

X. FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2005. március 18-19.

POLIÉDERES MIKROSZERKEZET TOPOLÓGIAI JELLEMZÉSE ALAKTÉNYEZŐK FELHASZNÁLÁSÁVAL

Bitay Enikő, Réti Tamás

Abstract

Starting with the concept of the generalized combinatorial curvature, novel topological shape factors are defined for the quantitative characterization of microscopic particles represented by convex polyhedra. It is demonstrated that using four appropriately selected topological shape factors the local structure and the stability of polyhedral fullerenes can be efficiently evaluated on the basis of quantitative criteria.

1. Bevezetés

Egyfázisú fémötvözetek mikroszkópos szemcseszerkezetét konvex poliéderek olyan rendszerének (halmazának) szokás tekinteni, amelynek jellegzetessége, hogy a különböző alakú és méretű poliéderek a teret hézagmentesen és egyrétűen töltik ki.

Az egyedi szemcsemorfológia kvantitatív minősítésére elterjedten alkalmazzák a sztereológiai módszerekkel meghatározott különféle típusú alaktényezőket [1]. Ezek definiálására sokféle lehetőség kínálkozik, az alaktényezők származtathatók a szemcsék metrikus geometriai adataiból (felületnagyság, térfogat, átmérő) illetve az egyes szemcsék számszerű topológiai jellemzőiből.

Mivel a valóságos térbeli szemcsék alakja meglehetősen szabálytalan, ezért ezek egyszerű geometriai alakzatokkal (gömb, ellipszoid, kocka, stb.), modellezése általában problematikus. Ennek alapvető oka

az, hogy a hagyományos metrikus geometriai alapadatok meghatározása mérés technikai nehézségekbe ütközik. Az említett problémák többsége kiküszöbölhető, ha a szemcsék egyedi topológiai jellemzőit használjuk fel alaktényezők definiálására.

A következőkben megmutatjuk, hogy a poliéder típusú szemcsék kombinatorikus görbületének statisztikai jellemzőiből olyan új típusú topológiai alakjellemzők generálhatók, amelyek hatékonyan alkalmazhatók egyedi szemcsék morfológiájának kvantitatív kritériumon alapuló minősítésére, a szemcsék alak szerinti osztályozására.

2. A kombinatorikus görbület értelmezése poliéderekre

Vizsgálatainkban az egyes szemcséket konvex poliédereknek tekintettük, és ezek alak szerinti jellemzését a kombinatorikus görbület fogalmára alapoztuk. Mint ismeretes tetszőleges konvex poliéderre érvényes az alábbi Euler-egyenlet:

$$N - E + V = 2 \quad (1)$$

ahol V a poliéder csúcscsáma, E éleinek száma, N pedig a lapokat reprezentáló konvex sokszögek száma. Tekintsük a poliéderhez tartozó, általa egyértelműen meghatározott síkbeli, 3-összefüggő gráfot. Ennek tetszőleges r -ed fokú X_j csúcsának kombinatorikus görbületét szokásos módon a

$$\Phi(X_j) = 1 - \frac{r}{2} + \frac{1}{n_{j,1}} + \frac{1}{n_{j,2}} + \dots + \frac{1}{n_{j,r(j)}} \quad (2)$$

formulával definiáljuk, ahol $n_{j,1}, n_{j,2}, \dots, n_{j,r(j)}$ jelöli az X_j csúcsra illeszkedő r számú sokszögek oldalszámát [2]. Ismeretes, hogy a kombinatorikus görbületek összegére fenn áll a

$$\chi \sum_{j=1}^V \Phi(X_j) = V \quad (3)$$

összefüggés, ahol χ az ún. Euler-karakterisztika, amely poliéderek gráfokra $\chi=2$ [2]. A következőkben megmutatjuk, hogy a kombinatorikus görbület fogalmát általánosítva olyan topológiai alaktényezők származtathatók, amelyek előnyösen használhatók poliéderekkel modellezett szemcsék egyedi geometriai sajátosságainak minősítésére.

