

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری



دانشگاه دامغان
دانشکده ریاضی و علوم کامپیوتر

پایان نامه کارشناسی ارشد
ریاضی محض

گراف‌های فولرن اکسترمال

توسط:

هاجر حقیقت پیشه

استاد راهنما:

دکتر بهزاد صالحیان متی کلایی

استاد مشاور:

دکتر مصطفی زارع خورمیزی

شهریور ۱۳۹۱

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

به نام خدا

گراف‌های فولرن اکسترمال

توسط:

هاجر حقیقت پیشه

پایان‌نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه به عنوان بخشی از فعالیت‌های تحصیلی لازم
برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته

ریاضی محض

از دانشگاه دامغان

ارزیابی و تأیید شده توسط کمیته پایان‌نامه با درجه: عالی

دکتر بهزاد صالحیان متی کلایی استادیار ریاضی محض گرایش گراف و ترکیبیات دانشکده ریاضی و علوم کامپیوتر
دانشگاه دامغان (استاد راهنما)

دکتر مصطفی زارع خورمیزی استادیار ریاضی محض گرایش منطق ریاضی دانشکده ریاضی و علوم کامپیوتر
دانشگاه دامغان (استاد مشاور)

دکتر صادق رحیمی شعرباف مقدس استادیار ریاضی کاربردی گرایش علوم کامپیوتر دانشگاه صنعتی شاهرود
(داور اول)

دکتر حنیف حیدری استادیار ریاضی کاربردی گرایش تحقیق در عملیات دانشکده ریاضی و علوم کامپیوتر دانشگاه
دامغان (داور دوم)

دکتر اسداله فرامرزی ثالث استادیار ریاضی محض گرایش جبر دانشکده ریاضی و علوم کامپیوتر دانشگاه دامغان
(نماینده تحصیلات تکمیلی)

شهریور ۱۳۹۱

تقدیم به

تقدیم قهره ای آب به دریا و شراره ای یک شمع به خورشید، پیش از آنکه گویای پاس و قدردانی باشد، مایه شرمندگی است. خدای راسی سناکرم که از روی کرم، پدر و مادری فداکار نصیم ساخته تا در سایه دخت پر بار وجودشان بیسایم و از ریشی آن شاخ و برگ کیرم و از سایه وجودشان در راه کسب علم و دانش تلاش نمایم. والدینی که بودنشان تاج افتخاری است بر سرم و نشان دلیلی است بر بودنم، چرا که این دو وجود، پس از پروردگار، مایه سستی ام بوده اند. دستم را گرفتند و راه رفتن را در این وادی زندگی پر از فراز و نشیب آموختند، آموزگاری که برایم زندگی، بودن و انسان بودن را معنا کردند.....

تقدیم به برادران و خواهران عزیزم؛

سپاسگزاری

پروردگارا! ای، هستی، بخش وجود، برابر نعمات بی کرانت توان شکر نیست، ذره ذره وجودم برای تو و نزدیک شدن به تویی تند. الهی مراد و کن تادانش اندکم، نه زردبانی برای فزونی تکبر و غرور، نه حلقه ای برای اسارت و نه دست مایه ای برای تجارت، بلکه گامی باشد برای تجلیل از تو و متعالی ساختن زندگی خود و دیگران.

اکنون که به لطف پروردگار بزرگ موفق به اتمام این مقطع از تحصیل گشته ام لازم می دانم از کسانی که در این مسیر مرا راهنمایی نموده اند، تشکر نمایم.

وظیفه خود می دانم از پدر و مادر عزیزم به عنوان اولین و بهترین آموزگار انم، سپاسگزاری و قدردانی نمایم.

بر خود واجب می دانم مراتب سپاس و قدردانی عمیق قلبی خود را به خدمت استاد فرزانه و کرامت دارم جناب آقای دکتر بزرگوار صاحبان همتی گلایه ای که در طول دوران تحصیل و ارائه پایان نامه از چشمه جوشان دانش و اخلاق والا ایشان به قدر ظرفیت محدود خویش بهره مند گشته ام ابراز نمایم.

از استاد ارجمندم جناب آقای دکتر مصطفی زارع خورمیزی که مشاوره این پایان نامه را بر عهده داشتند کمال تشکر را دارم.

از اساتید ارجمند مدعو، جناب آقای دکتر صادق رحیمی شعر باف و جناب آقای دکتر حنیف حیدری که در جلسه ی دفاع حضور یافتند و مرا از نظر ایشان بهره مند ساختند، سپاسگزارم.

جاء دارد از پروفور Dongye استاد ریاضی دانشگاه ویرجینیای غربی که در مکاتبات خصوصی بسیار کمک کردند، سپاسگزاری نمایم.

