

# Invariantes Topológicos en el ADN, los Fullerenos y la Teoría de Elección Social

S. Ardanza-Trevijano, J. Arsuaga, J.A. Crespo, J.I. Extremiana,  
L.J. Hernández, M.T. Rivas, J. Roca y M. Vázquez

11 de julio de 2006

## Resumen

En este trabajo analizamos el modo en el que problemas situados en muy diversos contextos (ADN, Fullerenos y Teoría de Elección Social) pueden ser formulados en un lenguaje común, en este caso en el de la Topología. La esencia de algunas de las cuestiones que se plantean en los ejemplos señalados, trasladada al ámbito topológico, queda expresada frecuentemente mediante propiedades de invariantes homotópicos y geométricos asociados. Muchos de los procesos en el ADN, los Fullerenos o la Teoría de Elección Social, relacionados con la vida y su desarrollo, en unos casos a nivel físico, químico o biológico y en otros a nivel social, determinan modelos en cuya descripción y estudio intervienen de modo natural nudos, estructuras poliedrales, complejos de Eilenber-Mac Lane, etc. De nuevo queda patente que numerosos problemas en áreas de investigación candentes, aparentemente alejadas de una matemática abstracta, se pueden modelar y estudiar por teorías y herramientas proporcionadas por ésta.

## 1. ADN y nudos topológicos

El análisis topológico es una herramienta esencial para el desarrollo de la Biología molecular moderna. La teoría de nudos, esto es, el estudio de curvas cerradas en el espacio, aparece de forma natural en el análisis estructural de moléculas como el ADN, el ARN y las proteínas. Estas moléculas son lo suficientemente largas y flexibles como para que su eje longitudinal pueda estar anudado. En esta sección nos centraremos en los nudos que se forman en el ADN.

Recordemos al lector que el ADN es una doble hélice formada por dos hebras de azúcar (desoxiribosa) y grupos fosfato. En el interior de la hélice

se encuentran las bases que se denotan por las letras A, C, G y T formando pares A-T y C-G. J. Watson y F. Crick propusieron esta estructura en 1953 al analizar los datos cristalográficos de R. Franklin. Los dos primeros investigadores junto con M. Wilkins recibieron en 1962 el Nobel de Medicina (Franklin había fallecido en 1958), ver la Figura 1.

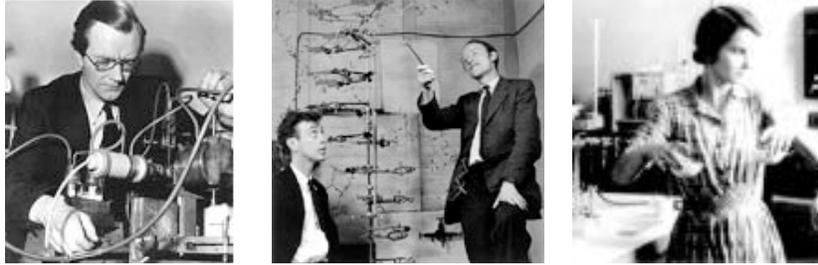


Figura 1: De izquierda a derecha: Wilkins, Watson, Crick y Franklin

La molécula de ADN en la célula está organizada en cromosomas. La estructura tridimensional de los cromosomas es compleja y no está completamente determinada. Sin embargo, se sabe que, en los niveles más simples de organización, diferentes regiones de la molécula lineal de ADN están ancladas a otras estructuras de la célula; dicho de otro modo, un trozo de la molécula lineal de ADN tiene sus extremos fijados en dos puntos de la célula, lo que hace que topológicamente pueda ser interpretado (identificando los extremos) como una curva cerrada que puede estar anudada o no.

En los siguientes párrafos presentaremos algunos ejemplos que ilustran la interacción entre la biología y la matemática en el estudio de la estructura del ADN. Primero describiremos los métodos experimentales desarrollados por los biólogos para identificar diferentes tipos de nudos en el laboratorio y después varias reacciones bioquímicas cuyos productos son moléculas de ADN anudadas. En ambos casos resaltaremos cómo la biología ha dado lugar a nuevos conceptos y métodos matemáticos y a su vez éstos han ayudado a analizar los datos experimentales. También mencionaremos algunos resultados experimentales para los cuales la matemática está todavía por desarrollar.

El método más sencillo con el que se pueden detectar nudos de ADN en el laboratorio es la electroforesis en gel. Ésta es una técnica común en los laboratorios de biología molecular que, aparte de separar moléculas de ADN según su masa molecular, también permite separar formas de ADN con la misma masa pero distinto grado de compacidad. Las muestras de ADN se inyectan en un gel de agarosa que se sumerge en un campo eléctrico. Como

las cadenas de azúcar-fosfato están cargadas negativamente, las moléculas de ADN migran a través del gel alejándose del polo negativo y acercándose al polo positivo del campo eléctrico. La estructura tridimensional de la agarosa crea una barrera porosa que permite que las moléculas de ADN más compactas viajen más rápido que las menos compactas. Durante la última década la migración de nudos en geles de agarosa se ha estudiado en gran detalle por biólogos, matemáticos y físicos.

Uno de los conceptos geométrico-topológicos más interesantes que ha surgido de esta aproximación interdisciplinar es el de “configuración ideal de un nudo”. Un nudo topológico se puede formar con una curva de cualquier longitud. Ahora bien, si intentamos hacer un nudo con una cuerda de un determinado grosor y longitud, no todas las configuraciones son posibles. Para un nudo concreto su configuración ideal es la que se obtiene con la cuerda de menor longitud posible (fijado un grosor). El estudio de las propiedades matemáticas de las configuraciones ideales de los nudos es un campo de gran interés y con muchas aplicaciones. Por ejemplo, en 1996, A. Stasiak junto con otros investigadores [53] demostraron que la migración de un determinado tipo de nudo de ADN en un gel de agarosa es casi lineal con respecto al número medio de cruces de su representación ideal.

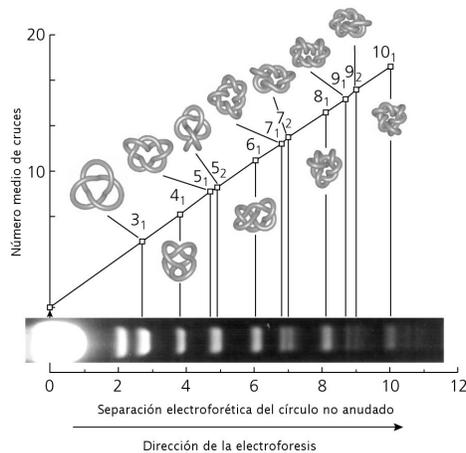


Figura 2: Migración de nudos en un gel

En la Figura 2 se muestra la migración de nudos en un gel. El polo negativo está situado en la parte izquierda de la figura y el positivo en la derecha. Cada una de las bandas corresponde a un tipo de nudo distinto, que está indicado por su representación ideal a lo largo de la diagonal. La ordenada muestra el número medio de cruces de cada nudo ideal y la abscisa

la distancia en centímetros que los nudos han recorrido en el gel.

Una técnica más elaborada, introducida por N.R. Cozzarelli, es la microscopía electrónica. La mayor dificultad que surge al analizar nudos cuando se usa esta técnica es la de distinguir las posiciones relativas de las hebras en los cruces. Esta tarea se facilita engrosando la molécula de ADN mediante la formación de un filamento proteínico alrededor de su contorno; esto no sólo permite identificar el tipo de nudo sino también su orientación. El nudo de la fotografía mostrada en la Figura 3 se obtuvo como producto de una reacción de recombinación de sitio específico, concepto que se introducirá más adelante.

