

COLORAÇÃO TOTAL DE NANODISCOS DE FULERENOS

FULLERENE NANODISCS TOTAL COLORING

MARIANA M. F. DA CRUZ^a DIANA SASAKI^b
MARCUS V. TOVAR COSTA^c

Resumo

Os grafos fulerenos são grafos cúbicos, planares, 3-conexos contendo somente faces pentagonais ou hexagonais. Estes grafos são modelos matemáticos para moléculas compostas exclusivamente por átomos de carbono, descobertas experimentalmente no início da década de 1980 por Kroto, Heath, O'Brien, Curl e Smalley. Diversos parâmetros associados a estes grafos vêm sendo discutidos, buscando descrever a estabilidade das moléculas de fulereno. Neste trabalho, apresentamos o estudo da coloração total de uma subfamília infinita dos grafos fulerenos, os nanodiscos de fulereno.

Palavras-chave: Teoria de Grafos, Coloração Total, Fullerenos, Nanodiscos.

Abstract

Fullerene graphs are mathematical models for carbon-based molecules experimentally discovered in the early 1980s by Kroto, Heath, O'Brien, Curl and Smalley. Many parameters associated with these graphs have been discussed to describe the stability of fullerene molecules. By definition, fullerene graphs are cubic, planar, 3-connected with pentagonal and hexagonal faces. On this work we present the study of total coloring of an infinite subfamily of fullerene graphs, the fullerene nanodiscs.

Keywords: Graph Theory, Total Coloring, Fullerenes, Nanodiscs.

MSC2020: 05C10, 05C15, 92E10

^aInstituto de Matemática e Estatística – IME, Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ORCID: 0000-0002-1145-3377 **E-mail:** mm.marr@hotmail.com

^bDepartamento de Matemática Aplicada, Instituto de Matemática e Estatística – IME, Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ORCID: 0000-0002-0514-9918 **E-mail:** diana.sasaki@ime.uerj.br

^cDepartamento de Matemática Aplicada, Instituto de Matemática e Estatística – IME, Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ORCID: 0000.0002.9029.2507 **E-mail:** marcus.tovar@ime.uerj.br

1 Introdução

Um **grafo** pode ser entendido como um modelo matemático utilizado para representar relações entre objetos. O estudo formal desses objetos combinatórios e suas relações levou à criação da chamada Teoria de Grafos. Essa teoria tem encontrado grande respaldo na modelagem de muitos problemas em diversas áreas como a matemática, física, informática, engenharia, química, psicologia e indústria nas quais são envolvidos problemas de grande porte.

Como um caso particular de importante aplicação da teoria de grafos na modelagem, podemos citar os grafos fullerenos que são modelos matemáticos para moléculas constituídas exclusivamente por átomos de carbono. Essas moléculas foram descobertas experimentalmente, em 1985, por Kroto, Heath, O'Brien, Curl e Smalley [8]. Diversos parâmetros associados a estes grafos, que por definição, são caracterizados como cúbicos, planares, 3-conexos cujas faces são pentagonais e hexagonais, vêm sendo discutidos, buscando descrever a estabilidade dessas moléculas [10].

Neste trabalho apresentamos um método eficiente para se obter uma 4-coloração total, se esta existir, de uma classe particular dos grafos fullerenos conhecidos como nanodiscos de fullerenos. Como o público alvo deste trabalho são alunos de graduação, optamos em apresentar um texto acessível e motivador a esse grupo. Assim, ao longo do texto incluímos, sempre que possível, exemplos que ilustram as definições e resultados estudados.

Este trabalho está organizado da seguinte forma: na Seção 2 é apresentada a motivação para o surgimento da Teoria de Grafos, bem como as definições básicas que auxiliarão no resultado central deste estudo. Na Seção 3, abordamos a cronologia da descoberta dos fullerenos, e como é possível sua representação matemática através de grafos. Por fim, apresentaremos o objeto central deste trabalho, os nanodiscos de fullerenos e, além de definirmos essa classe de objeto, ilustramos a construção de alguns nanodiscos. Na Seção 4, apresentamos os resultados obtidos e as conclusões são destacadas na Seção 5.

2 Teoria de Grafos - Uma breve introdução

Nesta seção, apresentamos uma motivação para o desenvolvimento da Teoria de Grafos que vem a ser o famoso Teorema das Quatro Cores.

2.1 O Teorema das Quatro Cores

O Problema das Quatro Cores trata da determinação do número mínimo de cores necessárias para colorir um mapa, formado por países reais ou imaginários, de modo que países com fronteira comum tenham cores diferentes. Em 1852, Francis Guthrie (Figura 1), que havia estudado matemática na University College London, tentava provar que era possível colorir com apenas quatro cores um mapa da Inglaterra com seus vários distritos, como ilustrado na Figura 2, de tal forma que dois distritos vizinhos não tivessem a mesma cor. Apresentou este problema a seu irmão, Frederick Guthrie, estudante da mesma Universidade, que por sua vez, formulou o problema a seu professor, Augustus De Morgan.

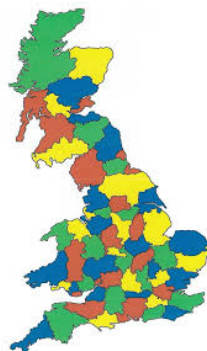
Figura 1: Francis Guthrie.



