

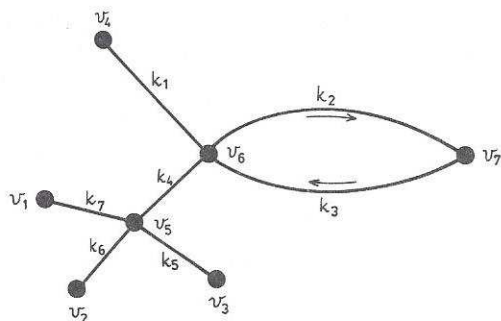
# Węglowodory i grafy

Piotr KOSZTOŁOWICZ

Wśród chemików panuje dość powszechne przekonanie, że wzór sumaryczny cząsteczki związku chemicznego nie niesie żadnych informacji o jej strukturze. Czy rzeczywiście zapisy  $C_6H_{12}$ ,  $C_{10}H_8$ ,  $CH_4O$  nie pozwalają sformułować żadnych sensownych wniosków na temat liczby pierścieni w cząsteczce, obecności wiązań wielokrotnych, wartościowości atomów węgla itp.? Jak zwykle w takich przypadkach, rozstrzygnięcie problemu będzie możliwe dzięki zastosowaniu odpowiedniego narzędzia matematycznego. Obiektem, który w naturalny sposób nadaje się do tego celu, jest graf nieskierowany. Dla Czytelnika, który nie zetknął się bliżej z grafami, podane będą podstawowe definicje i własności grafów, z konieczności tylko te, które będą przez nas wykorzystane.

## Grafy

Graf  $G$  to para zbiorów  $(V, K)$ . Pierwszy z nich jest zbiorem wierzchołków  $V = \{v_1, v_2, v_3, \dots, v_n\}$ , drugi to zbiór krawędzi  $K = \{k_1, k_2, k_3, \dots, k_m\}$ . Krawędź  $k_i$  utożsamia się z parą wierzchołków  $(v_k, v_l)$  zwanych jej wierzchołkami końcowymi. Często rysunek, na którym rolę wierzchołków pełnią punkty, a łączące je linie rolę krawędzi, sam nazywany jest grafem.



Rys. 1. Graf o 7 wierzchołkach i 7 krawędziach z zaznaczonym obwodem  $v_5k_2v_7k_3v_6$ .

Gdyby na rysunku 1 w miejsce wierzchołków  $v_1, v_2, v_3, v_4$  wstawić literę H, w miejsce  $v_5$  i  $v_6$  literę C, a w miejsce  $v_7$  literę O, uzyskalibyśmy wzór strukturalny aldehydu octowego. Wzory strukturalne cząsteczek chemicznych można więc traktować jako grafy.

Stopniem wierzchołka  $v_i$  nazywamy liczbę krawędzi, które łączą się z tym wierzchołkiem, czyli mówiąc ściślej – są z nim incydentne.

Obwodem albo cyklem w grafie nazywamy odpowiednik wielokąta, lub łamanej zamkniętej: skończony ciąg na przemian występujących wierzchołków i krawędzi z nimi incydentnych, w którym ostatnia krawędź łączy ostatni wierzchołek z pierwszym. Graf może mieć wiele obwodów, ale istnieje zawsze pewien minimalny ich zbiór, z którego można odtworzyć pozostałe (przez usuwanie wspólnych krawędzi). Obwody takie nazywamy podstawowymi, ich liczba równa jest liczbie krawędzi, które należy usunąć z grafu, aby otrzymać graf bez cykli. Dla zastosowań do opisu cząsteczek węglowodorów (a takie będą obiektem naszych zainteresowań), można przyjąć, że maksymalny stopień wierzchołka wynosi 4.

Oto podstawowe wzory, które znajdują zastosowanie w dalszej części:

$$(1) \quad m = m_1 + m_2 + m_3 + m_4,$$

$$(2) \quad 2l = m_1 + 2m_2 + 3m_3 + 4m_4,$$

gdzie:  $m$  – liczba wszystkich wierzchołków w grafie,  $m_i$  – liczba wierzchołków stopnia  $i$ ,  $l$  – liczba wszystkich krawędzi w grafie.

