

عباس ارجمندفر^۱، امید خرمالی^{۲*}

۱. دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرری، تهران
 ۲. گروه پژوهشی ریاضی و انفورماتیک، جهاد دانشگاهی واحد تربیت مدرس، تهران

اندیس Co-PI کلی و محاسبه آن برای چندین نانولوله

چکیده

در این مقاله، ابتدا نسخه کلی اندیس Co-PI را برای یک گراف معرفی نموده و نتایجی بر روی آن بدست می آوریم. در ادامه این نسخه جدید را برای سه نانولوله $TUC_4C_8(S)$ ، $TUC_4C_8(R)$ و زیگزاگ محاسبه می نماییم. کلمات کلیدی: اندیس Co-PI راسی، اندیس Co-PI یالی، نانولوله، گراف مولکولی.

۱- مقدمه

اندیس‌های توپولوژیکی اعداد حقیقی هستند که بوسیله روابط ریاضی و با توجه به ویژگی‌های گراف‌های مولکولی مولکول‌ها (درجه رئوس، فاصله بین راسها و غیره) برای تشریح روابط بین خواص فیزیکی-شیمیایی ترکیبات آلی مطرح شده‌اند. جهت محاسبه این توصیف کننده‌ها ابتدا باید ساختار مولکول را به صورت یک گراف شیمیایی رسم نمود. نظریه گراف شیمیایی، شاخه‌ای از علم شیمی-ریاضی می‌باشد که عموماً با شیمی نظری در ارتباط است. بر اساس این نظریه، در این گراف‌ها هر نقطه نشان‌دهنده یک اتم بوده و یال‌های بین نقاط نیز نشان‌دهنده پیوند شیمیایی بین اتم‌هاست. معمولاً در گراف‌ها، اتم ئیدروژن را نشان نمی‌دهند [۱]. اولین اندیس توپولوژیکی توسط هارولد وینر در سال ۱۹۹۷ برای مطالعه نقطه جوش پارافین بدست آمده است [۲]. تا کنون اندیس‌های توپولوژیکی متعددی معرفی شده‌اند و کارهای فراوانی روی آن‌ها انجام پذیرفته است. یکی از اندیس‌هایی که جدیداً معرفی شده، اندیس توپولوژیکی Co-PI است. نسخه راسی اندیس Co-PI بصورت زیر معرفی شد [۳]

$$Co-PI_v(G) = \sum_{e \in E(G)} |n_e(u) - n_e(v)|$$

که در آن $n_e(v) = |\{x \in V(G) \mid d(x, v) < d(x, u)\}|$ و $n_e(u) = |\{x \in V(G) \mid d(x, u) < d(x, v)\}|$ می‌باشند که $d(x, u)$

طول کوتاهترین مسیر بین دو راس x, u است. نسخه یالی آن نیز به صورت زیر معرفی گردید [۴]

$$Co-PI_e(G) = \sum_{e \in E(G)} |m_e(u) - m_e(v)|$$

که در آن $m_e(u) = |\{f \in E(G) \mid d'(f, u) < d'(f, v)\}|$ و $m_e(v) = |\{f \in E(G) \mid d'(f, v) < d'(f, u)\}|$ می باشند که $d'(f, u) = \min\{d(x, u), d(y, u)\}$ و $f = xy \in E(G)$ و $u \in V(G)$ هستند.

در ادامه بعد از معرفی نسخه کلی اندیس Co-PI و بدست آوردن نتایجی بر روی آن، این نسخه جدید را برای نانولوله های $TUC_4C_8(S)$ ، $TUC_4C_8(R)$ و زیگزاگ محاسبه می کنیم.

۲- اندیس Co-PI کلی

در [۵]، مفاهیم $t_e(u)$ که تعداد راس ها و یالهایی از گراف G باشد که به راس u نزدیکتر هستند و $t_e(v)$ که تعداد راس ها و یالهایی از گراف G باشد که به راس v نزدیک تر هستند، معرفی شده اند. اینک با توجه به این مفاهیم اندیس کلی Co-PI را بصورت زیر معرفی می نماییم.

$$Co-PI_T(G) = \sum_{e \in E(G)} |t_e(u) - t_e(v)| \quad \text{تعریف ۱-۲ اندیس کلی Co-PI برای گراف } G \text{ برابر است با}$$

