Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Jakab Attila

Szénhidrogének optimális párosításai

BSc Szakdolgozat

Témavezető:

Kovács Erika Renáta

Operációkutatási Tanszék

Budapest, 2013

Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Kovács Erika Renátának, aki kifogyhatatlan lelkesedéssel és türelemmel támogatott, rengeteget segített az angol nyelvű források beszerzésében, megértésében, és idejének jelentős hányadát fordította matematikai leírókészségem precízzé tételére. Szeretném családomnak és barátnőmnek Cseh Tímeának is megköszönni azt a rengeteg támogatást és szeretet, melyet tőlük kaptam. Nélkülük ez a szakdolgozat sem jöhetett volna létre.

Köszönöm egyetemi és középiskolás tanáraimnak, akik hozzájárultak szakmai fejlődésemhez, és rengeteg barátomnak, szaktársamnak akikkel az együtt töltött idő alatt rengeteget megtudtam saját magamról. Külön köszönöm Kránicz Grétának és Gyóni Dorottyának önzetlen segítségüket és barátságukat.

Budapest, 2013. május 28.

Jakab Attila

Tartalomjegyzék

1. fejezet

Bevezető

1.1. Motiváció

Rekordáron, 18,4 millió euróért vásároltak meg 2013 májusában a Christies aukciósház genfi árverésén egy különleges, 101,73 karátos, színtelen gyémántot. Az alig több, mint 20 grammos követ óriási érdeklődés övezte. Ha az aukció vezetői valamilyen okból kifolyólag úgy döntenek, hogy egy 20 grammos, a gyémánt vegyi összetételével megegyező grafitdarabot értékesítenek aznap, minden bizonnyal bárki sikeresen licitálhatott volna a korábban zsebében felejtett apróval.
Természetesen nem csak az árban, hanem a két anyag fizikai tulajdonságaiban is jelentős eltérések tapasztalhatók. A grafit puha, lágy anyag, kiváló írószerek gyártásához, míg a gyémánt kemény, más anyagok vágására alkalmas. A grafit vezeti az elektromosságot, a gyémánt szigetel. Bár anyagukat tekintve mindkettő szén, az atomok kapcsolódása eltérő, így fizikai tulajdonságaik is különböznek.
A technológia fejlődésével felmerült a lehetősége további szénmódosulatok létezésének. Elméleti úton 1970-ben már megjósolta fullerének létezését Eiji Osawa, a Toyohashi Műszaki Egyetem kutatója. 1985-ben Harold Kroto, Robert Curl és Richard Smalley igazolta ezt egy 60 szénatomot tartalmazó szénmolekula felfedezésével, amiért 11 évvel később Nobel-díjat kaptak. 1991-ben a fullerének egy újabb típusát írták le, a nanocsöveket. A sorozatos felfedezések és a szénmódosulatok nagy száma idővel a lehetséges felhasználásukat is előtérbe helyezte. Néhány, a fullerének lehetséges alkalmazásai közül:

- Volfrám- és molibdén-szulfidokat tartalmazó zárt fullerének kiváló száraz kenőanyagok, azaz szilárd halmazállapotuk ellenére csökkentik a fellépő súrlódást két felszín között.

- A pásztázó alagútmikroszkóp képalkotásának módja az alagúthatáson alapul. Ennek segítségével 10^{-7} cm méretű objektum is érzékelhető. A mikroszkóp szondájának hajlékony végéhez nanocsövek alkalmazhatóak [10].

- Elektromos vezetőképessége függ a nanocső feltekerésének módjától. Lehetnek félvezetők, vagy vezetők, ezeken belül az átmérő függvényében változik elektronszerkezetük. Egyes nanocsövek vezetőképessége eléri a $4 \cdot 10^6$ A/cm^2-t, ami a réz vezetőképességének több, mint ezerszerese.

- Nanocsöveket különféle fém-szulfidokkal bevonva rendkívül vékony, szigetelt elektromos vezeték hozható létre.

- A nanocsövek végei oxidációval eltávolíthatóak. Az így keletkező nyílt végű nanocsövek alkalmasak mikroszkopikus fém alkatrészek burkolására, megóvva azokat a korróziótól.
- Többfalú nanocsövek szakítószilárdsága kísérletek folyamán 11 és 63 GPa között adódott, ami az acélénak 252-szerese [11]. Ilyen anyag tömeggyártása rendkívüli hatással lenne az építőiparra, autók és repülők kialakítására.
- Gyógyászatban mint segédanyagok vivőanyaga.

A felsorolt alkalmazások nagy része még megvalósításra vár. A jelenlegi technológiával megadott szerkezetű nanocsövek előállítása költséges, gyártásuk időigényes, ráadásul a keletkező nanocsövek gyors és hatékony egymáshoz illesztése is megoldandó feladat. Ugyanakkor grafén előállítása, több technológiai eljárással is lehetséges. A jelenlegi hazai kutatások egyik iránya a grafén molekulából kivágott részletek spontán önszerveződéséből megadott szerzetű nanocsövek előállítása.

1.2. Kémiai kérdés a matematika nyelvén

Nem mindegyik szénvegyület elég stabil az ipari alkalmazáshoz. Azonos összegképletű vegyületeknek is eltérhetnek a tulajdonságai az elektronszerkezet és az atomok kapcsolódásának függvényében. A probléma megoldásában Erich Clar 1972-es munkája jelentett áttörést. Az általa bevezetett, és róla elnevezett Clar szám szorosan összefügg a vegyületek stabilitásával. A kémiai kérdés, ami delokalizált π-kötések maximumát keresi adott szénvegyületben, egy egyszerű matematikai problémaként fogalmazható meg. Legyenek a G gráfunk csúcsai szénatomok, az élek az atomok közötti kovalens kötések. Így kétszeresen összefüggő síkba rajzolható gráf lesz G. Ebben a gráfban a delokalizált π-kötések keresése egyenértékű diszjunkt hatszöglapok csúcsainak kiválasztásával úgy, hogy a ki nem választott csúcsok között legyen teljes párosítás. Szakdolgozatom célja a szénvegyületek stabilitásának vizsgálata a Clar szám segítségével ebben a matematikai modellben.

Az első fejezet tartalmazza az alapvető fogalmakat és tételeket rezonáns halmazokról és a Clar számról. Bemutatásra kerül K. Salem, S. Klavžar és I. Gutman eredménye, mely a rezonáns gráf dimenziója és a Clar szám között teremt kapcsolatot. A második fejezetben a benzenoid gráfok definíciója után minimax-tétel következik a Clar számra benzenoid gráfokban, és egy polinomiális algoritmus, amely a benzenoidok egy speciális osztályában talál meg egy maximális méretű rezonáns halmazt. A harmadik fejezet bemutatja, hogy a Clar szám kiszámítása NP-nehéz általános síkba rajzolható gráfok esetén. A negyedik fejezet egy felső becslést foglal magába a Clar számra szénvegyületek alkalmazásokban leginkább elterjedő osztályára: a fullerénekre.

1.3. Alap definíciók, rezonáns gráf

1.3.1. Def. (Benzenoid gráf) *Olyan kétszeresen összefüggő síkba rajzolható gráf, melynek minden belső lapja egy szabályos hatszög 1 élhosszúsággal.*

1.3.2. Def. (Hatszög) *Vagy hatszög lap, hexagon. A benzenoid gráf egy belső lapját határoló élek és csúcsok összessége.*

1.3.3. Megjegyzés. A szakirodalomban olyan benzenoid definíció is található, mely belső lapjaira megengedjük, hogy páros hosszú, 6-nál több csúcsú kör legyen, ha ezek csúcsdiszjunktak egymástól és a külső laptól. A szakdolgozat nem tárgyalja ezeket az úgynevezett coronahexed gráfokat.