## Wbrew zdrowemu rozsądkowi (VII)

(Według wykładów radiowych z audycji IV programu – *Widnokrąg*)

**Jak wyjść przez dwoje drzwi równocześnie nie dzieląc się – interferencja elektronu samego ze sobą**

Tomasz HOFMOKL

Tak zwany zdrowy rozsądek kształtuje się na podstawie doświadczeń, obserwacji bezpośrednio otaczającego nas świata. Jest rzeczą oczywistą, że częściej mamy okazję obserwować spadek rzuconego kamienia niż kwantowe zachowanie się elektronu. Na podstawie tych właśnie codziennych obserwacji wytwarzamy sobie, najczęściej bezwiednie, przekonanie o tym, co jest możliwe, a co nie. Inaczej mówiąc, co jest zgodne ze zdrowym rozsądkiem, a co jemu przeczy. W badaniach naukowych, dzięki odpowiednim urządzeniom, możemy obserwować zjawiska, z którymi nie spotykamy się na co dzień. Niektóre z tych zjawisk zdają się przeczyć naszemu poczuciu tego, co jest możliwe. Obserwacja ich stanowi najcenniejszą podniętę do weryfikowania naszego poglądu na otaczający świat i przy okazji uczy nas pokory. Nie wszystko, co jest sprzeczne ze zdrowym rozsądkiem, jest rzeczywiście niemożliwe. Przykładem takiego zjawiska, które w sposób oczywisty wydaje się na pierwszy rzut oka niemożliwe, jest interferencja elektronu samego ze sobą. Wspominałem o tym zjawisku w pierwszym wykładzie. Teraz, dla podkreślenia jego zaskakującego przebiegu, przedstawię je przez analogię.

Wyobraź sobie, Czytelniku, następującą sytuację. Jesteś samotnie w pomieszczeniu, w którym jest dwoje drzwi. Aby być bardziej precyzyjnym, powiem, że są tam dwa oddzielne otwory drzwiowe nie stykające się. Nie ma więc mowy o żadnych wykretach, jak na przykład rozważanie jednego otworu dwudrzwiowego. Mamy pomieszczenie o dwóch nie stykających otworach.

Proponuję wykonanie następującego zadania: wyjść przez oba otwory jednocześnie nie rozdzielając się przy tym na dwie części. Czy to możliwe? W oparciu o nasze codzienne doświadczenia, czyli w ramach zdrowego



rozsądku, jest to zadanie bezsensowne do tego stopnia, że nie warto nawet poważnego zastanawiania się.

A jednak... Elektron potrafi to wykonać, a przynajmniej zachowuje się tak, jak by to wykonywał. Mamy na to dowody eksperymentalne. Okazuje się, że nasz zdrowy rozsądek może prowadzić do fałszywych wniosków, jeżeli zastosujemy go w sytuacji skrajnie nietypowej dla życia codziennego. Co więcej, nie potrafimy wyobrazić sobie, jak to elektron robi, że przechodzi przez dwa otwory równocześnie będąc przy tym cząstką niepodzielną. Musimy zmienić nasz pogląd na świat, a tym samym wzbogacić rozumienie procesów, jakie występują w przyrodzie.

Przyjrzyjmy się nieco dokładniej samemu doświadczeniu. Wyniki zostały opublikowane stosunkowo niedawno, bo w lutym 1989 roku w *American Journal of Physics*. Doświadczenie wykonali w Japonii A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki i H. Ezawa. Sama idea doświadczenia jest bardzo prosta. Należy zbadać interferencję elektronów wypuszczanych pojedynczo na dwie szczeliny i zaobserwować obraz interferencyjny. Nie jest to pierwsze doświadczenie wskazujące na możliwość interferencji cząstek materii samych ze sobą, ale pierwsza realizacja dotychczas jedynie myślowego eksperymentu opisywanego w podręcznikach teorii kwantów. Znane są fakty doświadczalne wskazujące na falowe własności cząstek materialnych. Słyszeli o nich nie tylko ci, którzy studiowali fizykę. Ze względu na chronologię odkryć „szerokie rzesze” przyjmują, że światło jest falą, a elektrony cząstkami. Około roku 1923 L.V. de Broglie wysunął przypuszczenie, że cząstki materialne mają również własności falowe. Uzupełniało to obraz fali elektromagnetycznej, na przykład światła widzialnego, które ma, oczywiście, własności falowe, ale ma również cechy cząstek – mówimy przecież o fotonach. Jeżeli więc każda drobina materii ma własności falowe, to przynajmniej w pewnych sytuacjach drobina taka powinna zachowywać się jak fala. Czym zaś różni się fala od cząstki?