از تعریف بالا بلافاصله نتیجه زیر را داریم.
نتیجه ۲-۲. اگر G یک گراف باشد، داریم

$$Co-PI_T(G) \leq Co-PI_v(G) + Co-PI_e(G)$$

اثبات با توجه به اینکه $t_e(u) = n_e(u) + m_e(u)$ و $t_e(v) = n_e(v) + m_e(v)$ داریم

$$\begin{aligned} Co-PI_T(G) &= \sum_{e \in E(G)} |t_e(u) - t_e(v)| = \sum_{e \in E(G)} |(n_e(u) + m_e(u)) - (n_e(v) + m_e(v))| \\ &= \sum_{e \in E(G)} |(n_e(u) - n_e(v)) + (m_e(u) - m_e(v))| \\ &\leq \sum_{e \in E(G)} (|(n_e(u) - n_e(v))| + |(m_e(u) - m_e(v))|) \\ &= \sum_{e \in E(G)} (|(n_e(u) - n_e(v))|) + \sum_{e \in E(G)} (|(m_e(u) - m_e(v))|) = Co-PI_v(G) + Co-PI_e(G). \end{aligned}$$

قضیه ۳-۲ اندیس Co-PI کلی برای گراف های مسیر P_n ، ستاره S_n ، دور C_n ، گراف کامل K_n و گراف دوبخشی $K_{a,b}$ بصورت زیر است.

$$(۱) \quad Co-PI_T(P_n) = \begin{cases} 4(k-1)^2 & , n = 2k+1 \\ 4k(k-1) & , n = 2k \end{cases}$$

$$(۲) \quad Co-PI_T(S_n) = (n-1)(2n-4)$$

$$(۳) \quad Co-PI_T(K_{a,b}) = 2ab|b-a|$$

اثبات

۱. با توجه به اینکه مرکزی یک مسیر یک راس یا یک یال است داریم: اگر مسیر P_n که $n = 2k$ باشد، آن گاه مرکز آن یک یال است و برای این یال مقدار $|t_e(u) - t_e(v)|$ برابر صفر است. اگر از یک طرف این یال مقدار قدرمطلق مذکور را برای یالهای مجاور حساب کنیم مشاهده می‌کنیم که هر چه به سمت انتهای مسیر حرکت کنیم مقدار قدر مطلق برای یالهای مجاور به مقدار عدد ۴ اضافه می‌شود. از طرفی هر یالی یک یال متناظر در طرف دیگر یال مرکز دارد که مقدار قدرمطلق برای آن‌ها یکسان است پس داریم،

$$Co - PI_T(P_n) = 2 \sum_{i=1}^{k-1} 4i = 4k(k-1)$$

برای حالت فرد نیز از همین روش استفاده می‌کنیم و به نتیجه مطلوب می‌رسیم.

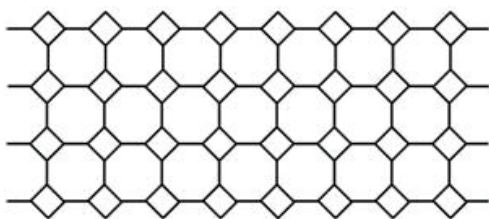
۲. چون برای هر یال مقدار $t_e(u) = 1$ و مقدار $t_e(v) = 2n - 3$ می‌باشد.

۳. چون برای هر یال مقدار $t_e(u) = 2b - 1$ که u در بخشی قرار داشته باشد که تعداد رئوس آن برابر a است و مقدار

$t_e(v) = 2n - 3$ که v در بخشی قرار داشته باشد که تعداد رئوس آن برابر b است، می‌باشد.

نتیجه ۳-۴. مقدار اندیس $Co-PI$ کلی برای گراف دور، گراف کامل و دوبخشی منظم برابر صفر می‌باشد.

اثبات. بدلیل اینکه مقدار $t_e(u)$ و $t_e(v)$ برای هر یال این گراف‌ها مساوی است، در نتیجه اندیس مورد نظر برای آن‌ها صفر می‌باشد.



شکل ۳-۱: نانولوله $TUC_4C_8(R)$ ، $p=8, q=4$

۳. اندیس $Co-PI$ کلی نانولوله های $TUC_4C_8(S)$ ، $TUC_4C_8(R)$ و زیگزاگ

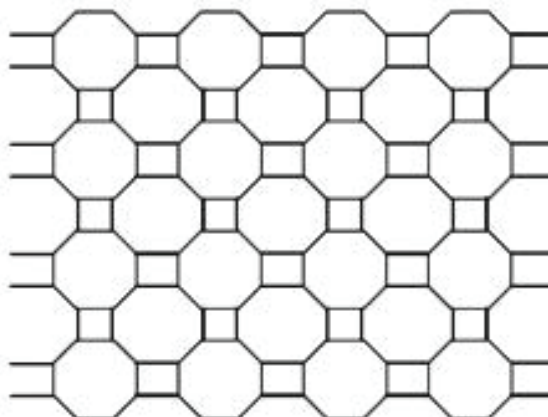
ابتدا نانولوله های $TUC_4C_8(R)$ ، $TUC_4C_8(S)$ و زیگزاگ را معرفی می‌کنیم.

