

## اندیس‌های توپولوژیکی سوم زاگرب گراف‌های مسطح و نانولوله (R) TUC4C8

محمدساکي \*

گروه ریاضی، واحد سوسنگرد، دانشگاه آزاد اسلامی، سوسنگرد، ایران

### چکیده

با توجه به این که مواد اطراف ما در مقیاس نانو (یک میلیاردم)، خواص عجیبی از خود بروز می‌دهند به نظر می‌رسد که علم ریاضیات و کامپیوتر بایستی نقش مرکزی در مطالعه چنین ساختارهایی داشته باشد. اندیس‌های توپولوژیکی اعداد حقیقی هستند که به وسیله روابط ریاضی و با توجه به ویژگی‌های گراف‌های مولکولی (درجه رئوس، فاصله بین رأس‌ها و غیره) برای تشریح روابط بین خواص فیزیکی- شیمیایی ترکیبات آلی مطرح شده‌اند. اندیس توپولوژیکی یک گراف مولکولی، عددی حقیقی است که به گراف‌های یکرخت با آن مولکول، نسبت داده می‌شود. این عدد بیان‌کننده بعضی از خواص مولکول می‌باشد بر اساس این نظریه، در این گراف‌ها هر نقطه نشان‌دهنده یک اتم بوده و یال‌های بین نقاط نیز نشان‌دهنده پیوندهای شیمیایی بین اتم‌هاست. این اندیس‌ها اطلاعاتی شامل ساختمان، اندازه و میزان شاخه‌ای شدن مولکول، پیوندها، تعداد اتم‌ها و نوع اتم‌های در مولکول را دارا می‌باشند. این مقاله به محاسبه و بررسی اندیس‌های توپولوژیکی سوم اندیس زاگرب (Zagreb) رأسی، یالی برخی از گراف‌های مسطح و همچنین نانولوله (R) TUC4C8 می‌پردازد، که در علم نانو مورد توجه قرار می‌گیرند. در این مقاله اندیس‌های توپولوژیکی سوم زاگرب یالی را تعریف و هم‌چنین برای تعداد یال‌های گراف خط رابطه‌ایی ارائه می‌نماییم.

**کلمات کلیدی:** اندیس‌های سوم زاگرب رأسی و یالی، نانو، گراف شیمیایی، نانولوله.

### ۱. مقدمه

نظریه گراف ابزار مفید و متنوعی برای شیمیدان‌ها فراهم می‌کند که از جمله می‌توان به شاخص‌ها یا اندیس‌های توپولوژیکی اشاره کرد. در شبیه‌سازی در ابعاد نانو، محاسبات عددی اهمیت ویژه‌ای دارد. در ابعاد نانو، مواد خواص کوانتومی از خود نشان می‌دهند که در اکثر موارد در عمل قابل اندازه‌گیری نیستند. به همین منظور باید سیستم‌های مورد نظر را از نظر ریاضی به صورت مدل درآورد و معادلات مربوطه را برای آنها حل کرد. از آنجایی که حل دقیق معادلات در اکثر موارد ممکن نیست باید از حل عددی به جای حل تحلیلی یا دقیق برای حل معادلات استفاده کرد. علوم نانو نگرشی بنیادی دربارهی جهان در مقیاس کوچک به ما نمیدهند. نگرش بنیادی، پدیده‌های عالم را با معادلات ریاضی واحدی توضیح میدهد. علوم نانو به مقیاس کوچکتر از اتم کاری ندارند. در عوض، در مورد ذرات بنیادی بسیار ریزتر به کوچکی کوآرک‌ها و لپتون‌ها که حداقل ده مرتبه کوچکتر از اتم هستند فیزیک بنیادی دستاوردهای خوبی دارد. نظریه گراف ابزار مفید و متنوعی برای شیمیدان‌ها فراهم می‌کند که از جمله می‌توان به شاخص‌ها یا اندیس‌های توپولوژیکی اشاره کرد. اندیس‌هایی که معرفی گردید