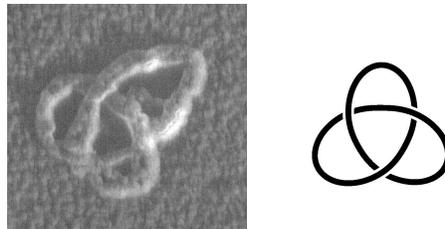


Figura 3: Microscopía electrónica de molécula de ADN y nudo trébol correspondiente

A continuación describiremos algunos ejemplos experimentales en los que los nudos son el producto final de reacciones bioquímicas y en los que la matemática ha contribuido de forma esencial a su interpretación.

Uno de los experimentos más sencillos en los que aparecen nudos es la circularización de moléculas lineales de ADN (cerrar moléculas lineales uniendo sus extremos). Cuando moléculas lineales de ADN se circularizan en solución, una pequeña fracción siempre queda en forma anudada. La proporción de nudos que se observa depende de la longitud de la molécula y de las condiciones iónicas de la solución. Por ejemplo, el porcentaje de moléculas anudadas en una población de moléculas de una longitud de 10000 pares de bases en condiciones iónicas fisiológicas es del 3% y casi todos esos nudos tienen menos de cinco cruces. Este proceso de anudamiento se ha conseguido cuantificar en detalle usando modelos de teoría estadística de nudos [52, 36]. En estos modelos, el ADN se representa como un camino aleatorio cerrado en  $\mathbb{R}^3$  con ciertas restricciones geométricas. Las configuraciones más probables de estos caminos se obtienen por medio de simulaciones de Monte-Carlo. La combinación de experimentos y de modelos ha permitido la estimación de importantes propiedades físicas del ADN [48]. Existen teoremas que demuestran que la probabilidad de anudamiento y la complejidad de los nudos

dependen de la longitud de la curva [18].

La probabilidad de anudamiento aumenta considerablemente cuando la circularización ocurre en volúmenes pequeños. Usando métodos experimentales y teóricos similares a los descritos anteriormente se ha demostrado que la configuración más probable de la molécula de ADN en un volumen pequeño es la de un nudo [3]. Estos nudos han servido para elucidar propiedades geométricas del ADN en ciertos virus [4]. En la Figura 4 se incluye a la izquierda una fotografía microscópica de un virus bacteriófago del tipo anterior y otra a la derecha en la que se observa la gran cantidad de ADN que se encuentra en un virus.

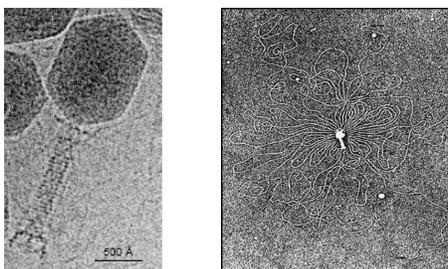


Figura 4: ADN dentro y fuera de la cápside de un virus bacteriófago

El hecho de que la probabilidad de anudamiento sea tan elevada en volúmenes pequeños sugiere que el ADN de los cromosomas, en cualquier organismo, tiene una alta probabilidad de formar nudos y enlaces con otras moléculas de ADN. Esto representa un impedimento para la célula a la hora de llevar a cabo tareas esenciales como la replicación, transcripción, etc. Este problema se resuelve mediante enzimas llamadas topoisomerasas cuyas funciones incluyen la de desanudar y desenlazar el ADN. Algunas de estas enzimas son esenciales para la vida y por lo tanto son una diana importante en el desarrollo de medicamentos (este es el caso de algunos fármacos antibacterianos y anticancerígenos). Este interés médico hace que las topoisomerasas sean un área muy activa de investigación en biología; sin embargo, los análisis cuantitativos de la acción enzimática están en sus principios.

Algunas topoisomerasas utilizan el mecanismo de dos puertas [45], como se observa en la Figura 5, para desanudar y/o desenlazar moléculas de ADN. Este mecanismo de acción inspiró a I. Darcy y D. W. Sumners la introducción de una métrica que generaliza el índice de desanudamiento de un nudo. Esta métrica determina el mínimo número de cruces que se tienen que realizar para transformar un nudo en otro y se estudia mediante teoría estadística

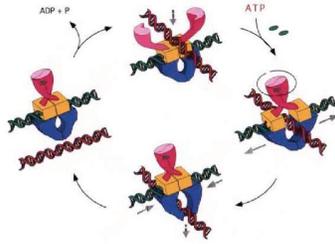


Figura 5: Mecanismo de dos puertas de la topoisomerasa de tipo II

de nudos o espacios fibrados de Seifert [56, 30, 17].

Otras enzimas que modifican la topología del ADN son las recombinasas de sitio específico. Existen unas 200 enzimas (principalmente en bacterias y virus) de este tipo. Su misión es la de integrar y/o extraer el ADN viral del cromosoma de la célula infectada, invertir segmentos de ADN para regular la expresión genética, y resolver cadenas multiméricas de ADN para permitir la segregación de los cromosomas. A continuación describiremos brevemente la aplicación introducida por C. Ernst y D.W. Sumners de la teoría de ovillos [54]. En estos estudios el complejo de ADN y la proteína se modela como un ovillo matemático, esto es una bola con dos hebras propiamente encajadas en su interior, y el proceso de recombinación se modela mediante cirugía de ovillos. La Figura 6 muestra en la parte superior el ovillo trivial y un ejemplo de ovillo del tipo racional. Las dos filas inferiores están inspiradas en datos experimentales obtenidos por microscopía electrónica y esquematizan la interacción entre el ADN y la enzima. La reacción de recombinación tiene lugar en el interior de la “esfera roja” y transforma el sustrato (primera ecuación) en producto (segunda ecuación).

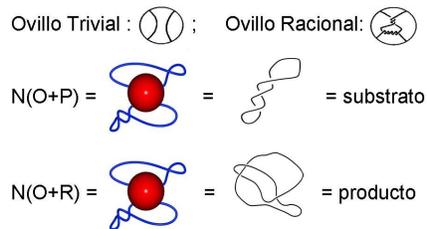


Figura 6: Ovillos racionales y ecuaciones de ovillos.

Gracias a los teoremas de clasificación de ovillos racionales y de nudos y enlaces de dos puentes, estas construcciones se traducen en un sistema de ecuaciones algebraicas que modelan el evento de recombinación. Usando la

teoría de ovillos se ha caracterizado parcial o totalmente la acción de las siguientes enzimas: Tn3, Flp, Int, Gin y XerC/D [9].

Nuevos retos surgen al estudiar enzimas en las que en lugar de dos hebras se cree que existen tres hebras de ADN en contacto con la enzima. Estas observaciones experimentales sugieren el desarrollo de una teoría de ovillos de tres hebras o en general de  $n$  hebras [10, 24].

El desarrollo de métodos cuantitativos y cualitativos en el estudio del ADN es un campo muy amplio en el que las contribuciones de matemáticos pueden ser esenciales. Mencionaremos dos tópicos en los que la matemática está todavía por desarrollar. El primero es el de la topología del ADN en la horquilla de replicación. Ésta tiene una estructura muy compleja y todavía hay muchas preguntas por responder [44]. Por ejemplo el grupo de S. Blinder ha demostrado experimentalmente la formación de nudos en la horquilla de replicación, pero su relación con la geometría del ADN durante este proceso está aún por determinar. Señalaremos, por otra parte, que ciertos tipos de nudos y enlaces de ADN se han construido en el laboratorio de N. Seeman [40], a quien se le reconoce como uno de los padres de la nanotecnología. Se considera que el uso de nudos en la nanotecnología del ADN es una gran promesa científica y la investigación de las teorías matemáticas que complementen estos estudios será muy necesaria.