1.3.4. Def. (Szomszédosság) *Azt mondjuk, hogy két különböző belső laphoz tartozó hatszög szomszédos egy benzenoidban, ha metszetük nem üres. Ebben az esetben a metszet mindenképp egy élet és annak két végpontját tartalmazza.*

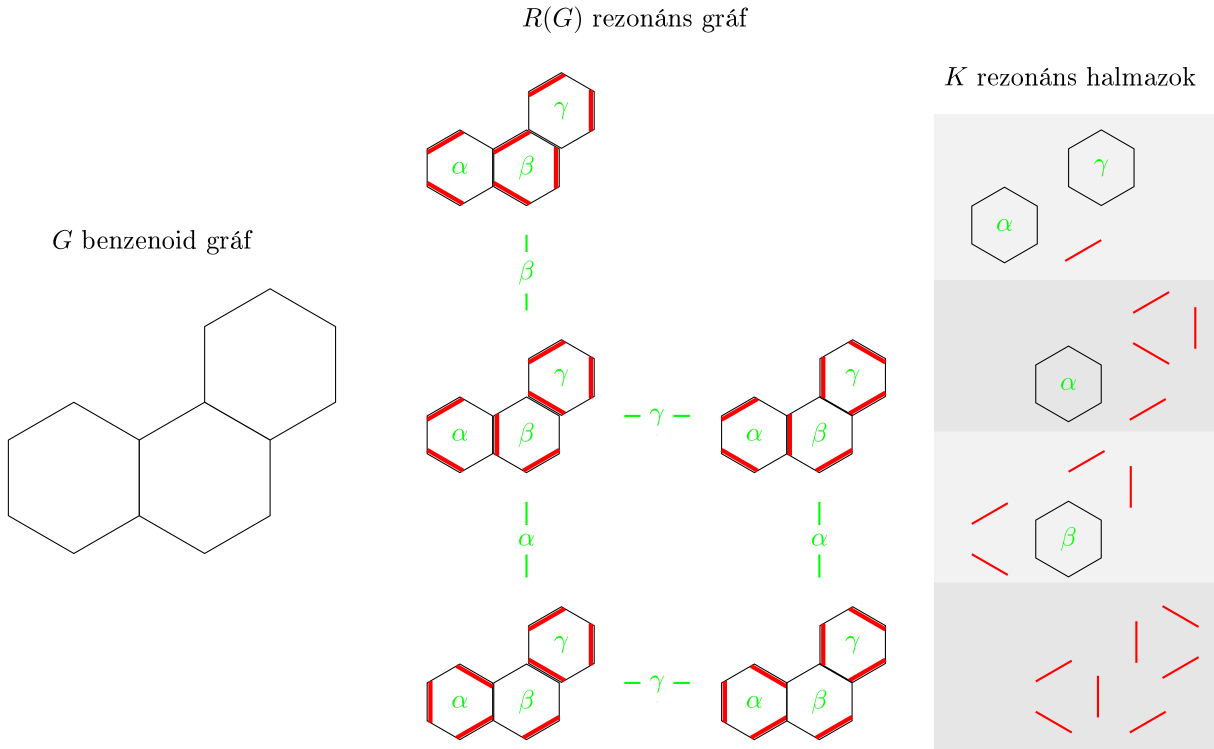
1.3.5. Def. (Rezonáns gráf) *Definiáljunk egy olyan $R(G)$ gráfot, amely a G teljes párosítással rendelkező benzenoid minden különböző teljes párosításának feleltet meg egy csúcsot. Két csúcs akkor szomszédos $R(G)$-ben, ha a nekik megfelelő teljes párosítások szimmetrikus differenciája egy hatszög.*

1.3.6. Def. (Rezonáns halmaz benzenoid gráfban) *Legyen G benzenoid gráf. Azt mondjuk, hogy hatszögek egy K halmaza rezonáns halmaza G-nek, ha diszjunkt H_i hatszögekből áll, és $\overline{K} := \overline{\bigcup H_i}$ üres vagy tartalmaz teljes párosítást.*

1.3.7. Megjegyzés. Ha K rezonáns halmaz, akkor $K \setminus H$ is rezonáns halmaz tetszőleges $H \in K$-ra.

1.3.8. Megjegyzés. Ha K rezonáns halmaz, akkor léteznek M és M' teljes párosítások, melyekre $K = M \Delta M'$, ahol Δ jelöli a szimmetrikus differenciát.

Az alábbi ábrán G benzenoid gráf szerepel, a hozzá tartozó $R(G)$ rezonáns gráffal. A gráf élein jelölve van, mely hatszög mentén alternálnak a párosítások, azaz mely hatszög a két teljes párosítás szimmetrikus differenciája. Az ábra jobb oldalán lehetséges K rezonáns halmazok és pirossal az azokhoz tartozó $\overline{K}$-ban teljes párosítások vannak jelölve.



1.3.9. Def. (Clar szám benzenoid gráfban) *Legyen G benzenoid gráf. Azt mondjuk, hogy G Clar száma $Cl(G)$, ha $Cl(G)$ a rezonáns halmazok számosságának maximuma G-ben.*

1.3.10. Def. (k-dimenziós hiperkocka) *Legyen $k \in \mathbb{N}$, $E_k := \{\{v_i, v_j\} : v_i, v_j \in \mathbb{F}_2^k$ pontosan egy koordinátában térnek el egymástól $\}$. Jelöljük Q_k-val és nevezzük k-dimenziós hiperkockának $G = (\mathbb{F}_2^k, E_k)$ gráfot.*

1.3.11. Tétel. *A rezonáns gráf k-dimenziós hiperkockával izomorf részgráfjaira teljesül, hogy ha csúcsait a definíciónak megfelelő k hosszú vektorral címkézzük, akkor az i-dik koordináta módosítása mindig ugyanazon H_i hatszög mentén alternálja a párosítást.* $\square$

1.3.12. Def. (Rezonáns gráf dimenziója)

$$dim(R_B) := \max\{k : Q_k \subseteq R(B)\}$$

1.3.13. Tétel. (K. Salem, S. Klavžar, I. Gutman)

$$dim(R_B) = Cl(B)$$

.

Bizonyítás. Vegyünk egy olyan K rezonáns halmazt, melynek $Cl(B)$ darab hatszög az eleme, és indexeljük ezeket H_1-től $H_{Cl(B)}$-ig. $\overline{K}$-ban rögzítsünk valamilyen M teljes párosítást. Tekintsük $R(B)$ azon csúcsait, melyekben K-t teljes párosítás fedi. Ez $2^{Cl(B)}$ darab csúcs, hiszen minden hatszögben kétféle párosítás vehető, minden más rögzített. Minden hatszögnek K-ból jelöljük ki egy élét és rendeljünk 1-et vagy 0-t a hatszöghöz annak függvényében, hogy a kijelölt él szerepel-e $R(B)$ csúcsához tartozó párosításban, vagy nem. Ezáltal egy $Cl(B)$ hosszú, páronként különböző $0, 1$ vektort kapunk $R(B)$-nek $2^{Cl(B)}$ csúcsára. Ha két csúcs pontosan egy koordinátában tér el egymástól, akkor szimmetrikus differenciájuk hatszög lesz [4], így össze lesznek kötve. Így lesz legalább $Cl(B)$ dimenziós hiperkocka részgráfja $R(B)$-nek. Így megkaptuk, hogy $Cl(B) \leq dim(R_B)$.

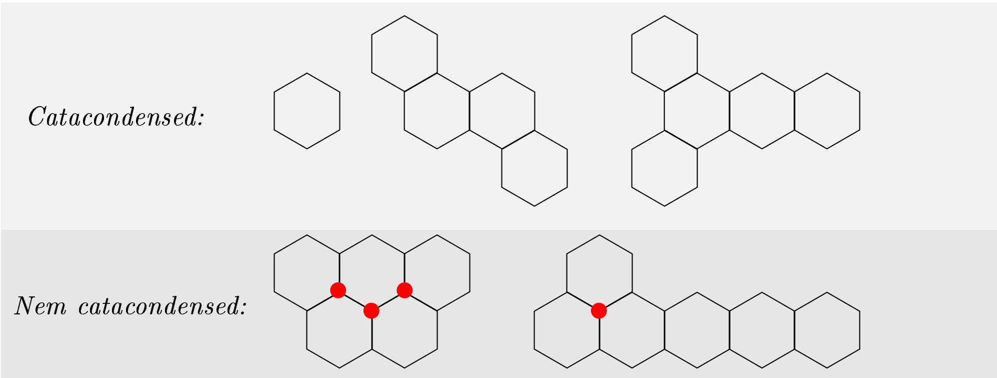
Tegyük fel, hogy $Cl(B) < dim(R_B) := k$. Legyen Q_k egy k-dimenziós hiperkockával izomorf részgráf R_B-ben. Q_k valamely x csúcsa k másikkal szomszédos, azokkal vett szimmetrikus differenciája k darab hatszög $R(B)$-ben. Ezek a hatszögek kölcsönös helyzetüket tekintve lehetnének azonosak, szomszédosak vagy diszjunktak. A benzenoidok szerkezete nem tesz mást lehetővé, például hogy egyetlen csúcs legyen a metszetük. Azonosak nem lehetnek, hiszen akkor két különböző csúcshoz tartozna ugyanaz a teljes párosítás. Indirekten tegyük fel, hogy van két szomszédos hatszög és az x csúcs nem tartalmazza a közös élüket. A közös él két végpontja így csak egy-egy hatszög párosításában szerepelhet, így viszont ellentmondásba kerülünk azzal, hogy az x csúcs mindkét szomszédjával vett szimmetrikus differenciája egy-egy hatszög. Ha x tartalmazza a közös élet, akkor létezik pontosan két olyan szomszédos u, v csúcs, melyek nem tartalmazzák a közös élet. Létezik egy y csúcs, mely szomszédos u, v csúcsokkal. Itt x, u, v, y egy négyzetlapja a hiperkockának, tetszőleges két szomszédos szimmetrikus differenciája hatszög. Mivel u és v alternál két szomszédos hatszöglapon, így $u\Delta y$ és $v\Delta y$ hatszögek azonosak $u\Delta x$ és $v\Delta x$ hatszögekkel. Ekkor y-nak tartalmaznia kell a két hatszög közös élét, de a közös éllel szomszédos két élet is, hogy alternálhasson a megfelelő hatszögekre. Így viszont y nem lehet teljes párosítás. $\square$

