



در مورد شاخص‌های حسابی-هندسی نانولوله‌های تک‌جداره حالت زیگ-زاگ

مهدی الیاسی^۱ | علی ایرانمنش^{۲*}

^۱گروه ریاضی، دانشکده ریاضی و کامپیوتر خوانسار، اصفهان
^۲گروه ریاضی محض، دانشکده ریاضی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

چکیده: شاخص‌های توپولوژیکی کاربردهای بسیاری در مطالعات QSAR/QSPR دارند و امکان پیش‌بینی ویژگی فیزیکی-شیمیایی بسیاری از ساختارهای شیمیایی را براساس تجزیه تحلیل آماری معتبر با استفاده از یک مجموعه داده‌های کوچک فراهم می‌کنند. در مورد نانوساختارها محاسبه‌ی بیشتر این شاخص‌ها که نخستین قدم در به‌کارگیری آن‌هاست، به‌طور معمول به‌قدری مشکل است که خود به موضوع اصلی مقالات تبدیل می‌شود و توجهی به کاربرد یا ارتباط آن‌ها با شاخص‌های ساده‌تر نمی‌شود. در این نوشتار، به بررسی شاخص‌های حسابی-هندسی و تعمیم‌های آن‌ها در ارتباط با نانولوله‌ی تک‌جداره حالت زیگ-زاگ ($TUHC_{[2p,q]}$) پرداخته و نشان می‌دهیم مقدار این خانواده از شاخص‌ها به نسبت با تعداد یال‌های گراف مولکولی آن‌ها برابر است. بنابراین، از لحاظ محاسبه ارزش چندانی ندارند. در عوض نسخه‌ی یالی شاخص‌های توپولوژیک مبتنی بر فاصله به‌عنوان جایگزین پیشنهاد می‌شود و ارتباط برخی از معروف‌ترین آن‌ها با انرژی کل مولکول $TUHC_{[2p,q]}$ مورد بررسی قرار می‌گیرد.

واژگان کلیدی: شاخص توپولوژیک، نانولوله‌ی تک‌جداره حالت زیگ-زاگ، شاخص‌های حسابی-هندسی، انرژی کل، گراف مولکول

iranmana@modares.ac.ir

مکانیکی منحصربه‌فردی هستند که باعث شده از آن‌ها در موارد متعددی مانند نمایشگرهای تشعشع میدانی، تقویت نانوچندسازه‌ها، تولید نانوحسگرها و ساخت نانوماشین‌ها استفاده شود [۵ و ۶]. QSARs/QSPRs، یا وابستگی‌های کمی ویژگی/فعالیت و ساختار، مدل‌های ریاضی هستند که هدف در آن‌ها برقراری ارتباط کمی بین ویژگی‌های ساختاری یک مولکول و ویژگی/فعالیت‌های آن است. این مدل‌ها بر این فرض بنا شده‌اند که ساختارهای مشابه ویژگی و فعالیت‌های نزدیک به هم دارند [۷ و ۸]. از این ارتباط برای پیش‌بینی فعالیت‌ها یا ویژگی ترکیبات جدید استفاده می‌شود و این امکان را فراهم می‌کند که با حداقل وقت و هزینه به‌ویژه زمانی که نمونه‌های کمی در دسترس است یا آزمایش پرخطر است، بتوان بیشترین استفاده از

۱- مقدمه

نانوساختارهای کربنی اغلب متفاوت از مواد تشکیل‌دهنده آن‌ها دارای ویژگی مکانیکی، فیزیکی و شیمیایی خاصی هستند که به علت این ویژگی، به‌طور فزاینده‌ای در علوم الکتروشیمی، جداسازی مواد، پزشکی و داروسازی مورد استفاده قرار می‌گیرند [۱ و ۲]. نانولوله‌های کربنی تک‌جداره (به‌اختصار SWNT) یک دسته‌ی مهم از نانوساختارهای کربن هستند که در سال ۱۹۹۳ توسط گروه Iijima کشف شدند [۳]. یک SWNT را می‌توان از طریق رول کردن یک ورق مستطیل شکل از گرافن (یک شبکه شش‌ضلعی از کربن) به ضخامت یک اتم به شکل یک استوانه‌ی توخالی مدل کرد [۴]. SWNT ها دارای ویژگی الکترونیکی و

مورد توجه قرار گرفته‌اند [۲۴ - ۲۰]. این دسته از شاخص‌ها، جدای از کاربرد آن‌ها، برای بسیاری از نانوساختارها حساب شده‌اند [۲۸ - ۲۵]. به تازگی، ویلچک با ترکیب تعریف شاخص حسابی-هندسی عمومی با شاخص‌های مبتنی بر فاصله، چندین شاخص توپولوژیک جدید را معرفی کرده است [۲۴]. همچنین، قابلیت کاربرد این شاخص‌های توپولوژیک جدید را در مطالعات QSPR نشان داده و از آن‌ها برای مدل‌سازی ویژگی فیزیکی و شیمیایی چندین کلاس از ترکیبات آلی استفاده کرده است. گام ابتدایی در به‌کارگیری شاخص‌های ویلچک مانند سایر شاخص‌های توپولوژیک محاسبه‌ی آن‌ها است. در مورد نانوساختارها به‌طور معمول محاسبات شاخص‌های توپولوژیک به‌قدری مشکل است که خود محاسبه و روش‌های انجام آن به موضوع اصلی مقالات تبدیل می‌شوند و کاربرد آن‌ها به‌کلی فراموش می‌شود. حتی در بحث محاسبه، ارتباط شاخص‌های جدید با شاخص‌های ساده‌تر هم لحاظ نمی‌شود. در این نوشتار به بررسی شاخص‌های حسابی-هندسی و تعمیم‌های آن‌ها در ارتباط با نانولوله تک‌جداره حالت زیگ-زاگ پرداخته و نشان می‌دهیم مقدار این خانواده از شاخص‌ها به‌تقریب با تعداد یال‌های گراف مولکولی آن‌ها برابر است. بنابراین، از لحاظ محاسبه ارزش چندانی ندارند. در عوض با الهام گرفتن از شاخص‌های مبتنی بر فاصله، شاخص‌های توپولوژیک یال محور جدیدی را معرفی کرده و مشخص می‌کنیم کدام‌یک بهترین ارتباط با انرژی نانولوله تک‌جداره حالت زیگ-زاگ را دارد. بدین ترتیب بستری نظری برای محاسبه‌ی شاخص‌های جدید و پشتوانه‌ای عملی جهت پژوهش‌های بیشتر در مورد این دسته از شاخص‌های توپولوژیک در حوزه نانو فراهم می‌آوریم.