## 2. Fullerenos y estructuras poliedrales

Las micro o nano magnitudes que se utilizan en la nanotecnología y en el estudio del ADN contrastan con las macromagnitudes con las que a veces se expresa la ciencia al estudiar los planetas, las estrellas o las galaxias del universo en su afán por comprender no sólo cómo se transmite la vida, sino también de dónde venimos y cómo es a nivel interno y externo nuestro mundo. A continuación expondremos un ejemplo dentro del marco de la Química que muestra la relación entre estos dos niveles, así como la conexión entre diversas ramas científicas o tecnológicas a la hora de abordar la resolución de muchos problemas.

Los Fullerenos [16], [38] constituyen una reciente área de la Química muy rica en investigación en la que, al igual que ocurre con el ADN, el uso de técnicas topológicas resulta de interés. Son una amplia familia de moléculas constituidas exclusivamente, al igual que los conocidos grafito y diamante, por átomos de carbono. Su estudio se inició con el descubrimiento en 1985 de la molécula C60, hecho por el cual los investigadores H. Kroto, R. Smalley y R. Curl recibieron el premio Nobel de Química en 1996. El

carbono, como otros elementos químicos se originó en las estrellas mediante reacciones de fusión nuclear. Esta fuente de vida viajó por el espacio hasta diferentes planetas en formación y dio lugar a los primeros microorganismos. Precisamente el descubrimiento del C<sub>60</sub> se produjo cuando el astroquímico Kroto encontró la colaboración de los químicos Smalley y Curl para tratar de reproducir en el laboratorio de estos últimos la química de la atmósfera de las estrellas gigantes rojas ricas en agregados de carbono, buscando una explicación sobre su formación y el modo de mantenerse unidos durante el viaje interestelar. Estudiando muestras de grafito vaporizado mediante un haz de láser en un chorro pulsante de helio, sus análisis mostraron que existía una regularidad no sospechada en los espectros de las cadenas de carbono: se presentaban mayoritariamente en agrupaciones cerradas de 60 átomos. Una de las cuestiones que se plantearon fue la de encontrar la forma geométrica en la que estos 60 átomos de carbono se enlazaban para formar una estructura estable. El recuerdo de la estructura poliedral de la cúpula diseñada por el arquitecto R. B. Fuller para el pabellón de EEUU en la Exposición Mundial de Montreal de 1967 les dio la idea clave para la resolución de su enigma: los 60 átomos de carbono se unían mediante 12 pentágonos y 20 hexágonos, conformando una jaula esférica con la estructura de un icosaedro truncado. Exactamente como un balón de fútbol (aproximadamente el tamaño del C<sub>60</sub> es al del balón, como el de éste al de la Tierra). Esta es la conjetura sobre la forma del C<sub>60</sub> que hicieron los investigadores cuando anunciaron su descubrimiento en [39] y la razón por la que la llamaron buckminsterfullereno (abreviadamente se le llama fullereno y familiarmente buckybola), ver la Figura 7.



Figura 7: De izquierda a derecha Smalley, Curl y Kroto con modelos de diferentes fullerenos, entre ellos el C<sub>60</sub> (centro)

El escepticismo inicial ante esta nueva forma de carbono se venció cuando los físicos D. Huffman y W. Kratschmer, que desde los ochenta trataban de obtener una explicación para las bandas interestelares difusas, lograron

aislar en 1990, [37], grandes cantidades del fullereno C60 y de otros con diferente número de átomos (disolviendo hollín obtenido de la vaporización del grafito en benceno), lo que originó una explosión de investigación sobre el tema, abriendo con esto las puertas a posibles aplicaciones de los fullerenos tanto a nivel teórico como práctico en diversos ámbitos. Por ejemplo, la teoría sustentada por geólogos como los del equipo de J. Bada [8], después de analizar diversas muestras de meteoritos, de que el viaje interestelar de otros átomos o moléculas esenciales para la vida en la Tierra se hubiera producido enjaulados en fullerenos. Por otra parte, en 1993, el mineralogista S. Tsipursky descubrió C60 en unas muestras de una roca llamada shunguita, siendo ésta la primera vez que se encontró fullereno cristalizado en forma natural.

Desde un punto de vista matemático, es habitual asociar a cada compuesto puro de carbono un grafo, de modo que los carbonos se corresponden con los vértices y los enlaces con las aristas, lo que proporciona una primera modelación topológico-geométrica susceptible de ser analizada. Del carácter tetravalente del carbono C resultan cuatro posibles situaciones de un vértice que denotaremos por 31, 22, 211 y 1111, ver Figura 8. En la mayoría de los fullerenos todos los enlaces son del tipo 211; en consecuencia, sus grafos asociados tienen la propiedad de que cada vértice incide con tres aristas (grafos 3-regulares). En estos grafos se pueden distinguir los enlaces dobles coloreando la familia de aristas que se corresponden con los mismos.

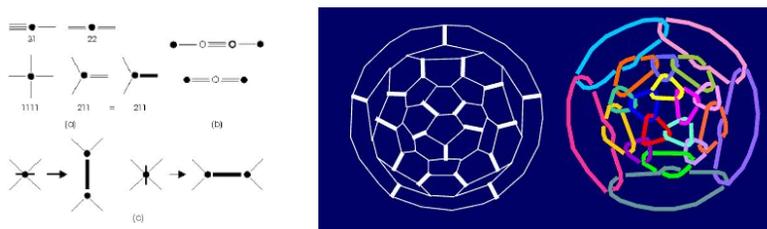


Figura 8: Izquierda: Posibles enlaces del carbono. Derecha: Enlace topológico asociado a un fullereno

Es interesante señalar que a cada grafo 3-regular se le puede asociar su grupo de isometrías y, si se tienen aristas coloreadas (enlaces dobles), tomar entonces el subgrupo de aquéllas que las preservan; de este modo, a cada grafo con aristas coloreadas se le hace corresponder una pareja de grupos. Observemos que si en el mismo grafo 3-regular cambiamos de familia de aristas coloreadas (es decir, consideramos dos isómeros) puede suceder que el subgrupo asociado sea distinto. Sin embargo, existen ejemplos de gra-

fos 3- regulares con aristas coloreadas que son diferentes y tienen asociada la misma pareja de grupos de simetría; en este caso, se puede diseñar una herramienta matemática más fina capaz de distinguir estos isómeros. Se procede del modo siguiente: cambiando cada enlace doble por un cruce de caminos a distinto nivel, véase la Figura 8, podemos asociar a cada fullereno con enlaces químicos dobles un enlace o nudo topológico que puede ser estudiado con técnicas homotópicas. Las diferentes posiciones de los dobles enlaces químicos determinan enlaces topológicos distintos y la clasificación de estos isómeros se aborda a través de los invariantes homotópicos del enlace o nudo topológico asociado. Utilizando el grupo fundamental del complemento del enlace o sus invariantes de tipo polinómico se pueden distinguir isómeros que no han podido diferenciarse a través de los grupos de simetría.

También es posible asociar a cada fullereno estructuras poliedrales más complejas; por ejemplo, añadiendo una cara por cada grupo de vértices y aristas que determinen un polígono plano convexo. De este modo se pueden obtener superficies, que se pueden agrupar por capas o empaquetamientos.