Fonte: [14]

De Morgan argumentou que, em qualquer mapa, não existem cinco países tais que cada um tenha fronteira com os outros quatro, ou seja, em cada agrupamento de cinco países, ao menos dois deles não são vizinhos. De Morgan apresentou o problema a seus estudantes e a outros matemáticos. Dentre eles, estava William Hamilton.

Figura 2: Mapa da Inglaterra.



Fonte: [19]

Em 1878, 26 anos depois de Guthrie tê-lo formulado, o problema foi divulgado pela London Mathematical Society, através de seu presidente, Arthur Cayley, fazendo com que esse conquistasse o interesse da comunidade matemática britânica.

Em 1879, Alfred Bray Kempe, matemático e advogado inglês, publicou uma demonstração completa do Teorema das Quatro Cores no American Journal of Mathematics [7]. Anos mais tarde Percy John Heawood mostrou que a demonstração de Kempe possuía um erro. No artigo em que publicou, Heawood lamentou não ter sido capaz de obter alguma demonstração alternativa do teorema, que continua sendo estudado por muitos matemáticos. No entanto, conseguiu dar mais um passo positivo, provando o Teorema das Cinco Cores [5], que diz que não são necessárias mais do que cinco cores para colorir um mapa plano onde países com fronteira comum têm cores diferentes.

Finalmente, em 1976, Kenneth Appel e Wolfgang Haken (Figura 3), utilizando um IBM 360, apresentaram uma demonstração para o Teorema das Quatro Cores. A demonstração, entretanto, gerou muita controvérsia, pois dependeu, de modo essencial, do uso de computadores de grande porte [2].

Figura 3: Kenneth Appel, Wolfgang Haken e o Computador IBM 360.



Fonte: [14].

Em 1990, uma nova demonstração do Teorema das Quatro Cores foi desenvolvida por quatro matemáticos, Neil Robertson, Dan Sanders, Paul Seymour e Robin Thomas ainda fazendo uso de computadores, mas utilizando um laptop, com um custo de apenas algumas horas [12].

2.2 Conceitos Básicos da Teoria de Grafos

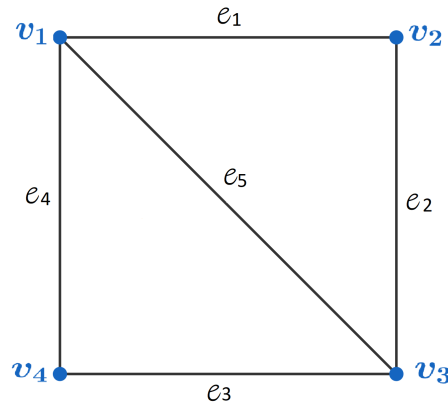
Os conceitos apresentados nesta estão presentes em referências como [3, 17, 18] da área de Teoria de Grafos.

Definição 1. Um grafo $G = (V(G), E(G))$ é um par ordenado, onde $V(G)$ é um conjunto finito não-vazio de vértices e $E(G)$ é um conjunto, disjunto de $V(G)$ de

arestas, formados por pares não ordenados de elementos distintos de $V(G)$, ou seja, para toda aresta $e \in E(G)$ existem u e $v \in V(G)$ tais que $e = \{u, v\}$, ou meramente $e = uv$.

Um exemplo é ilustrado na Figura 4, onde $V(G) = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$ e $E(G) = \{v_1v_2, v_2v_3, v_3v_4, v_4v_1, v_1v_3\}$.

Figura 4: Exemplo de um grafo.



Fonte: Autoral.

Se $uv \in E$, dizemos que u e v são vértices adjacentes ou que u é vizinho de v , e que a aresta e é incidente à u e à v , e u e v são ditos extremos de e . Duas arestas que possuem a mesma extremidade são chamadas arestas adjacentes. Por exemplo, na Figura 4, veja que os vértices v_1 e v_2 são adjacentes, e a aresta $e_1 = v_1v_2$ incide em v_1 e em v_2 .

O grau de um vértice v em G , representado por $d(v)$, é o número de arestas incidentes à v . Denotamos por $\delta(G)$ e $\Delta(G)$ os graus mínimo e máximo, respectivamente, dos vértices do grafo G . Na Figura 4, $\delta(G) = 2$ e $\Delta(G) = 3$.

Um grafo G é dito **conexo** quando existe um caminho entre cada par de vértices de G . Caso contrário, o grafo é dito desconexo. O grafo exemplificado na Figura 4 é conexo.

Definição 2. Definimos como um **passeio** de um grafo G uma sequência de vértices $S = (v_1, v_2, \dots, v_k)$, onde $v_i, i = 1, \dots, k$ pertence ao conjunto de vértices $V(G)$ e $v_i v_{i+1}$ é uma aresta de G .

Um *caminho* ou *trilha* é um passeio sem arestas repetidas, ou seja, um passeio onde todas as arestas são distintas. O *comprimento* k de um passeio S é dado pelo número de arestas de S , contadas com ou sem repetição. Um caminho é dito *fechado* se o passeio $S = (v_1, v_2, \dots, v_k)$ tem $v_1 = v_k$, ou seja, todos os vértices são distintos, exceto pelo primeiro e pelo último.