از تمامی اساتیدی که در طول این مدت افتخار ساگردیشان را دادم کمال تشکر و قدردانی را دارم.

در نهایت

پاس و تشکر خود را تقدیم دوستان مهربانم می‌کنم که مراد سخنی با آنها نگذاشتند و همواره در کنارم بودند.

با احترام
تحقیقت‌پیشه
شهر پور ماه ۹۱

چکیده

گراف‌های فولرن اکسترمال

به وسیله‌ی:
هاجر حقیقت پیشه

مجموعه‌ی \mathcal{H} از شش ضلعی‌های دوجه دو متمایز F_n را الگوی شش گانه می‌گویند، اگر F_n یک جورسازی تام (که در شیمی به آن ساختارهای ککوله^۱ می‌گویند) داشته باشد، به طوری که هر شش ضلعی به تناوب در مجموعه‌ی \mathcal{H} باشد. بزرگترین اندازه‌ی الگوهای شش گانه F_n را عدد کلر می‌گویند که اندازه‌ی عدد کلر F_n ، بیش‌تر از $\lfloor (n - 12)/6 \rfloor$ نیست. در این پایان‌نامه، کمیت فوق را برای گراف‌های فولرن بررسی می‌کنیم. گراف فولرن یک گراف مسطح ۳-همبند و ۳-منتظم است که دقیقاً ۱۲ وجه پنج‌ضلعی داشته و بقیه‌ی وجه‌هایش از شش ضلعی‌ها تشکیل شده است. از دیدگاه شیمی، گراف‌های فولرن، گراف‌های مولکولی هستند. به عنوان مثال مولکول C_6 ، C_7 دو عضو معروف این گروه هستند که به این کران بالا دست می‌یابند. در این پایان‌نامه، گراف‌های فولرن اکسترمالی را بررسی می‌کنیم که عدد کلر آن‌ها ماکزیمم مقدارشان را می‌گیرند، سپس نشان می‌دهیم که به طور دقیق ۱۸ گراف فولرن متمایز با ۶۰ راس وجود دارند که ماکزیمم عدد کلر آن‌ها ۸ است.

واژه‌های کلیدی: گراف فولرن، عدد کلر، جورسازی تام، الگوی شش گانه، C_6

^۱Kekulé structure

فهرست مطالب

ه	فهرست مطالب
ز	فهرست شکل‌ها
۴	۱ مقدمه
۴	۱-۱ تعریف‌ها و قضیه‌های مقدماتی در مورد گراف و همبندی گراف‌ها
۸	۲-۱ اعمال روی گراف‌ها
۱۱	۳-۱ مفاهیم و قضیه‌های مقدماتی در مورد جورسازی
۱۲	۴-۱ گراف‌های مسطح
۱۴	۲ گراف‌های فولرن با ۶۰ راس
۱۴	۱-۲ مقدمه‌ای بر فولرن‌ها
۱۷	۲-۲ کاربردهای فولرن‌ها
۱۸	۳-۲ بررسی مفاهیم همبندی در گراف فولرن
۲۴	۳ ساختارهای کلر فولرن‌ها
۲۴	۱-۳ تعاریف مقدماتی درباره‌ی عدد کلر
۲۸	۲-۳ یک کران بالا برای عدد کلر گراف‌های فولرن
۳۵	۳-۳ دو مسأله‌ی باز در مورد عدد کلر فولرن‌ها
۳۶	۴ گراف‌های فولرن اکستریمال با ماکزیمم عدد کلر

۳۶	۱-۴ تعاریف واصطلاحات
۴۳	۲-۴ گرافهای فولرن اکسترمال
۶۶	۳-۴ گرافهای فولرن اکسترمال با ۶۰ راس

۹۴ مراجع

۹۷ واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

۱۰۰ واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

فهرست شکل‌ها

۲	۱-۰ یک فرمول کلر C_6
۷	۱-۱ گراف فولرن با 60 راس
۱۵	۱-۲ گنبد ژئودزیک
۱۶	۲-۲ فولرن
۱۶	۳-۲ تقارن در C_6
۱۹	۴-۲ گرافی با کمر 5 که به طور دوری 4 - همبند یالی نیست
۲۲	۵-۲ نمایش دورهای C' و C'' همراه با یال‌های متصل‌کننده‌ی آنها
۲۵	۱-۳ بنزن
۲۵	۲-۳ بنزنوئید
۲۶	۳-۳ رزونانس در بنزنوئیدها
۲۶	۴-۳ دو نمونه از الگوهای شش گانه
۲۷	۵-۳ فرمول کلر برای بنزنوئید متفاوت
۲۷	۶-۳ C_6 چپ، C_7 راست
۲۸	۷-۳ پاره ای از ایزومرهای C_6 با عدد کلر 8
۲۹	۸-۳ یک بخش نیمه از 12 وجهی و نشان‌دهنده‌ی اثبات لم $3.2.3$
۳۱	۹-۳ زیرگراف G_1
۳۲	۱۰-۳ نشان‌دهنده‌ی حالت 1
۳۳	۱۱-۳ نشان‌دهنده‌ی حالت 2