\* Corresponding author: Email: : m.saki88@gmail.com

اندیس‌های اول، دوم و سوم اندیس زاگرب  $M_1, M_2, M_3$  می‌باشند که برای آنها تعمیم یالی معرفی گردیده است. اندیس‌های توپولوژیکی اعداد حقیقی هستند که به وسیله روابط ریاضی و با توجه به ویژگی‌های گراف‌های مولکولی (درجه رؤس، فاصله بین رأس‌ها و غیره) برای تشریح روابط بین خواص فیزیکی-شیمیایی ترکیبات آلی مطرح شده‌اند. امروزه این اندیس‌های توپولوژیکی موجب پیشرفت چشمگیر یکی از واسطه‌های آزمایشگاهی بنام QSAR شده‌اند. نتایج مطالعات QSAR علاوه بر شفاف‌سازی نحوه ارتباط بین خواص مولکول‌ها و ویژگی‌های ساختمانی آن‌ها به پژوهشگران در پیش‌بینی رفتار مولکول‌های جدید براساس رفتار مولکول‌های مشابه کمک می‌کند. به مجموعه ابزارها و روش‌هایی که به این منظور مورد استفاده قرار می‌گیرند روش‌های پارامتری گویند. در روش‌های پارامتری سعی می‌شود بین یک سری توصیف‌کننده‌های مولکولی با فعالیت یا خاصیت مورد نظر ارتباط منطقی برقرار نمایند. توصیف‌کننده‌های مولکولی که به این منظور استفاده می‌شوند، مقادیر عددی می‌باشند که جنبه‌های مختلف ساختاری مولکول را به طور کمی نشان می‌دهند. وقتی خصوصیات ساختاری مولکول‌ها و فعالیت آن‌ها توسط اعداد و ارقام بیان می‌شود می‌توان رابطه ریاضی یا کمی بین ساختار و فعالیت گونه ایجاد کرد. این رابطه می‌تواند برای پیش‌بینی پاسخ بیولوژیکی یا شیمیایی دیگر ساختارها مورد استفاده قرار گیرد. به طور کلی محاسبات عددی از نتایج عملی حاصل از اجرای محاسبات برای پیدا کردن روش‌های جدید برای تجزیه و تحلیل مسائل استفاده می‌کند.

## ۲. مواد و روش‌ها (تئوری و پیشینه تحقیق)

نظریه گراف شیمیایی، شاخه‌ای از علم شیمی-ریاضی می‌باشد که عموماً با نظریه شیمی در ارتباط است. بر اساس این نظریه، در این گراف‌ها هر نقطه نشان دهنده یک اتم بوده و یال‌های بین نقاط نیز نشان دهنده پیوندهای شیمیایی بین اتم‌هاست. این اندیس‌ها اطلاعاتی شامل ساختمان، اندازه و میزان شاخه‌ای شدن مولکول، پیوندها، تعداد اتم‌ها و نوع اتم‌های در مولکول را دارا می‌باشند. این شاخص‌ها اولین بار توسط وینر در سال ۱۹۴۷ ارائه شد [۱]. اگر  $G=(V,E)$  یک گراف باشد تعداد یال‌های آن را با  $E$  و تعداد رؤس آن را با  $V$  نشان می‌دهیم. اندیس که معرفی گردید سوم زاگرب می‌باشد [۲].

**تعریف ۱-۲-** اندیس توپولوژیکی سوم زاگرب  $M_3(G)$  برای گراف  $G$ ، به صورت زیر تعریف می‌نماییم:

$$M_3(G) = \sum_{v \in V(G)} |d_u - d_v| \quad (1)$$

که در آن  $d_u$  درجه رأس  $u$  باشد و یا می‌توان آن را به صورت  $M_3(G) = \sum_{i=1}^{|E(G)|} \xi_i$  که در آن  $\xi_i = |d_u - d_v|$  نوشت [۳-۶].

**تعریف ۲-۲-** گراف غیرتهی  $G$  را در نظر بگیرید. اگر به جای هر یال  $G$ ، رأسی در نظر گرفته و دو رأس را به هم متصل کنیم در صورتی که یال‌های متناظر با آن دو رأس در  $G$  با هم در رأسی از  $G$ ، مشترک باشند گراف حاصل را با  $L(G)$  نشان داده و آن را گراف خط یالی متناظر با گراف  $G$  می‌گوییم.

**تعریف ۳-۲-** نسخه یالی اندیس توپولوژیکی سوم زاگرب  $M_{3_e}(G)$  به صورت زیر است [۷-۱۱].

$$M_{3_e}(G) = \sum_{e=st \in E(L(G))} |d_s - d_t| \quad (2)$$

که در آن  $d_s$  درجه یال  $s$  در گراف  $G$ ، یا به عبارت دیگر درجه رأس  $s$  در گراف  $L(G)$  است. که گراف خط

$$\xi_i = |d_s - d_f|, \text{ که در آن, } M_{3_e}(G) = \sum_{i=1}^{|E(L(G))|} \xi_i$$

نوشت.

