The 10th Conference on Mathematics in Engineering: Theory and Applications
Novi Sad, December 12-14th 2025

MAGIČNE KONFIGURACIJE NA C_{24} FULERENU[1]

Đorđe Baralić [2] i Adam Farhat [3]

https://doi.org/10.24867/META.2025.01 Originalni naučni članak

Sažetak. Fulereni su alotropi ugljenika koji imaju šuplju, kaveznu strukturu. Atomi u molekulu raspoređeni su u petougaone i šestougaone prstenove tako da je svaki atom povezan sa još tri atoma. Jednostavni poliedri koji imaju samo petougaone i šestougaone strane predstavljaju matematički model za fulerene. Kažemo da fulleren sa n temena ima magično svojstvo ako se brojevi $1, 2, \ldots, n$ mogu dodeliti njegovim temenima tako da su zbirovi brojeva u svakom petouglu jednaki i zbirovi brojeva na svakom šestouglu jednaki. Pokazujemo da C_{8n+4} ne dozvoljava takvo uređenje za sva n, dok fuleren C_{24} ima mnogo neizomorfnih takvih uređenja.

AMS Mathematics Subject Classification (2020): 00A08

Ključne reči i izrazi: magično svojstvo, fulerenu, C_{24}

1. Uvod

Pre četrdeset godina, ser Harald V. Kroto, Robert F. Karl, mlađi i Ričard Smoli otkrili su prvi fuleren C_{60}, takođe poznat kao bakminsterfuleren ili ,,bakibol", vidi [4]. Za ovo otkriće dobili su Nobelovu nagradu za hemiju 1996. godine. Identifikacija fulerena značajno je proširila spektar priznatih alotropa ugljenika, koji je ranije bio ograničen na grafit, dijamant i amorfne forme ugljenika kao što su čađ i ugalj. Nakon otkrića bakminsterfulerena, potvrđeno je postojanje sličnih struktura sa 70, 76, 78, 82, 84, 90, 94 ili 96 atoma ugljenika. Oni su bili u fokusu opsežnih istraživanja, kako u vezi sa njihovim hemijskim svojstvima, tako i sa tehnološkim primenama, naročito u nauci o materijalima, elektronici i nanotehnologiji.

Eksperimentalno proučavanje fulerena bilo je praćeno teorijskim istraživanjima zasnovanim na matematičkim modelima molekula fulerena koji se nazivaju fulerenski grafovi. Temena grafova predstavljaju atome, a grane veze između atoma u molekulu. Matematički, fuleren je 3-povezan 3-regularan ravanski graf koji ima samo petougaone i šestougaone strane. Ekvivalentno, matematički fuleren može se posmatrati kao jednostavan 3-poliedar čije su strane petougaonici ili šestougaonici. Ojlerova formula implicira da broj

[1]Prvi autor je podržan od Ministarstva nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije kroz institucionalno finansiranje Matematičkog instituta SANU.

[2]Matematički institut SANU, Beograd, Srbija e-mail: djbaralic@mi.sanu.ac.rs

[3]Amerikanska akademija Dubai, Ujedinjeni Arapski Emirati e-mail: adamfermata@gmail.com

petougaonih strana u fulerenu iznosi 12, dok je broj temena paran. Grinbaum i Motzkin u [3] pokazali su da postoji fuleren sa svakim parnim $n \geq 24$ i sa $n = 20$ temena, kao i da ne postoji fuleren sa $n = 22$ temena.