۳۸	درخت های $T_0, K_{1,3}, K_2$	۱-۴
۴۱	گسترش شش ضلعی و گسترش کلر P و B_1	۲-۴
۴۳	حلقه های پنج ضلعی R_8 و R_9	۳-۴
۴۵	جورسازی M از R_6 و حلقه های پنج ضلعی R_5 و R_6	۴-۴
۴۷	فراگمنت R_5^- و اثبات لم ۴.۲.۴	۵-۴
۴۸	گسترش شش ضلعی $R_5^- \cup h$	۶-۴
۴۹	گسترش شش ضلعی $H[T[R_5^- \cup h]]$	۷-۴
۵۰	گسترش شش ضلعی $H[T[R_5^- \cup h]]$ و غیر مجاور بودن دو پنج ضلعی	۸-۴
۵۱	سمت چپ R_5 و سمت راست R_5^-	۹-۴
۵۱	دوگان درونی R_5, R_5^-	۱۰-۴
۵۵	نشان دهنده ی اثبات لم ۶.۲.۴	۱۱-۴
۵۶	فراگمنت های پنج ضلعی اکسترمال B_3, B_2 و گسترش کلر آن ها $C[B_3], C[B_2]$	۱۲-۴
۵۷	عمل چسباندن P^2, P و گسترش کلر آن ها	۱۳-۴
۵۸	$B_2 * B_3$ (گراف های خاکستری در $(a), (b)$) و B_2^+ (گراف های خاکستری در $(c), (d)$)	۱۴-۴
۵۸	گراف های فولرن اکسترمال با ۶۰ راس	۱۵-۴
۵۹	گسترش شش ضلعی $(d), (b)$ ، گسترش کلر $C[B_2^+]$ $(c), (a)$	۱۶-۴
۵۹	$C[B_3 * P]$ چپ، $H[C[B_3 * P]]$ راست	۱۷-۴
۶۱	فراگمنت پنج ضلعی B با $h_1, h_2 \in \mathcal{H}$	۱۸-۴
۶۲	نشان دهنده ی اثبات قضیه ی ۱۴.۲.۴	۱۹-۴
۶۳	نشان دهنده ی اثبات قضیه ی ۱۴.۲.۴	۲۰-۴
۶۷	۲۱-برچسب گذاری های مرز: ۳۳۱۳۳۱ (راست)، ۳۳۳۳ (چپ)	۲۱-۴
۶۸	نشان دهنده ی اثبات گزاره ی ۴.۳.۴	۲۲-۴
۶۹	نشان دهنده ی اثبات لم ۶.۳.۴	۲۳-۴
۷۰	گسترش کلر B_1, B_2	۲۴-۴
۷۳	نشان دهنده ی اثبات لم ۸.۳.۴	۲۵-۴
۷۴	نشان دهنده ی اثبات لم ۱۰.۳.۴	۲۶-۴
۷۵	گراف های فولرن اکسترمال F_6^1, F_6^2	۲۷-۴
۷۵	گراف های فولرن اکسترمال F_6^3, F_6^4 با زیرگراف های ماکسیمال B_1^4	۲۸-۴
۷۶	نشان دهنده ی اثبات حالت ۲	۲۹-۴
۷۷	نشان دهنده ی اثبات حالت ۲	۳۰-۴