3. Általánosított kombinatorikus görbület

Az ún. általánosított kombinatorikus görbületet síkbeli 2-összefüggő celluláris rendszerekre

$$\Phi_S(X_j) = 1 - \frac{r(X_j)}{2} + CV_S(X_j) \quad (4)$$

összefüggéssel definiáltuk, ahol $CV_S(X_j)$

$$CV_S(X_j) = n_{1,j}^S + n_{2,j}^S + \dots + n_{r(j),j}^S \quad (5)$$

és $n_{1,j}, n_{2,j}, \dots, n_{r(j),j}$ az r -ed fokú X_j csúcsra illeszkedő r számú sokszög oldalszáma, S paraméter pedig tetszőleges, de zérustól különböző valós szám [3]. Mint megállapítható, a (4) képlet $S = -1$ választásakor a tradicionális kombinatorikus görbületet adja speciális esetként. Az előző megfontolásokból következik, hogy az általánosított kombinatorikus görbületet fogalma kiterjeszthető minden olyan „celluláris rendszerre”, amely orientálható, 2-oldalú, zárt felületen definiált [3]. (Tehát $\Phi_S(X_j)$ nemcsak gömbfelületen, de például tóruszon értelmezett, 2-összefüggő celluláris rendszerek topológiai jellemzésére is alkalmazható.) Előfordulhat, hogy $\Phi_S(X_j)$ értéke azonos minden csúcsra vonatkozóan. Az ilyen celluláris rendszereket „kiegyensúlyozott” sejtrendszereknek (továbbiakban KS-rendszereknek) nevezzük. Tipikus példák erre a prizmák és az antiprizmák néven ismert konvex poliéderek, vagy a tórusz-felületen definiált, kizárólag hatszögekből álló cella-rendszerek [3].

3. Topológiai alakjellemzők és tulajdonságaik

Az általánosított kombinatorikus görbületet alapján kétféle, $\Lambda(S)$ és $\Omega(S)$ topológiai alaktényezőt származtattunk, ezek a

$$\Lambda(S) = 100 \left(\frac{1 + \sqrt{\mu_2(\Phi_S)}}{1 + \sqrt{\mu_1^2(\Phi_S)}} - 1 \right) \quad (6)$$

és

$$\Lambda(S) = \begin{cases} 0 & \text{KS-rendszerre} \\ 100 \left(\frac{\mu_3(\Phi_S)}{\mu_2^{3/2}(\Phi_S)} - 1 \right) & \text{egyébként} \end{cases} \quad (7)$$