2. fejezet

Benzenoidok Clar száma

2.1. Catacondensed benzenoidok

2.1.1. Def. (Catacondensed) *Olyan benzenoid gráf, melynek minden csúcsa határos a külső lappal.*



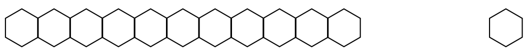
2.1.2. Def. (Átellenes él) *Legyen G benzenoid gráf. Legyenek e és f élek egy $H \in G$ hatszögben. Azt mondjuk, hogy e-vel átellenes egy f él, ha f egyik végpontja sem szomszédos e bármely végpontjával.*

2.1.3. Megjegyzés. Az élek átellenessége ekvivalencia-relációt definiál, G éleit ekvivalencia-osztályokba sorolja.

2.1.4. Def. (Egyenes vágás) *Olyan vágás G benzenoid gráfban, mely az átellenességre nézve pontosan egy ekvivalencia-osztályát tartalmazza G-nek. Egy hatszöget elvág egy egyenes vágás, ha tartalmazza élét.*

2.1.5. Def. (Lineáris lánc) *Olyan G catacondensed gráf, melyben minden harmadfokú csúcsnak pontosan egy harmadfokú szomszédja van.*

Két példa lineáris láncra:

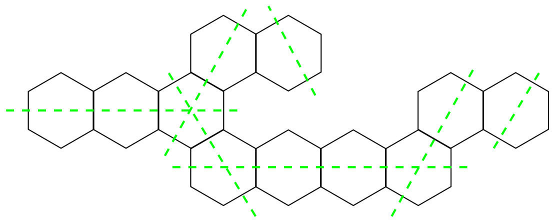


2.1.6. Megjegyzés. G catacondensed gráfban egyenes vágás által elvágott hatszögek lineáris lánc részgráfot alkotnak.

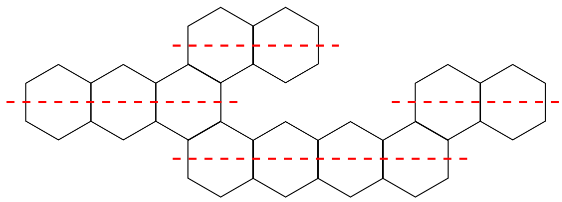
2.1.7. Def. (Fedő vágássorozat) *Azt mondjuk, hogy egyenes vágások egy sorozata fedi G-t, ha G minden hatszögét elvágja a sorozatból egy egyenes vágás.*

2.1.8. Def. (Minimális fedő vágássorozat) *Azt mondjuk, hogy egy fedő vágássorozat minimális, ha nincs nála kisebb számosságú fedő vágássorozat. Számosságának jele: $\Phi(G)$.*

Fedő vágássorozat:



Minimális fedő vágássorozat:



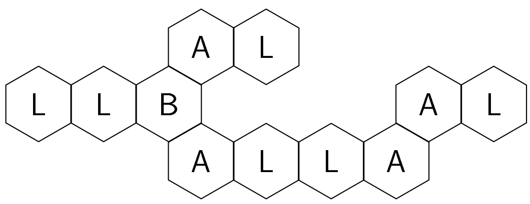
2.1.9. Állítás. *Legyen G tetszőleges catacondensed gráf. Ekkor $\Phi(G) \geq Cl(G)$.*

Bizonyítás. Legyen G' lineáris lánc. Ekkor G' Clar száma 1. Ha a lánc tetszőleges hatszögét kiválasztjuk K rezonáns halmazba, akkor $\overline{K}$-ban létezni fog és egyértelmű lesz a teljes párosítás.
Tekintsük G catacondensed gráf összes lineáris lánccal izomorf részgráfját. Ezekből a részgráfokból legfeljebb 1 hatszög választható K-ba. $\overline{K}$-ban lesz csúcsa minden további hatszögnek a részgráfból, így azok már biztosan nem választhatók K-ba. Az állítás abból adódik, hogy egyenes vágás által elvágott hatszögek lineáris lánc részgráfot alkotnak, melyekből legfeljebb 1 hatszög választható K-ba. $\square$

2.1.10. Def. A hatszögek fajtái egy catacondensed gráfban:

- **(Lineáris összekötő hatszög)** *Olyan hatszög, melyet pontosan egy átellenes élpárjában metszi két szomszédos hatszöge. Jele: L.*
- **(Szögben összekötő hatszög)** *Olyan hatszög, melynek két szomszédja van, de nem lineáris összekötő hatszög. Jele: A.*
- **(Láncvégi hatszög)** *Olyan hatszög, melynek legfeljebb egy szomszédja van. Jele: L.*
- **(Elágazó hatszög)** *Olyan hatszög, melynek három szomszédos hatszög lapja van. Jele: B.*

Catacondensed gráf hatszögeinek fajtái:



2.1.11. Tétel. *Legyen G catacondensed gráf. Ekkor létezik láncvégi hatszöge.*

Bizonyítás. Tegyük fel indirekten, hogy létezik olyan G catacondensed gráf, melynek nincs láncvégi hatszöge. Vegyük a gráf duálisát, töröljük a külső laphoz tartozó csúcsot és éleket, és jelöljük G^*-gal.

Ebben a gráfban minden csúcs fokszáma legalább 2, így tartalmaz legalább egy C kört.
Egy kör G^*-ban, az kör lesz G duálisában is, így C vágás lesz G-ben. Tehát $G \setminus C$ nem összefüggő.
C vágás G-ben nem tartalmaz a külső lappal határos élet, hiszen a külső laphoz tartozó csúcs és élek nincsenek G^*-ban. Catacondensed gráfban minden csúcs határos a külső lappal, ezeket összeköti a külső laphoz tartozó élek $G \setminus C$-ben, így $G \setminus C$ összefüggő ami ellentmondás. $\square$

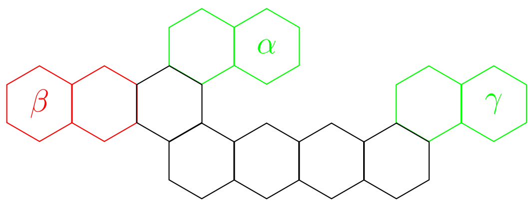
2.1.12. Megjegyzés. Az ellentmondást abból kaptuk, hogy G^*-ban van kör, azaz G^* fa.

Tekintsük G catacondensed gráf egy tetszőleges láncvégi hatszögét, és soroljuk fel a hatszögek fajtáját ettől a hatszögtől kezdődően a szomszédosokon keresztül az első nem lineáris összekötő hatszögig. Ez az utolsó betűt leszámítva egy csupa L betűsorozatot eredményez.

2.1.13. Def. (Végszekvencia) *Catacondensed gráf egy L_v láncvégi hatszögéhez tartozó fenti $(L, L, \dots, L, x)$ betűsorozatot, ahol $x = \{L, A, B\}$ az L_v-hez tartozó végszekvenciának nevezzük. Jele: $\langle L_v \rangle$.*

2.1.14. Def. (Hasítás) *Azt mondjuk, hogy G catacondensed gráfból valamely L_v láncvégi hatszöghöz tartozó végszekvenciát lehasítjuk, ha G-ből töröljük a végszekvenciában felsorolt összes L-lel és A-val jelölt hatszöget.*

Lehasítható végszekvenciák:



α végszekvenciája: (L, A)

β végszekvenciája: (L, L, B)

γ végszekvenciája: (L, A)

2.1.15. Megjegyzés. Hasítások hatással vannak a megmaradó gráf hatszögeire.

- Ha egy végszekvencia tartalmaz elágazó hatszöget, abból a hasítás után G'-ben szögben összekötő hatszög lesz.
- Ha egy végszekvencia tartalmaz A-t, melynek szomszédja szintén A, abból a hasítás után G'-ben láncvégi hatszög lesz.
- Ha egy végszekvencia tartalmaz A-t, melynek szomszédja B, abból a hasítás után G'-ben szögben összekötő hatszög lesz.

2.1.16. Def. (A-hasítás) *Hasítás speciális esete, amikor olyan L_v láncvégi hatszöget hasítunk le G catacondensed gráfból, melynek végszekvenciájában nincs elágazó hatszög.*

2.1.17. Def. (B-hasítás) *Tegyük fel, hogy létezik olyan B_v elágazó hatszög G catacondensed gráfban, mely legalább két végszekvenciában: $\langle L_{v_1} \rangle, \langle L_{v_2} \rangle$-ben szerepel. Ekkor töröljük ezt a két végszekvenciát G-ből.*

2.1.18. Megjegyzés. A hasítás és az egyenes vágás hasonló fogalmak, mégis szükséges mindkettő bevezetése. Catacondensed gráfok esetén az egyenes vágás és a hasítás kapcsolatának bemutatása után hatékony algoritmust nyerünk, mely nem csak a Clar számot adja meg, de egy maximális méretű rezonáns halmazt is kapunk. Általános benzenoidokban egyenes vágások általánosításával tudunk minimax tételt kimondani a Clar számra.