۷۸	$F_{\mathbb{F}_5}^{\vee}, F_{\mathbb{F}_5}^{\circ}, F_{\mathbb{F}_5}^{\delta}$	گراف‌های فولرن اکسترمال	۳۱-۴
۷۸	$F_{\mathbb{F}_8}^{\wedge}$	و نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۳	گراف فولرن اکسترمال
۷۹		نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۳	۳۳-۴
۸۱		نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۳	۳۴-۴
۸۲	$F_{\mathbb{F}_9}^{\wedge}$	و نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۱	گراف فولرن اکسترمال
۸۲	$F_{\mathbb{F}_9}^{\circ}$	گراف فولرن اکسترمال	۳۶-۴
۸۳	$F_{\mathbb{F}_9}^{\wedge}$	و گراف فولرن اکسترمال	۳۷-۴
۸۴	$F_{\mathbb{F}_9}^{\wedge}$	و گراف فولرن اکسترمال	۳۸-۴
۸۴		نشان دهنده‌ی اثبات زیر حالت ۱ - ۴	۳۹-۴
۸۶		نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۱	۴۰-۴
۸۶		نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۱ قسمت (b)	۴۱-۴
۸۸		نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۱ قسمت (c)	۴۲-۴
۸۸	$F_{\mathbb{F}_9}^{\wedge}, F_{\mathbb{F}_9}^{\circ}$	و گراف‌های فولرن اکسترمال	۴۳-۴
۸۹		نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۲	۴۴-۴
۹۰		نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۲ قسمت (c)	۴۵-۴
۹۰		نشان دهنده‌ی اثبات حالت ۱ - ۳	۴۶-۴
۹۱	g_3, g_2, g_1, f_4	با وجوه	گراف تشکیل شده از گراف (a)
۹۱	$F_{\mathbb{F}_9}^{\wedge}$	و گراف فولرن اکسترمال	۴۸-۴
۹۲	$F_{\mathbb{F}_9}^{\circ}$	و گراف فولرن اکسترمال	۴۹-۴
۹۲	$F_{\mathbb{F}_9}^{\wedge}$	و گراف فولرن اکسترمال	۵۰-۴
۹۳		گراف‌های فولرن اکسترمال با ۶۰ راس	۵۱-۴

پیشگفتار

گراف فولرن، گراف مسطح مکعبی و ۳-همبند است که به طور دقیق ۱۲ وجه پنج‌ضلعی دارد و بقیه‌ی وجه‌هایش شش‌ضلعی‌اند. از دیدگاه شیمی، فولرن یک مولکول شکل یافته‌ی کروی است که از اتم‌های کربن تشکیل می‌شود، به طوری که هر حلقه‌ی کربن یا یک پنج‌ضلعی بوده یا به صورت یک شش‌ضلعی است و هر اتم کربن با دقیقاً ۳ اتم کربن دیگر پیوند دارد. فرض کنید F_n گراف فولرن با n راس باشد. به ازای هر $n \geq 20$ کربن، که n عددی زوج است، به غیر از $n = 22$ می‌توان فولرن ساخت [۳، ۹]. برای n کوچک، یک شمارش بازسازی از ایزومرهای فولرن با n راس داده شده است [۲]. برای مثال، ۱۸۱۲ گراف فولرن متمایز با ۶۰ راس وجود دارد. مولکول مشهور C_{60} ، یکی از فولرن‌هایی است که توسط کروت ۲ و همکارانش در سال ۱۹۸۵ کشف شده است [۱۷]. فرض کنید F گراف فولرن باشد. یک جورسازی تام (ساختارهای ککوله ۳ در شیمی) F ، مجموعه‌ی M از یال‌های مستقل است که هر راس F با یک یال در M تلاقی داشته باشد. یک دور F ، M -متناوب است، اگر یال‌هایش به تناوب در M و $E \setminus M$ باشد.

مجموعه‌ی \mathcal{H} از شش‌ضلعی‌های دو به دو متمایز، الگوی ۶-گانه نام دارد، اگر F جورسازی تام M داشته باشد، به طوری که هر شش‌ضلعی در \mathcal{H} ، M متناوب باشد. به طور هم‌ارز، حذف شش‌ضلعی‌های در \mathcal{H} با یال‌های برخورد کننده اش یک زیرگراف F با جورسازی تام را نتیجه دهد. ماکسیمم الگوی شش‌گانه، فرمول کلر نامیده می‌شود. اندازه‌ی فرمول کلر، عدد کلر F نام دارد و آنرا با نماد $c(F_n)$ نشان می‌دهند.

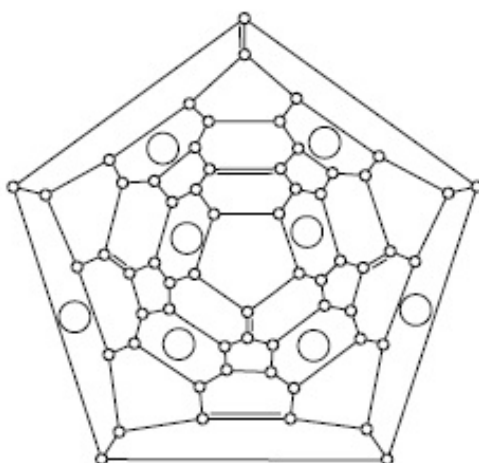
در مدل کلر ۴، فرمول کلر توسط دوره‌هایی درون شش‌ضلعی‌ها نشان داده می‌شود. شکل ۱-۰ یک

^۲Kroto

^۳Kekulé structure

^۴Clar Model

فرمول کلر C_6 را نشان می‌دهد. در ابتدا عدد کلر برای سیستم بنزنوئید تعریف شده بود که به قضیه‌ی