Definição 3. Um **ciclo** em um grafo G é um caminho fechado, com uma única repetição de vértices e sem repetição de arestas. Portanto, todo ciclo tem comprimento maior que dois.

Um grafo é *cíclico* se apresentar ao menos um ciclo. Se o grafo G não apresentar nenhum ciclo, dizemos que G é acíclico. Um ciclo é dito simples se não possui vértices repetidos, exceto pelo último, e dizemos que dois ciclos simples são idênticos se possuem o mesmo conjunto de arestas, ainda que tenham origens diferentes. Denotamos por k -ciclo o ciclo de comprimento k . Um ciclo é dito par ou ímpar de acordo com a paridade de k . Um 3-ciclo é geralmente chamado de triângulo, um 4-ciclo de quadrado, um 5-ciclo de pentágono, e assim sucessivamente.

Na Figura 4:

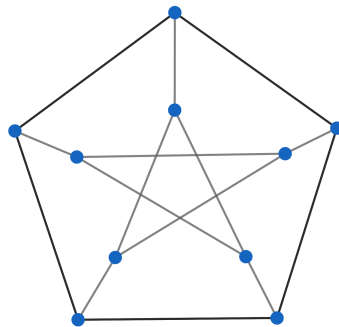
- Um caminho em $G : v_1, v_2, v_3$;
- Alguns ciclos em $G : v_1, v_2, v_3, v_1; v_1, v_2, v_3, v_4, v_4$.

A *cintura* de um grafo G , denotada por $g(G)$ é o menor comprimento de um ciclo de G . Se G não possui ciclos, então dizemos que a cintura de G tem comprimento infinito. Observe que a cintura do grafo da Figura 4 é 3.

Definição 4. Um grafo G é dito **regular de grau r** , ou r -regular quando todos os seus vértices possuem o mesmo grau r .

Para $r = 0, 1, 2$, os grafos r -regulares têm estruturas muito simples e são facilmente caracterizados. Por outro lado, grafos 3-regulares podem ser notavelmente complexos. Esses grafos, também conhecidos como *cúbicos* (Figura 5), desempenham um papel fundamental na Teoria de Grafos.

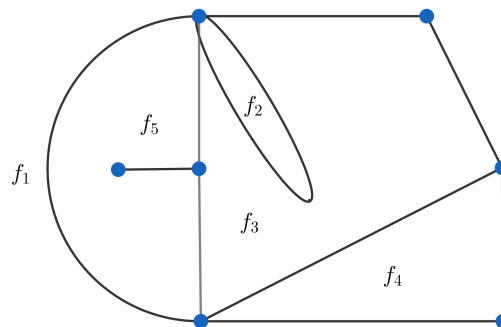
Figura 5: Grafo cúbico.



Fonte: Autoral.

Um grafo G é planar se existe uma representação (desenho, imersão) de G no plano de modo que as arestas se encontrem somente nos vértices, isto é, de modo que as arestas não se cruzem. Uma tal representação de G é dita plana ou planar. Uma representação planar divide o plano em regiões chamadas faces. Existe sempre uma única face chamada externa ou infinita, que não está limitada (tem área infinita). A fronteira ou ciclo exterior de uma face de um grafo planar conexo é um passeio fechado de arestas que limita e determina a face. Duas faces são adjacentes se tiverem uma aresta comum entre suas fronteiras. Denotamos a fronteira de uma face f por $\partial(f)$. A Figura 6 mostra um grafo planar com cinco faces, f_1, f_2, f_3, f_4 e f_5 . Denotamos por $F(G)$ e $f(G)$, respectivamente, o conjunto de faces e o número de faces de um grafo planar G .

Figura 6: Grafo planar com cinco faces.



Fonte: Autoral.

Existe uma fórmula simples que relaciona o número de vértices, arestas e faces em um grafo conexo planar. Esta fórmula foi estabelecida por Euler em 1752 para grafos poliédricos, e é conhecida como **Fórmula de Euler**, e será enunciada a seguir.

Teorema 1. [Fórmula de Euler, 1752] *Em um grafo conexo planar G com m arestas, n vértices e f faces, se tem*

$$n - m + f = 2. \quad (2.1)$$

A demonstração deste teorema pode ser encontrada em [3].

2.2.1 Coloração Total

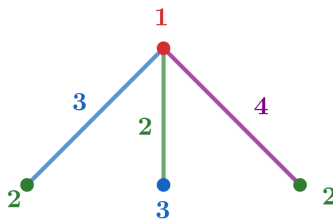
Em Teoria de Grafos, coloração é uma atribuição de cores a elementos do grafo, sujeita à certas restrições. O estudo de coloração foi iniciado com a Conjectura das Quatro Cores, citada na Subseção 2.1. Esta conjectura foi fundamental para o início do estudo de coloração de grafos.

Definição 5. Uma **coloração total** C^T de um grafo G é uma atribuição de cores ao conjunto $E \cup V$ em um conjunto de cores $C = \{c_1, c_2, \dots, c_k\}$, $k \in \mathbb{N}$, de tal forma que cores distintas sejam atribuídas a:

- Todo par de vértices que sejam adjacentes;
- Todas as arestas que sejam adjacentes;
- Cada vértice e suas arestas incidentes.