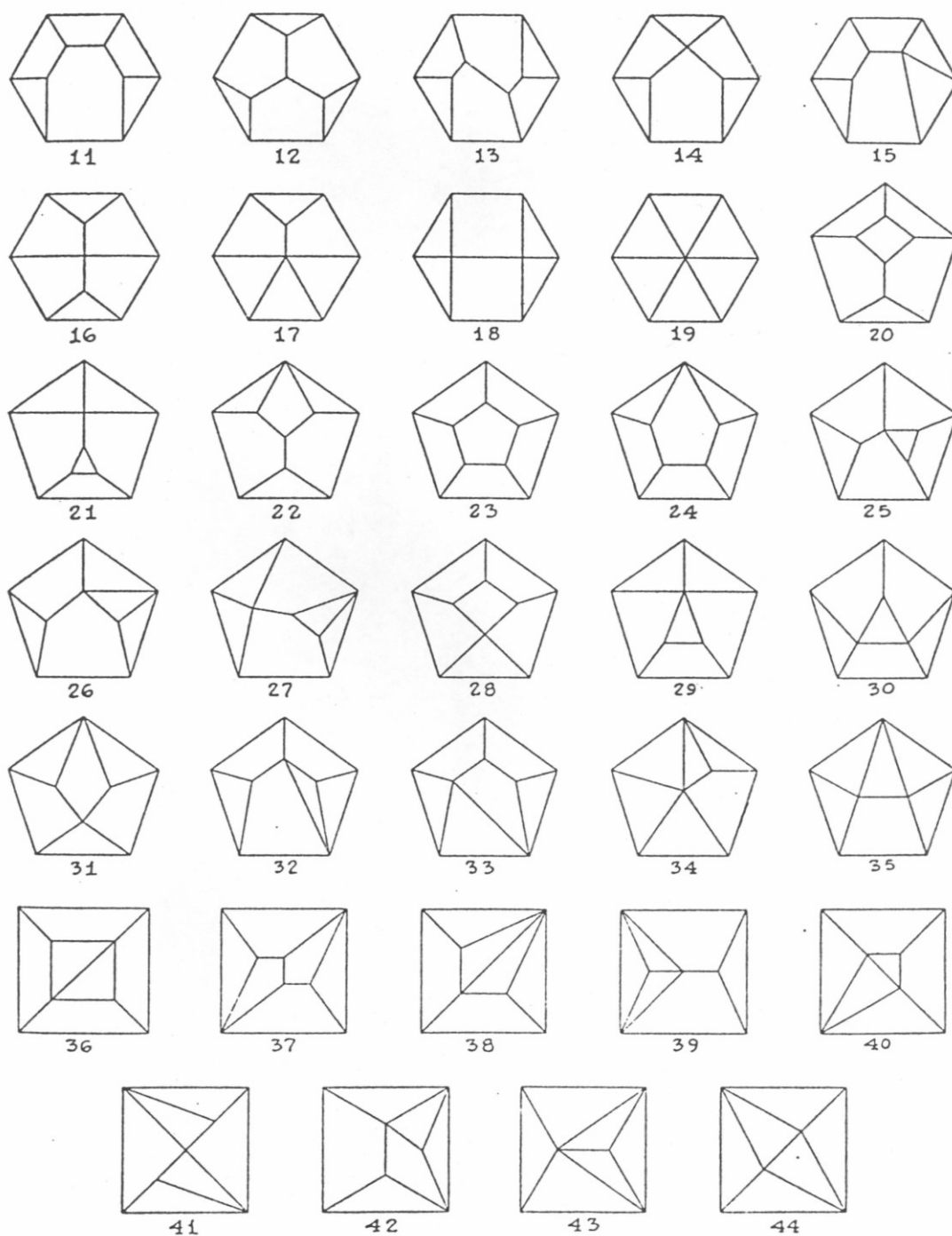
formulákkal definiáltak. A fenti képletekben

$$\mu_k(\Phi_S) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^V \Phi_S^k(X_j) \quad (8)$$

a $\Phi_S(X_j)$ általánosított kombinatorikus görbület k -adik közönséges momentuma, ahol $k=1,2,3$. Mivel S tetszőleges valós szám, ezért mindkét topológiai alaktényező az S skalár mennyiséget szabadon választható paraméterként tartalmazza. Meghatározása kísérletekre támaszkodva történhet. Tapasztalataink szerint az S paramétert oly módon célszerű megválasztani, hogy értéke a $[-2, 2]$ intervallumba essék. Kiegyensúlyozott” sejtrendszerekre (KS-rendszerekre) – a definíciókból következően – mind $\Lambda(S)$ mind pedig $\Omega(S)$ topológiai alaktényező értéke zérus.

4. Topológiai alakjellemzők szelektivitásának elemzése

Abból a célból, hogy megvizsgáljuk, hogy a fentebb definiált kétféle topológiai alaktényező milyen hatékonysággal alkalmazható poliéder típusú alakzatok morfológiai minősítésére, egy kísérletsorozatot végeztünk. E célra kis oldalszámú, nevezetesen 7-lapú poliéderek egy véges halmazát használtuk, e poliéderek Schlegel-diagramjai az 1. ábrán látható. Valamennyi, összesen 34 hétlapú poliéderre vonatkozóan, $S = -1$ és $S = +1$ paraméterválasztás mellett meghatároztuk a megfelelő $\Lambda(-1)$, $\Omega(-1)$, $\Lambda(1)$ és $\Omega(1)$ alaktényezőket. A számítási eredményeket az 1. táblázat összesíti.



