

محمد ساکی^۱، علی ایرانمنش^{۲*} و امید خرمالی^۳

۱- دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات تهران، گروه ریاضی، تهران، ایران

۲- دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

۳- گروه پژوهشی ریاضی و انفورماتیک، جهاد دانشگاهی تربیت مدرس، تهران، ایران

محاسبه اندیس GA یالی برخی از نانولوله‌ها

چکیده

در این مقاله ابتدا به محاسبه اندیس GA یالی برای نانولوله‌های $HAC_5C_7[p, q]$ و $HC_5C_7[p, q]$ و $TUC_4C_6C_8[p, q]$ اشاره می‌کنیم. در ادامه اندیس GA یالی شبکه دو بخشی، نانولوله و نانوجنبره $TUC_4C_6C_8[p, q]$ را به دست می‌آوریم.

واژه‌های کلیدی: اندیس GA راسی، اندیس GA یالی، نانولوله، گراف مولکولی، شبکه دو بعدی

۱- مقدمه

اندیس توپولوژیک یک گراف مولکولی، عددی است که بر گراف آن مولکول نسبت داده می‌شود. این عدد بیان کننده بعضی از خواص مولکول می‌باشد. یکی از قدیمی‌ترین اندیس‌های توپولوژیک اندیس وینر می‌باشد که در سال ۱۹۴۷ توسط شیمی‌دانی آمریکایی به نام هارولد وینر در مقاله‌ای در ژورنال انجمن شیمی آمریکا معرفی شد [۱]. پس از آن تعداد زیادی از دانشمندان به فکر معرفی و کار بر روی اندیس‌هایی توپولوژیک جدید و کاربردهای آنها پرداختند. یکی از اندیس‌هایی که اخیراً معرفی شده اندیس توپولوژیکی هندسی - حسابی GA می‌باشد که بصورت زیر معرفی گردید:

ابتدا فرض کنیم $(E, V) = G$ یک گراف ساده که در آن $(G)V$ مجموعه رئوس و $(G)E$ مجموعه یال‌ها باشد. اندیس توپولوژیکی هندسی - حسابی GA برای گراف G برابر است با

$$GA(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{2\sqrt{d_u \cdot d_v}}{d_u + d_v}$$

که در آن d_u درجه رأس u باشد و یا می‌توان آن را به صورت $GA(G) = \sum_{i=1}^{|E(G)|} \xi_i$ که در آن $\xi_i = \frac{2\sqrt{d_u \cdot d_v}}{d_u + d_v}$ نوشت

[۲]. در سالهای اخیر این اندیس را برای نانولوله‌های مختلفی محاسبه کرده اند [۳-۶].

همچنین نسخه یالی اندیس توپولوژیکی هندسی - حسابی GA بصورت زیر است [۷]

$$GA_e(G) = \sum_{e=sv \in E(L(G))} \frac{2\sqrt{d_s \cdot d_f}}{d_s + d_f}$$

که در آن d_e درجه یال e در گراف G است و $(G)L$ گراف خط G باشد که در گراف خط، رئوس آن یال‌های گراف G می‌باشند و دو رأس در $(G)L$ تشکیل یک یال می‌دهند هر گاه آن دو یال در گراف G دارای رأس مشترکی باشند.

توجه داشته باشیم که $d_e = d_u + d_v - 2$ و با توجه به این فرمول می‌توان تعداد یال‌های گراف خط را به دست آورد.