Uma k -coloração total de um grafo G é uma coloração total de G que utiliza um conjunto de k cores, e um grafo é k -total colorível se existe uma k -coloração total de G . Definimos como **número cromático total** de um grafo G o menor natural k para o qual G admite uma k -coloração total, e é denotado por $\chi''(G)$. Exibimos uma 4-coloração total na Figura 7.

Figura 7: Grafo com 4-coloração total.



Fonte: Autoral.

Behzad e Vizing conjecturaram independentemente um mesmo limite superior para o número cromático total.

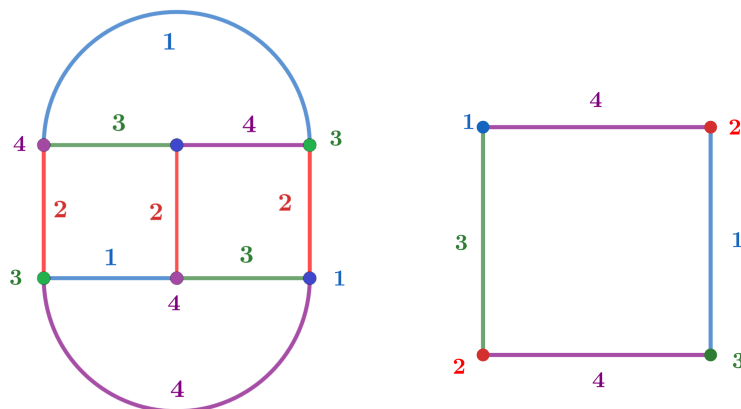
Conjectura 2.1 (Conjectura da Coloração Total (TCC)). *Para todo grafo G simples,*

$$\chi''(G) \leq \Delta(G) + 2.$$

A TCC é um problema em aberto, mas foi verificado para diversas classes de grafos. Sabendo que $\chi''(G) \geq \Delta(G) + 1$, e a partir da TCC, convencionou-se que: Se $\chi''(G) = \Delta(G) + 1$, o grafo é **Tipo 1**; $\chi''(G) = \Delta(G) + 2$, o grafo é **Tipo 2**.

A Figura 8 ilustra essa convenção, exibindo grafos Tipo 1 e Tipo 2. Observe que o grafo à esquerda é cúbico, ou seja, $\Delta(G) = 3$. Já o grafo à direita é 2-regular, o que significa $\Delta(G) = 2$.

Figura 8: À esquerda, um grafo Tipo 1 e à direita, um grafo Tipo 2.



Fonte: Autoral.

Para grafos cúbicos, a TCC já foi demonstrada, o que nos indica que estes grafos possuem coloração total com 4 ($\Delta + 1$) ou 5 ($\Delta + 2$) cores. Porém, o problema de decidir quais são Tipo 1 ou Tipo 2 é difícil.

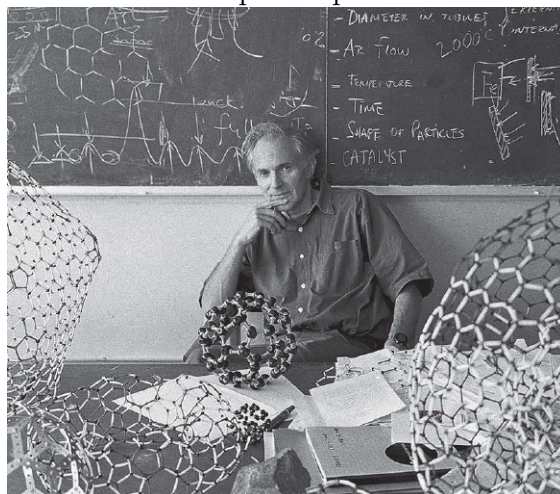
3 Os Fulerenos

Nesta seção, faremos uma breve exposição histórica sobre a descoberta das moléculas de fulereno, assim como sua estrutura geométrica e aplicações. Em seguida, introduziremos os grafos fulerenos que modelam tais moléculas, e apresentaremos uma classe de grafos fulerenos, os nanodiscos.

3.1 Um pouco de história

No ano de 1985, a comunidade científica presenciou o surgimento de um novo alótropo do carbono: O C_{60} [8]. Afim de compreender os mecanismos que permitiam a formação de longas cadeias de carbono observadas no espaço interestelar, um grupo de cientistas, liderados pelo inglês Harold Walter Kroto (Figura 9) e os americanos Richard Errett Smalley e Robert Curl, empregou a técnica desenvolvida por Smalley e colaboradores na Universidade Rice, de vaporização de átomos de um material refratário (por exemplo, um metal), a partir da irradiação de uma superfície de grafite com emprego de laser num jato pulsado de gás hélio de alta intensidade, a temperaturas na ordem de 10^4 °C, no qual os átomos se reagrupavam formando aglomerados e que eram analisados posteriormente por espectrometria de massa.