Najprościej odpowiedzieć na to, że fale mogą interferować. Nie wszyscy może pamiętają, co to jest interferencja fal, inaczej mówiąc – ich nakładanie się. Dwie fale spotykając się mogą się wzmacnić, jeżeli grzbiet jednej fali spotka się z grzbietem drugiej, lub osłabić aż do zupełnego wygaszenia, jeżeli grzbiet spotka się z doliną. Widzieliśmy to zjawisko wielokrotnie rzucając do wody dwa lub więcej kamieni. Od wrzuconego jednego kamienia rozchodzą się po powierzchni

Istnieje jeszcze jeden wzór o fundamentalnym znaczeniu dla teorii grafów. Jest to wzór Eulera, pozwalający obliczyć liczbę obwodów podstawowych  $\mu$ , jeżeli znana jest liczba krawędzi  $l$  i wierzchołków  $m$  w grafie:

$$(3) \quad \mu = l - m + 1.$$

Przy założonych ograniczeniach, korzystając ze wzorów (1) i (2) można zapisać, że

$$(4) \quad \mu = \frac{1}{2}(m_3 - m_1) + m_4 + 1.$$

Dla tych, którzy są zaznajomieni z topologią, dodajmy, że liczba cykli jest własnością topologiczną grafu i nie zależy od liczby wierzchołków stopnia 2, ponieważ homeomorfizmy ignorują wierzchołki 2 stopnia traktując je jako punkty krawędzi.

Przejdźmy obecnie do konkretów. Ze względu na wielką różnorodność strukturalną obiektów naszych zainteresowań będą węglowodory. Pamiętaj jednak należy, że prawa teorii grafów obowiązują także w odniesieniu do innych grup cząsteczek niekoniecznie organicznych.

### Alkany

Alkany to węglowodory, których cząsteczki nie zawierają wiązań wielokrotnych pomiędzy atomami węgla. Ogólny wzór sumaryczny tej grupy połączeń zapiszemy wstępnie jako  $C_nH_r$ . We wzorze strukturalnym tej cząsteczki wierzchołek reprezentujący atom węgla jest ze względu na swą wartościowość 4 stopnia, atom wodoru natomiast – 1 stopnia. Liczba wszystkich wiązań w cząsteczce równa jest liczbie krawędzi w grafie, który ją reprezentuje. Obliczyć ją można ze wzoru (2), przyjmując następujące założenia:

$$m_1 = r, \quad m_2 = m_3 = 0, \quad m_4 = n.$$

Otrzymujemy

$$l = \frac{1}{2}(4n + r).$$

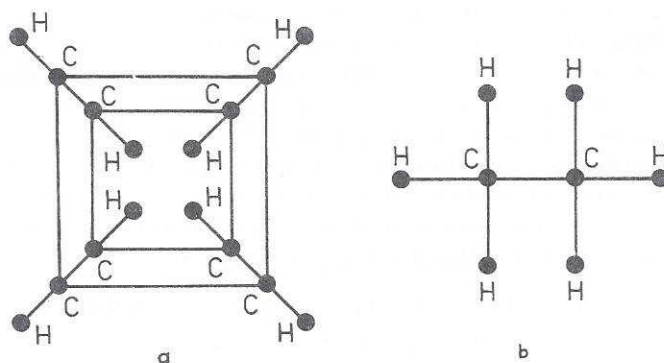
W cząsteczce występuje  $r$  wiązań C-H, pozostałe to wiązania C-C, w liczbie

$$l_{C-C} = 2n - \frac{1}{2}r.$$

Czy rozważana cząsteczka może zawierać jakieś pierścienie? Odpowiedzi udzieli nam równanie Eulera w formie (4), przy zachowaniu założeń poczynionych poprzednio. Otrzymamy ostatecznie następujący rezultat:

$$\mu = n - \frac{1}{2}r + 1.$$

Wynika stąd, że ogólny wzór cząsteczki alkanu można wyrazić w formie  $C_nH_{2n-2\mu+2}$ . Jeżeli  $\mu = 0$ , to wzór nasz zredukuje się do postaci znanej z podręczników chemii organicznej dla alkanów niecyklicznych  $C_nH_{2n+2}$ . Czytelnikowi pozostawiam praktyczne sprawdzenie wyprowadzonych zależności dla cząsteczek z rysunku 2.