A következő minimax tételt több lemma segítségével bizonyítjuk.

2.1.19. Tétel. (S. Klavžar, P. Žigerta, I. Gutman) *Egy G teljes párosítással rendelkező catacondensed gráfban $Cl(G) = \Phi(G)$.*

2.1.20. Lemma. *Legyen G' catacondensed gráf, melyet G catacondensed gráfból kapunk A-hasítással. Ekkor $Cl(G') + 1 = Cl(G)$.*

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy ki tudunk választani olyan L_v láncvégi hatszöget, mely végszekvenciájában van szögben összekötő A hatszög. Ekkor párosítsuk A két csúcsát, melyek csak A-hoz tartoznak. A végszekvencián kívüli részből, azaz G'-ből válasszunk ki maximális rezonáns $K_{G'}$ halmazt. $\overline{K_{G'}}$-ben rögzítsünk egy teljes párosítást. Így már csak a végszekvencia A-n kívüli hatszögeinek csúcsait nem párosítottuk. Mivel ez egy lineáris lánc, így Clar száma 1 lesz. L_v nem szomszédos G' semelyik hatszögével. $K_G := K_{G'} \cup L_v$ rezonáns halmaza G-nek. Így $Cl(G') + 1 \leq Cl(G)$.
$Cl(G') + 1 = Cl(G)$ is teljesül, ugyanis a szigorú egyenlőtlenséghez vagy két hatszöget kell választani K-ba $\langle L_v \rangle$-ból, ami lehetetlen, vagy $Cl(G') + 1$ hatszöget G'-ből és 1 hatszöget $\langle L_v \rangle$-ból úgy, hogy $\overline{K}$-t fedi N G-beli teljes párosítás. N olyan, hogy valamely $u \in G' \cap \overline{K}$ csúcs párja N-ben $u' \in \langle L_v \rangle \setminus G'$, különben ellentmondásra jutnánk G' Clar számával. Ezt nevezzük $(*)$ tulajdonságnak. Tekintsük azon csúcsokat, melyek elemei $G' \cap \langle L_v \rangle$-nek. Catacondensed gráfok szerkezete miatt $|G' \cap \langle L_v \rangle| = 2$. Csupán ezek N-beli párja lehet $\langle L_v \rangle \setminus G'$-beli. Jelölje $x, y \in G' \cap \langle L_v \rangle$ csúcsok N-beli párját x', y'. Ha $x' = y$, akkor N nem lehet $(*)$ tulajdonságú. Ha $|\{x', y'\} \cap \langle L_v \rangle| = 1$, akkor páratlan sok csúcsot kellene párosítani $\langle L_v \rangle$ részgráfban, ez ellentmond annak, hogy $\overline{K}$-ban van teljes párosítás. Ha $x', y' \in \langle L_v \rangle \setminus G'$, akkor létezik $N_{G'}$ teljes párosít G'-ben, mely azonos N teljes párosítással $G' \setminus \{x, y\}$-ra megszorítva, és tartalmazza xy élet. Ehhez létezik $N'_{G'}$ teljes párosítás, mellyel $N_{G'}$-nek vett szimmetrikus differenciája $Cl(G') + 1$ hatszög ami ellentmondás.
Tegyük fel, hogy nem tudunk kiválasztani olyan L_v láncvégi hatszöget, mely végszekvenciájában van szögben összekötő A hatszög. Ekkor G lineáris lánc, aminek a Clar száma 1. A rezonáns halmazba beválasztható lesz a lineáris lánc tetszőleges láncvégi hatszöge. A-hasítás törli G gráfot. $\square$

2.1.21. Lemma. *Legyen G'' catacondensed gráf, melyet G catacondensed gráfból kapunk B-hasítással. Ekkor $Cl(G') + 2 = Cl(G)$.*

Bizonyítás. Tekintsük azt a B_v elágazó hatszöget G-ben, melyet lehasítottunk B-hasítással. Legyen $\langle L_{v_1}, L_{v_2} \rangle$ olyan, hogy $B_v \in \langle L_{v_1} \cap L_{v_2} \rangle$. Ekkor L_{v_1} beválasztható tetszőleges $K'' \subseteq G''$ rezonáns halmazba, ugyanis az alábbi feltételek teljesülnek: $L_{v_1} \cap K''$ csúcsdiszjunkt, valamint $\langle L_{v_1} \rangle \setminus B_v$-ben és B_v két csúcsában lesz teljes párosítás. Ez a teljes párosítás egyértelmű, és akkor is az volna, ha a végszekvencia bármely másik elemét választjuk a rezonáns halmazba. Szimmetria miatt ugyanez mondható el L_{v_2}-ről. Végül kell, hogy $L_{v_1} \cap L_{v_2} = \emptyset$, ami mindig teljesül, mivel $B_v \neq L_{v_1}$ és $B_v \neq L_{v_2}$, így a kettő együtt is beválasztható tetszőleges G'' rezonáns halmazba. $\square$

2.1.22. Lemma. *Legyen G catacondensed gráf. Ekkor mindig létezik A-hasítás, vagy B-hasítás.*

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy nem lehetséges A-hasítást végrehajtani, vagyis minden láncvégi hatszög végszekvenciájában szerepel B. Ekkor létezik olyan B_v elágazó hatszög, mely legalább két végszekvenciában szerepel. Vegyük ugyanis a gráf duálisát, töröljük a külső laphoz tartozó csúcsot és éleket, és jelöljük G^*-gal. A 2.1.12 megjegyzésből tudjuk, hogy G^* fa, azaz eggyel több csúcsa van, mint éle. Indirekten ha minden láncvégi hatszöghöz különböző elágazó hatszög tartozna, akkor legalább annyi elágazó hatszög lenne a benzenoidban, mint láncvégi. Azaz G^*-ban legalább annyi csúcsnak lenne 3 a fokszáma, mint ahánynak 1. Minden további csúcs fokszáma 2. A fokszámok összege az élszám kétszerese, így ellentmondásra jutunk azzal, hogy egy fában legalább annyi él lenne, mint csúcs. □

2.1.23. Állítás. *Minden A-hasításhoz létezik egyenes vágás, mely elvágja a hasításbeli hatszögeket.*

Bizonyítás. Válasszuk a végszekvenciához tartozó láncvégi hatszög szomszédjával közös élét az egyenes vágásba. A lineáris összekötő hatszög definíciója és a végszekvencia definíciója miatt az egyenes vágás a végszekvencia minden hatszögének tartalmazni fogja élét. □

2.1.24. Állítás. *Minden B-hasításhoz létezik* 2 *egyenes vágás, mely elvágja a hasításbeli hatszögeket, kevesebb nem.*

Bizonyítás. Válasszuk a végszekvenciához tartozó láncvégi hatszögek szomszédjukkal közös élét az egyenes vágásokba. A lineáris összekötő hatszög definíciója és a végszekvencia definíciója miatt az egyenes vágások a végszekvencia minden hatszögének tartalmazni fogják élét. Kevesebb egyenes vágás nem elég, mert nem létezik olyan lineáris lánc, mely tartalmazná mindkét láncvégi hatszöget. □
Ezzel igazoltuk, hogy $\Phi(G) = Cl(G)$, ugyanis $\Phi(G) \geq Cl(G)$ teljesül 2.1.9 miatt. A- , és B-hasítások esetén mindig annyival csökken a Clar szám, ahány egyenes vágás elég a hasításbeli hatszögek fedéséhez, így $\Phi(G) \leq Cl(G)$. Valamint mindig létezik A-hasítás, vagy B-hasítás.

2.1.25. Állítás. (Rendezett (A, B)-hasítás) *Legyen G catacondensed gráf. Ekkor A- , és B-hasítások egymás utáni alkalmazásával, mindig a hasítások láncvégi hatszögeit kiválasztva $Cl(G)$ számosságú rezonáns halmazhoz jutunk.* □

2.2. Általános benzenoidok

Ebben a fejezetben minden eredményt olyan G benzenoid gráfra mondunk ki, melyben található teljes párosítás.

2.2.1. Tétel. (Clar LP) *A maximális rezonáns halmaz kiválasztása az alábbi primál feladat megoldása: Legyen G benzenoid gráf, F rezonáns halmaza G-nek, M teljes párosítás $\overline{F}$-ben. Minden csúcsot G-ből pontosan egyszer fedjünk le F-beli hatszöggel vagy M-beli párosításbeli éllel. Ekkor tekintsük az alábbi egészértékű programozási feladatot:*

$$\max\left\{1^T y : Kx + Ry = 1, x \in Z_+^E, y \in Z_+^F\right\}$$

ahol K a G incidenciamátrixa, R a $V \times F$ méretű csúcs-hatszöglap incidenciamátrix, Z_+^E, Z_+^F nemnegatív egész vektorok, melyek koordinátái E és F elemei szerint indexeltek.