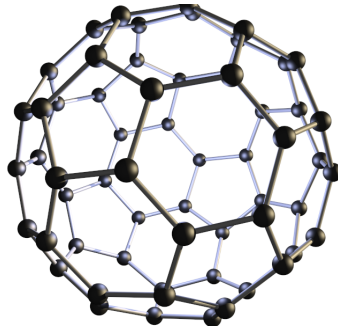
Figura 9: Walter Kroto com protótipos de moléculas de fulereno.



Fonte: Skeptical Inquirer - July August 2016.

A frutífera colaboração desses quatro cientistas teve como resultado, através dos experimentos de vaporização do carbono, a possibilidade de simulação da química estelar do carbono. Desse experimento resultou a descoberta uma molécula constituída somente por átomos de carbono, altamente simétrica, estável, e até então, distinta das demais formas alótropas de carbono já conhecidas. A análise do sistema obtido, através da técnica de espectrometria de massas possibilitou a identificação de fragmentos formados por estruturas contendo 60 átomos de carbono, o C_{60} [1].

A estrutura atômica do grafite, a ser vaporizado, é formada por planos ou camadas paralelas de átomos de carbono de anéis tipo benzeno (C_6) condensados e perfeitamente hexagonais. Dessa forma, foi inicialmente levantada a hipótese de que a forma mais provável desta nova molécula também seria a de planos de átomos de carbono dispostos em vértices hexagonais, similar ao grafite. No entanto, Kroto, admirador do arquiteto Americano Richard Buckminster Fuller, famoso por suas construções de cúpulas geodésicas, que são estruturas compostas por faces hexagonais e pentagonais, supôs que a nova molécula poderia apresentar uma estrutura idêntica àquela das cúpulas criadas por Fuller [13]. Assim, foi proposta uma estrutura similar a uma bola oca de futebol, apresentando 32 faces, sendo 20 hexagonais e 12 pentagonais, (Figura 10), e em homenagem a Fuller, decidiram batizar com o nome de *buckminsterfullereno* o C_{60} [13].

Figura 10: Estrutura molecular do C_{60} .

Fonte: chemistry.org.

A descoberta do buckminsterfullereno foi a primeira nova forma alotrópica a ser descoberta no século XX, e valeu a Kroto, Curl e Smalley (Figura 11) o Prêmio Nobel de Química no ano de 1996 [13].

Figura 11: Os cientistas Robert Curl, Harold Kroto e Richard Smalley.

Fonte: <https://www.nobelprize.org>.

Como curiosidade, em 1985, foi demonstrada a existência dos fulerenos, estruturas ocas de carbono com forma de bola de futebol. Em 1991, Sumio Iijima [6] demonstrou a existência dos nanotubos de carbono, que são tubos formados por folhas de grafeno enroladas na forma de cilindros, que também vem se mostrando possuir um grande potencial de aplicação tecnológica. Finalmente, em 2004 Andre Geim e Konstantin Novoselov, da Universidade de Manchester, na Inglaterra, utilizando a técnica da esfoliação de grafite, anunciaram processo para a obtenção de um novo alótropo do carbono chamado grafeno, [11]. O grafeno apresenta inúmeras propriedades que possibilitam um enorme leque de aplicações e atualmente parece ser o material mais resistente do mundo. Esta descoberta, rendeu à dupla o Prêmio Nobel da Física em 2010, mas isso já é uma outra história.

3.1.1 Aplicações dos Fullerenos

A funcionalização dos fullerenos, apresenta propriedades físicas e químicas bastante peculiares, e têm possibilitado o seu emprego em diversas áreas, principalmente na bioquímica e na medicina, onde [15] podemos destacar as seguintes aplicações que encontram-se em desenvolvimento:

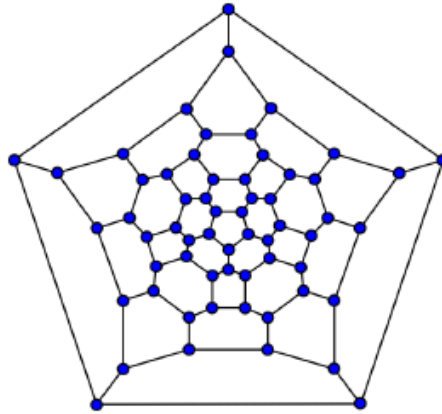
- Atividade antiviral;
- Atividade antioxidante e de armadilhas de radicais livres;
- Terapia fotodinâmica;
- Foto-clivagem do DNA;
- Atividade antimicrobiana;
- Transporte de medicamentos através do corpo humano e de drogas de efeito radioterápico e contrastes para diagnóstico por imagem;
- Tecnologias de armazenamento de energia.

3.2 Grafos Fullerenos

Dada uma molécula de fullereno podemos esquematizá-la por um grafo correspondente, de modo que os átomos da molécula são representados pelos vértices do grafo enquanto que as ligações duplas entre os átomos da molécula dão origem às arestas do grafo. Vale salientar que os grafos fullerenos conservam as propriedades geométricas das moléculas de fullereno, isto é, os grafos fullerenos são planares, conexos, todos os vértices têm exatamente 3 arestas incidentes e todas as suas faces são pentagonais ou hexagonais. Para um estudo mais detalhado acerca dos grafos fullerenos a indicamos a referência [10].