۲- مدل‌سازی

۲-۱- شاخص توپولوژیک

در ابتدا چند مفهوم از نظریه گراف‌های شیمیایی را یادآوری می‌کنیم. در ریاضیات گرافی مانند G از دو مجموعه به نام‌های رئوس و یال‌ها تشکیل شده است که به ترتیب با $V(G)$ و $E(G)$ نشان داده می‌شوند. از لحاظ هندسی یک رأس بیانگر یک نقطه و یک یال پاره‌خطی یا کمانی بین یک جفت رأس است. در ریاضی

داده‌های فیزیکی و شیمیایی به‌دست‌آمده را برد. روش‌های ریاضی، آمار و کامپیوتر پایه‌های اصلی برقراری ارتباط‌ها در QSAR/QSPR هستند. از آنجایی که به‌طور معمول ویژگی یا فعالیت‌های فیزیکی و شیمیایی مولکول‌ها بر اساس مقادیر عددی بیان می‌شوند، یکی از مهم‌ترین مراحل در QSAR/QSPR بیان کردن ساختار مولکول بر اساس اعداد است. به این منظور از توصیف‌گرهای مولکولی استفاده می‌شود [۹]. شاخص‌های توپولوژیک دسته‌ای مهم از توصیف‌گرها هستند که بر اساس نظریه گراف‌ها تعریف می‌شوند و کاربردهای بسیاری در مطالعات QSAR/QSPR دارند [۱۰]. اگرچه تعریف یک شاخص توپولوژیک ممکن است ساده باشد ولی وقتی مولکولی با تعداد زیادی اتم، مانند یک نانولوله، مطرح باشد محاسبه‌ی ساده‌ترین شاخص‌های توپولوژیک ممکن است بسیار مشکل باشد. دیودیا نخستین شیمیدانی بود که به روش‌های محاسبه‌ی شاخص‌های توپولوژیک نانوساختارها پرداخت [۱۱ و ۱۲]. به دنبال او شیمیدان‌ها و ریاضیدانان بسیاری، محاسبه‌ی شاخص‌های توپولوژیک انواع نانولوله‌ها، نانوجنبیره‌ها و فولرن‌ها را با روش‌های متفاوت موضوع کارهای پژوهشی خود قرار دادند [۱۶-۱۳]. مهم‌تر از محاسبه‌ی انواع شاخص‌های توپولوژیک، ارتباط کمی آن‌ها با فعالیت‌ها و ویژگی نانوساختارها است که در این مورد مقالات کمی انتشار یافته‌اند. در مرجع [۱۲] موارد استفاده از چندجمله‌ای‌های هوسویا، کلوج و امگا (به‌عنوان دنباله‌هایی از شاخص‌های توپولوژیک) برای تعیین و پیش‌بینی پایداری نانوساختارها گزارش شده است. همچنین، طاهرپور و همکارانش رابطه‌ی برخی شاخص‌های توپولوژیک با قطر، حجم، انرژی مولکولی و سختی فولرن‌ها و نانولوله‌های تک‌جداره (حالت صندلی) را به دست آوردند [۱۷ و ۱۸]. نویسنده‌ی نخست این مقاله، نیز با بررسی ارتباط مهم‌ترین شاخص‌های توپولوژیک مبتنی بر فاصله‌ی نانولوله‌ی تک‌جداره حالت زیگ-زاگ با انرژی این نانوساختارها، نتیجه گرفت شاخص زگد دارای بهترین ارتباط است [۱۹]. تفاوتی که شاخص زگد با سایر شاخص‌های بررسی شده دارد این است که علیرغم مبتنی بودن بر فاصله، مجموع یال‌های گراف شیمیایی بسته می‌شود. به عبارت دیگر یال محور است. شاخص‌های حسابی-هندسی دسته مهمی از شاخص‌های توپولوژیک یال محور هستند که افزون بر شیمی، در ریاضیات نیز

$$S(G) = \frac{1}{2} \sum_{v_i \in V(G)} \sum_{v_j \in V(G)} (d_{v_i} + d_{v_j}) d(v_i, v_j)$$

$$H(G) = \frac{1}{2} \sum_{v_i \in V(G)} \sum_{v_j \in V(G), v_j \neq v_i} d(v_i, v_j)^{-1}$$

$$RCW(G) = \frac{1}{2} \sum_{v_i \in V(G)} \sum_{v_j \in V(G), v_j \neq v_i} [1 + d(G) - d(v_i, v_j)]^{-1}$$

$$RW(G) = \frac{1}{2} n(n-1)d(G) - W(G)$$

در سال‌های اخیر، خانواده‌ی جدیدی از شاخص‌های توپولوژیکی معرفی شده‌اند. این شاخص‌های جدید به شاخص‌های حسابی-هندسی (عمومی) معروف هستند و به صورت زیر تعریف می‌شوند [۲۴]:

$$GA_{general}(G) = \sum_{v_i, v_j \in E(G)} \frac{2\sqrt{f(v_i)f(v_j)}}{f(v_i) + f(v_j)}$$