1. ábra Hétlapú konvex poliédereket reprezentáló Schlegel-diagramok

Amint a táblázati adatokból is kitűnik, mind a négy topológiai alaktényező meglehetősen jól tükrözi a poliéderek morfológiája közötti hasonlóságot, illetve különbözőséget. Arra következtethetünk, hogy bár a négy topológiai alaktényező között meglehetősen erős korreláció mutatható ki, mindazonáltal ezek algebrailag független mennyiségek. Külön elemzést igényel annak eldöntése, hogy a négy topológiai alaktényező közül melyik az, amelynek információ-tartalma, diszkrimináló képessége a legnagyobb.

| Poliéder kód- száma | Topológiai jellemzők | | | |
|---------------------------|----------------------|--------------|--------------|-------------|
| | $\Lambda(-1)$ | $\Omega(-1)$ | $\Lambda(1)$ | $\Omega(1)$ |
| 11 | 0,3437 | 6,145 | 0,1471 | 0,4783 |
| 12 | 0,2755 | 3,663 | 0,0946 | 0,3052 |
| 13 | 0,7693 | 12,085 | 0,2811 | 0,8868 |
| 14 | 0,9415 | 7,928 | 0,3011 | 1,0038 |
| 15 | 0,6695 | 10,145 | 0,2066 | 0,6572 |
| 16 | 1,6314 | 14,104 | 0,5280 | 1,6753 |
| 17 | 1,6025 | 10,217 | 0,5600 | 1,9295 |
| 18 | 0,5480 | 7,578 | 0,0896 | 0,2843 |
| 19 | 1,7805 | 8,012 | 0,7736 | 2,8840 |
| 20 | 0,2755 | 4,555 | 0,1034 | 0,3320 |
| 21 | 1,2523 | 16,029 | 0,4631 | 1,5070 |
| 22 | 0,4933 | 6,492 | 0,1703 | 0,5570 |
| 23 | 0,0000 | 0,000 | 0,0000 | 0,0000 |
| 24 | 0,8223 | 9,307 | 0,3372 | 1,1790 |
| 25 | 1,2948 | 13,166 | 0,4718 | 1,5810 |
| 26 | 0,7418 | 9,393 | 0,3283 | 1,0710 |
| 27 | 1,2707 | 14,826 | 0,5238 | 1,7010 |
| 28 | 0,6146 | 7,167 | 0,2058 | 0,7000 |
| 29 | 1,8581 | 13,289 | 0,8089 | 2,8550 |
| 30 | 0,5480 | 7,169 | 0,2195 | 0,7110 |
| 31 | 1,2394 | 11,699 | 0,5451 | 1,8430 |
| 32 | 1,6538 | 18,364 | 0,7076 | 2,2730 |
| 33 | 0,9762 | 12,104 | 0,4231 | 1,4010 |
| 34 | 1,4786 | 13,596 | 0,8414 | 2,8180 |
| 35 | 0,4431 | 5,834 | 0,2312 | 0,7530 |
| 36 | 0,5480 | 7,578 | 0,2711 | 0,8940 |
| 37 | 1,6025 | 14,625 | 0,6947 | 2,3770 |
| 38 | 1,7805 | 16,451 | 1,0720 | 3,6290 |
| 39 | 1,7805 | 21,514 | 0,9445 | 2,9150 |
| 40 | 0,2303 | 3,098 | 0,1765 | 0,5690 |
| 41 | 1,5292 | 16,703 | 0,8425 | 2,7040 |
| 42 | 1,0183 | 11,555 | 0,5869 | 1,9120 |
| 43 | 1,5165 | 15,232 | 1,2162 | 3,8900 |
| 44 | 0,5155 | 5,818 | 0,4108 | 1,3080 |

1. táblázat Hétlapú poliéderekre vonatkozó topológiai alaktényezők értéke

Megállapítható továbbá, hogy az Ω alaktényező hatékonyabb, mondhatni, némiképp „szektívebb” a Λ paraméternél. Ez főként azzal magyarázható, hogy a Λ alaktényező kizárólag a kombinatorikus görbület szórását jellemzi, a matematikai statisztikában szokásos értelemben. Mint megfigyelhető, a 34 hétlapú poliéder között található egy (a 23. sorszámú prizma), amely kiegyensúlyozott rendszert képvisel, ennek tulajdonítható, hogy ez esetben valamennyi számított alaktényező értéke zérus.