در شکل ۳-۱، نانولوله $TUC_4C_8(R)$ نشان داده شده است.

تعداد لوزیها در یک ردیف را با p و تعداد ردیفها را با q نشان می‌دهیم. همچنین تعداد رئوس نانولوله $TUC_4C_8(R)$ برابر

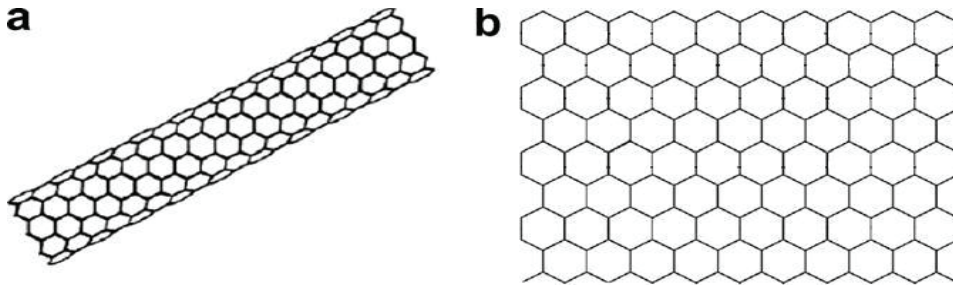
$|V(G)| = 4pk$ می‌باشد. برای راحتی محاسبات گراف مولکولی نانولوله $TUC_4C_8(R)$ را با G نشان می‌دهیم.

در شکل ۳-۲، نانولوله $TUC_4C_8(S)$ نشان داده شده است.



شکل ۳-۲: نانولوله $TUC_4C_8(S)$ ، $p'=4, q'=8$

تعداد مربع‌ها در یک ردیف را با p' و تعداد ردیف‌ها را با q' نشان می‌دهیم. برای راحتی محاسبات گراف مولکولی نانولوله $TUC_4C_8(S)$ را با G' نشان می‌دهیم. در شکل ۳-۳، نانولوله زیگزاگ نشان داده شده است.



شکل ۳-۳: (a) نانولوله زیگزاگ (b) شبکه دو بعدی نانولوله زیگزاگ، با $p=10$ و $q=9$.

تعداد ردیف‌های شبکه دو بعدی نانولوله زیگزاگ را با q'' و تعداد شش ضلعی‌ها را در هر ردیف را با p'' نشان می‌دهیم، برای مثال شکل ۳-۳ را ببینید. برای راحتی گراف مولکولی نانولوله زیگزاگ را با G'' نشان می‌دهیم.

در ادامه اندیس Co-PI کلی نانولوله $TUC_4C_8(R)$ را محاسبه می‌کنیم. مقادیر $t_e(u)$ و $t_e(v)$ برای این نانولوله در مرجع [۶] محاسبه شده‌اند که در لم‌های زیر به آن‌ها اشاره می‌کنیم.

لم ۳-۱ [۶] فرض کنید $uv = e \in E(G)$ یک یال عمودی در G بین ردیف‌های i و $i+1$ که $1 \leq i \leq q-1$ می‌باشد، باشد. آن‌گاه داریم: $t_e(v) = 10p(q-i) - p$ و $t_e(u) = 10pi - p$

لم ۳-۲ [۶] فرض کنید $uv = e \in E(G)$ یک یال افقی در G در ردیف i که $1 \leq i \leq q$ می‌باشد، باشد. آن‌گاه داریم: اگر p زوج

$$\text{باشد: } t_e(u) = t_e(v) = 5pi - \frac{p}{2} - i$$

$$\text{اگر } p \text{ فرد باشد: } t_e(u) = t_e(v) = 5pi - \frac{p+1}{2} - 2i$$

لم ۳-۳ [۶]. فرض کنید $uv = e \in E(G)$ در G در ردیف m که $1 \leq m \leq q$ می‌باشد، باشد. آن‌گاه داریم: اگر p زوج باشد:

$$t_e(u) = \begin{cases} 10km - \frac{p}{2} - 9k + 5kp - 5k^2 & , m \leq \frac{p}{2} + 1 \ \& \ q - m \leq \frac{p}{2} \\ 5mp + 5m^2 - 9m + 5\frac{p^2}{4} - 5p & , m \leq \frac{p}{2} + 1 \ \& \ q - m > \frac{p}{2} \\ 10km - 5k^2 + 5pk - 9k - 5m^2 + 5mp + 7m - 5\frac{p^2}{4} + 4p - 2 & , m > \frac{p}{2} + 1 \ \& \ q - m \leq \frac{p}{2} \\ 10mp - 2m - \frac{p}{2} - 2 & , m > \frac{p}{2} + 1 \ \& \ q - m > \frac{p}{2} \end{cases}$$

$$t_e(v) = \begin{cases} 5kp - 10km - \frac{p}{2} + 5k + 5k^2 & , m \leq \frac{p}{2} + 1 \text{ \& } q - m \leq \frac{p}{2} \\ 10pk - 5mp - 5m^2 + 5m - 5\frac{p^2}{4} + 2p & , m \leq \frac{p}{2} + 1 \text{ \& } q - m > \frac{p}{2} \\ 5k^2 - 10km + 5pk + 5k + 5m^2 - 5mp - 5m + 5\frac{p^2}{4} + 2p & , m > \frac{p}{2} + 1 \text{ \& } q - m \leq \frac{p}{2} \\ \frac{p}{2}(20k - 20m + 9) & , m > \frac{p}{2} + 1 \text{ \& } q - m > \frac{p}{2} \end{cases}$$

اگر p فرد باشد:

$$t_e(u) = \begin{cases} 10km - \frac{p}{2} - 8k + 5kp - 5k^2 + \frac{1}{2} & , m \leq \frac{p+1}{2} \text{ \& } q - m \leq \frac{p-1}{2} \\ 5mp + 5m^2 - 8m + 5\frac{p^2}{4} - 9\frac{p}{2} + \frac{13}{4} & , m \leq \frac{p+1}{2} \text{ \& } q - m > \frac{p-1}{2} \\ 10km - 5k^2 + 5pk - 8k - 5m^2 + 5mp + 7m - 5\frac{p^2}{4} - 4p - \frac{7}{4} & , m > \frac{p+1}{2} \text{ \& } q - m \leq \frac{p-1}{2} \\ 10mp - 8p - m + 1 & , m > \frac{p+1}{2} \text{ \& } q - m > \frac{p-1}{2} \end{cases}$$

9

$$t_e(v) = \begin{cases} 5kp - 10km - \frac{p}{2} + 4k + 5k^2 + \frac{1}{2} & , m \leq \frac{p+1}{2} \text{ \& } q - m \leq \frac{p-1}{2} \\ 10pk - 5mp - 5m^2 + 4m - 5\frac{p^2}{4} + 3\frac{p}{2} - \frac{1}{4} & , m \leq \frac{p+1}{2} \text{ \& } q - m > \frac{p-1}{2} \\ 5k^2 - 10km + 5pk + 4k + 5m^2 - 5mp - 4m + 5\frac{p^2}{4} + 3\frac{p}{2} + \frac{5}{4} & , m > \frac{p+1}{2} \text{ \& } q - m \leq \frac{p-1}{2} \\ \frac{7p}{2} + 10kp - 10mp + \frac{1}{2} & , m > \frac{p+1}{2} \text{ \& } q - m > \frac{p-1}{2} \end{cases}$$





برای سادگی محاسبات، نمادهای زیر را بکار می‌بریم.

$$a_1 = 10km - \frac{p}{2} - 9k + 5kp - 5k^2$$

$$a_2 = 5mp + 5m^2 - 9m + 5\frac{p^2}{4} - 5p$$

$$a_3 = 10km - 5k^2 + 5pk - 9k - 5m^2 + 5mp + 7m - 5\frac{p^2}{4} + 4p - 2$$

$$a_4 = 10mp - 2m - \frac{p}{2} - 2$$

$$a'_1 = 10km - \frac{p}{2} - 8k + 5kp - 5k^2 + \frac{1}{2}$$

$$a'_2 = 5mp + 5m^2 - 8m + 5\frac{p^2}{4} - 9\frac{p}{2} + \frac{13}{4}$$

$$a'_3 = 10km - 5k^2 + 5pk - 8k - 5m^2 + 5mp + 7m - 5\frac{p^2}{4} - 4p - \frac{7}{4}$$