Como es bien conocido, en el duro diamante (del griego adamantos: invencible), los átomos del carbono forman una red tridimensional donde cada átomo está unido a otros cuatro que constituyen los vértices de un tetraedro, mientras que en el frágil grafito (del griego graphein: escritura) los átomos de carbono forman hexágonos que teselan planos organizados en capas paralelas con débiles interacciones entre ellas, lo que hace que al presionar uno de nuestros lápices de grafito éstas se vayan depositando sobre el papel, permitiendo la escritura.

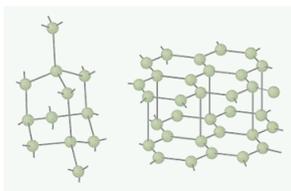


Figura 9: Diamante (izquierda) y grafito (derecha)

En el caso de los fullerenos es obvio el interés que tiene el estudio y clasificación de las diferentes estructuras poliedrales topológicas (*CW*-complejos regulares: espacios que se construyen adjuntando celdas; esto es, discos topológicos cerrados de diversas dimensiones [58]), que pueden estar asociadas a ciertas estructuras moleculares, siendo frecuente en este caso tener condiciones adicionales, como la anterior de 3-regularidad o la de que las caras sean pentagonales, hexagonales o heptagonales.

En el caso en el que las moléculas estables adquieran forma de superficies, es interesante analizar los diferentes signos que la curvatura gaussiana puede tomar; por lo general las caras pentagonales se relacionan con zonas de curvatura positiva, las hexagonales con curvatura cero y las heptagonales con curvatura negativa. La necesidad de insertar de modo regular pentágonos entre los hexágonos obtenidos de láminas planas de grafito para provocar moléculas de carbono con geometría cóncava (sugeridas teóricamente por D. Jones [34] en 1966) fue ya propuesta por Z. Yoshida y E. Osawa [59],[43] en 1971.

Desde otro punto de vista, la topología dispone de una herramienta básica muy eficaz para seleccionar sólo aquellas combinaciones que pueden realizarse. Se trata de la característica de Euler, que es una fórmula que asegura que la suma del número de celdas de dimensiones pares menos la suma del número de celdas de dimensiones impares de un espacio que admita alguna estructura poliedral es un invariante topológico; esto es, no cambia si en el mismo espacio consideramos una estructura diferente. Por ejemplo, para la esfera, la característica de Euler es 2, por lo que cualquier fullereno topológicamente esférico construido sólo con pentágonos y hexágonos exige tener exactamente 12 pentágonos, y su número de vértices, es decir de átomos de carbono, es un número par que depende, como ya se hace notar en [60], exclusivamente de la cantidad de hexágonos que intervengan. Una cuenta elemental nos diría que para el C60 debían ser 20 los hexágonos que intervenían en la enigmática configuración geométrica que sus descubridores buscaban. En el caso de admitir también caras heptagonales, la exigencia para un fullereno esférico es que el número de pentágonos supere exactamente en 12 al de heptágonos. Éstas son las reglas topológicas elementales para la creación de las diferentes buckybolos o de los cada día mas prometedores buckytubos o nanotubos (descubiertos en 1991 por el japonés S. Iijima [32]), fullerenos tubulares cerrados parecidos a finísimos hilos que pueden tener hasta más de un millón de átomos de carbono. En el caso de los fullerenos de tipo tórico, los llamados buckydonuts, el hecho de que la característica de Euler del toro sea 0 nos asegura que no es posible la creación de un fullereno de este tipo sólo con pentágonos y hexágonos, pues siempre debe haber la misma cantidad de heptágonos que de pentágonos considerados. En la Figura 10 se muestra la imagen de algunos de los fullerenos señalados. En la fila superior vemos fullerenos esféricos que se van alargando al incrementarse el número de hexágonos. En la inferior, el fullereno tubular (izquierda) y el tórico (derecha) incorporan caras heptagonales que generan zonas de curvatura negativa.

Dada la importancia que van adquiriendo en la investigación los posibles

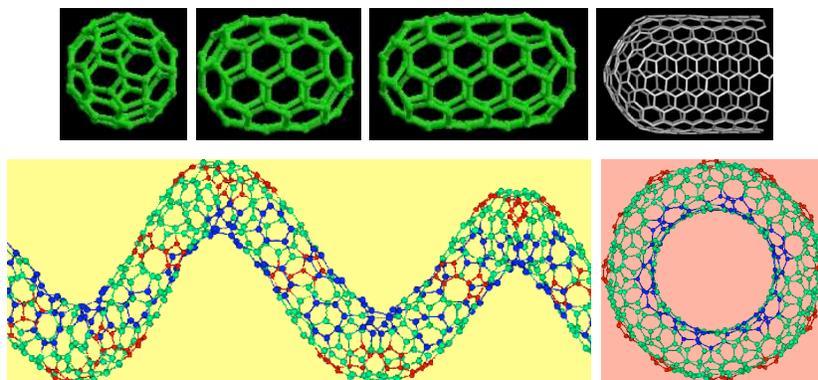


Figura 10: Fullerenos esféricos, tubulares y tórico

complejos formados al alojar otros átomos o moléculas en la cavidad de las jaulas de fullerenos (fullerenos derivados) o bien los constituidos por capas de distintos fullerenos que van enjaulándose sucesivamente (buckycebollas) [5] [50][55], es interesante tener en cuenta su modelación topológico-geométrica mediante estructuras poliedrales más sofisticadas, en las que, por ejemplo, se consideren celdas de mayor dimensión o bien una familia de subestructuras de la estructura final (ver la Figura 11).

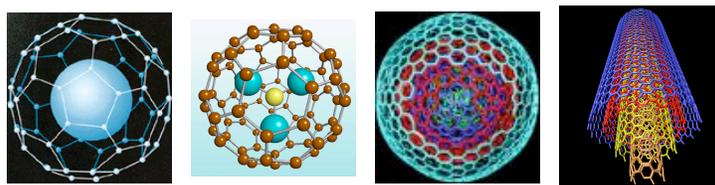


Figura 11: Fullerenos derivados endoédricos y buckycebollas

Por otra parte es útil recordar que la topología tiene numerosas técnicas constructivas, como por ejemplo las habituales suma conexa, suma basada, etc, que permiten generar nuevas configuraciones teóricas que, si las restricciones de tipo físico o químico lo permiten, pueden corresponder a algunas configuraciones moleculares existentes o pendientes de ser obtenidas. En la Figura 12 se han dispuesto algunos compuestos que son el resultado de aplicar operaciones del tipo anterior; en el de la izquierda la operación es una modificación de la suma basada y los de la derecha se han podido obtener mediante suma conexa de fullerenos topológicamente esféricos.

La diversidad de campos con los que la investigación en fullerenos está re-

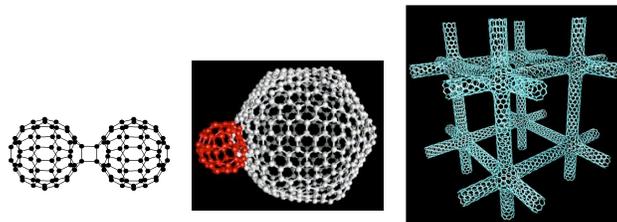


Figura 12: Construcciones topológicas con fullerenos

lacionada a nivel científico, tecnológico o industrial es muy grande. Por ejemplo, dentro de la astroquímica y astrofísica sigue abierto el problema del origen de las bandas interestelares difusas y se realizan estudios que comparan los espectros de fotoabsorción encontrados con otros de origen atómico o molecular conocidos. Actualmente continúa la investigación de espectros correspondientes a estructuras en las que participan fullerenos de una o varias capas o complejos endoédricos o exoédricos derivados de fullerenos ya obtenidos, conjeturándose como responsables de las bandas interestelares difusas algunos miembros de esta familia de moléculas orgánicas originadas de manera abundante en atmósferas estelares ricas en carbono, [47] [31].