Rys. 2. Grafy reprezentujące cząsteczki węglodorów:  
a) kuban (pięciocykliczny).  
b) etan (niecykliczny).

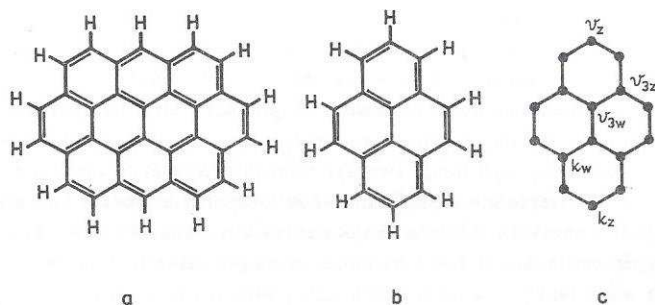


## Węglowodory aromatyczne o pierścieniach skondensowanych

Cząsteczki tej grupy węglowodorów charakteryzują się wyjątkowo regularną budową. Przyjmują one formę kawałków pszczelego plastra oderwanych od całości. W przypadku tych cząsteczek wygodniej jest posługiwać się grafem szkieletu węglowego w miejsce pełnego wzoru strukturalnego. Wymaga to pominięcia wiązań wielokrotnych oraz atomów wodoru we wzorze strukturalnym. Cząsteczki rozważanej grupy połączeń są płaskie (jest to rezultat obserwacji, a nie obliczeń). Fakt ten umożliwia dokonanie podziału wierzchołków i krawędzi na następujące zbiory:

- zbiór krawędzi  $k_z$  leżących na zewnętrznym obwodzie cząsteczki,
- zbiór krawędzi  $k_w$  przynależnych do dwu pierścieni jednocześnie,
- zbiór wierzchołków  $v_z$  drugiego stopnia reprezentujących atomy węgla związane z atomami wodoru,
- zbiór wierzchołków 3 stopnia  $v_{3z}$  należących do dwu pierścieni i leżących na zewnętrznym obwodzie,
- zbiór wierzchołków 3 stopnia  $v_{3w}$  należących do trzech pierścieni jednocześnie i znajdujących się wewnątrz cząsteczki.

Przez pierścienie rozumiemy tu cykle sześciocłonowe, stanowiące pewien zbiór obwodów podstawowych grafu.



Rys. 3. Niektóre węglowodory skondensowane:

- wzór półstrukturalny owalenu,
- wzór półstrukturalny pirenu,
- graf szkieletu węglowego pirenu.

Czy i w tym przypadku dysponując jedynie wzorem sumarycznym  $C_nH_s$  jesteśmy w stanie obliczyć, ile jest poszczególnych elementów strukturalnych grafu? Aby zastosować wzory (1), (2) i (4) w odniesieniu do tej grupy połączeń, należy przyjąć założenia:  $m_1 = m_4 = 0$ ,  $m_2 = s$ ,  $m_3 = n - s$ . Liczba obwodów podstawowych, którymi są cykle sześciocłonowe, wyrazi się wzorem

$$(5) \quad \mu = \frac{1}{2}(n - s) + 1.$$

Liczba wszystkich krawędzi  $l_{C-C}$  w tym przypadku wynosi

$$l_{C-C} = \frac{1}{2}(3n - s).$$

Liczbę  $l_w$  krawędzi typu  $k_w$  przynależnych do dwu pierścieni obliczamy korzystając z następującej równości

$$(6) \quad l_{C-C} = 6\mu - l_w.$$

Uzasadnienie tego wzoru pozostawiam dociekliwemu Czytelnikowi. Stosując wyżej przedstawione wzory otrzymamy ostatecznie

$$(7) \quad l_w = \frac{1}{2}(3n - 5s + 12).$$

Ten rezultat pozwoli nam obliczyć w prosty sposób liczbę krawędzi  $l_z$  leżących na obwodzie zewnętrznym cząsteczki. Uwzględniając, że