Baralić i Milenković u [**?**] predložili su proučavanje jednog zanimljivog svojstva motivisanog konfiguracijama magičnih kvadrata. Oni su pronašli primer rasporeda prvih dvadeset četiri pozitivna broja po dvadeset četiri temena trodimenzionalnog permutoedra tako da su zbirovi brojeva u temenima svakog kvadrata i svakog šestougla konstantni. Ovo svojstvo nazvali su *magičnim*. Pojam magičnog svojstva može se slično uvesti i za fulerene. Fuleren sa n temena ima magično svojstvo ako se prvih n pozitivnih brojeva može pridružiti tako da po jedno teme nosi jedan broj i tako da je zbir brojeva na svakom petougaonom licu konstantan, kao i odgovarajuci zbir za svako šestougaono lice. Cilj ovog rada je da predstavi i razmotri neke rezultate o magičnom svojstvu fulerena.

2. Fulereni i magično svojstvo

Označimo sa $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ skup temena fulerena C_n.

Definicija 2.1. Neka su $\mathcal{H}$ i $\mathcal{P}$ skupovi šestougaonih i petougaonih strana na fulerenu C_n. Kažemo da fuleren C_n ima magično svojstvo ako postoji bijekcija $f\colon V \to \{1, 2, \ldots, n\}$, nazvana magična konfiguracija, takva da

$$\sum_{v \in H_i} f(v) = S_h, \quad \forall H_i \in \mathcal{H}$$

$$\sum_{v \in P_j} f(v) = S_p, \quad \forall P_j \in \mathcal{P}$$

gde se zbir po petouglu S_p i zbir po šestouglu S_h smatraju magičnim konstantama fulerena.

Fuleren može imati mnogo različitih magičnih konfiguracija, uključujući i one sa različitim magičnim konstantama, što ćemo videti u narednom odeljku. Međutim, magične konstante S_p i S_h za dati fuleren C_n zadovoljavaju narednu relaciju.

Tvrđenje 2.2. *Ako fuleren C_n ima magično svojstvo, tada*

$$24S_p + (n - 20)S_h = 3n(n + 1). \tag{2.1}$$

Dokaz. Relacija se dobija sabiranjem brojeva preko svih strana C_n, čime se dobija tri puta zbir prvih n pozitivnih brojeva, jer svako teme pripada tačno trima stranama. □

Baralić i Milenković koristili su (2.1) i argument deljivosti u [**?**] da pokažu da ne postoji magična konfiguracija na dodekaedru C_{20}. Isti rezon može se primeniti na bakminsterfuleren C_{60}. Kada bi postojala magična konfiguracija na C_{60}, tada bi po (2.1) magične konstante zadovoljavale

$$24S_p + 40S_h = 3 \cdot 60 \cdot 61,$$

što je nemoguće zbog toga što je leva strana deljiva sa 8. Zaista, argument se neposredno generalizuje na sledeći rezultat.

Teorema 2.3. *Ako je $n \equiv 4 \pmod 8$, tada fuleren C_n ne dozvoljava magičnu konfiguraciju.*

Dokaz. Pretpostavimo suprotno. Tada je $24S_p + (n-20)S_h \equiv 0 \pmod 8$. S druge strane, $3n(n+1) \equiv 4 \pmod 8$. Kontradikcija! □

Na osnovu kongruencija modulo 8 ne možemo zaključiti mnogo o ostalim slučajevima.

Tvrđenje 2.4.

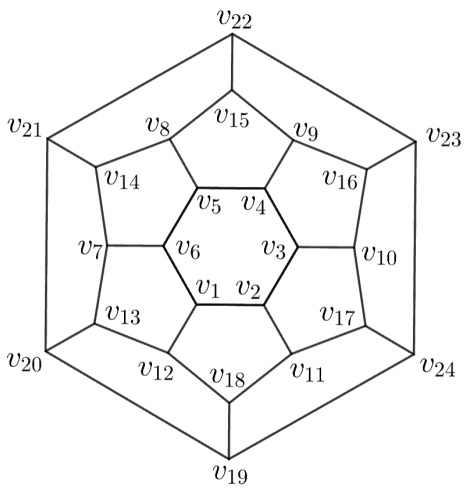
$$S_h \equiv \begin{cases} 0 \pmod 2, & \textit{ako je } n \equiv 0 \pmod 8, \\ 3 \pmod 4, & \textit{ako je } n \equiv \pm 2 \pmod 8. \end{cases}$$

Na žalost, korišćenjem ovakvih elementarnih brojevnoteorijskih argumenata ne može se dobiti mnogo. Radom modulo 3, najviše što se može reći je sledeće.