4. Fullerének topológiai szerkezetének minősítése

A négyféle alaktényező gyakorlati alkalmazhatóságnak további tesztelése és értékelése végett vizsgálatokat kiterjesztettük fullerén-izomerek geometriai szerkezetének minősítésére. A vizsgálatokat a C60 típusú fullerén-izomerekre koncentráltuk, amelyek 12 ötszögből és 20 hatszögből álló, 60 trivalens csúcsponttal rendelkező poliéderes gráfokkal reprezentálhatók.

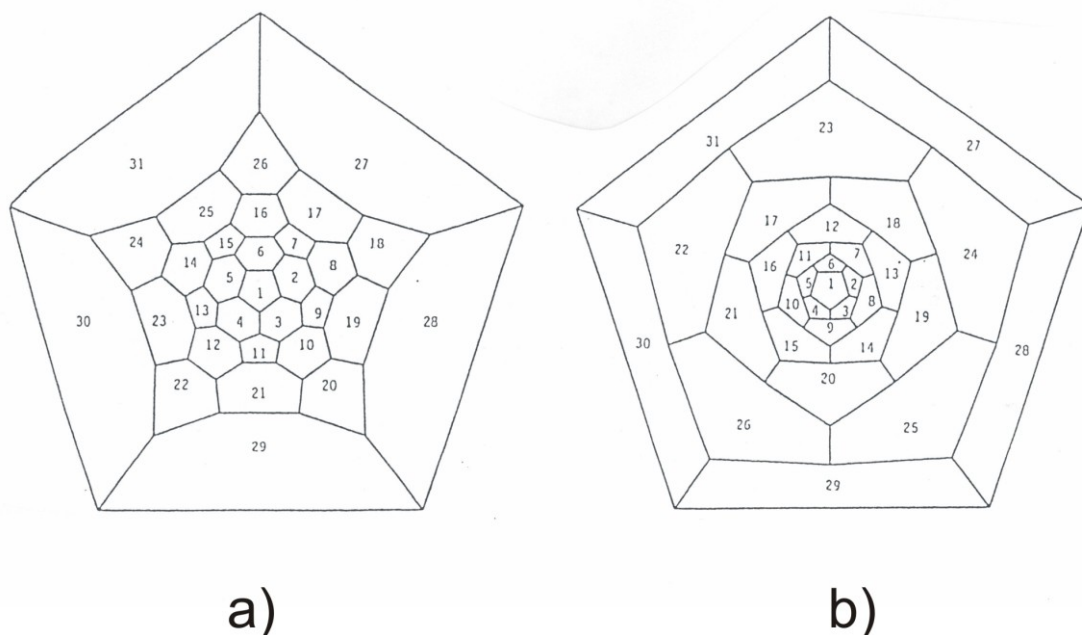
A C60 fullerén-izomerek topológiai jellemzőit illetően számos eredmény található a szakirodalomban. Mint ismeretes az 1812 darab C60 izomer 42 osztályba sorolható, amennyiben egy tetszőleges csúcsra illeszkedő 5- és 6-szögek lehetséges kombinációt tekintjük az osztályozás kiindulási alapjának [4]. Az öt- és hatszögek közül pontosan 3 találkozik egy csúcsban, ezek elvileg a következő négy konfigurációban fordulhatnak elő: $C_{5,5,5}$, $C_{5,5,6}$, $C_{5,6,6}$ és $C_{6,6,6}$. Mivel a csúcsok száma 60, ezért a négy különböző konfigurációt alkotó csúcsok számának összege is 60. Bizonyítható továbbá, hogy ismerve $C_{5,5,5}$ és $C_{5,5,6}$ konfigurációknak megfelelő csúcsok számát, ebből a $C_{5,6,6}$ és $C_{6,6,6}$ konfigurációkhoz tartozó csúcsok száma már meghatározható. A C60 típusú fullerén-izomerekre vonatkozóan meghatározott négyféle topológiai alaktényező értékét a 2. táblázat tartalmazza.