$$a'_4 = 10mp - 8p - m + 1$$

$$b_1 = 5kp - 10km - \frac{p}{2} + 5k + 5k^2$$

$$b_2 = 10pk - 5mp - 5m^2 + 5m - 5\frac{p^2}{4} + 2p$$

$$b_3 = 5k^2 - 10km + 5pk + 5k + 5m^2 - 5mp - 5m + 5\frac{p^2}{4} + 2p$$

$$b_4 = \frac{p}{2}(20k - 20m + 9)$$

$$b'_1 = 5kp - 10km - \frac{p}{2} + 4k + 5k^2 + \frac{1}{2}$$

$$b'_2 = 10pk - 5mp - 5m^2 + 4m - 5\frac{p^2}{4} + 3\frac{p}{2} - \frac{1}{4}$$

$$b'_3 = 5k^2 - 10km + 5pk + 4k + 5m^2 - 5mp - 4m + 5\frac{p^2}{4} + 3\frac{p}{2} + \frac{5}{4}$$

$$b'_4 = \frac{7p}{2} + 10kp - 10mp + \frac{1}{2}$$

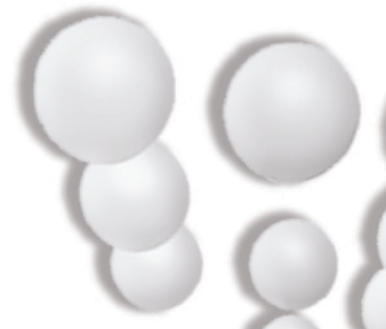
قضیه ۳-۴ اندیس Co-PI کلی نانولوله $TUC_4C_8(R)$ برابر است با:

اگر p زوج باشد:

$$Co-PI_T(G) = \begin{cases} \sum_{m=1}^q 2p|a_1 - b_1| + p(q-1) \sum_{i=1}^{q-1} |10pq - 20pi| & , q \leq \frac{p}{2} + 1 \\ \sum_{m=1}^{\frac{p+1}{2}} 2p|a_2 - b_2| + \sum_{m=\frac{p+2}{2}}^q 2p|a_3 - b_3| + p(q-1) \sum_{i=1}^{q-1} |10pq - 20pi| & , \frac{p}{2} + 1 < q \leq p + 2 \\ \sum_{m=1}^{\frac{p+1}{2}} 2p|a_2 - b_2| + \sum_{m=\frac{p+2}{2}}^{\frac{q}{2}} 2p|a_4 - b_4| + \sum_{m=q-\frac{p+2}{2}}^q 2p|a_3 - b_3| + p(q-1) \sum_{i=1}^{q-1} |10pq - 20pi| & , q > p + 2 \end{cases}$$

اگر p فرد باشد

$$Co-PI_T(G) = \begin{cases} \sum_{m=1}^q 2p|a'_1 - b'_1| + p(q-1) \sum_{i=1}^{q-1} |10pq - 20pi| & , q \leq \frac{p+1}{2} \\ \sum_{m=1}^{\frac{p+1}{2}} 2p|a'_2 - b'_2| + \sum_{m=\frac{p+1}{2}+1}^q 2p|a'_3 - b'_3| + p(q-1) \sum_{i=1}^{q-1} |10pq - 20pi| & , \frac{p+1}{2} < q \leq p + 1 \\ \sum_{m=1}^{\frac{p+1}{2}} 2p|a'_2 - b'_2| + \sum_{m=\frac{p+1}{2}+1}^{\frac{q}{2}} 2p|a'_4 - b'_4| + \sum_{m=q-\frac{p+1}{2}+1}^q 2p|a'_3 - b'_3| + p(q-1) \sum_{i=1}^{q-1} |10pq - 20pi| & , q > p + 1 \end{cases}$$



اثبات بنا به لم‌های ۱-۳ و ۲-۳، داریم

$$\sum_{\substack{e=uv \in E(G) \\ \text{and } e \text{ is horizontal edge}}} |t_e(u) - t_e(v)| = 0 \quad \text{و} \quad \sum_{\substack{e=uv \in E(G) \\ \text{and } e \text{ is vertical edge}}} |t_e(u) - t_e(v)| = p(q-1) \sum_{i=1}^{q-1} |10pq - 20pi|$$

همچنین بنا به لم ۳-۳ و نمادهای a'_i, b'_i, a_i, b_i که $1 \leq i \leq 4$ ، نتیجه دلخواه حاصل می‌گردد.