لم ۲-۴- تعداد یال‌های گراف خط متناظر با  $G$  از رابطه زیر به دست می‌آید.

$$|E_i| = \left| \left\{ e_i \mid e_i \in E(G), e_i = (d_{u_i}, d_{v_i}) \right\} \right| \text{ که در آن } |E(L(G))| = \frac{1}{2} \sum_{e_i = u_i v_i \in E(G)} (d_{u_i} + d_{v_i} - 2) \times |E_i| \quad (3)$$

اثبات: اگر  $|E_i|$ ، طبق تعریف صورت لم باشد آن گاه خواهیم داشت  $|E| = |E_1| + |E_2| + \dots + |E_n| = \sum_{i=1}^n |E_i|$

$\deg e_i = d_{u_i} + d_{v_i} - 2$  و  $e_i = u_i v_i \in E(G)$  که از این که  $1 \leq i \leq n \leq |E(G)|$

$$|E(L(G))| = \frac{1}{2} \sum_{e_i \in V(L(G))} d_{e_i} = \frac{1}{2} \sum_{e_i = u_i v_i \in E(G)} (d_{u_i} + d_{v_i} - 2) \times |E_i|. \quad \blacksquare$$

قضیه ۲-۵- اگر  $S_n, K_{m,n}, K_n, C_n, P_n$  به ترتیب گراف‌های مسیر، دور، کامل، دو بخشی کامل و ستاره باشند، آن گاه گراف‌های خط آن‌ها به صورت زیر است:

$$L(P_n) = P_{n-1}. \text{ (الف)}$$

$$L(C_n) = C_n. \text{ (ب)}$$

$$L(K_n) = \text{گراف } (2n-4) \text{ منتظم} \text{ (ج)}$$

$$L(K_{m,n}) = \text{گراف } (m+n-2) \text{ منتظم} \text{ (د)}$$

$$L(S_n) = K_{n-1}. \text{ (ه)}$$

نتیجه ۲-۶- اگر  $G$  یک گراف  $r$ -منتظم باشد آن گاه،  $M_3(G) = 0$

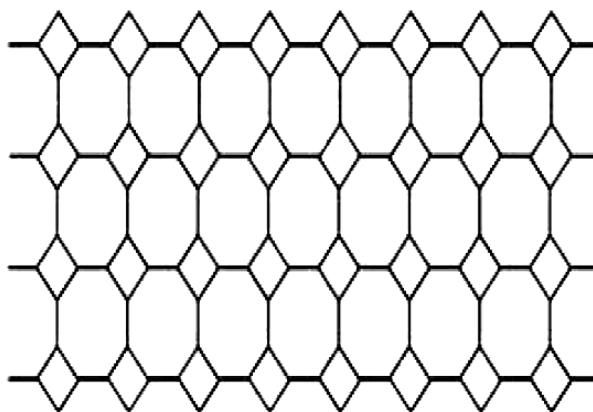
قضیه ۲-۷- اگر  $S_n, K_{m,n}, K_n, C_n, P_n$  به ترتیب گراف‌های مسیر، دور، کامل، دو بخشی کامل و ستاره باشند. آن گاه اندیس سوم زاگرب نوع یالی آنها به صورت زیر است.

$$M_{3_e}(P_n) = 2,$$

$$M_{3_e}(C_n) = 0M_{3_e}(K_n) = 0M_{3_e}(K_{m,n}) = 0M_{3_e}(S_n) = 0. \quad \blacksquare$$

## ۲-۱- محاسبه اندیس‌های $M_3$ و $M_{3e}$ نانولوله $TUC4C8(R)$

در این بخش اندیس‌های توپولوژیکی  $M_3$  رأسی و یالی نانولوله  $TUC4C8(R)$  را ارائه می‌نماییم. چنانچه اتم‌های کربن روی لوله‌ای به شکل شش ضلعی و چهار ضلعی منتظم در کنار یکدیگر قرار گیرند، تشکیل نانو لوله‌ای  $TUC4C8(R)$  می‌دهند برای نمونه در زیر [8,4]  $TUC4C8(R)$  در شکل ۱، رسم شده است.


 شکل ۱- گراف نانولوله  $TUC4C8(R) [8,4]$ 

اگر تعداد شش ضلعی‌ها را در یک ردیف برابر  $p$  و تعداد ردیف‌ها را با  $q$  نشان می‌دهیم. برای محاسبه اندیس‌ها، ابتدا برشی در ارتفاع لوله داده و نانو لوله را تبدیل به یک گراف ساده می‌نماییم، خواهیم داشت:

$$|E(TUC_4C_8(R)[p, q])| = 6pq - p.$$

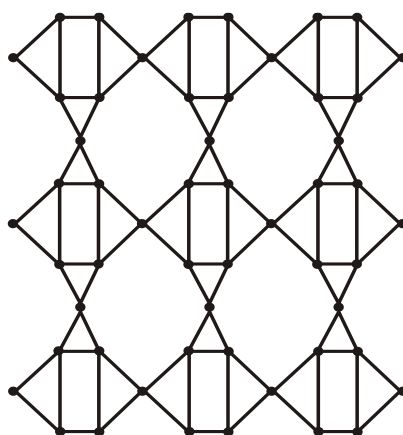
 جدول ۱-  $\xi_i$  و تعداد یال‌های نانولوله  $TUC4C8(R)[p, q]$ 