که $f(v_i)$ و $v_i, v_j \in V(G)$ مقدار مثبت و منحصر به فردی است که به رأس v_i از مولکول گراف G منتسب است. نخستین شاخص حسابی-هندسی توسط ووکیسویچ و فورتولا با فرض اینکه $f(v_i)$ برابر درجه‌ی v_i است تعریف شد [۲۰]:

$$GA_1(G) = \sum_{v_i, v_j \in E(G)} \frac{2\sqrt{d_{v_i}d_{v_j}}}{d_{v_i} + d_{v_j}}$$

ماتریس مجاورت گراف مولکولی G (با n رأس) که با $A(G)$ نشان داده می‌شود، ماتریسی حقیقی، متقارن و $n \times n$ است که درایه‌ی $[a]_{ij}$ آن برابر ۱ است اگر رأس‌های v_i و v_j مجاور باشند و در غیر این صورت صفر است. پس جمع درایه‌های سطر i ام است: $d_{v_i} = \sum_{j=1}^n [a]_{ij}$. ماتریس فاصله یا وینر چنین گرافی که با $D(G)$ نشان داده می‌شود نیز، ماتریسی متقارن و $n \times n$ است که $[D]_{ij}$ برابر فاصله رأس‌های v_i و v_j است. با توجه به تعریف شاخص وینر ما این ماتریس را با $MW(G)$ نشان می‌دهیم که اگر $i \neq j$ آنگاه $[MW]_{ij} = d(v_i, v_j)$ و $[MW]_{ii} = 0$. به همین ترتیب سایر ماتریس‌ها به صورت زیر تعریف می‌شوند [۳۵]:

شیمی به هر مولکول یک گراف نسبت داده می‌شود که رأس‌های گراف، اتم‌های مولکول و یال‌های آن پیوندهای بین اتم‌ها هستند. گراف حاصل گراف مولکولی نام دارد. در اینجا ما فقط اتم‌های کربن را در نظر می‌گیریم و از بین پیوندهای بین دو اتم فقط یکی را در نظر می‌گیریم. به این ترتیب یال مضاعف نداریم. اگر بین دو رأس (اتم) u و v یالی (پیوندی) وجود داشته باشد، می‌گوییم آن‌ها باهم مجاورند و می‌نویسیم $u \sim v$ یا $uv \in E(G)$. تعداد رئوسی که با رأس v مجاورند را درجه‌ی آن نامیده و با d_v نشان می‌دهیم. مفهوم درجه در گراف ارتباط نزدیکی با ظرفیت در شیمی دارد. فاصله‌ی دو رأس u و v طول کوتاه‌ترین مسیر بین آن‌هاست که با $d(u, v)$ نمایش داده می‌شود. بیشترین فاصله در بین فاصله‌های تمام جفت رأس‌های G قطر آن نامیده می‌شود و با $d(G)$ نشان داده می‌شود.

شاخص‌های توپولوژیکی، اعداد یا دنباله‌هایی از اعدادند که به گراف مولکول‌ها نسبت داده می‌شوند و تحت هر برچسب‌گذاری از رئوس آن گراف ثابت هستند. به همین دلیل، آن‌ها را در ریاضیات گراف-پایا می‌نامند. فرض کنیم G گراف مولکولی با n رأس باشد که رئوس آن را با v_1, v_2, \dots, v_n برچسب‌گذاری کرده‌ایم. وینر در سال ۱۹۴۷ مجموع فاصله بین تمام رئوس یک گراف را به عنوان نخستین شاخص توپولوژیکی معرفی کرد [۲۹]. در واقع این شاخص، که امروزه به افتخار وی شاخص وینر نامیده می‌شود، برابر است با

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{v_i \in V(G)} \sum_{v_j \in V(G)} d(v_i, v_j). \quad (1)$$

شاخص‌های توپولوژیکی مهم دیگری که بر اساس فاصله بین رئوس گراف با الهام گرفتن از شاخص وینر تعریف شده‌اند عبارتند از شاخص ابروینر $WW(G)$ [۳۰]، شاخص شولتس $S(G)$ [۳۱]، شاخص هراری $H(G)$ [۳۲]، شاخص متقابل وینر-مکمل $RCW(G)$ [۳۳] و شاخص معکوس وینر $RW(G)$ [۳۴]. تعریف ریاضی شاخص‌های بالا به صورت زیر است:

$$WW(G) = \frac{1}{4} \sum_{v_i \in V(G)} \sum_{v_j \in V(G)} [d(v_i, v_j) + d(v_i, v_j)^2]$$

گراف دوبخشی است. به عبارت ساده‌تر می‌توان نقاط شکل را طوری با دو رنگ سیاه و سفید رنگ‌آمیزی کرد که هیچ دو رأس مجاوری یک‌رنگ نباشند. شش شاخص توپولوژیکی که در بالا از آن‌ها نام برده شد، تابعی برحسب p و q می‌شوند. فرض کنیم φ تابعی باشد که روی مجموعه

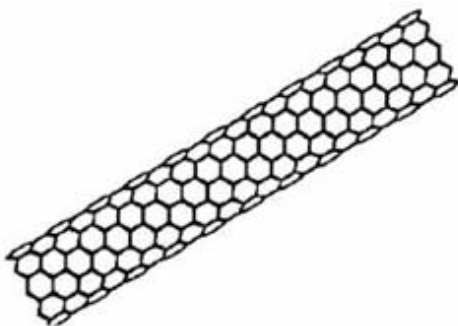
$$\{d(v_i, v_j) | v_i, v_j \in V(G)\}$$

تعریف شده است به طوری که

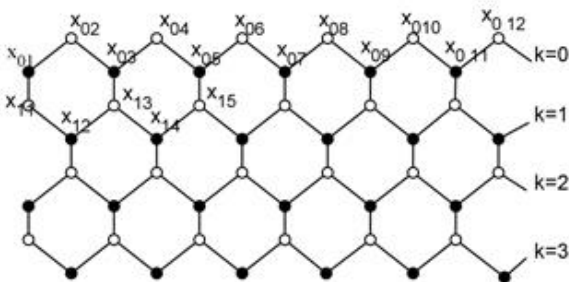
$$[M]_{ij} = \begin{cases} \varphi(d(v_i, v_j)) & i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases}$$

