**شاخص­های توپولوژیکی سوم زاگرب نانولوله و نانو چنبره TUC4C8 (s)**

محمد ساکی1\*

|  |  |
| --- | --- |
| 1\* عضو هیات علمی گروه ریاضی، واحد سوسنگرد، دانشگاه آزاد اسلامی، سوسنگرد، ایران | m.saki88@gmail.com |

# چكيده

نظریه گراف شيميايي، شاخه‌اي از علم شيمي- رياضي مي‌باشد که عموماً با نظریه شيمي در ارتباط است. بر اساس اين نظریه، در اين گراف‌ها هر نقطه نشان دهنده يک اتم بوده و يال‌هاي بين نقاط نيز نشان دهنده پيوندهای شيميايي بين اتم هاست. اين انديس‌ها اطلاعاتي شامل ساختمان، اندازه و ميزان شاخه‌اي شدن مولکول، پيوندها، تعداد اتم‌ها و نوع اتم‌هاي در مولکول را دارا مي‌باشند. با توجه به این که مواد اطراف ما درمقیاس نانو (یک میلیاردم)، خواص عجیبی ازخود بروز می­دهند به نظر می­رسد که علم ریاضیات بایستی نقش مرکزی در مطالعه چنین ساختارهایی داشته باشد. شاخص‌هاي توپولوژيکي اعداد حقيقي هستند که به وسيله روابط رياضي و با توجه به ويژگي‌هاي گراف‌هاي مولکولي (درجه رئوس، فاصله بين رأس‌ها و غيره) براي تشريح روابط بين خواص فيزيکي- شيميايي ترکيبات آلي مطرح شده‌اند. شاخص توپولوژیکی یک گراف مولکولی، عددی حقیقی است که به گراف های یک­ریخت با آن مولکول، نسبت داده می­شود. این عدد بیان کننده بعضی از خواص مولکول می‌باشد . این مقاله به محاسبه و بررسی شاخص­های توپولوژیکی سوم شاخص زاگرب(Zagreb) رأسی، یالی نانولوله و نانوچنبرهTUC4C8(s) پردازد، که در علم نانو مورد توجه قرار می­گیرند. دراین مقاله شاخص­ های توپولوژیکی سوم زاگرب یالی را تعریف و هم چنین برای تعداد یال های گراف خط رابطه ایی ارائه می نماییم.

**کليدواژه­ها:** شاخص های سوم زاگرب رأسی و یالی ، نانو، گراف شیمیایی، نانولوله ، نانوچنبره.

**Third topological indices of Zagreb nanotubes and nanotorus TUC4C8 (s)**

**Mohammad Saki1\***

|  |  |
| --- | --- |
| 1\*Assistant Professor, Department of Mathematics, Sousangerd Branch, Islamic Azad University, Sousangerd, Iran | m.saki88@gmail.com |

**Abstract**

Due to the fact that the materials around us at the nanoscale (one billionth) exhibit strange properties, it seems that the science of mathematics should play a central role in the study of such structures. Topological indices are real numbers that are proposed by mathematical relations and according to the characteristics of molecular graphs (degree of vertices, distance between vertices, etc.) to describe the relationships between the physical-chemical properties of organic compounds. The topological index of a molecular graph is a real number that is assigned to graphs that are uniform with that molecule. This number expresses some properties of the molecule. This article calculates and examines the third topological indices of the Zagreb index of vertices, edges of nanotubes and nanotorus. deals with TUC4C8(s), which are of interest in nanoscience. In this article, for the first time, we define the topological indexes of the third edge of Zagreb and also provide a relation for the number of edges of the line graph.