انواع یال‌ها	$\xi_i$	تعداد یال‌ها
(2,3)	1	4p
(3,3)	0	6pq-5p

در نتیجه طبق جدول ۱ و هم چنین تعاریف اندیس‌ها، قضیه (۲-۱) را خواهیم داشت.  
 قضیه ۲-۱- اندیس  $M_3$  نانولوله  $TUC4C8(R)$  به صورت زیر است.

$$M_3 = 4p \quad \blacksquare$$

در ادامه مطلب، نمونه‌ای از گراف  $L(G)$  را رسم می‌نماییم. از مدل سازی گراف خط استفاده می‌نماییم. در شکل ۲، گراف خط نانو لوله  $TUC4C8(R)[3,3]$  رسم شده است.


 شکل ۲- گراف خط نانولوله  $TUC4C8(R)[3,3]$ 

لذا تعداد یال‌های  $L(G)$  گراف خط، متناظر با گراف  $G$  طبق لم (۴.۲) به صورت زیر است.

$$|E(L(T))| = \frac{1}{2} [(2+2-2)(2p) + (2+3-2)(4p) + (3+3-2)(6pq-5p)] = 12pq - 4p.$$

### جدول ۲-۱ و تعداد یال‌های گراف خط نانولوله $TUC4C8(R)[p,q]$

تعداد یال ها	$\xi_i$	انواع یال ها
2p	0	(3,3)
8p	1	(3,4)
12pq-14p	0	(4,4)

با توجه به جدول ۲ و هم چنین تعاریف اندیس‌ها قضیه (۲-۲) به دست می‌آید.  
قضیه ۲-۲ - اندیس یالی  $M_3$  نانولوله  $TUC4C8(R)$ ، به صورت زیر است.

$$M_3(T) = 8p \quad \blacksquare$$

### ۳. نتیجه‌گیری

مقاله به محاسبه و بررسی اندیس‌های توپولوژیکی سوم زاگرب (Zagreb) رأسی و یالی برخی از گراف‌های مسطح و هم چنین گراف نانولوله  $TUC4C8(R)$  پرداخته شده است که در علم نانو مورد توجه قرار می‌گیرد. که در این مقاله اندیس توپولوژیکی سوم زاگرب یالی را معرفی و هم چنین برای تعداد یال‌های گراف خط رابطه‌ای ارائه می‌نماییم.

### ۴. مراجع

- [1] H. Wiener, "Structural determination of paraffin boiling points" *J. Amer. Chem. Soc.*, vol.69, pp.17-20, 1947.
- [2] G. H.Fath-Tabar, "Old and new Zagreb indices of graphs", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* Vol. 65 79-84, 2011.
- [3] R. Todeschini, V. Consonni, "Handbook of Molecular Descriptors", Weinheim, Wiley-VCH, 2000.
- [4] A. Iranmanesh, Gutman, I., O.Khormali, A.Mahmiani, "THE EDGE VERSIONS OF THE WIENER INDEX", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, Vol. 1(3, 663), 2009
- [5] I. Gutman., and N.O.Trinajstic., 1972, "Graph theory and molecular orbitals, Total  $\pi$  electron energy of alternant hydrocarbons", *Chem. Phys. Lett.* , Vol.17, pp.535-538, 1972.
- [6] I. Gutman, E.Milovanovic, and Milovanovic, I.Beyond, "the Zagreb indices, AKCE Int." *J. Graphs Comb.* (2018), doi: 10.1016/j.akcej.2018.05.002.
- [7] M.K.Siddiqui, M.Imran, and A. Ahmad., "On Zagreb indices, Zagreb polynomials of some nanostar dendrimers", *Appl. Math. Comput.*, Vol.280 pp.132-139,2016.
- [8] M. Saki, A. Iranmanesh, O. Khormali, "EDGE GEOMETRIC-ARITHMETIC INDEX OF SOME GRAPHS, " *Studia U.B.B. Chem.*, vol.3, PP. 83-90, 2014.
- [9] M.Saki, A.Iranmanesh, A.Tehrani, "Computing the Edge Geometric- Arithmetic Index of V-Phenylenic Nanotube, " *J. Comput. Theore. Nanoscience*, vol.12, PP. 2552-2555, 2015.
- [10] M. Saki, " Comparison between Two Geometric-Arithmetic Indices", *J. comput.Theor.Nanosci.*, vol.14(7), pp. 3393-3398, 2017.



- [11] M. Saki., "A New Version of the Edge Geometric-Arithmetic Index." *Int. J. Industrial Mathematics*, Vol. 12(1), pp.101-107, 2020.