شکل ۰-۱: یک فرمول کلر C_6

شش گانه‌ی کلر و به مدل دوری حدس زده‌ی راندیک^۵ بستگی داشت [۲۰]. عدد کلر در اندازه‌گیری پایداری مولکول هیدروکربن‌های بنزنوئید موثر است. برای دو هیدروکربن بنزنوئید، یکی با عدد کلر بالاتر پایداری بیش‌تر نشان داده شده است. عدد کلر هیدروکربن‌های بنزنوئید در بسیاری مقالات [۱۳، ۱۴، ۱۶، ۲۳، ۲۴، ۲۵] پیشنهاد و محاسبه شده است. هانسن^۶ و ژنگ^۷ در [۱۴] یک برنامه‌ی خطی صحیح را معرفی کردند که عدد کلر هیدروکربن‌های بنزنوئید را محاسبه می‌کند [۹، ۳]. تاکنون روش موثر برای محاسبه‌ی عدد کلر گراف‌های فولرن وجود نداشت. چند جمله‌ای کلر و چند جمله‌ای ۶-گانه C_6 به‌ترتیب برای شمارش ساختارهای کلر و الگوهای ۶-گانه محاسبه شده بود [۲۱]. این نتیجه می‌دهد که C_6 فرمول کلر ۵ و عدد کلر ۸ دارد. دانگ^۸ از طریق مکاتبه‌ی خصوصی با نویسنده‌ی مقاله، دلیل فرمول کلر ۵ را این‌چنین بیان کرد که از گروه تقارنی به‌دست می‌آید. اگر C_6 را هر بار ۷۲ درجه دوران دهید، نتیجه حاصل می‌شود. برای اطلاعات بیش‌تر به [۸] مراجعه کنید.

علاوه بر این، C_6 ساختار فرایز^۹ دارد [۱۱]. یعنی یک ساختار ککوله C_6 که از پیوندهای دوگانه در پنج‌ضلعی دوری می‌کند و بیش‌ترین تعداد شش‌ضلعی‌های تشدید کننده را دارد ($n/3$). گراف‌های

^۵Randic

^۶Hansen

^۷Zheng

^۸Dong Ye

^۹Fries

فولرن با ساختار فرایز هم ارز فولرن‌های لیپ فروگ^{۱۰} یا فولرن‌های نوع کلر هستند [۱۸، ۱۰]. نویسنده‌های زیادی نشان دادند که عدد کلر گراف‌های فولرن بیش‌تر از $\frac{n-12}{6}$ نیست [۲۷]، که این تساوی برای نامتناهی گراف‌های فولرن شامل C_6 و C_7 برقرار است. گراف فولرن F_n اکسترمال است، اگر عدد کلر آن $c(F_n) = \frac{n-12}{6}$ باشد. این پایان نامه در ۴ فصل تنظیم شده است.

- فصل اول مفاهیم و قضایای مقدماتی از نظریه‌ی گراف را بیان می‌کنیم که در فصل‌های دیگر مورد نیاز است.
 - در فصل دوم به منظور آشنایی بیش‌تر با گراف‌های فولرن، ابتدا مقدمه‌ای بر فولرن‌ها را بیان می‌کنیم و سپس تعدادی از کاربردهای فولرن را ذکر می‌کنیم و در آخر، به بررسی مفاهیم همبندی در گراف می‌پردازیم.
 - در فصل سوم ابتدا تعاریف مقدماتی درباره‌ی عدد کلر را بیان می‌کنیم و بعد یک کران بالا برای عدد کلر گراف‌های فولرن را معرفی می‌کنیم و در قسمت آخر ۲ مساله‌ی باز در مورد عدد کلر فولرن‌ها را مطرح می‌کنیم. این فصل‌ها پیش نیاز فصل بعدی خواهند بود.
 - فصل چهارم که قسمت اصلی این پایان نامه را تشکیل می‌دهد. ابتدا گراف‌های فولرن اکسترمال با حداقل ۶۰ راس را مشخص می‌کنیم و سپس متناظر با این ویژگی، همه‌ی ۱۸ تا گراف فولرن اکسترمال با ۶۰ راس که شامل C_6 است را بازسازی می‌کنیم.
- نتایج این کار می‌تواند به خوبی نشان دهد که ترکیب عدد کلر و شمارش ککوله در پایداری C_6 مؤثر است.