Abeledo és Atkinson megmutatták, hogy $[KR]$ unimoduláris, de nem teljes unimoduláris mátrix. Szerencsére a polinom idejű számításnak nem feltétele az utóbbi, mivel a nemnegativitási feltételen kívül minden további feltételt egyenlőség szab meg.
A minimax tétel kimondásához Hansen és Zheng definiálta a duális feladatot egyenes vágások általánosítása segítségével.
Feltettük, hogy G benzenoid gráf páros, így csúcsai színezhetők két színnel: pirossal és kékkel. Jelük: V_p, V_k lesz, élek csak a két színosztály között futhatnak.

2.2.2. Def. (Elemi vágás) *Legyen G benzenoid gráf, $\hat{Z}$ halmaz G éleinek egy speciális részhalmaza, melyre:*

1. *$G \setminus \hat{Z}$ két komponensre esik szét úgy, hogy minden $e \in \hat{Z}$ él végpontjai különböző komponensbe essenek. Azaz $\hat{Z}$ gráfelméleti vágás.*
2. *$\hat{Z}$ élek azonos komponensbe eső végpontjai azonos színosztálybeliek.*

2.2.3. Megjegyzés. Egyenes vágások kielégítik a fenti definíciót.

2.2.4. Def. (Fedő elemi vágássorozat) *Azt mondjuk, hogy elemi vágások egy sorozata fedi G-t, ha G minden hatszögét elvágja a sorozatból egy elemi vágás.*

2.2.5. Def. (Elemi vágás súlya) *Legyen G benzenoid gráf, M egy teljes párosítása G-nek. Ekkor erre a teljes párosításra vonatkoztatott súlya egy $\hat{Z}$ elemi vágásnak*

$$m_M(\hat{Z}) := \left|M \cap \hat{Z}\right|$$

2.2.6. Tétel. *Legyen G benzenoid gráf. Adott $\hat{Z}$ elemi vágás súlya tetszőleges teljes párosításra nézve azonos.*

Bizonyítás. Minden G benzenoid gráf páros, csúcsai két színosztályba sorolhatóak: V_p, V_k. Mivel feltettük, hogy létezik M teljes párosítás, így $|V_p| = |V_k|$. Tetszőleges $\hat{Z}$ elemi vágásra $G \setminus \hat{Z}$ két komponensből áll, ezeket jelölje A és B. Továbbá adott színosztályba tartozó csúcsokat a komponenseken belül jelöljük $A = A_p \cup A_k, B = B_p \cup B_k$ módon. Mivel $|V_p| = |A_p| + |B_p|$ és A_p, A_k, B_p, B_k páronként diszjunktak, így valamilyen $m \in \mathbb{Z}$ számra: $|A_p| = |A_k| + m$ és $|B_p| + m = |B_k|$. Szimmetria miatt feltehető, hogy m nem negatív. A_p csúcsai legfeljebb $|A_k|$ csúccsal párosíthatók A-ból, a többi párosítása B_k-beli csúcsokkal történik. Az elemi vágás definíciójának második pontja alapján vagy csak A_k és B_p, vagy csak A_p és B_k között futhatnak élek.
Tegyük fel, hogy $m > 0$. Ekkor nem párosítható A_p összes csúcsa A-beli csúccsal, így A_p és B_k között fut, A_k és B_p között nem fut él. Emaitt A_k minden csúcsa A_p-beli csúccsal van párosítva tetszőleges M esetén.
Tegyük fel, hogy $m = 0$. Ekkor ha valamely A-beli csúcsot B-belivel párosítunk, akkor ellentmondásra jutnánk az elemi vágás második pontjával, vagy azzal a ténnyel hogy létezik M teljes párosítás. Emaitt A_k minden csúcsa A_p-beli csúccsal van párosítva tetszőleges M esetén.
Szimmetriai okokból B_p-re ugyanez meggondolható. A_p és B_k párosítatlan csúcsainak száma pontosan m. Ezek tetszőleges M esetén párosítva voltak, és csak a kettő csúcshalmaz közötti m darab éllel. Ezen éleket tartalmazza $\hat{Z}$ elemi vágás. $\square$

2.2.7. Megjegyzés. Fedő elemi vágássorozat súlya azonos tetszőleges teljes párosításra.

2.2.8. Def. (Fedő elemi vágássorozat súlya) *Legyen G benzenoid gráf, M egy teljes párosítása G-nek. Legyen $(\hat{Z}_n)$ egy fedő elemi vágássorozat, ahol $n \in \mathbb{N}$. Ekkor erre a teljes párosításra vonatkoztatott súlya $(\hat{Z}_n)$-nek:*

$$m(\hat{Z}_n) := \sum_{\hat{Z} \in (\hat{Z}_n)} m(\hat{Z})$$

2.2.9. Állítás. *Legyen G benzenoid gráf.*

$$\min_{(\hat{Z}_n)} \left\{ m(\hat{Z}_n) \right\} \geq Cl(G)$$

Bizonyítás. Legyen $(\hat{Y}_n)$ olyan fedő elemi vágássorozat, mely realizálja a fenti minimumot, és legyen K rezonáns halmaz, melyre $|K| = Cl(G)$. Mivel $(\hat{Y}_n)$ fedő, így minden $H \in K$ hatszögnek tartalmazza legalább egy élét. Létezik olyan M teljes párosítás, melyre $H \cap (\hat{Y}_n) \cap M \neq \emptyset$ tetszőleges $H \in K$ hatszögre. Ehhez csupán azt az élet kell beválasztani M-be, melyet $(\hat{Y}_n)$ elvág H-ban, és ez megtehető. $M(\hat{Y}_n) \geq |K|$ erre az M teljes párosításra és 2.2.7 megjegyzés miatt minden teljes párosításra. □

Az egyenlőséget lineáris programozással és a dualitás tétel felhasználásával Hernán Abeledo és Gary W. Atkinson látták be [5].

2.2.10. Tétel. (Duális Clar) *Legyen G benzenoid gráf.*

$$\min_{(\hat{Z}_n)} \left\{ M(\hat{Z}_n) \right\} = Cl(G)$$

3. fejezet

Clar szám általános síkgráfban

3.1. A probléma NP-teljessége

A fejezet során G síkgráf tartományait az őket határoló csúcsok és élek összeségével azonosítjuk. G kétszeresen összefüggő síkgráf egy tartományát vagy lapját párosnak mondjuk, ha páros sok él határolja, páratlannak, ha páratlan sok él határolja.

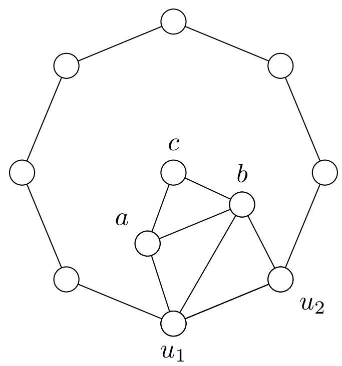
3.1.1. Def. (Rezonáns halmaz) *Legyen G kétszeresen összefüggő, síkba rajzolható gráf, melyben létezik teljes párosítás. A K halmaz rezonáns halmaza G-nek, ha páros, páronként diszjunk $J \subseteq G$ lapokból áll, és $\overline{K} := \overline{\bigcup J}$ üres vagy tartalmaz teljes párosítást.*

3.1.2. Def. (Clar szám) *Legyen G kétszeresen összefüggő, síkba rajzolható gráf, melyben létezik teljes párosítás. Azt mondjuk, hogy G Clar száma $Cl(G)$, ha $Cl(G)$ a rezonáns halmazok számosságának maximuma G-ben. Jele: $Cl(G)$.*

3.1.3. Állítás. (M. R. Garey, D. S. Johnson,) *A maximális független csúcshalmaz probléma NP-nehéz síkbarajzolható gráfok esetén.* □

3.1.4. Lemma. (Bernáth A., Kovács E. R.) *A maximális független csúcshalmaz probléma NP-nehéz olyan G' kétszeresen összefüggő síkbarajzolható gráfok esetén, melyeknek minden tartománya páratlan.*

Bizonyítás. Legyen G kétszeresen összefüggő, síkba rajzolható gráf, és jelölje $\alpha(G)$ a maximális független csúcsok számát. G minden páros J lapjára, jelöljük ki u_1, u_2 szomszédos csúcsokat. J tartományon belül vegyük fel a, b, c csúcsokat, és $ab; bc; ca; au_1; bu_1; bu_2$ éleket az ábrán látható módon. Az így nyert gráfnak eggyel kevesebb páros lapja lesz.