$$e = uv \in E(G)$$

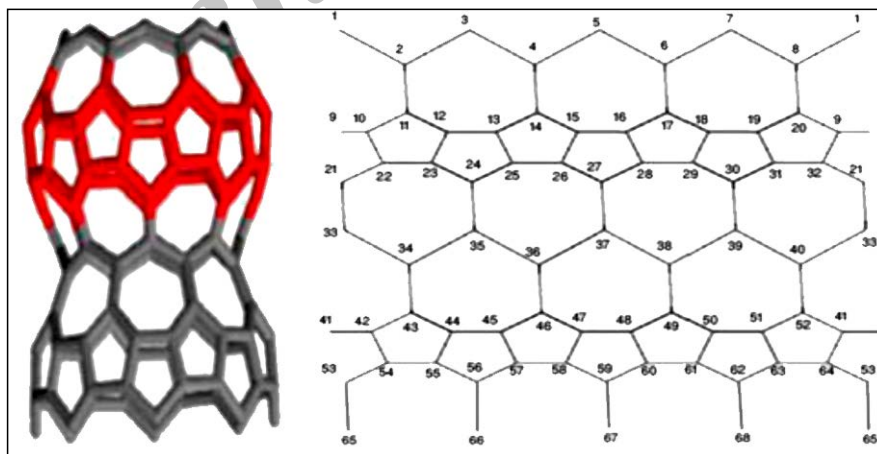
$|E_i| = \left| \{e_i \mid e_i \in E(G), \xi_i = (du_i, dv_i)\} \right|$ که در آن $|E(L(G))| = \frac{1}{2} \sum_{e_i=uv \in E(G)} (u_i + v_i - 2) \times |E_i|$
برای انجام محاسبات از لم زیر استفاده می‌کنیم:

لم ۱-۱. برای هر گراف ساده G ، خواهیم داشت $GA(G) = |E(G)|$ اگر و تنها اگر G یک گراف r -منتظم باشد.
اثبات: اگر $GA(G) = |E(G)|$ آنگاه $|E(G)| = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n$ لذا نتیجه می‌گیریم که $\xi_i = 1$ برای هر $1 \leq i \leq |E(G)|$ برعکس: اگر G گراف r -منتظم باشد آن گاه برای هر $uv = e \in V(E)$ خواهیم داشت که $du = dv = r$
لذا با جایگذاری $\xi = \frac{2\sqrt{r}}{r+r} = \frac{2r}{2r} = 1$ خواهیم داشت $GA(G) = \sum_{i=1}^{|E(G)|} \xi_i = \sum_{i=1}^{|E(G)|} 1 = |E(G)|$

در ادامه اندیس GA یالی برای نانولوله‌های $HAC_5C_7[p, q]$ ، $HC_5C_7[p, q]$ و $HC_5C_7[p, q]$ را محاسبه می‌کنیم.
سپس اندیس GA یالی شبکه دویخشی، نانولوله و نانوجنره $TUC_4C_6C_8[p, q]$ را به دست می‌آوریم.

۲. محاسبه GAe نانو لوله $HAC_5C_7[p, q]$ و $HAC_5C_6C_7[p, q]$

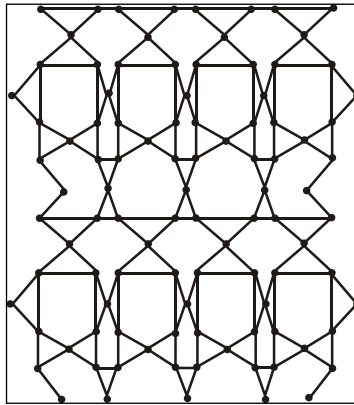
در این قسمت به محاسبه اندیس GA یالی نانولوله‌های $HAC_5C_7[p, q]$ و $HAC_5C_6C_7[p, q]$ اشاره می‌کنیم.
شکل زیر که گراف نانولوله $HAC_5C_7[p, q]$ است و آن را با H نمایش می‌دهیم. تعداد هفت ضلعی‌ها را در یک ردیف برابر p و تعداد ردیف‌های پنج ضلعی‌ها را با q نشان می‌دهیم و این نمادها فقط در این قسمت مقاله معتبر است. پس با توجه به شکل زیر داریم $|E(H)| = 12pq$.