در ادامه اندیس Co-PI کلی نانولوله $TUC_4C_8(S)$ را محاسبه می‌کنیم. ابتدا مقادیر $t_e(u)$ و $t_e(v)$ برای این نانولوله محاسبه می‌کنیم که در لم‌های زیر به آن‌ها اشاره می‌کنیم.

لم ۳-۵ فرض کنید $uv = e \in E(G)$ یک یال عمودی در G' بین ردیف‌های i و $i+1$ که $1 \leq i \leq q'-1$ می‌باشد، باشد. آن‌گاه داریم: $t_e(v) = 10p'q' - 10p'i - 2p'$ و $t_e(u) = 10p'i - 5p'$.

اثبات با توجه به شکل ۳-۳، داریم: $t_e(u) = n_e(u) + m_e(u) = 4pi + (4pi + 2p(i-1)) = 10pi - 2p$ و $t_e(v) = n_e(v) + m_e(v) = 4p(k-i) + (4p(k-i) + 2p(k-i-1)) = 10pk - 10pi - 2p$

لم ۳-۶ فرض کنید $uv = e \in E(G)$ یک یال افقی در G' در ردیف i که $1 \leq i \leq q'$ باشد. آن‌گاه داریم: $t_e(u) = t_e(v) = 8p'q' - 2p' - 2q'$.

اثبات با توجه به شکل ۲-۳، داریم: $t_e(u) = n_e(u) + m_e(u) = 2pk + (6pk - 2p - 2k) = 8pk - 2p - 2k$ و $t_e(v) = n_e(v) + m_e(v) = 2pk + (6pk - 2p - 2k) = 8pk - 2p - 2k$

لم ۳-۷ فرض کنید $uv = e \in E(G)$ یک یال افقی در G' در ردیف m که $1 \leq m \leq q'$ باشد. آن‌گاه داریم:

$$t_e(u) = \begin{cases} 6q'm - 2m - p' - 2k + 5q'p' - 3q'^2 & , m \leq p' \ \& \ q' - m \leq p' - 1 \\ 2m - 2q' - 5p' + 6q'm + 5q'p' + 3mp' - 3q'^2 - 3m^2 & , m > p' \ \& \ q' - m \leq p' - 1 \\ 3m^2 + 5p'm - 4m + 4p'^2 - 10p' + 7 & , m \leq p' \ \& \ q' - m > p' - 1 \\ 8mp' - 16p' + 4p'^2 + 7 & , m > p' \ \& \ q' - m > p' - 1 \end{cases}$$

و

$$t_e(v) = \begin{cases} 5q'p' - 6q'm + 2m - p' + 3q'^2 & , m \leq p' \ \& \ q' - m \leq p' - 1 \\ 3q'^2 - 6q'm + 5q'p' + 3m^2 - 5mp' + 2p'^2 + p' & , m > p' \ \& \ q' - m \leq p' - 1 \\ 2m - 6p' + 8q'p' + 5p'm - 3m^2 + 3 & , m \leq p' \ \& \ q' - m > p' - 1 \\ 8q'p' - 4p' + 2p'^2 + 3 & , m > p' \ \& \ q' - m > p' - 1 \end{cases}$$

اثبات با توجه تشابه روش محاسبه $t_e(u)$ و $t_e(v)$ ، تنها $t_e(u)$ را محاسبه می‌کنیم. با توجه به شکل ۳-۲، داریم:

$$n_e(u) = \begin{cases} 2mp + m(m-1) + (2p-2)(k-m) - (k-m)(k-m-1) & , m \leq p \ \& \ q-m \leq p-1 \\ 4p(m-p) + 2p^2 + p(p-1) + (2p-2)(k-m) - (k-m)(k-m-1) & , m > p \ \& \ q-m \leq p-1 \\ 2mp + m(m-1) + 2(p-1)^2 - (p-1)(p-2) & , m \leq p \ \& \ q-m > p-1 \\ 4p(m-p) + 2p^2 + p(p-1) + 2(p-1)^2 - (p-1)(p-2) & , m > p \ \& \ q-m > p-1 \end{cases}$$

$$m_e(u) = \begin{cases} m(3p-1) + 2m(m-1) + (2p-3)(k-m) + (p-2)(k-m-1) - (k-m-1)(2k-2m-2) & , m \leq p \ \& \ q-m \leq p-1 \\ 4p(m-p) + p(3p-1) + 2p(p-1) + (2p-3)(k-m) + (p-2)(k-m-1) - (k-m-1)(2k-2m-2) & , m > p \ \& \ q-m \leq p-1 \\ m(3p-1) + 2m(m-1) + (2p-3)(p-1) - (p-2)^2 & , m \leq p \ \& \ q-m > p-1 \\ 4p(m-p) + p(3p-1) + 2p(p-1) + (2p-3)(p-1) - (p-2)^2 & , m > p \ \& \ q-m > p-1 \end{cases}$$