Definição 6. *Um grafo planar, cúbico, 3-conexo, onde suas faces são pentagonais ou hexagonais é chamado de **grafo fullereno**, ou apenas **fullereno**.*

A Figura 12 ilustra um grafo que modela o C_{60} .

Figura 12: Grafo que modela o C_{60} .

Fonte: [10]

O lema a seguir é uma consequência direta do Teorema 1 (Euler, 1752) e pode ser encontrada em [10].

Lema 2. *Todo grafo fullereno possui exatamente 12 faces pentagonais.*

Demonstração. Seja G um grafo fullereno contendo p faces pentagonais e h faces hexagonais. Então, G possui $p + h$ faces, $\frac{5p + 6h}{2}$ arestas, pois cada aresta pertence a duas faces e o grafo é simples, e pelo fato de ser cúbico, possui $\frac{5p + 6h}{3}$ vértices. Como G é planar e conexo, então, pela Fórmula de Euler (Teorema 1), temos:

$$\frac{5p + 6h}{3} + p + h - \frac{5p + 6h}{2} = 2.$$

Daí, obtemos:

$$10p + 12h + 6p + 6h - 15p - 18h = 12,$$

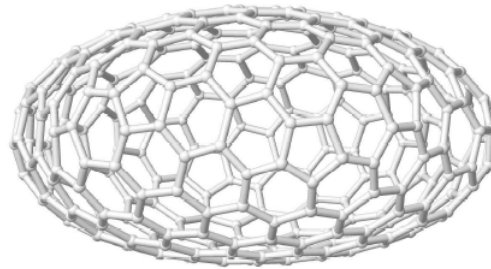
e portanto $p = 12$. □

3.3 Nanodiscos de Fulerenos

Nesta parte, apresentamos a família de grafos fulerenos que investigamos neste trabalho: os nanodiscos de fulerenos [4]. Utilizamos [10] como base para os conceitos e construção desta família. Um **nanodisco de fullereno**, ou simplesmente nanodisco de raio $r \geq 2$ é uma superfície formada por duas tampas planas e idênticas

conectadas por uma faixa através de suas fronteiras. Sabemos que em um grafo fulereno, tem exatamente 12 faces pentagonais. Essas tampas são definidas por grafos 2-conexos subcúbicos tal que todas as suas faces exceto a exterior são hexagonais. Dessa forma, um nanodisco de fulereno terá nas duas tampas apenas faces hexagonais e na faixa que os une, as 12 faces pentagonais. A Figura 13 mostra uma visão tridimensional do nanodisco com 300 vértices.

Figura 13: Visão tridimensional do nanodisco $D_{5,2}$.



Fonte: [10]

Um nanodisco de raio $r \geq 2$ e $1 \leq t \leq r - 1$ representado por $D_{r,t}$, pode ser obtido através de sua planificação ou projeção bidimensional de modo a dispor suas faces em camadas ao redor da camada imediatamente anterior, partindo de uma face hexagonal e obtendo as demais camadas, que circundarão as camadas anteriores.

A quantidade de faces em cada camada da planificação do nanodisco D_r , para $r \geq 2$ é fornecida pela sequência $\{1, 6, 12, 18, \dots, 6(r-1), 6r, 6(r-1), \dots, 18, 12, 6, 1\}$. Além disso, essa sequência diz que um nanodisco D_r tem $(6r^2+2)$ faces, $12r^2$ vértices e $(2r+1)$ camadas. Sempre teremos as 12 faces pentagonais distribuídas em uma mesma camada com outras $(6r-12)$ faces hexagonais. Esta se constitui em uma propriedade central para a descrição dos nanodiscos de fulereno. A Tabela 1 mostra o número de elementos do nanodisco de fulereno, em função do parâmetro $r \geq 2$.

Tabela 1: Número de vértices, faces, arestas e camadas do nanodisco de fulereno D_r em função do parâmetro $r \geq 2$.

r	Vértices	Faces	Arestas	Camadas
2	48	26	72	5
3	108	56	162	7
4	192	98	288	9
5	300	152	450	11
.
.
.
$r \geq 2$	$12r^2$	$6r^2 + 2$	$18r^2$	$2r + 1$

Fonte: Autoral.

O Algoritmo 1 nos mostra como obter a planificação de um nanodisco de fulereno D_r de raio $r \geq 2$.

Algoritmo 1: Planificação do Nanodisco de Fulereno D_r ($r \geq 2$)

Passo 1: Construir a sequência

$\{1, 6, 12, 18, \dots, 6(r-1), 6r, 6(r-1), \dots, 18, 12, 6, 1\}$, que nos indicará o número de camadas do nanodisco e quantas faces haverá em cada camada;

Passo 2: Construir a camada inicial contendo um hexágono (Ciclo de tamanho 6);

Passo 3: Partindo da camada central, construiremos a segunda camada, que contém 6 hexágonos. A regra para a construção desses hexágonos é utilizar os vértices que possuem grau 2 para criar as arestas que formarão os hexágonos da camada posterior. Seguir este processo até a camada que contém $6(r-1)$ hexágonos;

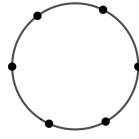
Passo 4: Na camada $6r$ (camada central), distribuir as faces pentagonais lado a lado com $6r - 12$ faces hexagonais; O parâmetro t nos garante a organização dos pentágonos nesta camada.