^{۱۰}Leapfrog

فصل ۱

مقدمه

در این فصل به بیان تعاریف و قضایایی که در فصل‌های بعدی مورد نیاز است می‌پردازیم، این فصل شامل ۳ بخش است، در بخش اول مفاهیم اساسی در مورد گراف و همبندی گراف‌ها را بیان می‌کنیم، در بخش دوم اعمال روی گراف‌ها را ارائه می‌دهیم. در بخش سوم به تعاریف و قضیه‌های مربوط به جورسازی می‌پردازیم و در بخش چهارم مفاهیم و ویژگی‌های مقدماتی گراف‌های مسطح را بیان می‌کنیم.

۱-۱ تعریف‌ها و قضیه‌های مقدماتی در مورد گراف و همبندی

گراف‌ها

تعریف ۱.۱.۱. گراف G ، متشکل از سه تایی مرتب چون $(V(G), E(G), I_G)$ ، که در آن $V(G)$ مجموعه‌ای ناتهی، $E(G)$ مجموعه‌ای مجزا از $V(G)$ ، و I_G یک نگاشت وقوع است، که به هر عضو $E(G)$ یک زوج نامرتب (یکسان یا متمایز) از $V(G)$ نظیر می‌کند. عناصر $V(G)$ را راس‌ها (یا گره‌ها یا نقاط) G ، و عناصر $E(G)$ را یال‌ها (خطوط) G نامیم. اگر برای یال e از G داشته باشیم $I_G(e) = uv$ ، می‌نویسیم $I_G(e) = uv$.

تعداد رأس‌های G را با n و تعداد یال‌های G را با m نشان می‌دهیم.

تعریف ۲.۱.۱. دو رأس انتهایی یک یال، رأس‌های هم‌وقوع با آن یال نامیده می‌شوند و دو رأسی را که هم‌وقوع با یک یال مشترک هستند، رأس‌های هم‌جوار یا مجاور می‌گویند و همین‌طور دو یالی که هم‌وقوع با یک رأس مشترک می‌باشند، دو یال مجاور نامیده می‌شوند. دو یالی که هم‌وقوع با هیچ

رأس مشترکی نیستند، یال‌های مستقل نامیده می‌شوند. دو رأس مجاور مجزا، دو رأس همسایه نامیده می‌شوند. مجموعه‌ی رأس‌های همسایه‌ی v ، با نماد $N_G(v)$ نمایش داده می‌شود.

تعریف ۳.۱.۱. یک یال با نقاط ابتدا و انتهای مساوی را طوقه و یال با نقاط انتهایی مجزا را پیوند می‌نامند.

تعریف ۴.۱.۱. گراف بدون طوقه و یال‌های موازی گراف ساده نامیده می‌شود.

تعریف ۵.۱.۱. دو گراف G و H یکسان اند و می‌نویسیم $G = H$ ، هرگاه $V(G) = V(H)$ و $E(G) = E(H)$. اگر دو گراف یکسان باشند ساختار و شکل یکسانی دارند. ولی ممکن است دو گراف یکسان نباشند، ولی ساختار یکسانی داشته باشند، در این حالت دو گراف را یک‌ریخت می‌نامیم. به بیان دقیق‌تر، دو گراف G و H یک‌ریخت هستند، اگر تابع دوسوئی $\phi : V(G) \rightarrow V(H)$ وجود داشته باشد به طوری که اگر $uv \in E(G)$ آن‌گاه $\phi(u)\phi(v) \in E(H)$ و بالعکس. به تابع دوسوئی ϕ یک یک‌ریختی بین دو گراف گفته می‌شود.

تعریف ۶.۱.۱. یک خودریختی گراف، یک یک‌ریختی از گراف به خودش است. به عبارتی خودریختی، یک جایگشت مثل α روی مجموعه راس‌های گراف است، به طوری که همسایگی را حفظ کند. یعنی اگر uv یالی از گراف باشد $\alpha(u)\alpha(v)$ نیز یالی از گراف باشد.

ملاحظه ۷.۱.۱. تقارن گراف توسط گروه خودریختی شرح داده می‌شود. خودریختی‌های یک گراف در واقع نظم موجود در گراف را نشان می‌دهند. اگر راس u توسط یک خودریختی به راس v برود، آن‌گاه این دو راس در حقیقت دارای جایگاه یکسانی در ساختار گراف هستند.

تعریف ۸.۱.۱. گراف H زیرگراف G است و می‌نویسیم $H \leq G$ ، اگر $V(H) \subseteq V(G)$ و $E(H) \subseteq E(G)$ باشد و ψ_H تحدید ψ_G به $E(H)$ باشد. وقتی که $H \leq G$ است ولی $H \neq G$ ، می‌نویسیم $H < G$ و H را زیرگراف سره‌ی G می‌نامیم.

تعریف ۹.۱.۱. H زیرگراف فراگیر G است، هرگاه شامل همه‌ی رأس‌های گراف G باشد. یعنی در واقع داشته باشیم $V(H) = V(G)$.