Tvrđenje 2.5. *Ako $n \not\equiv 2 \pmod 3$ i fuleren C_n dozvoljava magičnu konfiguraciju, tada $S_h \equiv 0 \pmod 3$.*

3. Magične konfiguracije na C_{24}

U prethodnom odeljku ustanovili smo nekoliko rezultata o nepostojanju magičnih konfiguracija na fulerenima. Najjednostavniji slučaj fulerena je C_{24}: njegov Šlegelov dijagram dat je na slici 1. C_{24} ima 24 temena, dvanaest petougaonih i dve šestougaone strane.



Slika 1: Schlegel dijagram za C_{24}

Proučavanje magičnih konfiguracija na C_{24} počinjemo ispitivanjem njegovih magičnih konstanti S_p i S_h. Korišćenjem (2.1) dobijamo

$$6S_p + S_h = 450. \tag{3.1}$$

Gornja linearna Diofantska jednačina ima rešenja u pozitivnim celim brojevima, npr. $S_p = 50$ i $S_h = 150$, tako da se ne može isključiti mogućnost postojanja magičnog svojstva kod C_{24}.

Iz (3.1) je jasno da $S_h \equiv 0 \pmod 6$. Dva šestougla u C_{24} ne dele nijedno teme. Najmanja moguća vrednost za S_h nije manja od zbira brojeva iz skupa $\{1, 2, \ldots, 12\}$ raspoređenih na temena šestougla, što iznosi 39. S druge strane, najveća moguća vrednost nije veća od zbira brojeva $\{13, 14, \ldots, 24\}$, što iznosi 111.

Međutim, uslov $S_h \equiv 0 \pmod 6$ implicira

$$S_h \in \{42, 48, 54, 60, 66, 72, 78, 84, 90, 96, 102, 108\},$$

a odgovarajuće vrednosti za S_p su

$$S_p \in \{68, 67, 66, 65, 64, 63, 62, 61, 60, 59, 58, 57\}.$$

Ispitali smo sve očigledne brojevnoteorijske argumente i ne mogu se dobiti nova ograničenja za magične konstante. Ručno traženje magične konfiguracije za te konstante deluje besmisleno, pa smo stoga napisali program [2] da proveri koje permutacije prvih 24 pozitivnih brojeva zadovoljavaju sistem (3.2) Diofantskih jednačina za svaki od dvanaest parova konstanti (S_p, S_h). Promenljive su povezane sa temenima označenim na slici 1. Više o programu dato je u [**?**].

(3.2)