| Osztály sor- száma | Topológiai paraméterek | | | | | | |
|--------------------------|------------------------|-------------|-------|---------------|--------------|--------------|-------------|
| | $C_{5,5,5}$ | $C_{5,5,6}$ | N_P | $\Lambda(-1)$ | $\Omega(-1)$ | $\Lambda(1)$ | $\Omega(1)$ |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 4 | 2 | 0,2083 | 16,04 | 0,0231 | 0,0734 |
| 3 | 0 | 6 | 3 | 0,3079 | 21,72 | 0,0346 | 0,1101 |
| 4 | 0 | 8 | 4 | 0,4047 | 26,26 | 0,0462 | 0,1467 |
| 5 | 0 | 10 | 5 | 0,4990 | 29,90 | 0,0577 | 0,1833 |
| 6 | 0 | 12 | 6 | 0,5910 | 32,81 | 0,0692 | 0,2198 |
| 7 | 0 | 14 | 7 | 0,6808 | 35,12 | 0,0808 | 0,2563 |
| 8 | 0 | 16 | 8 | 0,7686 | 36,94 | 0,0923 | 0,2928 |
| 9 | 0 | 18 | 9 | 0,8546 | 38,35 | 0,1038 | 0,3293 |
| 10 | 0 | 20 | 10 | 0,9387 | 39,43 | 0,1154 | 0,3657 |
| 11 | 0 | 24 | 12 | 1,1021 | 40,79 | 0,1384 | 0,4385 |
| 12 | 1 | 7 | 5 | 0,4990 | 36,40 | 0,0577 | 0,1810 |
| 13 | 1 | 9 | 6 | 0,5910 | 38,85 | 0,0692 | 0,2176 |
| 14 | 1 | 11 | 7 | 0,6808 | 40,75 | 0,0877 | 0,2541 |
| 15 | 1 | 13 | 8 | 0,7686 | 42,20 | 0,0923 | 0,2906 |
| 16 | 1 | 15 | 9 | 0,8546 | 43,29 | 0,1038 | 0,3271 |
| 17 | 1 | 17 | 10 | 0,9387 | 44,07 | 0,1154 | 0,3635 |
| 18 | 1 | 19 | 11 | 1,0212 | 44,61 | 0,1269 | 0,4000 |
| 19 | 2 | 8 | 7 | 0,6808 | 46,38 | 0,0808 | 0,2519 |
| 20 | 2 | 10 | 8 | 0,7686 | 47,47 | 0,0923 | 0,2884 |
| 21 | 2 | 12 | 9 | 0,8546 | 48,23 | 0,1038 | 0,3249 |
| 22 | 2 | 14 | 10 | 0,9387 | 48,72 | 0,1154 | 0,3613 |
| 23 | 2 | 16 | 11 | 1,0212 | 48,99 | 0,1269 | 0,3977 |