Por otra parte, el gran potencial de aplicación práctica de los fullerenos, [41] [23], ya se vislumbró poco después del descubrimiento del C60 cuando se observó que al añadirle ciertos átomos de metales alcalinos se obtenían compuestos superconductores, [28] [60] [46]. El hecho de que los fullerenos puedan ser modificados para obtener un elevado número de derivados con excepcionales propiedades físicas o químicas inducidas en muchos casos a partir de las de los fullerenos precursores, algunas de las cuales están relacionadas con la estructura topo-geométrica de éstos, así como la posibilidad de elongación y encaje que ofrecen los nanotubos, los sitúa en un lugar privilegiado para la creación de nuevos materiales o fibras a escala nanométrica con especiales propiedades ópticas, magnéticas, de dureza, conductividad eléctrica o térmica, etc, [6]. Esto hace que se continúe investigando fuertemente sobre sus aplicaciones no sólo dentro de la ingeniería, ciencia de los materiales, física, química, geología e informática, sino también en biología o medicina, donde se estudian, por ejemplo, sus efectos sobre procesos de diferenciación y proliferación de células embrionarias, su uso en la obtención de nuevos materiales para injertos o su posible actividad antiviral (ya contrastada por un derivado del C60 frente a virus HIV-1 y HIV-2 causantes del sida, [51]) y su utilización para la creación de nuevos fármacos. Cabe señalar

que trabajos recientes de Kroto van dirigidos a hacer arreglos en superficies utilizando moléculas de ADN, y, por otra parte, recordar sus palabras sobre el abanico de posibilidades abierto en el campo de la nanociencia y la nanotecnología: “Suena a ciencia ficción, pero no es imposible”.

Al igual que en el caso de los fullerenos, existen otros muchos ejemplos dentro de la química, ver [25], donde puede constatarse la utilidad de determinadas técnicas relacionadas con estructuras poliedrales topo-geométricas asociadas a las moléculas, tanto para la modelización o descubrimiento de propiedades de las ya sintetizadas, como para la predicción de otras nuevas.

### 3. Elección social y complejos de Eilenberg-Mac Lane

En los ejemplos mencionados en los párrafos previos hemos visto cómo la topología, y en particular la teoría de nudos, puede resultar útil en el estudio del ADN o en el de los fullerenos. El estudio topológico de los invariantes de un nudo  $N$  suele llevarse a cabo analizando su complementario en la 3-esfera  $S^3 = \mathbb{R}^3 \cup \{\infty\}$ . Este espacio  $S^3 \setminus N$  tiene la propiedad de que su grupo fundamental no es nulo, pero sí lo son sus grupos de homotopía de orden superior; es por lo tanto un complejo de Eilenberg-Mac Lane de tipo  $K(G, 1)$ , donde  $G$  es el llamado grupo del nudo  $N$ . En general, se denominan complejos de Eilenberg-Mac Lane  $K(A, n)$  a aquellos espacios que tienen grupos de homotopía nulos en todas las dimensiones  $q \neq n$  y el de dimensión  $n$  es precisamente el grupo  $A$ . Estos complejos tienen, entre otras, la propiedad de que el conjunto de clases de homotopía de aplicaciones de un espacio en un  $K(A, n)$  tiene estructura de grupo. Esta misma cualidad la tienen en general los  $H$ -espacios homotópicamente asociativos y con inversa homotópica (espacios topológicos dotados con una “multiplicación” con la que, salvo homotopía, verifican los axiomas de grupo), y es una de las numerosas razones por las que esta familia de espacios tiene importantes aplicaciones no sólo dentro de la topología, sino en muchísimos otros campos.

A continuación mostraremos una aplicación de estas herramientas topológicas en un contexto enmarcado dentro de las ciencias sociales o de la economía cuya naturaleza es aparentemente distinta de la de los casos mencionados en las secciones anteriores. El ejemplo elegido es el de la “Teoría de Elección Social”, la cuál forma parte de la llamada Teoría de la Decisión, una disciplina científica que, basándose en aspectos cuantitativos o estructurales, estudia los diversos métodos o reglas que llevan a un individuo o a una sociedad a tomar una decisión.

Un problema clásico de organización social que aparece en múltiples ocasiones (pensemos en procesos de votación, elección de programas de televisión, productos de mercado, etc) consiste en cómo agrupar las preferencias individuales de los miembros de una comunidad para obtener preferencias sociales que representen lo que esa comunidad en su conjunto prefiere. La teoría de Elección Social se dedica fundamentalmente al estudio de los métodos o sistemas para la realización de elecciones colectivas, tratando de buscar reglas de elección “buenas” en el sentido de que la elección “social” que se tome “respete” de un modo sensato las preferencias “individuales” de cada miembro de ese colectivo. Sólo pensar en los múltiples aspectos que entran en juego cuando se emplean palabras como las anteriores, hace que la modelización del problema general expuesto se presente como una tarea compleja.

El economista K.J. Arrow (Figura 13), en su tesis doctoral “Social Choice and Individuals Values” de 1951, [1], modelizó el problema exigiendo que toda regla de elección social, que desde preferencias individuales obtuviera una preferencia social, debía ser razonable; esto es, cumplir ciertas condiciones o axiomas que reflejaran las restricciones que nuestro sentido común impondría a una regla de elección colectiva; por ejemplo, debería ser independiente de alternativas irrelevantes y respetar los deseos unánimes de los individuos. Pero Arrow mostró que (en el contexto de su trabajo: el conjunto de preferencias consistía en preórdenes de un cierto conjunto) la única regla posible era una dictadura: existiría un miembro de la sociedad cuya preferencia individual siempre resultaría elegida como preferencia social. Así que si se imponía, como parece razonable, que tal regla no fuese dictatorial, no habría ninguna que satisficiera todos los axiomas impuestos (Teorema de imposibilidad de Arrow). El trabajo de Arrow supuso una revolución teórica y, lejos de llevar a un desaliento científico, provocó la búsqueda de nuevos marcos y nociones de reglas de elección que, recogiendo el espíritu de las ideas marcadas por Arrow, condujeran a algún resultado de posibilidad; así que dio lugar al desarrollo de una teoría matemática de enormes posibilidades, con aplicaciones importantes en economía o, en general, allí donde haya que analizar conflictos o estrategias y se deban tomar decisiones sociales o colectivas basadas en opiniones o preferencias individuales, [2], [35]. En el año 1972, Arrow recibió el premio Nobel de Economía por sus contribuciones pioneras a la teoría del equilibrio económico y bienestar general.