$$l_{C-C} = l_z + l_w,$$

otrzymamy

$$(8) \quad l_z = 2s - 6.$$

wody koncentryczne kręgi fal. Przy dwóch wrzuconych kamieniach kręgi te w pewnej chwili spotykają się i w ich przecięciu powstaje dość złożony obraz. W niektórych miejscach fala wodna jest większa niż fale przed spotkaniem, a w innych woda jest spokojna, co oznacza, że fale wygasily się. Łatwo zaobserwować interferencję fal na wodzie. Ich długość sięga kilkunastu, kilkadziesiątu centymetrów. W sprzyjających okolicznościach możemy obserwować wynik interferencji fal świetlnych, na przykład obserwując barwne plamy powstające w cieniutkiej warstewce benzyny rozlanej na powierzchni kałuży. W braku zanieczyszczonej benzyną kałuży możemy użyć siatki dyfrakcyjnej (jest to płytka z bardzo drobnymi, blisko siebie leżącymi rysami) lub innego urządzenia optycznego. Im mniejsza długość fali, tym trudniej zaobserwować zjawiska interferencji. Czego spodziewamy się od fal związanych z cząstkami materii?

Rozważmy cząstkę, która jest mała z makroskopowego punktu widzenia (przykład zaczerpnąłem z książki Wichmana *Fizyka kwantowa*). Przypuśćmy, że masa naszej cząstki równa się 10 mikrogramów, czyli dziesięć milionowych części grama. Niech cząstka ta porusza się z prędkością 1 cm/s - długość fali de Broglie'a ( $h/mv$ ) wyniesie w tym przypadku około  $6,6 \times 10^{-22}$  cm. Jest to wielkość śmiesznie mała: tysiąc milionów milionów razy mniejsza niż długość fali światła widzialnego w zakresie czerwieni. Przypomnijmy, że długość fali, na przykład światła widzialnego o kolorze czerwonym, wynosi około siedmiuset nanometrów. Przypominam: jeden nanometr to jedna tysięczna milionowej części metra. Wyjaśnia to, dlaczego fale materii, jeżeli nawet istnieją, zwykle nie uwidoczniają się. Jeżeli chcemy mieć stosunkowo długą falę de Broglie'a, to powinniśmy do doświadczenia wybrać cząstkę o możliwie jak najmniejszej masie, najlepiej elektron i nadać jej bardzo małą prędkość. Dla elektronów przyspieszanych różnicą potencjałów 150 woltów długość fali będzie mniejsza tylko siedmiokrotnie od długości fali światła czerwonego. Taka długość fali jest już rzędu odległości między atomami w kryształach. Można więc wykorzystać kryształ jako siatkę dyfrakcyjną.

Pierwsze doświadczenie tego typu wykonał C.J. Davisson przy współpracy L.H. Germera potwierdzając falowe właściwości elektronów.

W doświadczeniach Davissona-Germera, i w innych późniejszych, używano wiązki elektronów i okazało się, że w odpowiednio dobranych warunkach zachowuje się ona jak wiązka światła. Można by zrobić przeskok myślowy i powiedzieć: elektrony



mają własności falowe. Zastanówmy się nad tym. W doświadczeniach użyto wiązek elektronów. Najprostsze doświadczenie z interferencją możemy wyobrazić sobie następująco: elektrony wybiegają ze źródła, padają na ekran, w którym są dwie szczeliny i po przejściu przez nie biegną do obserwatora, którym może być klisza fotograficzna. Mamy dwie możliwe drogi elektronów: albo przez jedną, albo przez drugą szczelinę. Drogi te różnią się w sposób oczywisty i, zależnie od różnicy dróg, u obserwatora lub na kliszy spotykają się dwie fale przesunięte względem siebie tak, że nakładają się albo wierzchołek z wierzchołkiem, albo wierzchołek z doliną, albo są w sytuacji pośredniej. W zależności od przesunięcia możemy zaobserwować albo wzmocnienie fali, albo osłabienie – aż do całkowitego wygaszenia. Na ekranie zobaczymy więc charakterystyczne maksima i minima interferencyjne. W przypadku kliszy fotograficznej pojawiają się prążki silniejszego i słabszego zaczerwienia. Przedstawiony opis przebiegu doświadczenia nadal nie jest wyczerpujący. Nie odpowiada bowiem na pytanie, czy interferują, czyli nakładają się, fale różnych elektronów, czy interferuje fala tego samego elektronu. Przynajmniej, że jest to zasadnicza różnica. Na interferencję różnych elektronów możemy się łatwiej zgodzić niż na interferencję tego samego elektronu ze sobą. Jak bowiem sobie wyobrazić, że elektron przechodzi przez obie szczeliny jednocześnie? Dzieli się? – jest przecież niepodzielny. Wyraźna sprzeczność ze zdrowym rozsądkiem. Dlatego właśnie nie możemy poprzestać na stwierdzeniu, że elektrony mają własności falowe w opisanych doświadczeniach, ale musimy rozstrzygnąć, czy elektron może interferować sam ze sobą. Odpowiedź na to właśnie pytanie była przedmiotem wspomnianego na początku doświadczenia.