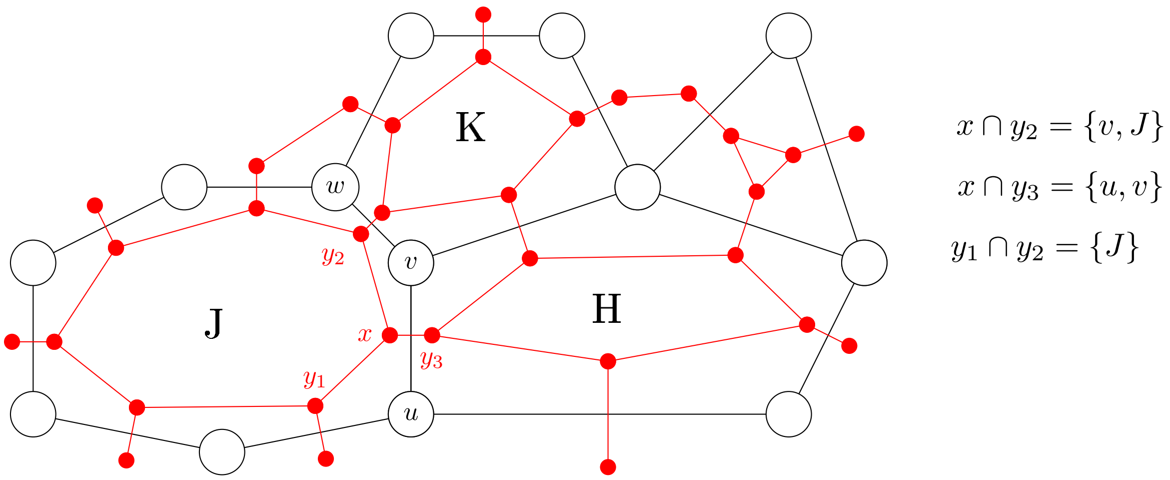
Ha összesen k darab ilyen J tartomány volt, akkor az így kapott G' gráfra teljesül, hogy $\alpha(G') = \alpha(G) + k$. Ugyanis tetszőleges független csúcshalmazhoz c csúcs hozzávehető, azonban a, b, c közül legfeljebb egy vehető hozzá, mivel K_3-at alkotnak. G'-ben nem definiáltunk éleket G-ben lévő csúcsok között, így független csúcsok G-ben függetlenek maradnak G'-ben is. Így minden J tartományhoz felvett ilyen csúcshármas eggyel növeli $\alpha(G)$-t. G' minden lapja páratlan.

Legyen F tetszőleges összefüggő síkgráf. F minden J lapja körbejárható, azaz értelmezhetünk egy $S := u_1, u_2, \ldots, u_l, u_1$ körsétát, mely J-t határoló minden élet tartalmaz. Azon éleket, melyek csak J-t határolják, azokat kétszeresen. A körséta minden élére hajtsuk végre az algoritmust, majd az így nyert $c_1, c_2, \ldots, c_l$ csúcsokra indexük sorrendjében ismét hajtsuk végre. Az így nyert G gráf síkgráf, független csúcsainak száma minden J tartományra $2 \cdot l$-lel nő, G kétszeresen összefüggő. $\square$

3.1.5. Tétel. (Bernáth A., Kovács E. R.) *Legyen G kétszeresen összefüggő, síkba rajzolható gráf. $Cl(G)$ kiszámítása NP-nehéz.*

Bizonyítás. Legyen I síkgráf, melyet G' kétszeresen összefüggő, csak páratlan tartománnyal rendelkező síkgráfból nyerünk a következő lépésekkel:

- Minden J tartományban minden uv éléhez rendelünk egy x csúcsot. Ezek a csúcsok értelmezhetőek úgy, mint 3 elemű halmazok: $x = \{u, v, H\}$.
- Két csúcs össze van kötve I-ben, ha metszetük kételemű, azaz $x, y \in I$ esetén $xy \in I$ akkor és csak akkor, ha $|x \cap y| = 2$



I síkba rajzolható, mivel G' duális gráfja síkgráf, aminek csúcsait körökké széthúzva pont I-t kapjuk. G' minden J tartományához létezik $I(J) \in I$ tartomány, amit ugyanannyi, páratlan sok él határol. G' minden x csúcsához létezik $I(x) \in I$ tartomány, melyet páros sok él határol. Továbbá ez bijekció, azaz csak ezek a tartományai vannak I-nek. I-ben létezik M teljes párosítás, mivel minden $uv \in G'$ élhez egy szomszédos

x, y csúcspár tartozik I-ben. Ez az M teljes párosítás alternál I összes páros lapjára, így tetszőleges páros $I(x)$ lap rezonáns halmazba választása esetén $I \setminus I(x)$ biztosan tartalmaz teljes párosítást: $M \setminus I(x)$-et. Ugyanígy több csúcsdiszjunkt páros lap rezonáns halmazba választása esetén a maradék gráfban lesz teljes párosítás. A feladat arra redukálódik, hogy válasszunk ki maximális csúcsdiszjunkt páros lapot I-ben. $Cl(I)$-t meghatározni egyenértékű G'-ben $\alpha(G')$ meghatározásával, ami NP-nehéz.

$\square$

4. fejezet

Fullerének

4.1. Becslés a Clar számra

4.1.1. Def. (Fullerén) *Olyan kétszeresen összefüggő,* 3*-reguláris, síkba rajzolható gráf, melynek* 12 *belső lapja ötszög, az összes többi hatszög.*

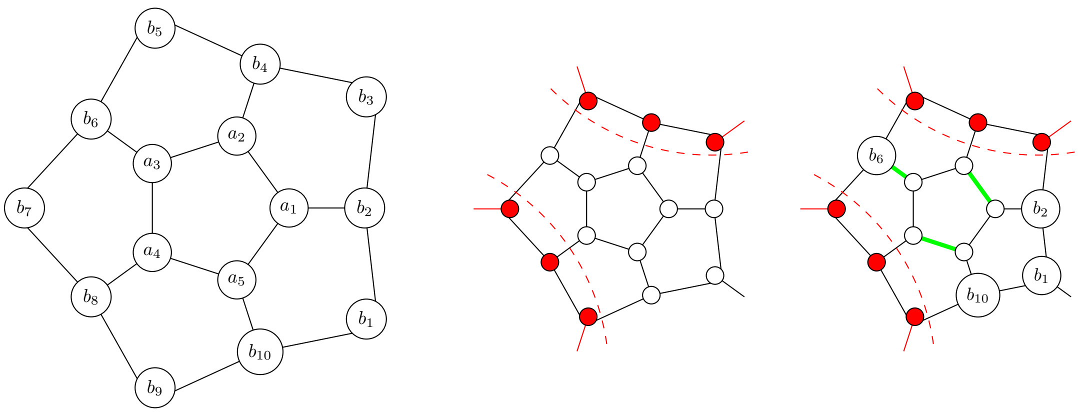
4.1.2. Megjegyzés. A fullerének lapjait a benzenoidokhoz hasonlóan a lapokat határoló élek és csúcsok összességével azonosítjuk.

Általános síkgráfok esetén a Clar szám meghatározása NP-nehéz probléma, azonban megadott skruktúrával rendelkező síkgráfoknál a kérdés nyitott. Fullerénekre még nem létezik általános módszer, becslések azonban igen.

4.1.3. Def. (Dodeka gráf) *Olyan G kétszeresen összefüggő síkgráf, melyre $|V(G)| = 15$, tartalmaz két csúcsdiszjunkt $a_1, a_2, \dots, a_5$ és $b_1, b_2, \dots, b_{10}$ kört, valamint $i = \{1, \dots, 5\}$-re $a_ib_{2\cdot 1}$ éleket. Jele D_6.*

4.1.4. Megjegyzés. A dodeka gráf egy szabályos dodekaéder fele, pontosan 6 darab ötszöglapja van.

4.1.5. Lemma. (Heping Zhang, Dong Ye) *Legyen G fullerén, mely részgráfként tartalmazza D_6-ot. Legyen K rezonáns halmaza G-nek , melyre $|K| = Cl(G)$ teljesül. Ekkor $\left|V\left(\overline{K}\right) \cap V\left(D_6\right)\right| \geq 12$.*



Bizonyítás. D_6 csúcsai közül $a_1, \ldots, a_5$ nem lehetnek rezonáns halmaz elemeinek csúcsai, mivel nem határolnak páros lapot.

Bármely H hatszöglapra $D_6 \cap H$ egy 2 hosszú út, melynek végpontjai páratlan indexű b_i csúcsok. Legfeljebb 5 hatszög határolhatja D_6-ot. Diszjunkt H lapok kiválasztásához legfeljebb 2 választható ki az 5-ből. Ezek az ábrán láthatóak.

Indirekten tegyük fel, hogy ez a kettő hatszöglap ki is választható. Ekkor $\overline{K}$-ban létezik teljes párosítás. Mivel G fullerén 3-reguláris, így egyértelműen létezik valamely páros j-re $b_j \in \left(\overline{K} \cap D_6\right) : d(b_j) = 1$. Szimmetria miatt feltehető, hogy $j = 6$. Ez egyértelműen meghatároz egy teljes párosítást D_6 csúcsain, az ábrán látható módon. Ekkor azonban b_{10} és b_2 is csak b_1 csúccsal állítható párba, ami ellentmond a teljes párosítás létezésének. D_6-tal szomszédos lapok közül legfeljebb 1 választható K-ba, amiből már következik a lemma. $\square$

4.1.6. Megjegyzés. Legyen G gráf, és $S \subset V(G)$. Ha töröljük G-ből az S halmazt és minden élet, melynek legalább egyik végpontja S-ben van, annak jele: $G - S$.