Un nuevo enfoque en la manera de abordar el problema de la elección social fue la aproximación topológica introducida por G. Chichilnisky [13] a partir de 1980, donde el problema se plantea en sus términos básicos del modo que se expondrá a continuación. Supongamos una sociedad de  $n$  individuos ordenados a los que llamamos  $1, 2, \dots, n$  y un conjunto de preferencias

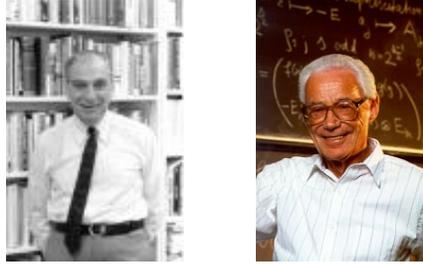


Figura 13: K.J. Arrow (izquierda) y B. Eckmann (derecha)

$X$  que es un espacio topológico. Si  $x_i \in X$  denota una preferencia elegida por el agente  $i$ , el conjunto de todas las posibles preferencias individuales de esos  $n$  agentes; es decir, de todos los posibles perfiles, es el espacio producto  $X^n = X \times \dots \times X$ . Una regla o función de elección social (o función de agregación) es una aplicación  $F: X^n \rightarrow X$  que asocia a cada perfil de preferencias individuales  $(x_1, \dots, x_n)$  una preferencia social o colectiva  $F(x_1, \dots, x_n)$ , de modo que se deben verificar las tres condiciones siguientes: (i)  $F$  es una aplicación continua (lo que significa que pequeños cambios en las preferencias individuales no producirán grandes cambios en las preferencias sociales); (ii)  $F$  respeta la “unanimidad”; es decir,  $F(x, \dots, x) = x$  para todo  $x \in X$  (lo que significa que si todos los individuos tienen la misma preferencia, ésta debe ser la preferencia de la sociedad); (iii)  $F$  es “anónima” (o “justa”); esto es,  $F(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_n) = F(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_n)$ , para todo  $i \neq j$  (lo que significa que la preferencia social debe ser independiente de las posibles permutaciones de los individuos; esto es, la opinión de cada uno de los individuos vale lo mismo. Por lo tanto (iii) impide la existencia de un agente “dictador”  $i \in \{1, \dots, n\}$  tal que la preferencia social  $F(x_1, \dots, x_n)$  sea siempre la preferencia  $x_i$  de ese agente; es decir,  $F$  no puede ser la proyección  $i$ -ésima).

Observemos que la condición (ii) significa que la identidad de  $X$  factoriza como  $X \xrightarrow{\Delta} X^n \xrightarrow{F} X$ , donde  $\Delta$  es la aplicación diagonal  $\Delta(x) = (x, \dots, x)$  y la (iii) significa que  $F$  es invariante bajo la acción del grupo simétrico  $\Sigma_n$  (el grupo de todas las posibles permutaciones de  $n$  agentes).

Notemos que en este caso el lenguaje topológico es capaz de capturar la esencia cualitativa del problema que queremos tratar; esto es, la existencia o no de funciones de agregación “razonables” (funciones de elección social) para un espacio de preferencias  $X$  dado, en una sociedad (o una muestra de ella) constituida con un número finito de individuos.

El siguiente ejemplo (véase [33],[11]) sirve para ilustrar cómo un proble-

ma aparentemente sencillo de elección colectiva queda formulado con precisión en el lenguaje topológico, en cuyo contexto hallará además respuesta. Pensemos en dos personas en el centro de un desierto sin provisiones de agua que saben que en un radio de exactamente 30 kilómetros hay un pozo de agua aunque ignoran la posición de éste y por lo tanto en qué dirección y sentido deberían caminar para alcanzarlo. Deciden que van a tratar de encontrarlo caminando juntos; cada uno tiene sus propias preferencias o intuiciones, pero tienen que ponerse de acuerdo antes de comenzar a caminar sobre la dirección y sentido en que lo harán, así que buscan una regla razonable que determine esa elección común (siguiendo las pautas indicadas anteriormente). Pero cabe preguntarse si existe tal regla o no. Notemos que este problema podemos modelarlo de la manera siguiente: El conjunto de todas las posibles preferencias individuales (dirección y sentido hacia el cuál moverse) lo podemos identificar con la circunferencia unidad  $S^1$ . El diseño de una regla consiste en encontrar una aplicación continua  $F: S^1 \times S^1 \rightarrow S^1$  verificando que  $F(x, x) = x$ ,  $F(x, y) = F(y, x)$ , para todo  $x, y \in S^1$ . Ahora bien, esto es equivalente a encontrar una aplicación continua definida directamente en el espacio cociente  $S^1 \times S^1 / \sim$  que resulta de identificar  $(x, y) \sim (y, x)$  para todo  $x, y \in S^1$ , de modo que la imagen de la clase correspondiente al punto  $(x, x)$  de la diagonal  $\Delta(S^1)$  sea  $x$ . Pero desde el punto de vista topológico ese espacio cociente es una banda de Moebius  $M$  (ver Figura 14) y los puntos correspondientes a la diagonal son precisamente los de la circunferencia borde  $L$  de  $M$  y el problema equivalente al original es saber si existe una aplicación continua de  $M$  en  $L$  de modo que su restricción a  $L$  sea la identidad, o lo que es lo mismo, saber si existe alguna retracción de  $M$  en  $L$ . Notemos que este problema así formulado entra ya en el marco concreto de la teoría de homotopía y ayudándonos aquí de invariantes homotópicos como el grupo fundamental podemos resolverlo. En este caso, la respuesta es que no existe tal retracción de la banda de Moebius  $M$  a su circunferencia borde  $L$  (a pesar de que, como es obvio, sí que existe una retracción de  $M$  a su circunferencia central) y por lo tanto nuestros individuos del desierto nunca podrían encontrar la regla de elección que buscaban porque tal regla no existe.

Observemos que, en general, la existencia de una función de elección social  $F$  para  $n$  agentes sobre un espacio de preferencias  $X$ , siempre puede plantearse como un problema de extensión de aplicaciones continuas: La condición (ii) dice que sobre la diagonal  $\Delta(X) \subset X^n$ , la función  $F$  está ya definida como  $F(x, \dots, x) = x$ , y se trataría de estudiar si  $F$  admite una extensión continua (condición (i)) al espacio  $X^n / \Sigma_n$  que se obtiene al identificar los puntos de  $X^n$  módulo todas las permutaciones posibles (condición



Figura 14: Banda de Moebius con borde

(iii)).

Así planteado, estamos ante un caso particular del problema general de extensión de aplicaciones continuas, uno de los más importantes dentro de la Topología Algebraica. En este contexto se sabe que el problema de la extensión depende fundamentalmente de los invariantes de homotopía de los espacios involucrados y han sido desarrolladas numerosas herramientas, que se suelen denominar Teoría de Obstrucción, para dar respuesta positiva o negativa al problema de existencia y, en el caso de que sí que exista, a la clasificación de todas las posibles extensiones.

Dentro del marco establecido por el modelo topológico para el estudio de la elección social, G. Chichilnisky y G. Heal [14], en 1983, considerando algunas restricciones sobre los espacios de preferencias, caracterizaron aquellos para los cuales era posible encontrar reglas de elección social, obteniendo que si el espacio de preferencias  $X$  es un  $CW$ -complejo conexo parafinito (es decir, tiene un número finito de celdas en cada dimensión), entonces  $X$  admite una función de elección social para cada  $n \geq 2$  si y sólo si  $X$  es contráctil (es decir, homotópicamente equivalente a un punto).

Recientemente, S. Weinberger ha publicado un artículo [57] con resultados mas generales. Señalaremos concretamente dos de ellos cuando el espacio de preferencias  $X$  es un  $CW$ -complejo conexo: (1) Si  $X$  admite una función de elección social para algún  $n \geq 2$ , entonces  $X$  es un  $H$ -espacio, (2)  $X$  admite una función de elección social para cada  $n \geq 2$  si y sólo si tiene el tipo de homotopía de algún producto de espacios de Eilenberg-Mac Lane racionales  $K(\mathbb{Q}^{\alpha_i}, l)$ .