**Keywords:** Third topological indicesof Zagreb vertex and edge, nano, chemical graph, nanotube, nanotop.

**مقدمه**

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، پدیده های 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 کوارک ها و لپتون ها که حداقل ده مرتبه کوچکتر از اتم هستند فیزیک بنیادی دستاوردهای خوبی دارد. نظریه گراف ابزارمفید و متنوعی برای شیمیدان‌ها فراهم می‌کند که از جمله می‌توان به شاخص ها یا شاخص های توپولوژیکی اشاره کرد. شاخص‌هايي که معرفي گرديد شاخص های اول،دوم و سوم شاخص زاگرب M1 ، M2 و M3 مي‌باشدکه برای آنها تعمیم یالی معرفی گردیده است .شاخص‌هاي توپولوژيکي اعداد حقيقي هستند که به وسيله روابط رياضي و با توجه به ويژگي‌هاي گراف‌هاي مولکولي (درجه رئوس، فاصله بين رأس‌ها و غيره) براي تشريح روابط بين خواص فيزيکي- شيميايي ترکيبات آلي مطرح شده‌اند. امروزه اين انديس‌هاي توپولوژيکي موجب پيشرفت چشمگير يکي از واسطه‌هاي آزمايشگاهي بنام QSAR شده‌اند. نتايج مطالعات QSAR علاوه بر شفاف سازي نحوه ارتباط بين خواص مولکول‌ها و ويژگي‌هاي ساختماني آن‌ها به پژوهشگران در پيش‌بيني رفتار مولکول‌هاي جديد برأساس رفتار مولکول‌هاي مشابه كمك مي‌كند. به مجموعه ابزارها و روش­هايي كه به اين منظور مورد استفاده قرار مي‌گيرند روش‌هاي پارامتري گويند. در روش‌هاي پارامتري سعي مي‌شود بين يك سري توصيف كننده‌هاي مولکولي با فعاليت يا خاصيت مورد نظر ارتباط منطقي برقرار نمايند. توصيف‌كننده‌هاي مولکولي كه به اين منظور استفاده مي‌شوند، مقادير عددي مي‌باشند كه جنبه‌هاي مختلف ساختاري مولکول را به طور كمي نشان مي‌دهند. وقتي خصوصيات ساختاري مولکول‌ها و فعاليت آن‌ها توسط اعداد و ارقام بيان مي‌شود مي‌توان رابطه رياضي يا کمي بين ساختار و فعاليت گونه ايجاد کرد. اين رابطه مي‌تواند براي پيش بيني پاسخ بيولوژيکي يا شيميايي ديگر ساختارها مورد استفاده قرار گيرد. به طور کلی محاسبات عددی از نتایج عملی حاصل از اجرای محاسبات برای پیدا کردن روش‌های جدید برای تجزیه و تحلیل مسائل استفاده می‌کند.

نظریه گراف شيميايي، شاخه‌اي از علم شيمي- رياضي مي‌باشد که عموماً با نظریه شيمي در ارتباط است. بر اساس اين نظریه، در اين گراف‌ها هر نقطه نشان دهنده يک اتم بوده و يال‌هاي بين نقاط نيز نشان دهنده پيوندهای شيميايي بين اتم هاست. اين انديس‌ها اطلاعاتي شامل ساختمان، اندازه و ميزان شاخه‌اي شدن مولکول، پيوندها، تعداد اتم‌ها و نوع اتم‌هاي در مولکول را دارا مي‌باشند. اين شاخص‌ها اولين بار توسط وينر در سال 1947 ارائه شد ]1[.

اگر G=(V,E) یک گراف باشد تعداد یال های آن را با و تعداد رئوس آن را با نشان می دهیم. شاخص‌ که معرفي گرديد شاخص سوم زاگرب مي‌باشد ]2[.

**تعریف 2 .1.** شاخص توپولوژیکی سوم زاگرب M3(G)برای گراف G، به صورت زیر تعریف می نماییم:



که در آنdu درجه رأس u ‌باشد و یـا مـی‌تـوان آن را بـه صـورت ، کـه در آن ، نوشت ]3-6[.

**تعریف 2. 2*.*** 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 باL(G) نشان داده و آن را گراف خط یالی متناظر با گراف G می‌گوییم.

**تعریف3.2.**نسخه یالی شاخص توپولوژیکی سوم زاگرب به صورت زیر است. ]7-11[.



که در آن ds درجه یال s در گراف G، یا به عبارت دیگر درجه رأس s درگراف L(G) است. که L(G) گراف خط متناظر با گراف G می باشد و یـا مـی‌تـوان آن را بـه صـورت ، کـه در آن ، نوشت.

لم **.4.2.**تعداد یال‌های گراف خط متناظر با G از رابطه زیر به دست می‌آید.

که در آن  .

**بدنه اصلي مقالات**

**محاسبه M3 و نانولوله TUC4C8(s)**

در این بخش محاسبه شاخص های M3 رأسی، یالی نانولوله TUC4C8(s) را ارائه می نماییم. چنان‌چه اتم‌های کربن روی لوله‌ای به شکل شش ضلعی و چهار ضلعی منتظم در کنار یکدیگر قرار گیرند، تشکیل نانو لوله‌ای [p,q] TUC4C8(S)می‌دهند شکل 1، این نانو لوله به TUC4C8(S) [5,3]معروف است.



**شکل1**: **نانولوله** TUC4C8(S) [5,3]

درشکل1، مثالی از این نانولوله آورده شده است. که تعداد هشت ضلعی ها را در یک ردیف برابر p و تعداد ردیف‌ها را با q نشان می‌دهیم. برای محاسبه شاخص ها ابتدا برشی در ارتفاع لوله داده و نانو لوله را تبدیل به یک گراف ساده می‌نماییم، خواهیم داشت:

 

**جدول 1.** تعداد یال‌های نانولوله TUC4C8(s)[p,q]

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| تعداد یال ها | ξi | انواع یال ها |
| 2p | 0 | (2,2) |
| 4p | 1 | (2,3) |
| 12pq-8p | 0 | (3,3) |

در نتیجه طبق **جدول 1 و** **هم چنین تعاریف شاخص ها،** قضیه زیر را خواهیم داشت.