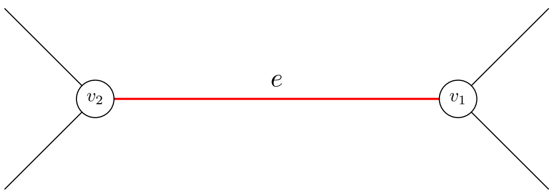
4.1.7. Lemma. (Heping Zhang, Dong Ye) *Legyen G fullerén részgráfja T, ami tartalmaz legalább i ötszöget. Legyen K rezonáns halmaza G-nek , melyre $|K| = Cl(G)$ teljesül. Ekkor $\left|V(T) \cap \overline{K}\right| \geq i$.*

Bizonyítás. Legyen T részgráfja G fullerénnek, mely tartalmaz legalább i ötszöget. Mivel G pontosan 12 ötszöget tartalmaz, így $i \leq 12$. Feltehetjük, hogy T nem tartalmaz D_6-ot, különben 4.1.5 miatt igaz a lemma. A bizonyítás i-re való teljes indukcióval történik.

Ha $i = 1$, akkor $\left|V(T) \cap \overline{K}\right| \geq 1$ teljesül, ugyanis $P_1 \subseteq T$ ötszöget határoló 5 tartomány közül legfeljebb 2 választható K-ba. Így P_1-nek lesz olyan csúcsa, mely eleme $\overline{K}$-nak. Tegyük fel, hogy $i \geq 2$ és minden i-nél kisebb számra már beláttuk a lemmát. Legyen $S \subseteq V(T) \cap \overline{K}$ nem üres halmaz olyan, hogy csúcsai legfeljebb $|S|$ darab T-beli ötszöggel határosak. Ekkor $T - S$-ben lesz legalább $i - |S|$ ötszög, mivel azokból nem töröltünk sem csúcsot, sem élet. $T - S$ részgráf G-ben, melyben i-nél kevesebb ötszög van, azaz az indukciós feltétel alapján igaz rá a lemma: $\left|V(T - S) \cap \overline{K}\right| \geq i - |S|$. Ekkor viszont T-re is teljesül, ugyanis $S \subseteq T \cap \overline{K}$. Ha létezik ilyen S halmaz, teljesül a lemma.

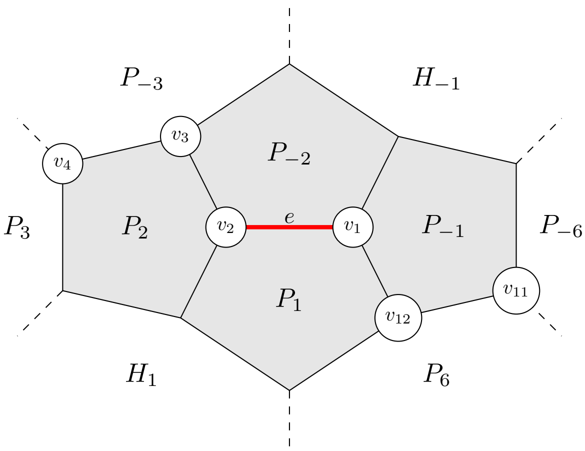
$(*)$ *Tegyük fel indirekten, hogy nem létezik $\emptyset \neq S \subseteq V(T) \cap \overline{K}$ halmaz, melynek csúcsai legfeljebb $|S|$ darab T-beli ötszöggel határosak.*

Legyen M teljes párosítás $\overline{K}$-ban. $M \neq \emptyset$ ugyanis a teljes indukció első lépése alapján $T = G$ választás mellett adódik, hogy $\overline{K}$ nem üres, továbbá a rezonáns halmaz definíciójából ha $\overline{K}$ nem üres, akkor létezik benne teljes párosítás. Létezik $e = v_1 v_2 \in M$ él, melynek T-vel vett metszete nem üres, mivel minden T-beli ötszögnek létezik $\overline{K}$-beli csúcsa és $i \geq 2$. Jelölje Ψ_e, hogy $\{v_1, v_2\}$ hány T-beli ötszöggel határos. $\Psi_e \leq 4$, ugyanis G 3-reguláris.



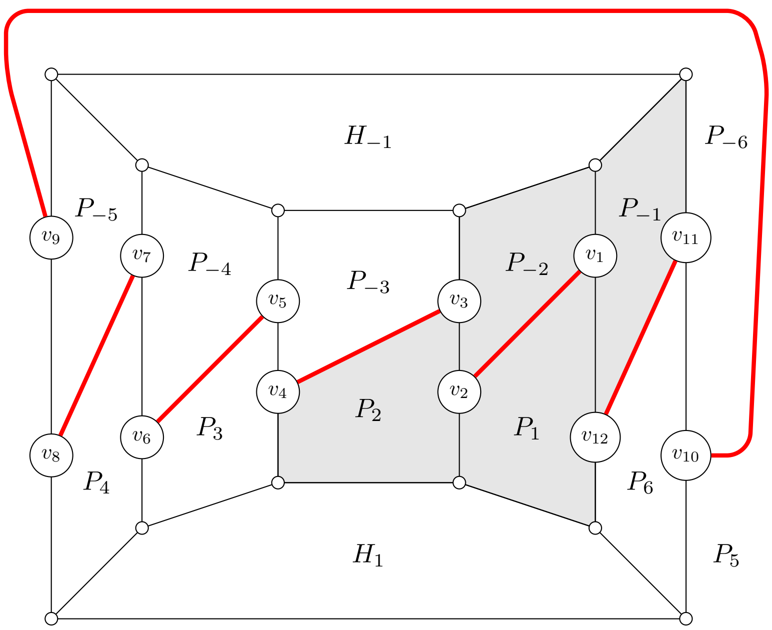
Ha létezik e él, melyre $\Psi_e \leq 2$, akkor $S = V(T) \cap \{v_1, v_2\}$ ellentmond $(*)$-nak. Így feltehető, hogy $3 \leq \Psi_e \leq 4$ minden T-től nem diszjunkt $e \in M$-re. Ha $\Psi_e \geq 2$, akkor $e \in T$.

Ha létezik $e \in M \cap E(T)$, melyre $\Psi_e = 4$: Jelölje D_4 azt a részgráfot T-ben, mely 4 ötszögből áll: P_{-2}, P_{-1}, P_1, P_2 úgy, hogy ezek metszete e-vel nem üres.



Az ábrán látható módon jelölje D_4-el határos lapokat G-ben $P_{-6}, H_{-1}, P_{-3}, P_3, H_1, P_6$. Mivel K diszjunkt tartományokból áll, így $\{H_{-1}, P_{-3}\}, \{H_1, P_6\} \nsubseteq K$. Ha $\{H_{-1}, P_{-3}\} \cap K = \emptyset$, akkor $V(P_{-2}) \subseteq \overline{K}$ 6 tartománnyal, de legfeljebb 5 ötszöggel határos, különben tartalmazna T részgráf D_6-ot. $S = V(P_{-2})$ ellentmond $(*)$-nak, azaz P_{-3} és H_{-1} közül pontosan egy eleme K-nak. Hasonlóan H_1 és P_6 közül pontosan egy eleme K-nak.

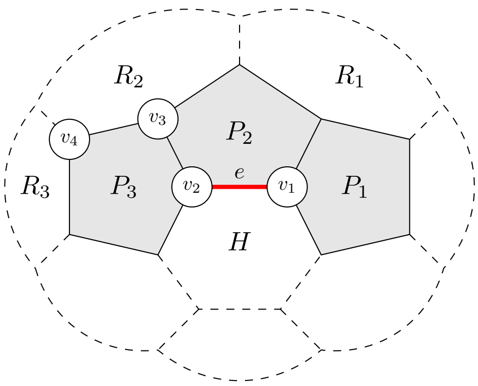
Ha $\{H_1, P_{-3}\} \subseteq K$, akkor $\{H_{-1}, P_6\} \cap K = \emptyset$, és $v_{12} \in \overline{K}$ csúcs párja M-ben csak v_{11} csúcs lehet, így $P_{-6} \notin K$. Mivel D_6 nem részgráfja G-nek, így P_{-1} legfeljebb 4 ötszöggel határos. $S = V(P_{-1})$ ellentmond $(*)$-nak. Azaz $\{P_{-3}, H_1\} \nsubseteq K$ és hasonlóan $\{P_6, H_{-1}\} \nsubseteq K$. Így vagy $\{H_{-1}, H_1\} \subseteq K$ vagy $\{P_{-3}, P_6\} \subseteq K$. Szimmetria miatt az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük az előbbit.
Legyen H_1 hatszöggel határos lapok: $P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6$, és H_{-1} hatszöggel határos lapok: P_{-1}, P_{-2}, P_{-3}, P_{-4}, P_{-5}, P_{-6} az ábrának megfelelően. Mivel $H_{-1}, H_1 \in K$ és $e \in M$, így $v_{12}v_{11}, v_3v_4 \in M$. Tekintsük $U_6 := v_{11}v_{12}v_1v_2v_3v_4$ utat D_4-ben. Ez M-re nézve alternál D_4-ben, így $V(U_6) \subseteq \overline{K}$. Ahhoz, hogy $V(U_6)$-tal ne jussunk ellentmondásra $(*)$ indirekt feltevéssel, P_3, P_{-3}, P_6, P_{-6} közül legalább 3 ötszög, melyeket tartalmaznia kell T részgráfnak. Szimmetria miatt az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük, hogy $P_3, P_{-3} \subseteq T$ ötszög.