Otras generalizaciones de la teoría para el caso en el que haya un número infinito de agentes y nuevas nociones de funciones de elección social siguen siendo temas de investigación de interés tanto en el ámbito matemático como el económico (ver [12]).

Es importante señalar que algunos de los resultados anteriores, aunque planteados con una terminología completamente diferente, ya habían sido esencialmente obtenidos dentro de la “Teoría de medias generalizadas”, iniciada por B. Eckmann [20] en 1954 (Figura 13) y desarrollada por B. Eck-

mann, T. Ganea y P.J. Hilton (todos ellos figuras relevantes en Topología Algebraica)[22], pues la definición de función de elección dada por Chichilnisky es en realidad la misma que la de media generalizada. Como indica el propio Eckmann en [21], parece ser que los economistas no conocían los trabajos de medias generalizadas, al igual que él desconocía el término de elección social.

El hecho mencionado hace ver la importancia de la difusión y conocimiento de los resultados previos en una investigación; en este caso, una mejor comunicación entre los investigadores de diferentes campos del saber, hubiera evitado la duplicación de esfuerzos que en algunos casos se ha producido. Ello no resta mérito al hecho notable de que investigadores como los aludidos anteriormente hayan sido capaces de observar el interés de aplicar técnicas y herramientas topológicas, en algunos casos muy abstractas, en un campo tan aparentemente lejano a ellas como el problema de la elección social.

**Observaciones:** Los autores de este trabajo agradecen la ayuda prestada por las instituciones: Universidad de La Rioja, Gobierno de La Rioja, Universidad de Navarra, Center for Computing in the Life Sciences (San Francisco State University), y los proyectos: MTM2004-06686, ANGI 2005/10 del GR, BFM2003-05878 del MEC, (P20 MD000262) from the Research Infrastructure in Minority Institutions Program, NCMHD, NIH.

## Referencias

- [1] K. J. ARROW, *Social choice and individual values*, Cowles Foundation and Wiley. New York, 1951.
- [2] K. J. ARROW AND H. RAYNAUD, *Opciones sociales y toma de decisiones mediante criterios multiples*, Alianza Editorial. Madrid, 1989.
- [3] J. ARSUAGA, M. VAZQUEZ, S. TRIGUEROS, D.W. SUMNERS AND J. ROCA, *Knotting probability of DNA molecules confined in restricted volumes: DNA knotting in phage capsids*, Proc Natl Acad Sci USA 99 (2002), 5373-5377.
- [4] J. ARSUAGA, M. VAZQUEZ, P. MCGUIRK, S. TRIGUEROS, D.W. SUMNERS AND J. ROCA, *DNA knots reveal a chiral organization of DNA in phage capsids*, Proc Natl Acad Sci USA 102 (2005), 9165-9169.

- [5] R.A. ASSINK, J.E. SCHIRBER, D.A. LOY, B. MOROSIN AND G.A. CARLSON, *Intercalation of molecular species into the interstitial sites of fullerenes*, Journal of Materials Research 7, 8, 2136-2143, Aug. 1992.
- [6] E.V. BARRERA AND K. LOZANO, *New technologies ... New composites*, Journal of Materials 52 (11), Nov. 2000, 32.
- [7] A.D. BATES AND A. MAXWELL, *DNA Topology*, Oxford University Press, 2005.
- [8] L. BECKER, R.J. POREDA AND J.L. BADA, *Extraterrestrial helium trapped in fullerenes in the Sudbury impact structure*, Science 272, 5259, 249-252, Apr. 1996.
- [9] D. BUCK AND C. VERJOVSKY, *Classification of tangle solutions for integrases, a protein family that changes DNA topology*, Math. Proc. Cam. Phil. Soc. (2006).
- [10] H. CABRERA-IBARRA, *On the classification of rational three tangles*, Journal of knot theory and its ramifications 12 ( 2003), 921–946.
- [11] J.C. CANDEAL-HARO AND E. INDURÁIN-ERASO, *The Moebius strip and a social choice paradox*, Economics Letters, Elsevier, vol. 45(3),407–412.
- [12] J.C. CANDEAL-HARO, G. CHICHILNISKY AND E. INDURÁIN-ERASO, *Topological Aggregation of Preferences: The Case of a Continuum of Agents*, Social Choice and Welfare; Vol. 14, No. 2; April, 1997, 333-343.
- [13] G. CHICHILNISKY, *Social choice and the topology of the spaces of preferences*, Advances in Math. 37 (2), ( 1980), 165–176.
- [14] G. CHICHILNISKY AND G. HEAL, *Necessary and sufficient conditions for the resolution of the social choice paradox*, J. Econ. Theory 31 (1983), 68–87.
- [15] R. H. CROWELL AND R. H. FOX, *Introduction to Knot Theory*, GTM 57, Springer, 1963.
- [16] R.F. CURL AND R.E. SMALLEY, *Fullerenes*, Scientific American 265, 4, 54-63, Oct 1991.

- [17] I. DARCY AND D.W. SUMNERS, *A Strand Passage Metric for Topoisomerase Action, in Knots' 96*, Proceedings of the Fifth MSJ International Research Institute of Mathematical Society of Japan, Publicado en World Scientific, ed. S. Suzuki ( 1997), 267 - 278.
- [18] Y. DIAO, N. PIPPENGER AND D.W. SUMNERS, *On random knots*, Journal of knot theory and its ramifications 3 (1994), 419–429.
- [19] M. S. DRESSELHAUS, G. DRESSELHAUS AND P. EKLUND, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, 1996.
- [20] B. ECKMANN, *Räume mit Mittelbildungen*, Comment. Math. Helv. 28 (1954), 329–340.
- [21] B. ECKMANN, *Social choice and topology. A Case of Pure and Applied Mathematics*, Expositiones Math. 22 (2004), 385–393.
- [22] B. ECKMANN, T. GANEA AND P.J. HILTON, *Generalized means*, Studies in Mathematical Analysis, Stanford University Press, ( 1962), 82–92.
- [23] A. ELIAS ZÚÑIGA, *Nanotecnología. Materiales para el nuevo milenio*, Transferencia, Inst. Tecnológico de Monterrey, Año 16, n° 64, Oct. 2003.
- [24] J. EMERT AND C. ERNST, *N-string tangles*, Journal of knot theory and its ramifications 9 ( 2000), 987–1004.
- [25] J.I. EXTREMIANA, L.J. HERNÁNDEZ Y M.T. RIVAS, *Poliedros*, Margarita Mathematica en memoria de José Javier (Chicho) Guadalupe Hernández, ( 2001) 139–166.
- [26] N. D. GILBERT AND T. PORTER, *Knots and Surfaces*, Oxford University Press, 1994.
- [27] A. HATCHER, *Algebraic Topology*, Cambridge University Press, 2001.
- [28] A.F. HEBARD, M.J. ROSSEINSKY, R.C. HADDON, D.W. MURPHY, S.H. GLARUN, T.T.M. PALSTRA, A.P. RAMIREZ AND A.R. KORTAN, *Superconductivity at 18 K in potassium-doped C60*, Nature 350, 6319, 600-601, Apr 1991.
- [29] G. HEAL, *Social choice and resource allocation: a topological perspective*, Social Choice and Welfare 14 ( 1997), 147–160.