به‌عنوان مثال برای ابر وینر داریم $\varphi(z) = \frac{1}{2}(z^2 + z)$ و برای شاخص هراری $\varphi(z) = \frac{1}{z}$. برای محاسبه‌ی درایه‌های ماتریس‌هایی که در بخش قبل معرفی شدند به لم زیر احتیاج داریم که از مقالات [۱۴، ۱۳، ۱۹ و ۳۵] نویسنده‌ی نخست مقاله حاضر و همکاران استخراج شده است:

لم ۱. فرض کنیم k سطری از شکل [۲] باشد. برای $0 \leq k < p$ قرار می‌دهیم:



شکل ۱: یک نانولوله $TUHC_6[20, q]$



شکل ۲: شکل گسترده نانولوله

$$[MWW]_{ij} = \frac{1}{2} [d(v_i, v_j) + d(v_i, v_j)^2]$$

$$[MS(G)]_{ij} = (d_{v_i} + d_{v_j}) d(v_i, v_j)$$

$$[MH]_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{d(v_i, v_j)}, & i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases}$$

$$[MRCW]_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{1 + d(G) - d(v_i, v_j)}, & i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases}$$

$$[MRW]_{ij} = \begin{cases} d(G) - d(v_i, v_j), & i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases}$$

فرض کنیم $M(G)$ یکی از ماتریس‌های بالا باشد. ویلچک عملگر جمع راسی برای رأس v_i را با $VS(M(G))_i$ نشان داد و برابر جمع سطر i ام ماتریس $M(G)$ تعریف کرد [۲۴]:

$$VS(M(G))_i = VS(M(G))(v_i) = \sum_{j=1}^n [M]_{ij}$$

با توجه به مشاهدات بالا و شاخص حسابی-هندسی عمومی تعریف زیر که متعلق به ویلچک است را بیان می‌کنیم:

$$GA_6(G) = \sum_{v_i, v_j \in E(G)} \frac{2 \sqrt{VS(M(G))_i VS(M(G))_j}}{VS(M(G))_i + VS(M(G))_j}$$

در اینجا از نماد GA_6 در حالت کلی استفاده شده است و ما برای تمایز بین شاخص‌های فوق از GA_{6RW} ، GA_{6WW} ، GA_{6W} ، ... و GA_{6RW} به ترتیب برای ماتریس‌های وینر، ابر وینر، ... و شاخص معکوس وینر استفاده می‌کنیم.

۲-۲- نانولوله‌ی تک‌جداره زیگ-زاگ $TUHC_6[2p, q]$

در این مقاله از نمادهای مرجع [۱۱] پیروی می‌کنیم. منظور از $T = T[2p, q] = TUHC_6[2p, q]$ یک نانولوله‌ی تک‌جداره به قطر $2p$ و طول q است (شکل ۱ ببینید). درواقع اگر نانولوله را باز کنیم، یک گراف ساخته‌شده از شش ضلعی‌ها به دست می‌آید (شکل ۲). در هر ردیف افقی $2p$ اتم کربن (رأس) وجود دارد و تعداد این ردیف‌ها q تا است پس گراف حاصل $2pq$ رأس دارد. برای نام‌گذاری، رأس x_{ij} را اتم واقع بر ردیف i ام که در این ردیف از سمت چپ در جایگاه j ام است در نظر می‌گیریم به طوری که $1 \leq j \leq 2p$ و $0 \leq i \leq q - 1$ توجه داریم شکل حاصل یک

$$\frac{2\sqrt{VS(M(T))(x_{0,1})VS(M(T))(x_{0,2})}}{VS(M(T))(x_{0,1}) + VS(M(T))(x_{0,2})} = \frac{2\sqrt{g(0)f(0)}}{g(0) + f(0)}$$

به همین ترتیب

$$\frac{2\sqrt{VS(M(T))(x_{0,1})VS(M(T))(x_{0,2p})}}{VS(M(T))(x_{0,1}) + VS(M(T))(x_{0,2p})} = \frac{2\sqrt{g(0)f(0)}}{g(0) + f(0)}$$

با جمع تساوی‌های بالا داریم:

$$\sum_{uv \in 0, \dots, p} \frac{2\sqrt{VS(M(T))(u)VS(M(T))(v)}}{VS(M(T))(u) + VS(M(T))(v)} = 2p \frac{2\sqrt{g(0)f(0)}}{g(0) + f(0)}$$

به همین ترتیب برای هر j که $1 \leq j \leq q-1$ داریم:

$$\sum_{uv \in j, \dots, q-j} \frac{2\sqrt{VS(M(T))(u)VS(M(T))(v)}}{VS(M(T))(u) + VS(M(T))(v)} = 2p \frac{2\sqrt{g(j)f(j)}}{g(j) + f(j)} \quad (4)$$

با جمع‌بندی روی همه j ها به دست می‌آوریم:

$$\sum_{uv \in \text{یال‌های}} \frac{2\sqrt{VS(M(T))(u)VS(M(T))(v)}}{VS(M(T))(u) + VS(M(T))(v)} = 2p \sum_{j=0}^{q-1} \frac{2\sqrt{g(j)f(j)}}{g(j) + f(j)}$$

به همین ترتیب

$$\sum_{uv \in \text{یال‌های}} \frac{2\sqrt{VS(M(T))(u)VS(M(T))(v)}}{VS(M(T))(u) + VS(M(T))(v)} = p \sum_{j=0}^{q-2} \frac{2\sqrt{g(j)f(j+1)}}{g(j) + f(j+1)} \quad (5)$$