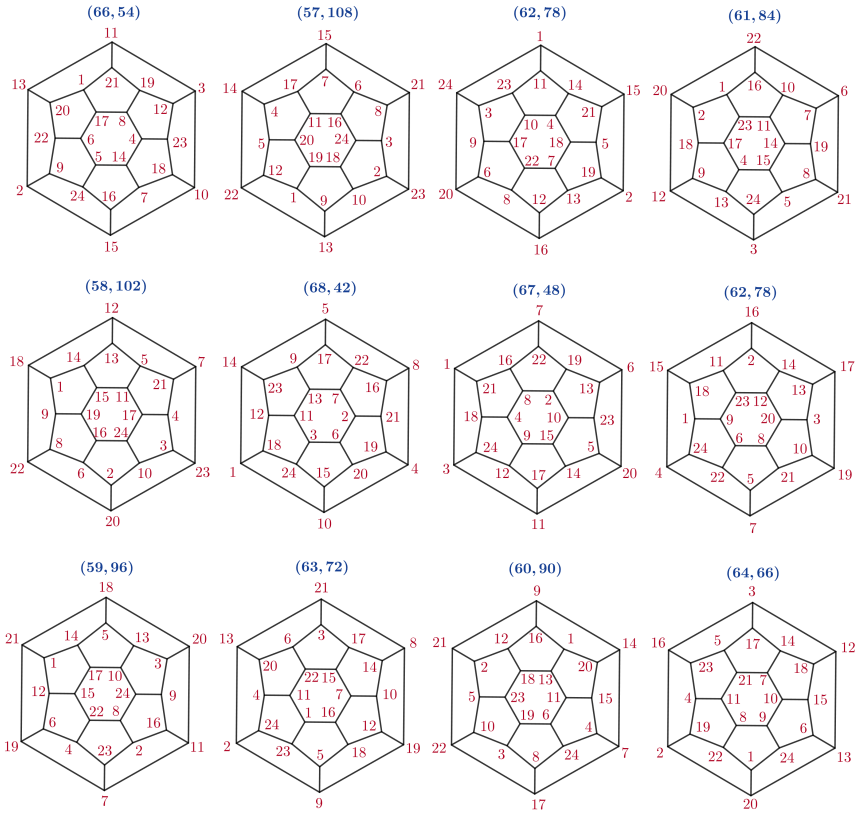
$$\begin{aligned}
v_1 + v_2 + v_3 + v_4 + v_5 + v_6 &= S_h & v_{19} + v_{20} + v_{21} + v_{22} + v_{23} + v_{24} &= S_h \\
v_5 + v_8 + v_{15} + v_9 + v_4 &= S_p & v_4 + v_9 + v_{16} + v_{10} + v_3 &= S_p \\
v_3 + v_{10} + v_{17} + v_{11} + v_2 &= S_p & v_2 + v_{11} + v_{18} + v_{12} + v_1 &= S_p \\
v_1 + v_{12} + v_{13} + v_7 + v_6 &= S_p & v_6 + v_7 + v_{14} + v_8 + v_5 &= S_p \\
v_{14} + v_8 + v_{15} + v_{22} + v_{21} &= S_p & v_{15} + v_9 + v_{16} + v_{23} + v_{22} &= S_p \\
v_{16} + v_{10} + v_{17} + v_{24} + v_{23} &= S_p & v_{17} + v_{11} + v_{18} + v_{19} + v_{24} &= S_p \\
v_{18} + v_{12} + v_{13} + v_{20} + v_{19} &= S_p & v_{13} + v_7 + v_{14} + v_{21} + v_{20} &= S_p
\end{aligned}$$

Iznenađujuće, program je pronašao mnogo rešenja u svakom od dvanaest slučajeva.

Za zaključak analize C_{24}, dajemo primere magičnih konfiguracija. Na slici 2 predstavljena je po jedna magična konfiguracija za svaki od dvanaest parova magičnih konstanti S_p i S_h.

Literatura

[1] Đ. Baralic and L. Milenković, *The Magic Permutohedron*, *Math. Intelligencer* 46 , pp. 260-263, 2024.



Slika 2: Primeri magičnih konfiguracija na C_{24}

S_p	S_h	# of solutions	S_p	S_h
57	108	576	68	42
58	102	936	67	48
59	96	2832	66	54
60	90	8832	65	60
61	84	11208	64	66
62	78	14592	63	72

Tabela 1: Broj magičnih konfiguracija na C_{24} za date magične konstante

[2] A. Farhat, *Magic Property of Fullerenes*, GitHub repository (2025), https://github.com/jazzbits/magic_property_of_fullerenes

[3] B. Grünbaum and T. S. Motzkin,"The number of hexagons and the simplicity of geodesics on certain polyhedra", *Canadian J. Math.*, vol. 15, pp. 744-751, 1963.

[4] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, "C60: Buckminsterfullerene", *Nature*, vol. 318, pp. 162-163, 1985.