- [30] C. HUA, B. BAGHAVAN, D. NGUYEN, J. ARSUAGA AND M. VAZQUEZ, *A first step in modeling the action of type II topoisomerases*, Aceptado para publicar en *Topology and Its Applications*.
- [31] S. IGLESIAS-GROTH, *Fullerenes and buckyonions in the interstellar medium*, *The Astrophysical Journal*, vol 608 (2004) L37-L40.
- [32] S. IJIMA, *Helical microtubules of graphitic carbon*, *Nature*, 354 (1991), 56-58.
- [33] E. INDURAIN, *Aproximación topológica a problemas de elección social*, *Un paseo por la Geometría*, 2005.
- [34] D.E.H. JONES, *Column "Ariadne"*, *New Scientist*, 1966, 3 Nov, 245.
- [35] J. S. KELLY, *Social Choice Theory*, Springer-Verlag, New York, 1988.
- [36] K.V. KLENIN, A.V. VOLOGODSKII, V.V. ANSHELEVICH, A.M. DYKHNE AND M.D. FRANK-KAMENETSKII, *Effect of excluded volume on topological properties of circular DNA*, *J. Biomol. Struct. Dyn.* 5 ( 1988), 1173–1185.
- [37] W. KRATSCHEMER, L. LAMB, K.FOSTIROPOULOS AND D.R. HUFFMAN, *Solid C60-A new form of carbon*, *Nature* 347, 6291, 354-357, Sep. 1990.
- [38] H. W. KROTO, *C60-Buckminsterfullerene, the celestial sphere that fell to earth*, *Angewandte Chemie-International Edition in English* 31, 2, 111-129, Feb. 1992.
- [39] H. W. KROTO, J.R. HEATH, S.C. O'BRIEN, R.F. CURL AND R.E. SMALLEY, *C60-Buckminsterfullerene*, *Nature* 318, 14, 162-163, Nov. 1985.
- [40] C. MAO, W. SUN AND N.C. SEEMAN, *Construction of Borromean Rings from DNA*, *Nature* 386 ( 1997) , 137–138.
- [41] N. MARTÍN LEON, *Fullerenos: moléculas de carbono con propiedades excepcionales*, *Anales de la RSEQ, Sec Investigación química*, ( 1999) 14–24.
- [42] C.R.F. MAUNDER, *Algebraic topology* , Van Nostrand, 1972.
- [43] E. OSAWA, *The evolution of the football structure for de C60 moolecule: a retrospective*, *Phil. Trans. R. Soc. London A* (1993), 343, 1-8.

- [44] L. POSTOW, N.J. CRISONA, B.J. PETER, C.D. HARDY AND N.R. COZZARELLI, *Topological challenges to DNA replication: conformations at the fork*, Proc Natl Acad Sci USA. 98 (2001), 8219–8226.
- [45] J. ROCA, J.M. BERGER, S.C. HARRISON AND J.C. WANG, *DNA transport by a type II topoisomerase: direct evidence for a two-gate mechanism*, Proc Natl Acad Sci USA. 93 (1996), 4057–4062.
- [46] M.J. ROSSEINSKY, *Fullerene intercalation chemistry*, J. Mater. Chem, 1995, 5, 1497.
- [47] A. RUIZ, J. BRETÓN AND J.M. GÓMEZ-LORENTE, *Theoretical support for buckyonions as carriers of the UV interstellar extinction feature*, Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 105501.
- [48] V.V. RYBENKOV, N.R. COZZARELLI AND A.V. VOLOGODSKII, *Probability of DNA knotting and the effective diameter of the DNA double helix*, Proc Natl Acad Sci USA. 90 (1993), 5307–5311.
- [49] Y. SAKA AND M. VAZQUEZ, *TangleSolve: topological analysis of site-specific recombination*, Bioinformatics. 18 (2002), 1011-1012.
- [50] M. SAUNDERS, R.J. CROSS, H.A. JIMÉNEZ-VÁZQUEZ, R. SHIMSHI AND A. KHONG, *Noble gas atoms inside fullerenes*, Science 271, 5256, 1693-1697, Mar 1996.
- [51] R.F. SCHINAZI, R. SIJBESME, G. SRDANOV, C.L. HILL AND F. WUDL, *Synthesis and virucidal activity of a water-soluble, configurationally stable, derivatized C60 fullerene*, Antimicrob Agents Chemother, Aug. 1993, 37(8), 1707-1710.
- [52] T. SCHLICK AND W.K. OLSON, *Trefoil Knotting Revealed by Molecular Dynamics of Supercoiled DNA*, Science 257 (1992), 1110–1115.
- [53] A. STASIAK, V. KATRITCH, J. BEDNAR, D. MICHLOUD AND V. DUBOCHET, *Electrophoretic mobility of DNA knots*, Nature 384 (1996) 122.
- [54] D.W. SUMNERS, C. ERNST, S.J. SPENGLER AND N.R. COZZARELLI, *Analysis of the mechanism of DNA recombination using tangles*, Q Rev Biophys. 28 (1995), 253–313.
- [55] D. UGARTE, *Curling and closure of graphitic networks under electron-beam irradiation*, Nature, 359 (1992), 707-709.

- [56] A.V. VOLOGODSKII, W. ZHANG, V.V. RYBENKOV, A. PODTELEZHNIKOV, D. SUBRAMANIAN, J.D. GRIFFITH AND N.R. COZZARELLI, *Mechanism of topology simplification by type II DNA topoisomerases*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 98 (2001), 3045-3049.
- [57] S. WEINBERGER, *On the topological social choice model*, Journal of Economic Theory, Elsevier, 115(2), (2004) 377-384.
- [58] G.W. WHITEHEAD, *Elements of Homotopy Theory*, GTM 61, Springer, 1978.
- [59] Z. YOSHIDA AND E. OSAWA, *Aromaticity (in Japanese)*, Kagakudojin, Kyoto, 1971.
- [60] Q.L. ZHANG, S.C. O'BRIEN, J.R. HEATH, Y. LIU, R.F. CURL, H.W. KROTO AND R.E. SMALLEY, *Reactivity of large carbon clusters: spheroidal carbon shells and their possible relevance to the formation and morphology of soot*, The Journal of Physical Chemistry, vol. 90, no. 4, Feb. 13, 1986.

S. Ardanza-Trevijano ([sardanza@unav.es](mailto:sardanza@unav.es))

Departamento de Física y Matemática Aplicada, Universidad de Navarra.

Francisco Javier Arsuaga ([jarsuaga@math.sfsu.edu](mailto:jarsuaga@math.sfsu.edu))

Mariel Vázquez ([mariel@math.sfsu.edu](mailto:mariel@math.sfsu.edu))

Mathematics Department, San Francisco State University, San Francisco, CA 94116.

Center for Computing in the Life Sciences, San Francisco State University, San Francisco, CA 94116.

J.A. Crespo ([juanalfonso.crespo@uc3m.es](mailto:juanalfonso.crespo@uc3m.es))

Departamento de Economía, Universidad Carlos III de Madrid.

J.I. Extremiana ([jextremi@dmc.unirioja.es](mailto:jextremi@dmc.unirioja.es))

L.J. Hernández ([luis-javier.hernandez@dmc.unirioja.es](mailto:luis-javier.hernandez@dmc.unirioja.es))

M.T. Rivas ([maria-teresa.rivas@dmc.unirioja.es](mailto:maria-teresa.rivas@dmc.unirioja.es))

Departamento de Matemáticas y Computación, Universidad de La Rioja.

J. Roca ([jrbmc@cid.csic.es](mailto:jrbmc@cid.csic.es))

Departament de Biologia Molecular i Celular, Institut de Biologia Molecular de Barcelona, CID-CSIC.