در نتیجه از رابطه‌های (4) و (5) داریم:

$$GA_6(T) = p \sum_{j=0}^{q-2} \frac{2\sqrt{f(j+1)g(j)}}{f(j+1) + g(j)} + 2p \sum_{j=0}^{q-1} \frac{2\sqrt{f(j)g(j)}}{f(j) + g(j)} \quad (6)$$

$$= p \sum_{j=0}^{q-2} \frac{2\sqrt{f(j+1)f(q-j+1)}}{f(j+1) + f(q-j+1)} + 2p \sum_{j=0}^{q-1} \frac{2\sqrt{f(j)f(q-j+1)}}{f(j) + f(q-j+1)}$$

حال با توجه به رابطه‌ی (6) می‌توان مقدار $GA_6(T)$ مانند شاخص‌های توپولوژیک متفاوت به دست آورد که به این منظور محاسبه w_k و b_k کلید حل مسئله است.

$$b_k = 2 \sum_{j=k+2}^p \varphi(k+j-1) + \varphi(k+p) + (k+1)\varphi(2k) + k\varphi(2k-1) \quad (2)$$

$$w_k = 2 \sum_{j=k+2}^p \varphi(k+j-1) + \varphi(k+p) + (k+1)\varphi(2k) + k\varphi(2k+1) \quad (3)$$

برای حالتی که $k \geq p$ قرار می‌دهیم:

$$b_k = p\varphi(2k) + p\varphi(2k-1),$$

$$w_k = p\varphi(2k) + p\varphi(2k+1).$$

با توجه به تعریف‌های بالا تعریف می‌کنیم:

$$f(j) = \sum_{r=0}^{q-j-1} w_r + \sum_{r=1}^j b_r$$

$$g(j) = \sum_{r=0}^{q-j-1} b_r + \sum_{r=1}^j w_r$$

در این صورت:

حالت ۱: اگر $0 \leq j \leq q-1$ و j فرد باشد، آنگاه برای $k = 1, 2, \dots, p$ داریم:

$$VS(M(T))(x_{j,2k-1}) = f(j),$$

$$VS(M(T))(x_{j,2k}) = g(j).$$

حالت ۲: اگر $0 \leq j \leq q-1$ و j زوج باشد، آنگاه برای $k = 1, 2, \dots, p$ داریم:

$$VS(M(T))(x_{j,2k-1}) = g(j)$$

$$VS(M(T))(x_{j,2k}) = f(j).$$

در گراف T دو نوع یال داریم: یال‌های افقی و عمودی. برای سطر $j = 0$ داریم:

جدول ۱: تقسیم GA_{6W} ، GA_{6H} و GA_{6WH} بر تعداد یال‌ها $|E|$ در برخی نانولوله‌های زیگ زاگ

$T[2p, q]$	$GA_{6W}/ E $	$GA_{6WH}/ E $	$GA_{6H}/ E $
$T[8,3]$	-.۹۹۹۲	-.۹۹۷۶	-.۹۹۹۱
$T[8,8]$	-.۹۹۹۲	-.۹۹۷۱	-.۹۹۹۵
$T[8,10]$	-.۹۹۹۴	-.۹۹۷۹	-.۹۹۹۶
$T[10,5]$	-.۹۹۹۳	-.۹۹۷۶	-.۹۹۹۴
$T[10,10]$	-.۹۹۹۵	-.۹۹۸۱	-.۹۹۹۷
$T[40,10]$	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۸	-.۹۹۹۸
$T[40,80]$	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۹
$T[200,50]$	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۹
$T[200,100]$	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۹
$T[200,200]$	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۹	-.۹۹۹۹
$T[4000,50]$	۱/۰۰۰۰	۱/۰۰۰۰	۱/۰۰۰۰

پس تعداد یال‌های گراف، یک کران بالا برای $GA_{general}(G)$ است. در بررسی این شاخص‌ها برای نانولوله‌ی زیگ زاگ با استفاده از روش بالا ما به نتایج جالبی رسیدیم. محاسبات عددی (جدول ۱) نشان می‌دهد:

$$GA_{general}(T[p, q]) \geq 0.99|E(T[p, q])|$$

بنابراین، در مورد شاخص‌های بالا

$$GA_{general}(G) \approx |E(T[2p, q])| = 3pq - p$$

برای اثبات ریاضی این موضوع همان شاخص نظیر وینر حالت $p \geq q$ را در نظر می‌گیریم. بنابر معادلات (۲) و (۳)

$$f(j) = \left(-\frac{1}{3}\right)q + p^2q - pq + 2pj + pq^2 + 2pj^2 - q^2j + qj^2 - 2pqj + \left(\frac{1}{3}\right)q^3$$

$$g(j) = \left(\frac{2}{3}\right)q + p^2q - pq + 2pj - q^2 + 2qj + pq^2 + 2pj^2 - q^2j + qj^2 - 2pqj + \left(\frac{1}{3}\right)q^3$$

حال تابع

$$h(j) = \frac{2\sqrt{g(j)f(j)}}{g(j) + f(j)}$$

را در نظر می‌گیریم. این تابع در بازه $[\frac{q}{2} - \frac{1}{2}, q]$ صعودی است و در بازه $[2, \frac{q}{2} - \frac{1}{2}]$ نزولی است. از طرفی $h(q) \geq 0.99$ (با به توان رساندن و ساده کردن) معادل با این است که:

$$-8.98q^2 + .2388pq^2 - 17.8806q^3 + .4776pq^5$$

$$+ .9552p^2q^2 + .9552pq^3 + .7164p^4q^2$$

$$+ 1.4328p^3q^3 + 1.194p^2q^4$$

$$+ 1.4328p^3q^2 + 2.1492p^2q^3$$

$$+ 1.194pq^4 - 8.7413q^4 + .2388q^5$$

$$+ 0.0796q^6 > 0$$

به‌عنوان مثال اگر شاخص وینر مورد نظر باشد با جایگذاری $\phi(z) = z$ در رابطه‌های مربوط به w_k و b_k به دست می‌آوریم:

$$b_k = \begin{cases} (p+k)^2 - k & \text{اگر } 0 \leq k < p \\ p(4k-1) & \text{اگر } k \geq p. \end{cases}$$

$$w_k = \begin{cases} (p+k)^2 + k & \text{اگر } 0 \leq k < p \\ p(4k+1) & \text{اگر } k \geq p. \end{cases}$$