شکل ۱-۲. نانولوله $HAC_5C_7[4, 2]$

گراف خط H بصورت زیر است و داریم:

$$|E(L(HAC_5C_7[p, q]))| = \frac{1}{2} [(2+3-2)(2p) + (1+3-2)p + (3+3-2)(12pq-3p)] = 3p + p + 24pq - 6p = 24pq - 2p$$



شکل ۲-۲. $(H)L$ و $p = 3$ ، $q = 3$

جدول ۱-۲. ξ_i و تعداد یال‌های گراف خط نانولوله $HAC_5C_7[p, q]$

تعداد یال‌ها	ξ_i	انواع یال‌ها
$2p$	۱	(۳,۳)
$2p$	$\frac{2\sqrt{12}}{7}$	(۳,۴)
$2p$	$\frac{2\sqrt{8}}{6}$	(۲,۴)
$24pq - 8p$	۱	(۴,۴)

قضیه ۱-۲. اندیس GA یالی نانولوله H برابر است با:

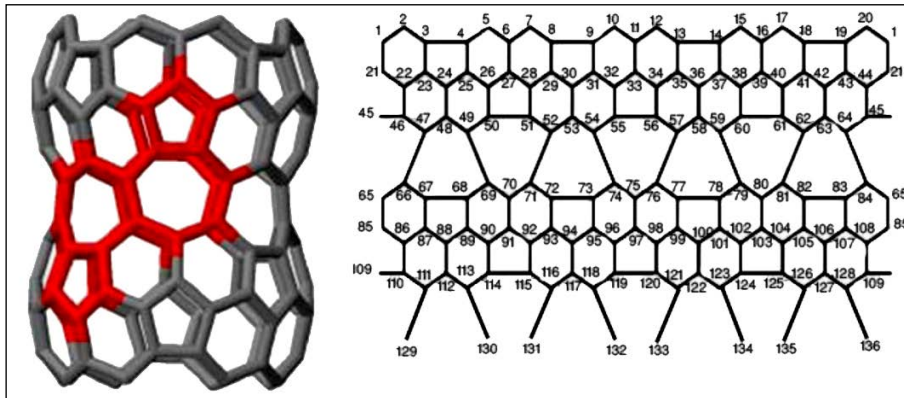
$$GA_e(HAC_5C_7[p, q]) = 2p + 24pq - 8p + (2p)\left(\frac{2\sqrt{12}}{7}\right) + (2p)\left(\frac{2\sqrt{8}}{6}\right)$$

$$= 24pq + \left(\frac{8\sqrt{3}}{7} + \frac{8\sqrt{2}}{6} - 6\right)p = 24pq + \left(\frac{8\sqrt{3}}{7} + \frac{4\sqrt{2}}{3} - 6\right)p$$

اثبات. با توجه به جدول ۱-۲ و شکل ۲-۲ به نتیجه مطلوب می‌رسیم.

شکل زیر که گراف نانولوله $HAC_5C_6C_7[p, q]$ است. تعداد جفت هفت ضلعی‌ها را در یک ردیف برابر p' و تعداد ردیف‌های شامل پنج ضلعی‌ها و شش ضلعی‌ها را با q' نشان می‌دهیم و این نمادها فقط در این قسمت مقاله معتبر است. پس با توجه به

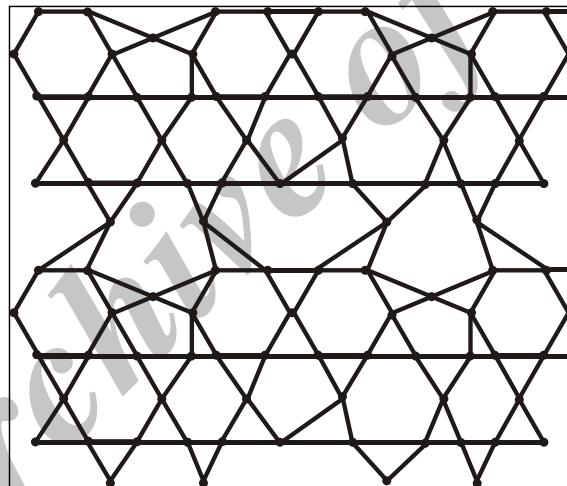
$$|E(HAC_5C_6C_7[p', q'])| = 24p'q'$$



شکل ۲-۳. نانولوله $HAC_5C_6C_7 [4,2]$

گراف خط $HAC_5C_6C_7 [p',q']$ بصورت زیر است و داریم:

$$|E(L(HAC_5C_6C_7 [p',q']))| = \frac{1}{2} [(2+3-2)(4p') + (1+3-2)(2p') + (3+3-2)(24p'q' - 6p')] = 48p'q' - 4p'$$