تعریف ۱۰.۱.۱. فرض کنیم که V' زیرمجموعه‌ی ناتهی V باشد، زیرگراف G را که مجموعه‌ی رأس‌هایش، V' و مجموعه‌ی یال‌هایش، مجموعه‌ای از آن یال‌های G است که هر دو انتهایشان در V' است زیرگراف G القاء شده به وسیله‌ی V' می‌نامند و با نماد $G[V']$ نمایش می‌دهند.

تعریف ۱۱.۱.۱. فرض کنیم که E' زیرمجموعه‌ی ناتهی از E باشد، زیرگراف G را که مجموعه‌ی رأس‌هایش، مجموعه‌ای از ۲ انتهای یال‌ها در E' و مجموعه‌ی یال‌هایش، مجموعه‌ی E' است زیرگراف G ی‌القایی به وسیله‌ی E' می‌نامند و آن را با نماد $G[E']$ نمایش می‌دهند. در واقع $G[E']$ زیرگراف یال-القایی G می‌باشد.

حذف راس‌ها و یال‌ها در یک گراف:

فرض کنید G یک گراف، S زیرمجموعه‌ی سره‌ای از V ، و E' زیر مجموعه‌ای از E باشد. زیرگراف $G[V - S]$ را یک زیرگراف حاصل از G با حذف S می‌نامیم. این زیرگراف را با $G - S$ نشان می‌دهیم. اگر $S = \{v\}$ باشد گراف $G - S$ را با $G - v$ نشان می‌دهیم. زیر گراف فراگیر G با مجموعه‌ی یال $E \setminus E'$ را زیرگراف حاصل از G با حذف مجموعه‌ی یال E' نامیم. این زیر گراف را با $G - E'$ نشان می‌دهیم. اگر $E' = \{e\}$ باشد گراف $G - E'$ را با $G - e$ نشان می‌دهیم. توجه کنید که با حذف یک راس همه‌ی یال‌های مجاور آن نیز حذف می‌شوند، در حالی که حذف یک یال تاثیری بر راس‌های G ندارد.

تعریف ۱۲.۱.۱. درجه‌ی رأس v در گراف G که با نماد $d_G(v)$ نمایش داده می‌شود، تعداد یال‌های گراف G است که رأس v بر آن‌ها واقع شده است. کم‌ترین و بیش‌ترین درجه‌ی رأس‌های G را به ترتیب با $\delta(G)$ و $\Delta(G)$ ، نمایش می‌دهیم.

تعریف ۱۳.۱.۱. گراف G ، k -منتظم است، هرگاه درجه‌ی همه‌ی رأس‌های آن k باشد و گراف منتظم، گرافی است که به ازاء k یی، منتظم باشد. هر گراف تهی، منتظم از درجه‌ی صفر و هر گراف کامل K_n ، منتظم از درجه‌ی $n - 1$ است. گراف ۳-منتظم را گراف مکعبی می‌نامند. همچنین اگر G ، n راس داشته باشد و منتظم از درجه‌ی k باشد، آن‌گاه G دارای $(rn)/2$ یال است.

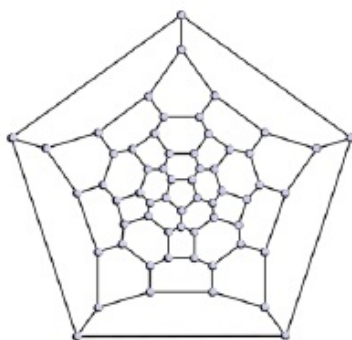
در میان گراف‌های منتظم، گراف‌های موسوم به افلاطونی، مورد توجه خاص اند.

تعریف ۱۴.۱.۱. به هر چند وجهی که همه‌ی وجه‌های آن دو به دو بر هم منطبق شوند یک چند وجهی منتظم گوئیم. مثلا مکعب یک شش وجهی منتظم می‌باشد. یونانی‌های باستان از وجود پنج، چند وجهی منتظم مطلع بودند و آن‌ها را اجسام افلاطونی یا چند وجهی‌های افلاطونی می‌نامیدند. این پنج چند وجهی عبارتند:

چهاروجهی منتظم، شش وجهی منتظم، هشت وجهی منتظم، دوازده وجهی منتظم و بیست وجهی منتظم. اکنون فرض کنید بخواهیم تصویر هر یک از اجسام را روی صفحه بکشیم. تصاویر به وجود آمده را نمودار شله گل^۱ می نامیم.

فولرن‌ها دارای انواع مختلفی هستند، اما مهم‌ترین آن‌ها، فولرن‌هایی هستند که وجوه آن‌ها از پنج و شش ضلعی ساخته می شوند. ما نیز در این پایان نامه فقط این گونه فولرن‌ها با ۶۰ راس را مورد بررسی قرار می دهیم.