Do jego przeprowadzenia wykorzystano odpowiednio zmodyfikowany mikroskop elektronowy. Bardzo ciekawie rozwiązano problem dwóch szczelin. Utworzono je przez oryginalną konfigurację pola elektrostatycznego. Elektrony nadlatujące ulegają ugięciu w powstałym polu elektrostatycznym tak samo, jak by przechodziły przez szczeliny. Poniżej szczelin umieszczono układ elektronicznego odczytu pozwalający zarejestrować nadejście każdego pojedynczego elektronu. Elektrony są niepodzielne, więc układ mógł rejestrować albo fakt nadejścia elektronu, albo jego brak. Nie będę opisywać szczegółów elektronicznych urządzenia do detekcji – autorzy zdołali doprowadzić aparaturę do takiego stanu, że prawdopodobieństwo niezarejestrowania elektronu lub zarejestrowania fałszywego sygnału nie przekraczało jednego procentu.

Równie proste rachunki doprowadzą do obliczenia liczby wierzchołków trzeciego stopnia poszczególnych rodzajów. Oznaczmy przez  $n_{3z}$  i  $n_{3w}$  odpowiednio liczbę wierzchołków typu  $v_{3z}$  i  $v_{3w}$ . Każdy obwód, w tym także obwód zewnętrzny grafu, którym się zajmujemy, zawiera tyle samo wierzchołków co krawędzi. Musi więc być spełnione równanie

$$l_z = n_{3z} + s,$$

skąd wykorzystując równanie (8) otrzymamy

$$n_{3z} = s - 6.$$

Tym samym łatwo znajdziemy wyrażenie pozwalające obliczyć parametr  $n_{3w}$

$$n_{3w} = n - 2s + 6.$$

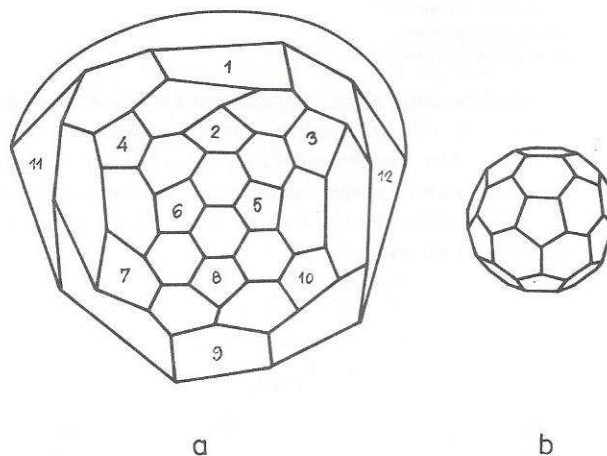
Wystarczy wykorzystać oczywistą równość

$$n_{3w} + n_{3z} = n - s.$$

Na uwagę zasługuje fakt, że wartości parametrów:  $l_{C-C}$ ,  $l_w$ ,  $l_z$ ,  $n_{3w}$ ,  $n_{3z}$  uzyskano znając jedynie wzór sumaryczny cząsteczki, czyli współczynniki  $n$  i  $s$  oraz mając informację o rodzaju węglowodoru. W niektórych przypadkach, jak widzimy, wzór sumaryczny niesie dość znaczną informację o strukturze cząsteczki.