شکل ۲-۴. $(HAC_5C_6C_7 [2,2])L$

جدول ۲-۲. ξ_p و تعداد یال‌های گراف خط نانولوله $HAC_5C_6C_7 [p',q']$

تعداد یال‌ها	ξ_p	انواع یال‌ها
$3p'$	۱	(۳,۳)
$2p' + 2p' = 4p'$	$\frac{2\sqrt{8}}{6} = \frac{2\sqrt{2}}{3}$	(۲,۴)
$6p'$	$\frac{2\sqrt{12}}{7} = \frac{4\sqrt{3}}{7}$	(۳,۴)
$48p'q' - 17p'$	۱	(۴,۴)

قضیه ۲-۲. اندیس GA یالی نانولوله $HAC_5C_6C_7[p', q']$ برابر است با:

$$GA_e(HAC_5C_6C_7[p', q']) = 48p'q' + \left(\frac{8\sqrt{2}}{3} + \frac{24\sqrt{3}}{7} - 14 \right) p'$$

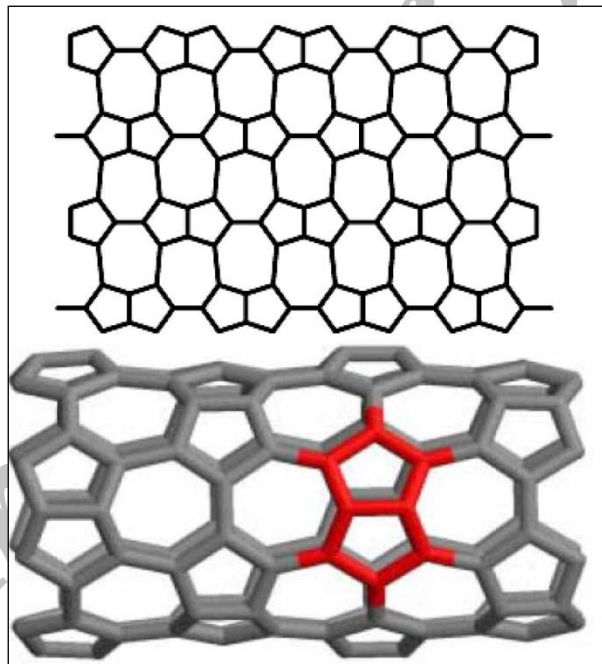
اثبات. با توجه به جدول ۲-۲ و شکل ۴-۲ به نتیجه مطلوب می‌رسیم.

۳- محاسبه GAe برای نانولوله $HC_5C_7[p, q]$

در این قسمت به محاسبه اندیس GA یالی نانولوله $HC_5C_7[p, q]$ اشاره می‌کنیم.

شکل زیر که گراف نانولوله $HC_5C_7[p, q]$ است. تعداد هفت ضلعی‌ها را در یک ردیف برابر p و تعداد ردیفهای پنج ضلعی‌ها را با q نشان می‌دهیم و این نمادها فقط در این قسمت مقاله معتبر است. پس با توجه به شکل زیر داریم:

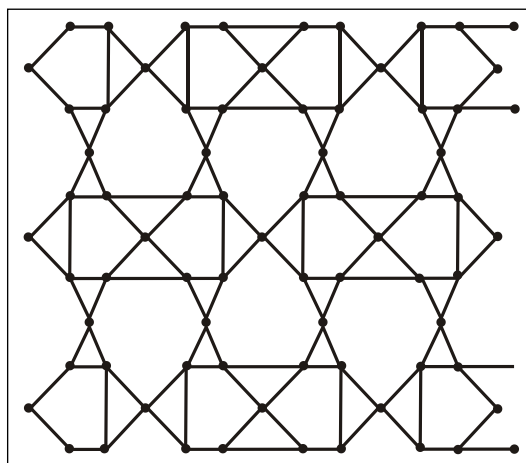
$$|E(HC_5C_7[p, q])| = 6pq - p$$



شکل ۳-۱. گراف نانولوله $HC_5C_7[p, q]$

گراف خط نانولوله $HC_5C_7[p, q]$ بصورت زیر است که با توجه به آن داریم:

$$|E(L(HC_5C_7[p, q]))| = \frac{1}{2} [(2+3-2)(4p) + (3+3-2)(6pq-5p)] = 12pq - 4p$$