Passo 5: Construir a camada seguinte, que contém $6(r-1)$ hexágonos. Neste passo, decresceremos o número de faces hexagonais nas camadas posteriores, até atingirmos a última camada, contendo um hexágono (face exterior). Alcançada esta camada, o algoritmo encerrará e nos retornará a planificação nanodisco D_r com $r \geq 2$.

Como exemplo de uma planificação, utilizaremos o Algoritmo 1 para exibir a construção do nanodisco $D_{2,1}$: $\{1, 6, 12, 6, 1\}$.

Como ponto de partida, escolhemos a camada inicial, contendo um hexágono (Figura 14).

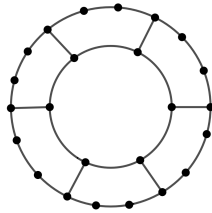
Figura 14: Face hexagonal: camada contendo um hexágono.



Fonte: Autoral.

A essa face hexagonal adicionamos a seguir a camada contendo seis hexágonos (Figura 15).

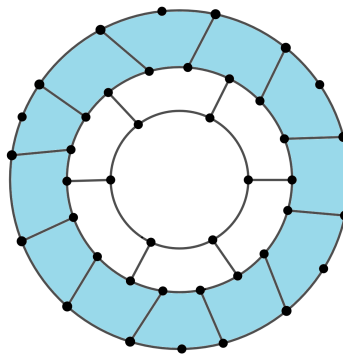
Figura 15: Construção de $D_{2,1}$: camada contendo seis hexágonos.



Fonte: Autoral.

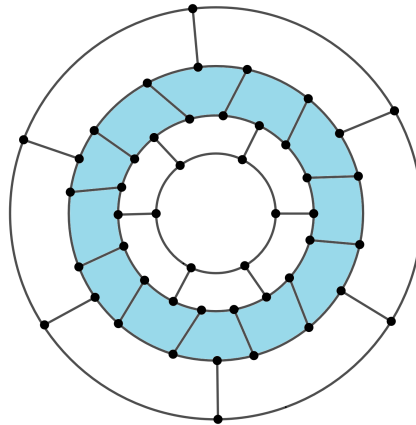
Em seguida adicionamos as 12 faces pentagonais (Figura 16).

Figura 16: Adição das faces pentagonais.



Fonte: Autoral.

Por fim, é adicionada a última camada contendo seis hexágonos, e assim obtemos a planificação do nanodisco $D_{2,1}$ como representado pela Figura 17.

Figura 17: Nanodisco $D_{2,1}$.

Fonte: Autoral.

4 Coloração Total dos Nanodiscos de Fulerenos - Alguns resultados

Para mostrar que um grafo cúbico é Tipo 1, basta exibir uma coloração total com 4 cores. Porém, para mostrar que um grafo cúbico é Tipo 2, precisamos mostrar que este não possui nenhuma coloração total com apenas 4 cores. Sendo assim, encontrar grafos cúbicos Tipo 2 tem sido uma tarefa um pouco mais complicada. Lembramos que a cintura de um grafo G é o comprimento de seu menor ciclo. Até o presente momento, todo grafo cúbico Tipo 2 que conhecemos possui cintura 3 ou 4 (possuem triângulos ou quadrados). Assim, poderíamos ser levados a pensar que não existem grafos cúbicos Tipo 2 com cintura pelo menos 5. Dessa forma, Sasaki em 2013 [16] propôs a seguinte questão:

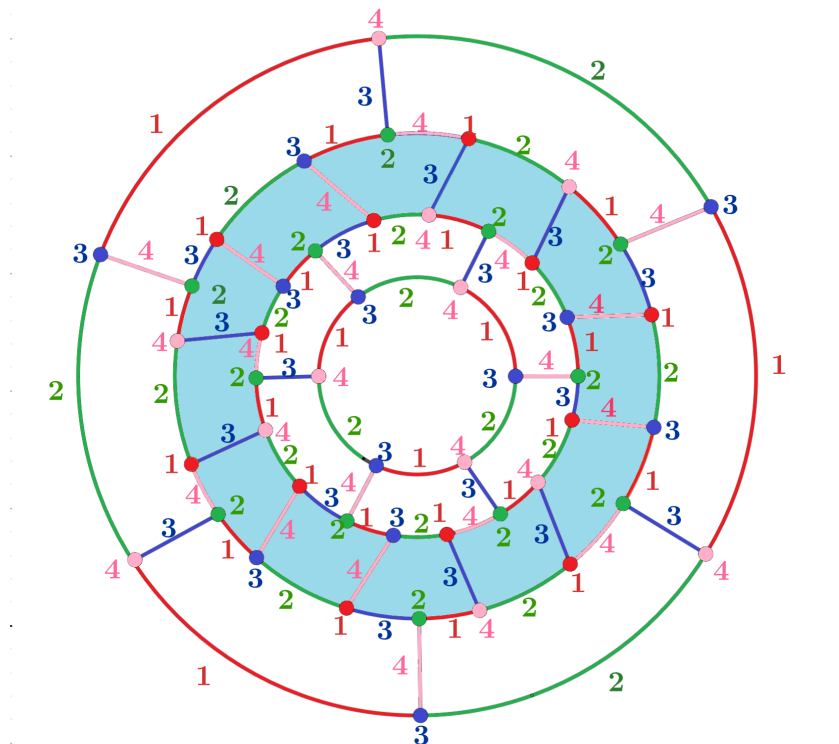
Questão 1. *Existe grafo cúbico Tipo 2 com cintura pelo menos 5?*