بنابراین نتیجه دلخواه با مجموع عبارات بالا بدست می‌آید.
برای سادگی محاسبات، نمادهای زیر را بکار می‌بریم.

$$\begin{aligned} a_{11} &= 6q'm - 2m - p' - 2q' + 5q'p' - 3q'^2 \\ a_{12} &= 2m - 2q' - 5p' + 6q'm + 5q'p' + 3mp' - 3q'^2 - 3m^2 \\ a_{13} &= 3m^2 + 5p'm - 4m + 4p'^2 - 10p' + 7 \\ a_{14} &= 8mp' - 16p' + 4p'^2 + 7 \\ b_{11} &= 5q'p' - 6q'm + 2m - p' + 3q'^2 \\ b_{12} &= 3q'^2 - 6q'm + 5q'p' + 3m^2 - 5mp' + 2p'^2 + p' \\ b_{13} &= 2m - 6p' + 8q'p' + 5p'm - 3m^2 + 3 \\ b_{14} &= 8q'p' - 4p' + 2p'^2 + 3 \end{aligned}$$

قضیه ۳-۸. اندیس Co-PI کلی نانولوله $TUC_4C_8(S)$ برابر است با:

$$Co-PI_T(G) = \begin{cases} \sum_{m=1}^{q'} 2p' |a_{11} - b_{11}| + 2p'(q'-1) \sum_{i=1}^{q'-1} |10p'q' - 20p'i + 3p'| & , q' \leq p' \\ \sum_{m=1}^{p'} 2p' |a_{13} - b_{13}| + \sum_{m=p+1}^{q'} 2p' |a_{12} - b_{12}| + 2p'(q'-1) \sum_{i=1}^{q'-1} |10p'q' - 20p'i + 3p'| & , p' < q' \leq 2p' \\ \sum_{m=1}^{p'} 2p' |a_{13} - b_{13}| + \sum_{m=p+1}^{q'-p'} 2p' |a_{14} - b_{14}| + \sum_{m=q-p+1}^{q'} 2p' |a_{12} - b_{12}| + 2p'(q'-1) \sum_{i=1}^{q'-1} |10p'q' - 20p'i + 3p'| & , q' > 2p' \end{cases}$$

$$\sum_{\substack{e=uv \in E(G) \\ \text{and } e \text{ is vertical edge}}} |t_e(u) - t_e(v)| = 2p'(q'-1) \sum_{i=1}^{q-1} |10p'q' - 20p'i + 3p| \quad \text{اثبات بنا به لم های ۳-۵ و ۳-۶، داریم}$$

$$\sum_{\substack{e=uv \in E(G) \\ \text{and } e \text{ is horizontal edge}}} |t_e(u) - t_e(v)| = 0 \quad \text{و همچنین بنا به لم ۳-۷ و نمادهای } a_{li} \text{ و } b_{li} \text{ که } 1 \leq i \leq 4 \text{، نتیجه دلخواه حاصل می‌گردد.}$$

در ادامه اندیس Co-PI کلی نانولوله زیگزاگ را محاسبه می‌کنیم. مقادیر $t_e(u)$ و $t_e(v)$ برای این نانولوله در مرجع [۵] محاسبه شده‌اند که در لم‌های زیر به آن‌ها اشاره می‌کنیم.

لم ۳-۹. [۵] فرض کنید $uv = e \in E(G'')$ یک یال عمودی گراف G'' بین ردیف‌های i و $i+1$ که $1 \leq i \leq q''-1$ باشد. آن‌گاه داریم $t_e(v) = 5p''q'' - 5p''i - p''$ و $t_e(u) = 5p''i - p''$