شکل ۳-۲. گراف خط نانولوله $(HC_5C_7[4,3])L$

نکته: P باید حتماً زوج باشد زیرا شکل نانو لوله در برش بدست نمی آید.

جدول ۳-۱. ξ_i و تعداد یال‌های گراف نانولوله $HC_5C_7[p, q]$

تعداد یال‌ها	ξ_i	انواع یال‌ها
$\frac{3}{2}p + \frac{3}{2}p = 3p$	1	$(3,3)$
$4p + 4p = 8p$	$\frac{4\sqrt{3}}{7}$	$(3,4)$
$12pq - 12p$	1	$(4,4)$

قضیه ۳-۱. اندیس GA یالی گراف نانولوله $HC_5C_7[p, q]$ برابر است با

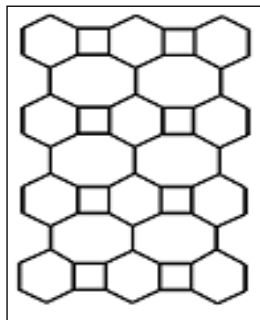
$$GA_e(HC_5C_7[p, q]) = 12pq + \left(\frac{32\sqrt{3}}{7} - 12 \right) p$$

اثبات. با توجه به جدول ۳-۱ و شکل ۳-۲ به نتیجه مطلوب می‌رسیم.

۴. محاسبه GA_e شبکه دو بعدی، نانولوله و نانوجنبره $TUC_4C_6C_8[p, q]$

در این قسمت به محاسبه اندیس و GA یالی شبکه دو بعدی، نانولوله و نانوجنبره $TUC_4C_6C_8[p, q]$ اشاره می‌کنیم. شکل زیر که گراف نانولوله $TUC_4C_6C_8[p, q]$ است و آن را با H نمایش می‌دهیم. تعداد شش ضلعی‌ها را در یک ردیف برابر p و تعداد ردیفهای شش ضلعی‌ها و چهار ضلعی‌ها را با q نشان می‌دهیم و این نمادها فقط در این قسمت مقاله معتبر است.

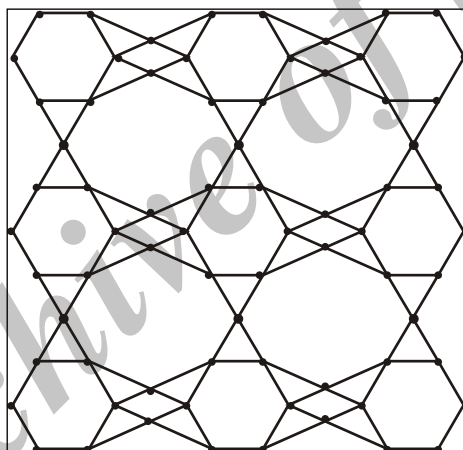
$$|E(TUC_4C_6C_8[p, q])| = 9pq - 2q - p$$



شکل ۴-۱. گراف شبکه دوبعدی $TUC_4C_6C_8[3,4]$

گراف خط شبکه دوبعدی $TUC_4C_6C_8[p,q]$ بصورت زیر است و داریم:

$$\begin{aligned} |E(L(TUC_4C_6C_8[p,q]))| &= \frac{1}{2} [(2+2-2)(2q+4) + (2+3-2)(4q+4p-8) + (3+3-2)(9pq-8q-5p+4)] \\ &= 2q+4+3(2q+2p-4)+2(9pq-8q-5p+4) \\ &= 18pq-8q-4p \end{aligned}$$