| Osztály sor- száma | Topológiai paraméterek | | | | | | |
|--------------------------|------------------------|-------------|-------|---------------|--------------|--------------|-------------|
| | $C_{5,5,5}$ | $C_{5,5,6}$ | N_P | $\Lambda(-1)$ | $\Omega(-1)$ | $\Lambda(1)$ | $\Omega(1)$ |
| 24 | 2 | 18 | 12 | 1,1021 | 49,07 | 0,1384 | 0,4341 |
| 25 | 3 | 9 | 9 | 0,8546 | 53,17 | 0,1038 | 0,3227 |
| 26 | 3 | 11 | 10 | 0,9387 | 53,37 | 0,1154 | 0,3591 |
| 27 | 3 | 13 | 11 | 1,0212 | 53,37 | 0,1269 | 0,3955 |
| 28 | 3 | 15 | 12 | 1,1021 | 53,21 | 0,1384 | 0,4319 |
| 29 | 3 | 17 | 13 | 1,1815 | 32,92 | 0,1500 | 0,4682 |
| 30 | 4 | 8 | 10 | 0,9387 | 58,02 | 0,1154 | 0,3569 |
| 31 | 4 | 10 | 11 | 1,0212 | 57,75 | 0,1269 | 0,3933 |
| 32 | 4 | 12 | 12 | 1,1021 | 57,35 | 0,1384 | 0,4296 |
| 33 | 4 | 14 | 13 | 1,1815 | 56,84 | 0,1500 | 0,4660 |
| 34 | 4 | 16 | 14 | 1,2595 | 56,24 | 0,1615 | 0,5023 |
| 35 | 5 | 9 | 12 | 1,1021 | 61,49 | 0,1384 | 0,4274 |
| 36 | 5 | 11 | 13 | 1,1815 | 60,76 | 0,1500 | 0,4638 |
| 37 | 5 | 13 | 14 | 1,2595 | 59,96 | 0,1615 | 0,5000 |
| 38 | 6 | 10 | 14 | 1,2595 | 63,68 | 0,1615 | 0,4979 |
| 39 | 6 | 12 | 15 | 1,3361 | 62,63 | 0,1730 | 0,5342 |
| 40 | 6 | 14 | 16 | 1,4116 | 61,56 | 0,1845 | 0,5704 |
| 41 | 8 | 12 | 18 | 1,5588 | 65,49 | 0,2076 | 0,6384 |
| 42 | 10 | 10 | 20 | 1,7017 | 68,34 | 0,2306 | 0,7063 |

2. táblázat A C60 típusú fullerén-izomerekre számított topológiai alaktényezők

Mint megállapítható, az alaktényezők számított értéke egy adott fullerén-osztályra nézve azonos, de a 42 osztályra vonatkozóan eltérő, azaz osztályonként különböző. A táblázatban feltüntettük a $C_{5,5,5}$ és $C_{5,5,6}$ konfigurációknak megfelelő csúcsok számát, továbbá az ún. pentagonális index (N_P) értékét is, amely a fullerének strukturális jellemzésére leginkább használatos topológiai paraméter [5]. A pentagonális index nem-negatív egész szám, nagysága zérus és 20 között változik, a szakirodalomban a fullerén-stabilitás legfontosabb kvantitatív mérőszámaként tartják számon. Gyakorlatilag, egy fullerén annál stabilabbnak tekinthető, minél kisebb N_P értéke. Ebből adódóan, $N_P=0$ a legstabilabb C60 fullerén-izomerre (ez a kizárólag izolált ötszögeket tartalmazó Buckminster fullerén), és $N_P=20$ a leginkább instabilnak tekintett C60 fullerén-izomerre. (Bizonyítható, hogy mindkettőből csak egy darab létezik.) A 2. táblázat adataiból kitűnik, hogy a 42 osztály közül, a legstabilabb Buckminster fullerén az első osztályt, míg a legkevésbé stabil fullerén-izomer az utolsó, azaz a 42. osztályt képviseli. Az említett két „extremális” tulajdonságú C 60 fullerén Schlegel-diagramja a 2. ábrán látható.



2. ábra A legstabilabbnak tekintett C60 izomer (a) és a leginkább instabilnak tekintett C60 izomer (b) Schlegel diagramjai [4]

A négyféle topológiai alaktényező valamint a pentagonális index között meglehetősen szoros sztochasztikus jellegű kapcsolat fedezhető fel. Ezt a megfigyelést a 3. táblázatban feltüntetett, a 42 fullerén-osztályra vonatkozóan számított korrelációs együtthatók is alátámasztják.