۲-۳- انرژی کل مولکول

در شیمی کوانتومی، انرژی‌های متفاوتی از جمله انرژی جنبشی الکترون‌ها، انرژی جنبشی هسته، جذب اتمی الکترون، انفجار هسته‌ای، انفجار الکترونی الکترون، انرژی الکترونیک، انرژی متقابل کوولب، انرژی متقابل مبادله، انرژی کل یک مولکول و انرژی مداری مورد مطالعه قرار می‌گیرند. ساختار و پایداری یک مولکول با استفاده از کل انرژی E مولکول تعیین می‌شود. در مرجع [۱۹] انرژی کل $TUHC_6[2p, q]$ به ازای p و q های متفاوت برای بررسی ارتباط آن‌ها با شاخص‌های توپولوژیک متفاوت حساب شده است. در اینجا از داده‌های آن مقاله برای مقایسه شاخص‌های توپولوژیک بیان شده در این پژوهش استفاده می‌کنیم.

۳- مدل سازی (برای کارهای تجربی)

با توجه به نامساوی حسابی-هندسی در ریاضیات، اگر a, b دو عدد حقیقی مثبت باشند، آنگاه $2\sqrt{ab} \leq a + b$ و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر $a=b$ در نتیجه

$$GA_{general}(G) = \sum_{v_i, v_j \in E(G)} \frac{2\sqrt{f(v_i)f(v_j)}}{f(v_i) + f(v_j)} \leq \sum_{v_i, v_j \in E(G)} 1 \leq |E(G)|$$

دیگری است که در سال ۱۹۹۴ معرفی شد [۳۸]. برای یال $e = uv$ از گراف G فرض کنیم $n_u(e)$ تعداد رأس‌هایی از G باشد که به رأس u نزدیک‌ترند تا رأس v . در این صورت شاخص زگد برابر است با

$$S_z(G) = \sum_{uv \in E(G)} n_u(e) n_v(e)$$

یک واقعیت جالب این است که اگر G یک درخت باشد، یعنی دور نداشته باشد، آنگاه شاخص زگد با شاخص وینر برابر است. شاخص زگد نیز دارای اهمیت بسیاری در مسائل ریاضی شیمی و شاخص‌های توپولوژیک است [۳۹]. همچنین، سختی محاسبه‌ی آن به‌ویژه برای نانوساختارها انگیزه‌ی بیشتری به بسیاری از پژوهشگران در شاخه‌ی ریاضی برای حساب کردن این شاخص داده است [۱۳].

دوم از لحاظ نظری. باید تا می‌توانیم نقش تعداد یال‌ها را در محاسبه کم کنیم. تقسیم بر تعداد یال‌ها ساده‌ترین ایده برای این منظور است.

برای نشان دادن ارتباط شاخص‌های جدید و ویژگی‌های نانوساختارها انرژی کل مولکول‌های $TUHC_6[2p, q]$ را در نظر می‌گیریم.

۳- روش آزمایش

در مرجع [۱۹] انرژی کل $TUHC_6[2p, q]$ به ازای p و q های متفاوت گزارش شده که ما در اینجا از آن استفاده می‌کنیم. برای محاسبه ET ‌های متفاوت با توجه به روشی که در بخش‌های پیشین بیان شد مقدار $f(v_i)$ ‌ها قابل محاسبه هستند. در واقع

$$ET(T) = \frac{1}{3pq - p} \left(p \sum_{j=0}^{q-2} f(j+1)g(j) + 2p \sum_{j=0}^{q-1} f(j)g(j) \right)$$

یک برنامه کامپیوتری به زبان MAPLE تهیه شده که مقادیر p و q را به‌عنوان ورودی دریافت و مقدار ET را حساب می‌کند. اطلاعات به‌دست آمده در نمودار آمده است.

چون $p \geq q$ کافی است در جملات مثبت بالا به جای p مقدار q را قرار داده و نشان دهیم نامساوی برقرار است. یعنی

$$-8.98 - 17.6418q^3 + 3.9004q^6 - 6.8309q^4 + 5.014q^5 > 0$$

با استفاده از مشتق‌گیری و تعیین نقاط اکسترمم چندجمله‌ای سمت چپ بالا که عبارتند از 0.5 و 0.350 (به‌طور تقریبی) نتیجه می‌گیریم در بازه $[2, +\infty)$ نامساوی‌های بالا برقرارند. پس $h(q) \geq 0.99$. به نحو مشابه می‌توان دید $h(1) \geq 0.99$. لذا $h(j) \geq 0.99$. به همین ترتیب در رابطه (۳) داریم

$$\frac{2\sqrt{g(j)f(j+1)}}{g(j) + f(j+1)} > 0.99$$

در نتیجه

$$A = 2p \sum_{j=0}^{q-1} \frac{2\sqrt{g(j)f(j)}}{g(j) + f(j)} + p \sum_{j=0}^{q-2} \frac{2\sqrt{g(j)f(j+1)}}{g(j) + f(j+1)} > 2pq(0.99) + p(q-1)(0.99) = (3pq - p)(0.99) = |E(T[2p, q])|(0.99)$$

پس پیشنهاد می‌شود، از تعریف زیر استفاده شود:

$$ET(G) = \frac{1}{|E(G)|} \sum_{v_i, v_j \in E(G)} f(v_i)f(v_j)$$

این تعریف از دو جنبه دارای اهمیت است.