### Fullereny

Fullereny nie są węglowodorami, lecz mimo to istnieje wiele podobieństw strukturalnych między tymi obiektami. Fullereny stanowią odmiany pierwiastkowego węgla, podobnie jak grafit czy diament. Cząsteczki fullerenów są kuliste i mają budowę wielopięścieniową. Atomy węgla występują tu w takim samym stanie walencyjnym, jak w węglowodorach skondensowanych, czyli mogą tworzyć wiązania wyższych rzędów niż w alkanach. Otrzymano szereg fullerenów o ogólnym wzorze  $C_n$ , gdzie  $n$  jest liczbą parzystą. Cząsteczka o wzorze  $C_{60}$  okazała się wyjątkowo trwała. Stwierdzono, że jest ona zbudowana jak piłka futbolowa i składa się z 12 pięściocłonowych i 20 sześciocłonowych.



Rys. 4. Cząsteczka fullereny  $C_{60}$ , zwanego buckminsterfullerenem: a) graf cząsteczki z ponumerowanymi cyklami pięściocłonowymi, b) kształt geometryczny cząsteczki.

Narysowanie rzeczywistego kształtu cząsteczki fullereny nie jest łatwe ze względu na jej przestrzenną strukturę. Z łatwością narysować można natomiast jej graf strukturalny. W tym miejscu pora na wyjaśnienie pewnej subtelności. W przedstawionych sytuacjach tak naprawdę rzadko odwoływaliśmy się do metrycznych własności cząsteczek, bardziej interesowała nas ich topologia. Takie własności, jak długości wiązań, kąty między wiązaniami były pomijane.



Do wyciągnięcia wszystkich wniosków wystarczające okazały się informacje o tym, które wierzchołki są połączone krawędzią oraz jakiego stopnia były te wierzchołki. Krawędzie reprezentujące wiązania mogą więc (jeśli to jest wykonalne tak, aby krawędzie się nie przecinały) być narysowane dowolnie na płaszczyźnie. Graf fullerenu narysować można „rozciągając” jeden z pierścieni do takich rozmiarów, że cała reszta znajdzie się wewnątrz. Zakładamy więc, że wzór naszej cząsteczki ma postać  $C_n$ . Co mówi nam ten wzór o strukturze fullerenu? Przyjmijmy oczywiste założenie:  $m_1 = m_2 = m_4 = 0, m_3 = n$ . Pozwala to obliczyć liczbę wiązań C – C

$$l_{C-C} = \frac{3}{2}n,$$

oraz liczbę pierścieni w cząsteczce, w tym jednak przypadku wzór Eulera należy zmodyfikować (co znowu nie wynika z teorii grafów) do postaci znanej z geometrii wielościanów

$$(9) \quad \mu = l - m + 2.$$

Pozwoli to uwzględnić pierścieni, przez który „oglądamy” cząsteczkę. Cząsteczki fullerenów składają się z pierścieni pięcio- i sześciocłonowych. Czy potrafimy w każdym przypadku odpowiedzieć na pytanie, ile jest jednych i drugich? Odpowiedź jest pozytywna, jeżeli założymy, że innych pierścieni nie ma i że każdy wierzchołek należy jednocześnie do trzech pierścieni. Oznaczmy przez  $\mu_5$  i  $\mu_6$  odpowiednio liczbę pierścieni pięcio- i sześciocłonowych. Wystarczy teraz rozwiązać układ równań

$$6\mu_6 + 5\mu_5 = 3n,$$

$$\mu_6 + \mu_5 = \mu.$$

Uwzględniając (9) otrzymamy nieco zaskakujący rezultat

$$\mu_5 = 12, \quad \mu_6 = \frac{1}{2}n - 10.$$

W każdej cząsteczce fullerenu liczba cykli pięciocłonowych równa jest dokładnie 12. Ponadto nie istnieją cząsteczki fullerenów złożone z samych tylko pierścieni sześciocłonowych. Wynik ten jest w pełni zgodny z wynikami otrzymanymi przez Eulera w XVII w. – nic dziwnego, przecież ze wzoru Eulera je wyprowadziliśmy. Euler nie znał, co prawda, fullerenów, ale badał bryły geometryczne, które opisują ich strukturę. Łączna liczba pierścieni w cząsteczce fullerenu wynosi zatem

$$\mu = \frac{1}{2}n + 2.$$

Wynika stąd jasno, że fullereny muszą zawierać parzystą liczbę atomów węgla w cząsteczce, co gwarantuje ich fizyczną stabilność.