تعریف ۱۵.۱.۱. یک گراف فولرن، گرافی مسطح، ۳-منتظم و ۳-همبند است که ۱۲ وجه آن پنج ضلعی و بقیه‌ی وجوه آن شش ضلعی هستند. گراف فولرن n راسی را با F_n نشان می‌دهیم. در شکل ۱-۱ می‌توانید گراف فولرن C_{60} را مشاهده کنید.



شکل ۱-۱: گراف فولرن با ۶۰ راس

تعریف ۱۶.۱.۱. گراف دوبخشی، گرافی است که مجموعه‌ی رأس‌های آن را می‌توان به دو بخش مانند X و Y افزایش کرد، به طوری که هر یال این گراف، یک سرش در بخش X و سر دیگر آن در بخش Y قرار داشته باشد.

قضیه ۱۷.۱.۱. [۲] برای هر گراف G ، اگر m ، نمایش تعداد یال‌ها باشد، داریم:

$$\sum_{v \in V(G)} d(v) = 2m$$

^۱Schlegel diagram

۲-۱ اعمال روی گراف ها

در این بخش تعدادی از روش های تولید گراف های جدید از دو گراف داده شده را ارائه می دهیم. فرض کنید $G_1 = (V_1, E_1)$ و $G_2 = (V_2, E_2)$ دو گراف ساده باشند.

تعریف ۱.۲.۱. گراف $G = (V, E)$ که در آن $V = V_1 \cup V_2$ و $E = E_1 \cup E_2$ را اجتماع G_1 و G_2 نامیم و با $G_1 \cup G_2$ نشان می دهیم.

هنگامی که مجموعه راس های G_1 و G_2 مجزا باشند، $G_1 \cup G_2$ را با $G_1 + G_2$ نشان می دهیم و آن را مجموع دو گراف G_1 و G_2 نامیم. اجتماع متناهی از گراف ها را با استفاده از شرکت پذیری تعریف می کنیم؛ به ویژه اگر G_1, G_2, \dots, G_r گراف هایی با مجموعه ی راس های دو به دو مجزا باشند، که هر کدام با G یکریخت هستند، آن گاه $G_1 + G_2 + \dots + G_r$ را با rG نشان می دهیم.

تعریف ۲.۲.۱. اگر $V_1 \cap V_2 \neq \emptyset$ ، آن گاه گراف $G = (V, E)$ ، که در آن $V = V_1 \cap V_2$ و $E = E_1 \cap E_2$ ، را اشتراک گراف های G_1 و G_2 نامیم و آن را با $G_1 \cap G_2$ نشان می دهیم.

تعریف ۳.۲.۱. فرض کنید G_1 و G_2 گراف هایی با مجموعه ی راس های مجزا باشند. در این صورت پیوند $G_1 \vee G_2$ ، از G_1 و G_2 عبارت است از زیرگراف $G_1 + G_2$ به طوری که هر راس G_1 با هر راس G_2 مجاور باشد.

تعریف ۴.۲.۱. یک گشت یا راه در گراف G ، دنباله ی ناتهی به صورت $W = v_0 e_1 v_1 e_2 v_2 \dots e_k v_k$ است که جمله های آن متناوباً رأس ها و یال ها هستند، به قسمی که برای $1 \leq i \leq k$ ، دو انتهای یال e_i ، رأس های v_{i-1} و v_i هستند. در یک گشت، لزومی ندارد که یال ها، متمایز باشند، بنابراین رأس ها نیز ممکن است متمایز نباشند. عدد صحیح k ، طول W می باشد. در گراف ساده ی G یک گشت را به صورت دنباله ای از رأس های مجاور می نویسیم.

تعریف ۵.۲.۱. اگر یال های e_1, e_2, \dots, e_k در گشت W مجزا باشند، در این صورت گشت W را یک گذر می نامند. با وجود متمایز بودن یال ها، به دلیل امکان وجود یال های موازی در گراف G ، ممکن است رأس ها متمایز نباشند. تعداد یال ها، طول W را مشخص می کنند.

تعریف ۶.۲.۱. اگر در گشت W ، علاوه بر یال ها، رأس های v_0, v_1, \dots, v_k ، مجزا باشند W را یک مسیر می نامند. بنابراین در گراف ساده ی G ، یک مسیر به صورت دنباله ای از رأس های دو به دو متمایز نوشته می شوند، به طوری که هر دو رأس متوالی این دنباله، در گراف G ، مجاور هستند. طول یک مسیر، تعداد یال های آن مسیر است. یک مسیر به طول k را یک k -مسیر می نامیم.