| | Topológiai paraméterek | | | | |
|---------------|------------------------|---------------|--------------|--------------|-------------|
| | N_p | $\Lambda(-1)$ | $\Omega(-1)$ | $\Lambda(1)$ | $\Omega(1)$ |
| N_p | | 0,99807 | 0,87522 | 0,99975 | 0,99977 |
| $\Lambda(-1)$ | | | 0,88800 | 0,99794 | 0,99873 |
| $\Omega(-1)$ | | | | 0,87594 | 0,87242 |
| $\Lambda(1)$ | | | | | 0,99953 |
| $\Omega(1)$ | | | | | |

3.táblázat A vizsgált öt különböző topológiai alaktényező korrelációs mátrixa

A 2. és 3. táblázat adatait elemezve a következő felismerésekhez juthatunk: A négyféle alaktényező mindegyike lehetőséget nyújt a fullerén típusú poliéderek topológiai szerkezetének kvantitatív jellemzésére, és ezen túlmenően ezek számszerű kritériumon alapuló osztályozására is. Megfigyelhető, hogy a legstabilabbnak vélt Buckminster fullerénre nézve az összes vizsgált topológiai alaktényező értéke minimális: $\Lambda(-1)=\Omega(-1)=\Lambda(+1)=\Omega(+1)=N_p=0$. Ugyanakkor szembe tűnő, hogy

legkevésbé stabilnak tartott fullerén-izomerre vonatkozóan valamennyi topológiai alaktényező értéke maximális: $\Lambda(-1)=1.7017$, $\Omega(-1)=68.34$, $\Lambda(+1)=0.2306$, $\Omega(+1)=0.7063$ és $N_p=20$. Mivel a vizsgált alaktényezők rendkívül erősen korreláltak a pentagonális indexszel, ezért alkalmasnak tűnnek a fullerén-stabilitás minősítésre, előrejelzésére is. Ez főként olyan fullerének tanulmányozásakor lehet hasznos, amelyek bonyolultabb felépítésűek, azaz nemcsak 5- és 6-szögekből állnak.

5. Összefoglalás, következtetések

Kísérletekre támaszkodva igazoltuk, hogy a poliéder típusú alakzatok általánosított kombinatorikus görbületének statisztikai jellemzőiből olyan számszerű topológiai alaktényezők generálhatók, amelyek hatékonyan alkalmazhatók egyedi szemcsék morfológiájának kvantitatív jellemzésére.

Példákon demonstráltuk, hogy az újonnan definiált topológiai alaktényezők alkalmasak poliéderek topológiai hasonlóságának minősítésére, poliéder-típusú szemcsék és mikroszkópos részecskék számszerű kritériumon alapuló morfológiai osztályozására.

C60 típusú fullerén-izomerek topológiai jellemzésére irányuló vizsgálataink eredményeiből arra következtettünk, hogy az új alaktényezők felhasználhatók a fullerén-stabilitás predikciójára is.

Irodalom

- [1] Gy. Bagyinszki: A 3-dimenziós mikroszerkezet topológiai jellemzése cella-modell alkalmazásával, FMT IX. Tud. Ülésszak Közleményei, Kolozsvár, 2004. p. 215-224.
- [2] Yu. Higuchi: Combinatorial Curvature for Planar Graphs, J. Graph Theory, **Vol. 38**, (2001) p. 200-229.
- [3] T. Réti and K. Böröczky: Topological Characterization of Cellular Structures, in preparation
- [4] A. T. Balaban, X. Liu, D.J. Klein, D. Babics, T.G. Schmalz, W.A. Seitz and M. Randic: Graph Invariants for Fullerenes, J. Chem. Inf. Comput. Sci., **Vol. 35**, (1995) p. 396-404.
- [5] P. W. Fowler and D.E. Manolopoulos: An Atlas of Fullerenes, Oxford, University Press, 1994.

Dr. Bitay Enikő tudományos főkutató
Erdélyi Múzeum-Egyesület
Ro-400009 Kolozsvár, Jókai / Napoca u. 2-4.
Tel, fax: (+40) 264-595-176, E-mail: bitay@eme.ro

Dr. Réti Tamás, egyetemi tanár
Budapest Polytechnic, Budapest
H-1081 Budapest, Népszínház u. 8, Hungary E-mail cím: Reti.tamas@bkgk.bmf.hu