**قضیه 1.3.** شاخص M3 نانولوله TUC4C8(s) به صورت زیر است.



در ادامه مطلب، نمونه ایی ازگراف L(G) را رسم می نماییم. از مدل سازی گراف خط استفاده می نماییم. **درشکل2،گراف خط نانو لوله** TUC4C8(s)[3,3]**رسم شده است.**



**شکل 2.** **گراف خط** نانولوله TUC4C8(s)[3,3]

لذا تعداد یال های L(G) گراف خط، متناظر با گراف G

طبق لم (4.2) به صورت زیر است.



**جدول 2:** تعداد یال‌های گراف خط TUC4C8(s)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| تعداد یال ها | ξi | انواع یال ها |
| 4p | 1 | (2,3) |
| 8p | 1 | (3,4) |
| 24pq-20p | 0 | (4,4) |

با توجه به جدول 2و هم چنین **تعاریف شاخص ها** قضیه زیر به دست می آید.

**قضیه 2.3.** شاخص یالی M3 نانولوله TUC4C8(s)، به صورت زیر است.



**محاسبه M3 و نانوچنبره TUC4C8(s)**

در این بخش محاسبه شاخص های شاخص M3 رأسی، یالی نانوچنبره TUC4C8(s) را ارائه می نماییم. درشکل3، نانو چنبره به TUC4C8(s)[5,3]نشان داده شده است.





**شکل3:گراف نانوچنبره** TUC4C8(s)[5,3]

برای محاسبه شاخص ها ابتدا برشی در ارتفاع نانوچنبره داده و آن را تبدیل به یک گراف ساده می‌نماییم، خواهیم داشت: 

**جدول 3: تعداد یال‌های نانوچنبره** TUC4C8(s)[p,q]

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| تعداد یال ها | ξi | انواع یال ها |
| 24p | 0 | (4,4) |

در نتیجه طبق **جدول 3 و** **هم چنین تعاریف شاخص ها،** قضیه زیر را خواهیم داشت.

**قضیه 3.3.** شاخص M3نانوچنبره TUC4C8(s) به صورت زیر است.



در ادامه مطلب، نمونه ایی ازگراف L(G) را رسم می نماییم.و از این مدل سازی گراف خط استفاده می نماییم. درشکل**4،گراف خط نانوچنبره** TUC4C8(s)[3,3]

**رسم شده است.**



**شکل 4:گراف خط نانوچنبره** TUC4C8(s)[3,3]

لذا تعداد یال های L(G) گراف خط، متناظر با گراف G طبق لم (2-4) به صورت زیر است.



**جدول 4:تعداد یال‌های گراف خط نانوچنبره** TUC4C8(s)[p,q]

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| تعداد یال ها | ξi | انواع یال ها |
| 12p | 0 | (3,3) |

با توجه به جدول 4و هم چنین **تعاریف شاخص ها** قضیه( 4.3 ) به دست می آید.

**قضیه 4.3.** شاخص یالی M3نانوچنبره TUC4C8(s)، به صورت زیر است.



**نتيجه‌گيري**

در این مقاله به محاسبه و بررسی شاخص­های توپولوژیکی سوم زاگرب(Zagreb) رأسی و یالی نانولوله و نانوچنبره TUC4C8(s) پرداخته شده است که در علم نانو مورد توجه قرار می­گیرند. که دراین مقاله شاخص­ توپولوژیکی سوم زاگرب یالی را معرفی و هم چنین برای تعداد یال های گراف خط رابطه ایی ارائه می نماییم.

**مراجع و منابع**

[1]. H. Wiener, Stractural determination of paraffin boiling points. *J. Amer.Chem.Soc*., **69**(1947), 17-20.

[2] G. H. Fath-Tabar, Old and new Zagreb indices of graphs, *MATCH Commun. Math.
Comput. Chem*. 65 (2011) 79-84.

[3]R. Todeschini, V. Consonni, “Handbook of Molecular Descriptors”, *Weinheim, Wiley-VCH*, 2000.

[4] A. Iranmanesh, I. Gutman, O. Khormali, A. Mahmiani, THE EDGE VERSIONS OF THE

WIENER INDEX, MATCH Commun. *Math. Comput. Chem*., **1**(3)(2009), 663.

[5] I. Gutman, and N. O. Trinajstic, (1972), Graph theory and molecular orbitals, Total π electron energy of alternant hydrocarbons, *Chem. Phys. Lett*. , 17(1972), 535–538.

[6] I. Gutman, E. Milovanovic and I. Milovanovic, 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*., **280** (2016), 132–139.

[8] M. Saki, A. Iranmanesh, , and A. Tehranian,. Computing the Edge Geometric-Arthimetic Index of V-Phenylenic Nanotube. *J. Comput. Theor.Nanosci*., **2**(11) (2015), 2552-2555.

[9]M. Saki, A. Iranmanesh, A., and O.Khormali, EDGE GEOMETRIC-ARTHMETIC INDEX OF SOME GRAPHS. *Studia U.B.B. Chem*, **3**(2014), 83-90.

[10] M. Saki, Comparison between Two Geometric–Arithmetic Indices, *J. comput.Theor.Nanosci.,* **4**(7) (2017), 3393–3398.

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