نخست از لحاظ تاریخی. لازم به یادآوری است شاخص بالابان J در سال ۱۹۸۲ به‌صورت زیر معرفی شد [۳۶]:

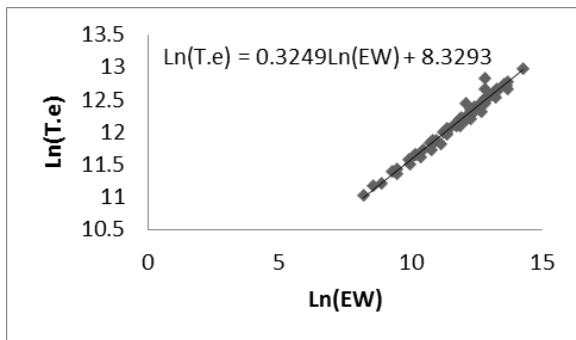
$$J(G) = \frac{|E(G)|}{|E(G)| - |V(G)| + 1} \sum_{v_i, v_j \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{D_i D_j}}$$

که در آن D_i برابر مجموع فاصله رأس v_i تا بقیه رأس‌هاست. این شاخص دارای کاربردهای بسیاری در حوزه‌ی شاخص‌های توپولوژیک است [۳۷]. شاخص زگد نیز شاخص بسیار مهم

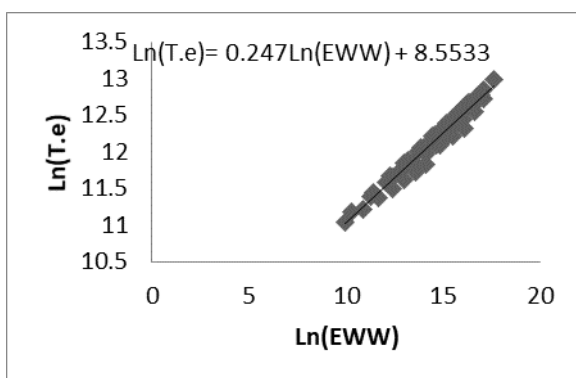
سپس، با استفاده از نرم افزار SPSS ارتباط بین تک تک شاخص‌ها با انرژی کل به دست آمده است.

۴- نتایج و بحث

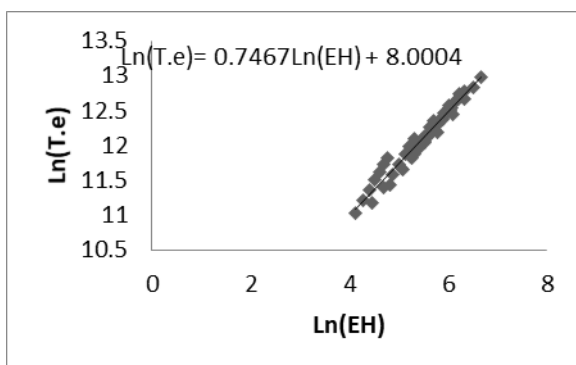
رابطه‌ی بین انرژی کل (که با T.e نشان می‌دهیم) و لگاریتم ET شاخص‌های متفاوت عبارتند از:



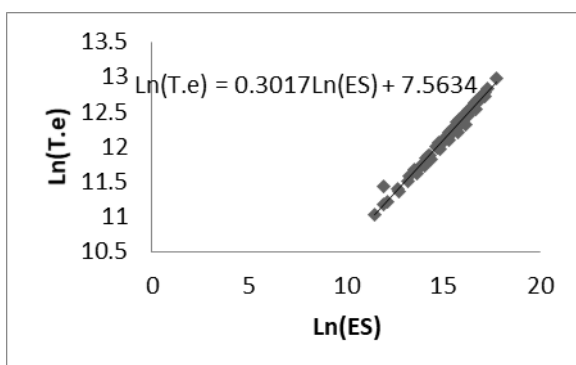
نمودار ۱: رابطه بین لگاریتم انرژی کل برحسب کالری بر مول و لگاریتم وینر یالی.



نمودار ۲: رابطه بین لگاریتم انرژی کل برحسب کالری بر مول و لگاریتم ابر وینر یالی.



نمودار ۳: رابطه بین لگاریتم انرژی کل برحسب کالری بر مول و لگاریتم هراری یالی.



$$\text{Ln}(T.e) = 0.325\text{Ln}(EW) + 8.329, \quad R \text{ Square} = 0.973$$

$$\text{Ln}(T.e) = 0.247\text{Ln}(EWW) + 8.553, \quad R \text{ Square} = 0.967$$

$$\text{Ln}(T.e) = 0.302\text{Ln}(ES) + 7.563, \quad R \text{ Square} = 0.985$$

$$\text{Ln}(T.e) = 0.747\text{Ln}(EH) + 8, \quad R \text{ Square} = 0.964$$

$$\text{Ln}(T.e) = 0.459\text{Ln}(ERCW) + 9.914, \quad R \text{ Square} = 0.477$$

$$\text{Ln}(T.e) = 0.27\text{Ln}(5ERW) + 8.853, \quad R \text{ Square} = 0.944$$

با توجه به مربع خطا (R Square) می‌توان گفت نسخه‌ی یالی شاخص شولتز (ES) بهترین ارتباط را با انرژی کل نانولوله دارد. همچنین به غیر از نسخه‌ی یالی شاخص متقابل وینر-مکمل (ERCW)، نسخه‌ی یالی سایر شاخص‌های مورد بحث ارتباط قابل قبولی با انرژی کل مولکول نانولوله $TUHC_6[2p, q]$ دارند.

۵- نتیجه گیری

اگرچه شاخص‌های حسابی-هندسی و تعمیم‌های آن‌ها به طور قابل ملاحظه‌ای در مباحث QSAR/QSPR مورد استفاده قرار می‌گیرند، اما نتایج این تحقیق نشان می‌دهد در مورد نانولوله‌های $TUHC_6[2p, q]$ این شاخص‌ها به تقریب برابر تعداد یال‌ها هستند. پس با وجود اهمیت و گاه پیچیدگی محاسبه‌ی شاخص‌های حسابی-هندسی و تعمیم‌های آن‌ها، در مورد این دسته از نانولوله‌ها اهمیت چندانی ندارد. البته محاسبات نشان می‌دهند در مورد سایر نانولوله‌ها هم وضعیت به طور مشابه است. در عوض نسخه‌ی یالی شاخص‌های توپولوژیک پیشنهاد می‌شود. نتایج نشان می‌دهند بیشتر این شاخص‌ها ارتباط بسیار خوبی با انرژی کل نانولوله‌های تک‌جداره حالت زیگ-زاگ دارند.

