \in \mathcal{R}$, $R_j \neq h_1, h_2$, hogy R_j fedi v_2 -t. A 3.3.1. megjegyzés alapján ez nem lehetséges. Így következik, hogy $E(F) \cap E(R_i)$ részhalmaza R_i teljes párosításának minden $R_i \in (\mathcal{R}' \setminus F)$ -re. \square

3.4.2. Lemma. *Legyen G ($\in \mathcal{G}$) egy r darab F -típusú, D -típusú vagy O -típusú sokszög rendszer össze-
ragasztásával vagy átfedésével kapott sokszög rendszer. Ekkor G k -rezonáns bármilyen $k \geq 3$ -ra.*

Bizonyítás: Legyenek G_1, G_2, \dots, G_r a G gráfot felépítő F -, D - és O -típusú gráfok, és legyenek ezen gráfok páros fedései sorra $\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2, \dots, \mathcal{R}_r$. Belátjuk, hogy G diszjunkt lapjainak bármely F halmazára



3.14. ábra. [5]

$G - F$ -ben létezik teljes párosítás, mely élei \mathcal{R}_i -beliek, ahol $i = 1, 2, 3, \dots, r$.

Bizonyítsunk r szerinti indukcióval. Ha $r = 1$, akkor a bizonyítás megegyezik a 3.4.1. lemma bizonyításával. Tegyük fel, hogy az állítás igaz minden r -nél kisebb egész számra. Tekintsük az r esetet. Legyen F a G -beli diszjunkt lapok halmaza. Tegyük fel, hogy G' a G egy összefüggő részgráfja, G' uniója a G_1, G_2, \dots, G_{r-1} gráfoknak és $G = G' \vee G_r$, ahol $G' \vee G_r$ vagy összeragasztás vagy átfedés műveletet jelent a G_i és G_r gráfok között ($i \in \{1, 2, \dots, r-1\}$). Legyen $F_1 = G' \cap F$ és $F_2 = G_r \cap F$.

Először tegyük fel, hogy $G' \vee G_r$ egy összeragasztás művelet és e az összeragasztott él. Ekkor e egy M -él G_i -ben és G_r -ben is. Így léteznek h_1 és h_2 lapok a G_i és G_r gráfokban melyek tartalmazzák az e élt. Mivel F diszjunkt elemeket tartalmaz, következik, hogy h_1 és h_2 közül pontosan egy eleme az F halmaznak. Tegyük fel, hogy $h_1 \notin F$. Az indukciós hipotézis alapján $G' - F$ -ben létezik M_1 teljes párosítás, amely csak \mathcal{R}_i -beli éleket tartalmaz ($i \in \{1, 2, \dots, r-1\}$). Ekkor $e \in M_1$. Másrészt $G_r - F_2$ -ben létezik M_2 teljes párosítás, mely élei \mathcal{R}_r -beliek. Ekkor $(M_1 - \{e\}) \cup M_2$ a keresett $G - F$ -beli teljes párosítás.

Most tegyük fel, hogy $G' \vee G_r$ egy átfedés művelet és f a közös lap. Legyenek P_1, P_2, \dots, P_t f -nek azon útjai, melyeket f G' -beli 3 fokú csúcsai képeznek és P_r pedig az f lap G_r -beli 3 fokú csúcsai által alkotott út. Ekkor ezek az utak páratlan utak, mivel minden átfedés műveletnél képzett közös lapnak páratlan számú szomszédos lapja van \mathcal{G} egy F- vagy D-típusú szegmensében.

1. eset: $f \in F$

Az indukciós hipotézis alapján $G' - F_1$ -ben és $G_r - F_2$ -ben is létezik teljes párosítás, legyenek ezek M_1 és M_2 , amelyek csak \mathcal{R}_i -beli éleket tartalmaznak ($i \in \{1, 2, \dots, r\}$). Ekkor $M_1 \cup M_2$ a $G - F$ keresett teljes párosítása.

2.eset: $f \notin F$

Mivel f átfedő lap, ezért nem-fedő lapja G bármely f -et tartalmazó szegmensének, és nem léteznek G -beli páros utak f -en. Az indukciós hipotézis alapján $G' - F_1$ -ben létezik M_1 teljes párosítás, amely csak \mathcal{R}_i -beli éleket tartalmaz ($i \in \{1, 2, \dots, r-1\}$), melyek P_r -re és a G -beli f -en lévő láncokra korlátozva a nekik megfelelő teljes párosítást adják. Szimmetrikusan, $G_r - F_2$ -ben is létezik teljes párosítás, M_2 , amely csak \mathcal{R}_r -beli éleket tartalmaz, amelyek P_1, P_2, \dots, P_t -re és G -beli f -en lévő láncokra korlátozva a nekik megfelelő teljes párosítást adják. Ekkor $(M_1 - E(P_r)) \cup (M_2 - E(\bigcup_{i=1, \dots, t} P_i))$ a keresett $G - F$ -beli teljes párosítás. \square

Irodalomjegyzék

- [1] Gunnar Brinkmann, Andreas W.M. Dress, *A Constructive Enumeration of Fullerenes*, Journal of Algorithms **23** (1997), 345-358.
- [2] Gunnar Brinkmann, Andreas W.M. Dress, *PentHex Puzzles: A Reliable and Efficient Top-Down Approach to Fullerene-Structure Enumeration*, Advances in Applied Mathematics **21** (1998), 473-480.
- [3] Dong Ye, Zhongbin Qi, Heping Zhang, *On k -resonant fullerene graphs*, SIAM J. Discrete Mathematics **23** (2009), 1023-1044.
- [4] Dong Ye, Heping Zhang, *Extremal fullerene graphs with the maximum Clar number*, Discrete Applied Mathematics **157** (2009), 3152-3173.
- [5] Saihua Liu, Heping Zhang, *Maximally resonant polygonal systems*, Discrete Mathematics **310** (2010), 2790-2800.
- [6] Maolin Zheng, *Construction of 3-resonant benzenoid systems*, Journal of Molecular Structure (Theochem) **277** (1992), 1-14.
- [7] Jean-Sébastien Sereni, Matěj Stehlík, *On the sextet polynomial of fullerenes*, Journal of Mathematical Chemistry **47**, 1121-1128.