شکل ۴-۲. گراف شبکه دوبعدی $(TUC_4C_6C_8[3,3])L$

جدول ۴-۱. ξ_i و تعداد یال‌های گراف شبکه دوبعدی $TUC_4C_6C_8[p,q]$

تعداد یال‌ها	ξ_i	انواع یال‌ها
4	1	(2,2)
$2q+2q=4q$	$\frac{2\sqrt{6}}{5}$	(2,3)
$4p+4p+4(q-2)+4(q-2)$ $=8p+8q-16$	$\frac{2\sqrt{12}}{7}$	(3,4)
$18pq-20q-12p+12$	1	(4,4)

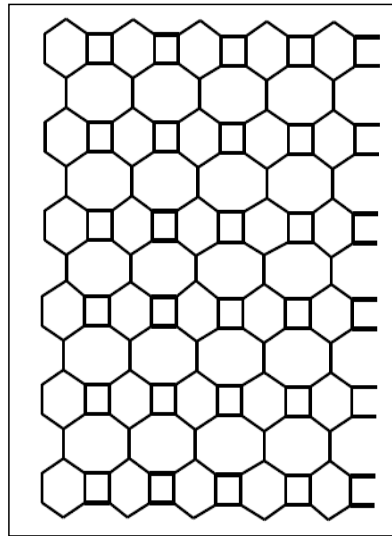
قضیه ۱-۴. اندیس GA یالی گراف شبکه دوبعدی $TUC_4C_6C_8[p, q]$ برابر است با:

$$GA_e(TUC_4C_6C_8[p, q]) = 18pq + \left(\frac{8\sqrt{6}}{5} + \frac{32\sqrt{3}}{7} - 20 \right) q + \left(\frac{32\sqrt{3}}{7} - 12 \right) p + 16 - \frac{64\sqrt{3}}{7}$$

اثبات: با توجه به جدول ۱-۴ و شکل ۲-۴ داریم به نتیجه مطلوب می‌رسیم.

در ادامه به محاسبه اندیس GA یالی نانولوله $TUC_4C_6C_8[p, q]$ اشاره می‌کنیم. با توجه به شکل زیر داریم:

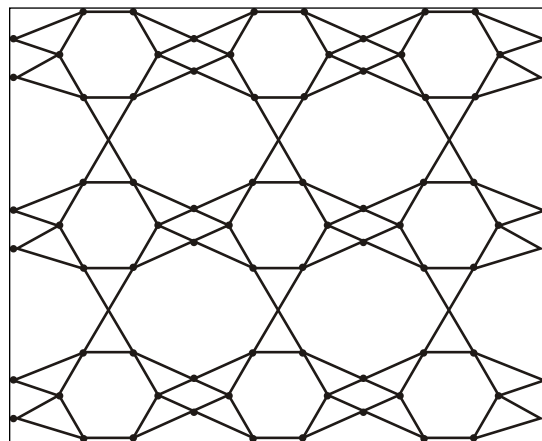
$$|E(H)| = 9pq - p$$



شکل ۳-۴. گراف نانولوله $TUC_4C_6C_8[5,6]$

گراف خط نانولوله $TUC_4C_6C_8[p, q]$ بصورت زیر است و داریم:

$$|E(L(TUC_4C_6C_8[p, q]))| = \frac{1}{2} [(2+3-2)(4p) + (3+3-2)(9pq - 5p)] = 18pq - 4p$$