Pora na krótkie podsumowanie. Jak wykazaliśmy, wzór sumaryczny pozwala przewidzieć pewne cechy strukturalne cząsteczki chemicznej i dość powszechne przekonanie chemików zawarte w pierwszym zdaniu tego opracowania okazało się mocno przesadzone. Czy jednak prowadzone przez nas rozważania to tylko zabawa? Wydaje się, że nie. Grafy mogą się okazać przydatne wszędzie tam, gdzie na podstawie niepełnej informacji o budowie cząsteczki, uzyskanej np. drogą badań instrumentalnych, trzeba odtworzyć jej rzeczywistą strukturę.

Na zakończenie ciekawostka związana z tym, że teoria grafów dostarcza często zaskakujących wniosków niezupełnie zgodnych z intuicją. Zainteresowanemu Czytelnikowi proponuję znalezienie takiej cząsteczki chemicznej, w której skład wchodzi nieparzysta liczba atomów o nieparzystej wartościowości. Rozwiązanie znajdzie Czytelnik w książce: Narsinght Deo, *Teoria grafów i jej zastosowania w technice i informatyce*. Miłej zabawy.

Należało się jeszcze zabezpieczyć przed zaobserwowaniem interferencji dwóch elektronów, chciano bowiem wykazać, że to właśnie pojedynczy elektron może interferować sam ze sobą. Osiągnięto to wykorzystując bardzo słabą wiązkę elektronów. W ciągu jednej sekundy do urządzenia docierało około tysiąca elektronów. Może się to wydawać bardzo dużo, ale żeby uzmysłowić Państwu, jak to w rzeczywistości jest niewiele, zróbmy następujące porównanie. Odległość od źródła do ekranu, na którym były rejestrowane elektrony, wynosiła 1,5 m. Średnia odległość między kolejnymi elektronami wynosiła 150 kilometrów. Wynika z tego, że średnio rzecz biorąc na trasie przelotu nigdy nie było dwóch elektronów.

Obraz interferencyjny w tych warunkach powstawał w czasie około 20 minut. Wynik przedstawiono w postaci serii zdjęć z ekranu telewizyjnego aparatury rejestrującej elektrony. Każda kropka na ekranie odpowiadała zarejestrowaniu jednego elektronu. Po nadejściu najpierw pięciu, a później stu elektronów, rozkład na ekranie był całkiem przypadkowy, przynajmniej tak wyglądało. Widać było powierzchnię ekranu pokrytą chaotycznie rozrzuconymi kropkami. Po zarejestrowaniu już 3000 elektronów zaczął wyłaniać się obraz maksimów – w pewnych miejscach było wyraźnie więcej kropek – i minimów – gdzie tych kropek zarejestrowano niewiele. Odpowiadało to obrazowi interferencyjnemu. W miarę przybywania elektronów obraz stawał się coraz wyraźniejszy. Otrzymano więc naoczny dowód, że elektron może interferować sam ze sobą.

Czy to można zrozumieć? Zależy od tego, co rozumiemy przez samo słowo *zrozumieć*. Jeżeli chcemy tylko przewidzieć przebieg zjawiska na podstawie praw teorii kwantów, to, oczywiście, łatwo to zrobić. Jeżeli chcemy sobie wyobrazić przebieg zjawiska na podstawie modelu, na przykład, kul bilardowych biegnących przez dwie szczeliny, to jest to niemożliwe – świat nie da się opisać za pomocą analogii tylko z życia codziennego. Jeżeli dalej nie ufając wynikiem opisanego doświadczenia postawimy pytanie „ale którądy tak naprawdę przeszedł elektron, przez którą szczelinę?”, to nie będziemy umieli znaleźć na nie odpowiedzi. Jeżeli zasłonimy jedną szczelinę, wiedząc już teraz na pewno, że elektron przemknął przez pozostałą otwartą, to obraz interferencyjny zniknie. Przyroda nam nie zdradzi, którądy przeszedł elektron, a tak naprawdę, to pytanie o jego drogę nie ma sensu, ale to już inna sprawa.