Motivados por essa indagação, analisamos a família dos nanodiscos de fulerenos, em busca de evidências que possam responder positivamente ou negativamente a esta questão. Cabe ressaltar que todos os fulerenos são grafos cúbicos com cintura 5. Neste contexto, o nosso objetivo é buscar um algoritmo eficiente para encontrar uma 4-coloração total dos nanodiscos de fulereno, se esta coloração existir.

4.1 Resultados obtidos

Após algumas tentativas, conseguimos obter uma 4-coloração total do nanodisco $D_{2,1}$ (Figura 18). Portanto, $D_{2,1}$ é Tipo 1, mais uma evidência de que a questão proposta anteriormente tem resposta negativa.

Figura 18: Uma 4-coloração total do nanodisco $D_{2,1}$ obtida sem o auxílio do computador.



Fonte: Autoral.

5 Conclusão

Neste artigo, investigamos uma subclasse dos grafos fullerenos em relação à coloração total, com o objetivo de classificá-los quanto ao Tipo 1 ou Tipo 2 de modo a contribuir com as evidências de que a Questão 1, formulada por Sasaki, possui resposta negativa ou positiva.

A escolha dos nanodiscos de fullerenos para investigação, se deve ao fato de que recentemente os grafos desta família foram os contraexemplos encontrados para uma importante conjectura de 1955 [9] e portanto potenciais candidatos para o nosso estudo neste primeiro momento. Buscaremos contribuir para o estado da arte, tentando generalizar a coloração total obtida, de modo a compor um algoritmo que possibilite a coloração total desta família infinita de nanodiscos de fullerenos, e ainda

iremos considerar outras subclasses de grafos de fulerenos para maior entendimento do assunto.

Referências

- [1] TAYLOR, R. et al.: Isolation, separation and characterisation of the fullerenes C_{60} and C_{70} : the third form of carbon. **J. Chem. Soc., ChemComm.**, n. 20, p.1423-1425, 1990.
- [2] APPEL, K. e HAKEN, W.: The Solution of the Four-Color-Map Problem. **Scientific American** v. 237(4) p.108-121, 1977.
- [3] BONDY, J. A. e MURTY, U. S. R.: **Graduate Texts in Mathematics 244 - Graph Theory**. Springer, 2008.
- [4] GRAVER J. E. e MONACHINO I. A.: Highly symmetric fullerenes and nanotubes. **Symmetry Cult. Sci.**, 19(4), p. 317-340, 2008.
- [5] HEAWOOD, P. J.: Map-Colour Theorem. **Quart. J. of Pure Appl. Math.**, v.24, p.332-338, 1890.
- [6] IJIMA, S.: Synthesis of Carbon Nanotubes. **Nature**, v.354, p.56-58, 1991.
- [7] KEMPE, A. B.: On the Geographical Problem of the Four Colors. **Am. J. Math.**, v.2, p.193-200, 1879.
- [8] KROTO, H. et al.: C_{60} : Buckminsterfullerene. **Nature**, v.138, p.162-163, 1985.
- [9] NICODEMOS, D. S. e STEHLÍK M.: Fullerene graphs of small diameter. **MATCH Commun. Math. Comput. Chem.** v.77 p.725-728, 2017.
- [10] NICODEMOS, D. S.: Diâmetro de Grafos fulerenos e Transversalidade de Ciclos Ímpares de Fuleróides-(3, 4, 5, 6). Tese de doutorado. Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.
- [11] NOVOSELOV, K. S.; et al.: Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. **Science**. v.306 p.666-669, 2004.
- [12] ROBERTSON N. et al.: The Four-Colour Theorem. **J. Combin. Theory Ser. B**, v.70, n^o 1, p.2-44, 1997.
- [13] ROCHA-FILHO, R. C.: Os fulerenos e sua espantosa geometria molecular. **Química Nova na Escola**, v.4, p.7-11, 1996.

- [14] SAMPAIO, J. C. V.: Quatro cores e matemática. Salvador, II Bienal da SBM–UFBA, disponível em www.bienasbm.ufba.br, M35, 2004.
- [15] SANTOS, L. J. et al.: Fulereno [C60]: química e aplicações. **Química Nova**, v.33, nº 3, p.680-693, 2010.
- [16] SASAKI, D.: Sobre Coloração Total de Grafos Cúbicos. Tese de doutorado. Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.
- [17] SZWARCFITER, J. L.: **Teoria computacional de grafos: Os Algoritmos** Rio de Janeiro: Elsevier Brasil LTDA, 2018.
- [18] WEST, D. B.: **Introduction to graph theory**. Upper Saddle River, NJ: Prentice hall, 1996.
- [19] WILSON, R. L.: **Four Colors Suffice: how the map problem was solved**. Princeton University Press, 2014.