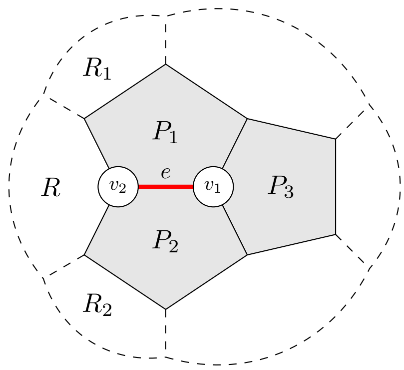
Ekkor P_{-4}-nek és P_3-nak lesz közös éle: v_5v_6, melyre $v_5v_6 \in M$, és $P_{-4} \cap P_4 := v_6v_7$. Tekintsük

$U_8 := v_{11}v_{12}v_1v_2v_3v_4v_5v_6$ utat G-ben. Ez M-re nézve alternál, így $V(U_8) \subseteq \overline{K}$. Ahhoz, hogy $V(U_8)$-cal ne jussunk ellentmondásra $(*)$ indirekt feltevéssel, P_4, P_{-4}, P_6, P_{-6} közül legalább 3 ötszög, melyeket tartalmaznia kell T részgráfnak. Szimmetria miatt az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük, hogy $P_4, P_{-4} \subseteq T$ ötszög.
Előző gondolatmenetet ismételve definiáljuk U_{10}-et és U_{12}-t, melyek szintén alternálnak M-re. Így $T = G$ az ábrán látható fullerén. Minden fullerén 12 hatszöget tartalmaz, így $S = V(U_{12})$ ellentmond $(*)$ feltételnek $T = G$ részgráfban.
Ha nem létezik $e \in M \cap E(T)$, melyre $\Psi_e = 4$: Ekkor minden e-re $\Psi_e = 3$. Két különböző részgráfot tartalmazhat T részgráf. Jelölje D_3 azt a részgráfot, melyben csak P_2 ötszöglap tartalmazza e-t, és jelölje D'_3 azt a részgráfot, melyben P_1 és P_2 ötszöglap tartalmazza e-t.

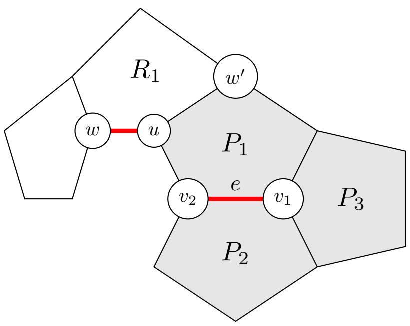
D_3 részgráf

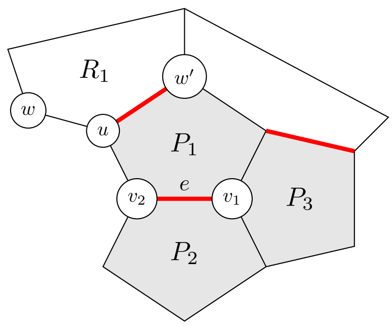


D'_3 részgráf



Ha nem létezik $e \in M \cap E(T)$, melyre $\Psi_e = 4$, és $D_3 \subseteq T$: $H \subseteq T$ esetén H hatszög. Legyen R_1, R_2 szomszédosak P_2-vel G-ben. $R_1 \cap R_2 \neq \emptyset$, így $\{R_1, R_2\} \not\subseteq K$. Ha $\{R_1, R_2\} \cap K = \emptyset$, akkor $S = V(P_2) \subseteq \overline{K}$ legfeljebb 5 ötszöggel határos T-ben, ami ellentmond $(*)$-nak. Szimmetria miatt az általánosság megszorítása nélkül feltehető, hogy $R_1 \in K$. Ekkor $v_3v_4 \in M$ és $\Psi_{v_3v_4} = 3$ miatt $S = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$ legfeljebb 4 ötszöggel határos, ami ellentmond $(*)$-nak.
Ha nem létezik $e \in M \cap E(T)$, melyre $\Psi_e = 4$, $D'_3 \subseteq T$ és $D_3 \not\subseteq T$: Legyen D'_3-mal határos, de P_3-tól diszjunkt lapok G-ben: R_1, R, R_2 az ábrán látható módon. $R \subseteq T$ esetén R hatszög, de $R \notin K$. Ha $\{R_1, R_2\} \subseteq K$, akkor $V(P_3) \subseteq \overline{K}$. Mivel $D_6 \not\subseteq T$, $S = V(P_3)$ legfeljebb 5 ötszöggel határos, ami ellentmond $(*)$-nak. Szimmetria miatt feltehető, hogy $R_1 \notin K$. Legyen $u := (P_1 \cap R_1 \cap R)$, $uw := R_1 \cap R$ és $uw' := R_1 \cap P_1$. Teljesül, hogy $u \in \overline{K}$, így vagy $uw \in M$, vagy $uw' \in M$.





D'_3-ban $u \in \overline{K}$ csúcsot két másikkal párosíthatom.

Ha $uw \in M$, akkor $uw \cap T \neq \emptyset$ miatt $uw \in T$. $\Psi_{uw} = 3$, azonban R nem lehet ötszög T-ben, így $D_3 \subseteq T$, ami ellentmondás. Másrészt ha $uw' \in M$, akkor $V(P_1) \subseteq \overline{K}$. R nem lehet ötszög T-ben, így $S = V(P_1)$ legfeljebb 5 ötszöggel szomszédos, ami ellentmond $(*)$-nak. Ezzel beláttuk a lemmát. $\square$

4.1.8. Tétel. *Legyen G tetszőleges fullerén n csúccsal. Ekkor $Cl(G) \leq \left\lfloor \frac{n-12}{6} \right\rfloor$*

Bizonyítás. Alkalmazzuk az előbbi lemmát $T = G$ választással. G-ben pontosan 12 ötszög van, így $Cl(G)$ számosságú K rezonáns halmazra $\left|V(\overline{K})\right| \geq 12$ adódik. $V(\overline{K}) = V(G - K) = V(G) \setminus V(K)$. Ezt átrendezve: $V(K) = V(G) \setminus V(\overline{K})$. Helyettesítsünk be:
$6 \cdot Cl(G) = |V(K)| = \left|V(G) \setminus V(\overline{K})\right| = |V(G)| - \left|V(\overline{K})\right| \leq n - 12$ Az egyenlőtlenséget rendezve és $Cl(G) \in \mathbb{N}$ megfontolásból adódik a tétel. $\square$

4.1.9. Megjegyzés. Végtelen sok fullerén létezik, melyre ez a felső becslés éles. Többek között a leghíresebb, 1985-ben felfedezett C_{60}, amit alakja miatt futball-labdának is szoktak nevezni, valamint a C_{70} ilyen fullerének.

Irodalomjegyzék

[1] Sandi Klavžar és Petra Žigert, *A min-max result on catacondensed benzenoid graphs*, 2002

[2] P. Žigert és I. Gutman, *Clar number of catacondensed benzenoid hydrocarbons*, 2002

[3] Katona Gyula, Recski András, Szabó Csaba, *A számítástudomány alapjai* 2006

[4] K. Salem, S. Klavžar, I. Gutman, *On the role of hypercubes in the resonance graphs of benzenoid graphs* Discrete Math, 2006

[5] H. G. Abeledo, Gary W. Atkinson, *A min-max theorem for plane bipartite graphs*, Discrete Applied Mathematics 158, 2010, no. 5, 375-378.

[6] Kovács Erika Renáta, Bernáth Attila, *NP-hardness of the Clar number in general plane graphs*, 2011, EGRES Quick-Proof No. 2011-07

[7] Heping Zhang, Dong Ye, *An upper bound for the Clar number of fullerene graphs*, 2005

[8] Heping Zhang, Dong Ye, Yunrui Liu, *A combination of Clar number and Kekulé count as an indicator of relative stability of fullerene isomers of* C_{60}, 2009

[9] Alexandru T. Balaban, Milan Randic, *Carbon bonding and structures* 8. fejezet, 2011

[10] A. Pasquini, G.B. Picotto, M. Pisani,*STM carbon nanotube tips fabrication for critical dimension measurements* 2005

[11] Min-Feng Yu, Oleg Lourie, Mark J. Dyer, Katerina Moloni, Thomas F. Kelly, Rodney S. Ruoff, *Strength and Breaking Mechanism of Multiwalled Carbon Nanotubes Under Tensile Load* 1999

[12] http://www.britannica.com/EBchecked/topic/221916/fullerene/234437/Carbon-nanotubes