شکل ۴-۴. گراف خط نانولوله $L(TUC_4C_6C_8[3,3])$

جدول ۲-۴. ξ_i و تعداد یال‌های گراف نانولوله $TUC_4C_6C_8[p, q]$

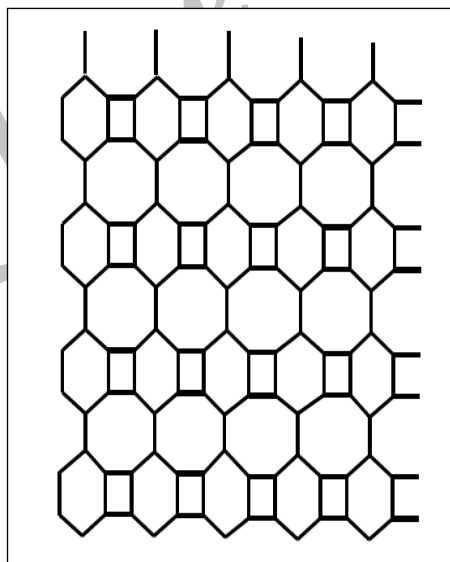
تعداد یال‌ها	ξ_i	انواع یال‌ها
$p+p=2p$	1	(3,3)
$4p+4p=8p$	$\frac{2\sqrt{12}}{7}$	(3,4)
$18pq-14p$	1	(4,4)

قضیه ۲-۴. اندیس GA یالی گراف نانولوله $TUC_4C_6C_8[p, q]$ برابر است با:

$$GA_e(TUC_4C_6C_8[p, q]) = 18pq + \left(\frac{32\sqrt{3}}{7} - 12 \right) p$$

اثبات. با توجه به جدول ۲-۴ و شکل ۴-۴ داریم به نتیجه مطلوب می‌رسیم.

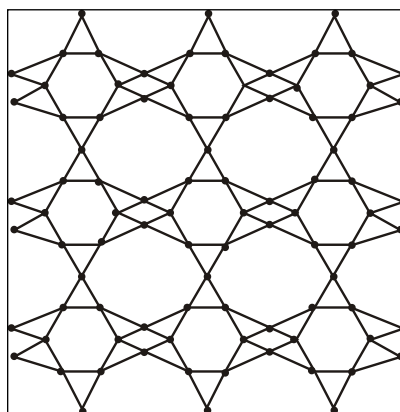
در ادامه به محاسبه اندیس GA یالی نانوجنبه $TUC_4C_6C_8[p, q]$ اشاره می‌کنیم. با توجه به شکل زیر داریم: $|E(K)| = 9pq$ چون گراف ۳-منظم هستند.



شکل ۴-۵. گراف نانولوله $TUC_4C_6C_8[5,4]$

گراف خط نانوجنبه $TUC_4C_6C_8[p, q]$ بصورت زیر است که با توجه به آن داریم:

$$|E(L(K))| = \frac{1}{2}[(3+3-2)(9pq)] = 18pq$$



شکل ۴-۶. گراف خط نانوجنبره $(TUC_4C_6C_8[3,3])_L$

قضیه ۴-۶. اندیس GA یالی گراف نانوجنبره $TUC_4C_6C_8[p, q]$ برابر است با:

$$GA_e(TUC_4C_6C_8[p, q]) = |E(L(TUC_4C_6C_8[p, q]))| = 18pq$$

اثبات. با توجه به شکل ۴-۶ داریم به نتیجه مطلوب می‌رسیم.

index of HAC5C7 [p;q] and HAC5C6C7[p;q] nanotubes, Optoelectronics and Advanced Materials Rapid Communications, **5**(7), (2011) 790-792.

- منابع
1. H. Wiener, *Structural determination of paraffin boiling points*, J. Am. Chem. Soc., **69**, (1947), 17-20.
 2. D. Vukičević and B. Furtula, *Topological index based on the ratios of geometrical and arithmetical means of end-vertex degrees of edges*, J. Math. Chem., **46**, (2009), 1369-1376.
 3. A. Iranmanesh and M. Zeraatkar, *Computing GA index for some nanotubes*, Optoelectronics and Advanced Materials Rapid Communications, **4** (11), (2010), 1852-1855.
 4. A. Iranmanesh and M. Zeraatkar, *Computing GA*
 5. M. Ghorbani, *GA index of TUC4C8(R) nanotube*, Optoelectronics and Advanced Materials Rapid Communications, **4**(2), (2010), 261 – 263.
 6. M. Ghorbani and M. Jalali, *Computing a new topological index of nanostructures*, Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures, **4**(4), (2009), 681-685.
 7. A. Mahmiani, O. Khormali and A. Iranmanesh, *On the edge versions of geometric-arithmetic index*, Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures, **7**(2), (2012), 411-414.