لم ۳-۱۰. [۵] فرض کنید $uv = e \in E(G'')$ یک یال عمودی گراف G'' بین ردیف‌های m باشد. آن‌گاه داریم:

$$t_e(u) = \begin{cases} q''(2m + 2p'' - q'' - 2) & , m \leq p'' \text{ \& } q'' - m \leq p'' - 1 \\ 3m - 2p'' - 3q'' + 2mp'' + 2p''q'' - (m - q'')(m - q'' + 1) - p''^2 & , m > p'' \text{ \& } q'' - m \leq p'' - 1 \\ (m + p'' - 1)^2 & , m \leq p'' \text{ \& } q'' - m > p'' - 1 \\ 4mp'' - 4p'' + 1 & , m > p'' \text{ \& } q'' - m > p'' - 1 \end{cases}$$

$$t_e(v) = \begin{cases} q''(2p'' - 2m + q'') & , m \leq p'' \text{ \& } q'' - m \leq p'' - 1 \\ (p'' - m + q'')^2 & , m > p'' \text{ \& } q'' - m \leq p'' - 1 \\ 2mp'' - m^2 - p''^2 + 4p''q'' + 1 & , m \leq p'' \text{ \& } q'' - m > p'' - 1 \\ 4p''q'' + 1 & , m > p'' \text{ \& } q'' - m > p'' - 1 \end{cases}$$

برای سادگی محاسبات، از یک سری نمادها استفاده می‌کنیم که عبارتند از:

$$a_{21} = q''(2m + 2p'' - q'' - 2)$$

$$a_{22} = 3m - 2p'' - 3q'' + 2mp'' + 2p''q'' - (m - q'')(m - q'' + 1) - p''^2$$

$$a_{23} = (m + p'' - 1)^2$$

$$a_{24} = 4mp'' - 4p'' + 1$$

$$b_{21} = q^{2p-2m+q}$$

$$b_{22} = (p-m+q)^2$$

$$b_{23} = 2mp - m^2 - p^2 + 4pq + 1$$

$$b_{24} = 4pq + 1$$

در قضیه زیر اندیس Co-PI کلی نانولوله زیگزاگ را محاسبه می‌کنیم.

قضیه ۳-۱۱. اندیس Co-PI کلی نانولوله زیگزاگ عبارت است از

$$Co-PI_T(G) = \begin{cases} \sum_{m=1}^q 2p^m |a_1 - b_1| + 2p^{q-1} \sum_{i=1}^{q-1} |5p^m q^i - 10p^m i| & , q \leq p \\ \sum_{m=1}^p 2p^m |a_3 - b_3| + \sum_{m=p+1}^q 2p^m |a_2 - b_2| + 2p^{q-1} \sum_{i=1}^{q-1} |5p^m q^i - 10p^m i| & , p < q \leq 2p \\ \sum_{m=1}^p 2p^m |a_3 - b_3| + \sum_{m=p+1}^{q-p} 2p^m |a_4 - b_4| + \sum_{m=q-p+1}^q 2p^m |a_2 - b_2| + 2p^{q-1} \sum_{i=1}^{q-1} |5p^m q^i - 10p^m i| & , q > 2p \end{cases}$$

اثبات با توجه به لم (۳-۹)، داریم

$$\sum_{\substack{e=uv \in E(G) \\ \text{and } e \text{ is vertical edge}}} |t_e(u) - t_e(v)| = 2p^{q-1} \sum_{i=1}^{q-1} |5p^m q^i - 10p^m i|$$

همچنین، با توجه به لم (۳-۱۰) و نمادهای a_{2i} و b_{2i} ، $1 \leq i \leq 4$ ، نتیجه مطلوب حاصل می‌شود.

مراجع

1. R. Todeschini, V. Consonni, and P. Gramatica, Chemometrics in QSAR, In: Brown S, Tauler R, Walczak R (eds.) Comprehensive Chemometrics, 4 (2009), 129-172.
2. H. Wiener, Structural determination of paraffin boiling points. J. Am. Chem. Soc. 69 (1947), 17-20.
3. F. Hasani, O. Khormali and A. Iranmanesh, Computation of the first vertex of co-PI index of TUC4C8(S) nanotubes, Optoelectron. Adv. Mater.-Rapid Commun., 4:4 (2010), 544-547.
4. A. Arjomandfar and O. Khormali, On edge Co-PI indices, Int.

J. Industrial Mathematics, accepted.

5. O. Halakoo, O. Khormali, A. Mahmiani, A. Iranmanesh, The new version of PI index and its computation for Zigzag nanotubes, Optoelectron. Adv. Mater.-Rapid Commun., 4:10 (2010), 1559-1561.
6. A. Mahmiani, O. Khormali, A. Iranmanesh, M. Yousefidaz, The computation of total Szeged index of TUC4C8(R) nanotube, Optoelectron. Adv. Mater.-Rapid Commun., 4:12 (2010), 2185 - 2189.

