

## Konstruktion von Fullerenisomeren und deren Graphen am Computer

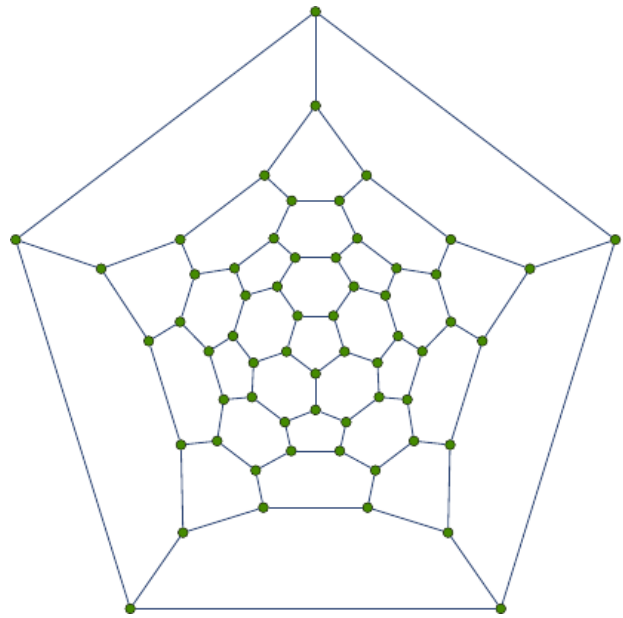
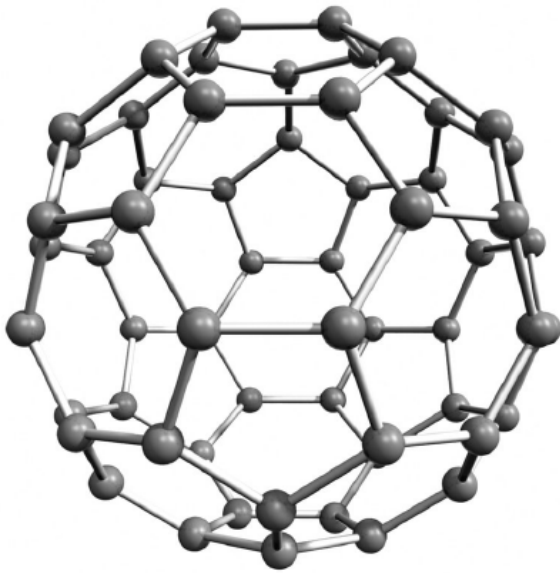


Abbildung 1: 3D Darstellung des Buckyballs    Abbildung 2: Schelgeldiagramm des Buckyballs

Fullerene sind dreidimensionale Kohlenstoffmoleküle, deren Oberfläche ausschließlich aus Fünf- und Sechsecken bestehen. Für die Anordnung der Facetten, sodass es ein geschlossenes Molekül bleibt, gibt es viele Möglichkeiten. Betrachtet man das bekannteste Beispiel C<sub>60</sub> (auch Buckyball, Buckminster-Fulleren oder Fußballfulleren genannt), so existieren 1812 verschiedene Varianten (Isomere) die zwölf Fünf- und 20 Sechsecke anzuordnen. Mit zunehmender Anzahl an Ecken nimmt die Anzahl der Isomere rasant zu. Eine ausführlichere Einführung zu dem Thema finden Sie [hier](#).

Wir untersuchen verschiedene Methoden diese Isomere zu kategorisieren. Ein wichtiges Hilfsmittel dafür ist die Berechnung, Konstruktion und Darstellung solcher Isomere am Computer. Eine erste und sehr simple Implementation existiert bereits. Diese soll weiterentwickelt und in passende Programmiersprachen übersetzt werden. Auch die Implementierung weiterer Methoden zur Konstruktion von Isomeren ist vorgesehen. Diese Ergebnisse sollen anschließend in zwei- und dreidimensionalen Graphen dargestellt werden.

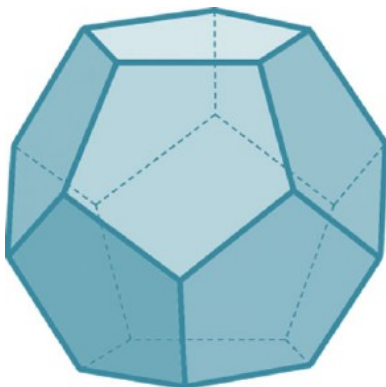


Abbildung 3: Dodekaeder, kleinstes Fulleren

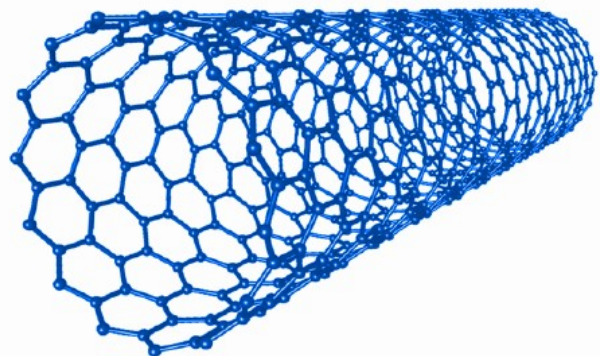


Abbildung 4: Abschnitt eines Nanotubes

Ansprechpartner: [Prof. Spodarev](#) und [Artur Bille](#) in Kooperation mit [Prof. Buchstaber](#) von der [Lomonossov Universität](#) in Moskau.