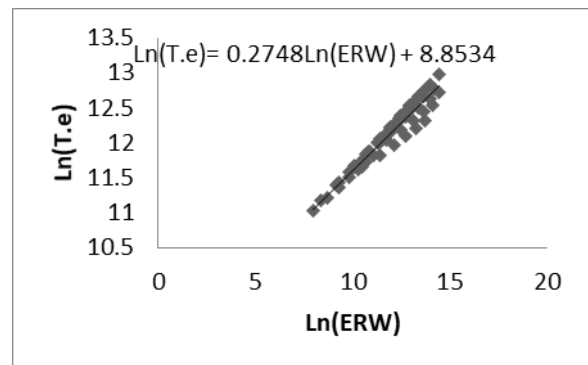

```

u:=u+b(i,p)
end do;
return(u);
end proc;
g:=proc(j3,p,q)
return(f(q-j3-1,p,q));
end proc;
abd:=proc(j,p,q)
return(f(j,p,q)*g(j,p,q));
end proc;
abd1:=proc(j,p,q)
return(f(j+1,p,q)*g(j,p,q));
end proc;
Top_Edg:=proc(p,q)
local cc,c,cc1;
cc:=0;for c from 0 to q-1 do cc:=abd(c,p,q)+cc;end
do:cc1:=0;for c from 0 to q-2 do cc1:=abd1(c,p,q)+cc1;end
do:
return(2*p*cc/(3*p*q-p)+p*cc1/(3*p*q-p));
end proc;
> Top_In(5,8);    (مقدار شاخص برای p=5,q=8) >5559480/23
    
```

مراجع

- [1] M. Endo, S. Iijima, M. S. Dresselhaus (Eds.), "Carbon nanotubes," Pergamon, 1996.
- [2] M. Meyyappan, "Carbon Nanotubes: Science and Applications," CRC Press, Boca Raton, 2004.
- [3] S. Iijima, T. Ichihashi, "Single-Shell Carbon Nanotubes of 1-nm Diameter," Nature, 363, 603-605, 1993.
- [4] S. Iijima, "Carbon nanotubes: past, present, and future," Physica B, 323, 1-5, 2002.
- [5] T. Yamamoto, K. Watanabe, E. R. Hernandez, "Mechanical properties, thermal stability and heat transport in carbon nanotubes RID G-8978-2011 RID B-1285-2008," Carbon Nanotubes: Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications, 111, 165-194, 2008.
- [6] P. Avouris, R. Martel, "Progress in carbon nanotube electronics and photonics," MRS BULLETIN, 35, 306-313, 2010.

نمودار ۴: رابطه بین لگاریتم انرژی کل برحسب کالری بر مول و لگاریتم شولتز یالی.



نمودار ۵: رابطه بین لگاریتم انرژی کل برحسب کالری بر مول و لگاریتم وینر معکوس یالی.

پیوست

در این قسمت یک برنامه به زبان میپل برای محاسبه‌ی شاخص‌های توپولوژیک و نسخه یالی آن‌ها ارائه می‌شود. در سطر اول تابع Φ تعریف می‌شود که همان‌طور که در بخش سوم گفته شد با توجه به آن شاخص موردنظر مشخص می‌شود. در زیر داریم $\Phi(x) = x$ که شاخص وینر و وینر یالی خروجی‌اند. لازم به ذکر است قطر گراف $TUHC_6[2p, q]$ اگر $p \geq q$ برابر $p + q - 1$ و در غیر این صورت برابر $2q - 1$ است.

```

> phi:=x->x;
b:=proc(t,p)
if t=0 then
return(2*sum(phi(jj-1),jj=2..p)+phi(p));
elif t>0 and t<p then
return((t+1)*phi(2*t)+t*phi(2*t-1)+
2*sum(phi(t+jj-1),jj=t+2..p)+phi(t+p));
elif t>p or t=p then return( (p)*phi(2*t)+p*phi(2*t-1));
end if;
end proc;
w:=proc(tt,p)
if tt=0 then
return(2*sum(phi(jj1-1),jj1=2..p)+phi(p));
elif tt>0 and tt<p then
return((tt+1)*phi(2*tt)+tt*phi(2*tt+1)+
2*sum(phi(tt+jj1-1),jj1=tt+2..p)+phi(tt+p));
elif tt>p or tt=p then return(
(p)*phi(2*tt)+p*phi(2*tt+1));
end if;
end proc;
f:=proc(j2,p,q) local u,i;
u:=0;
for i from 0 to q-j2-1 do
u:=u+w(i,p);
end do;
for i from 1 to j2 do
    
```

fullerenes,” Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures, 16, 196–205, 2008.

[18] A. Taherpour, E. Mohammadinasab, “Topological relationship between wiener, Padmaker-Ivan, and Szeged indices and energy and electric moments in armchair polyhex nanotubes with the same circumference and varying lengths,” Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures, 18(1), 72–88, 2010.

[19] M. Eliasi, “Topological indices and total energy of zig-zag polyhex nanotubes,” Current Nanoscience, 9, 502 – 513, 2013.

[20] D. Vukicevic, B. Furtula, “Topological index based on the ratios of geometrical and arithmetical means of end–vertex degrees of edges,” J. Math. Chem. 46, 1369–1376, 2009.

[21] K. C. Das, I. Gutman, B. Furtula, “Survey on geometric-arithmetic indices of graphs,” MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 65, 595-644, 2011.

[22] K. C. Das, N. Trinajstić, “Comparison between geometric-arithmetic indices,” Croat. Chim. Acta, 85, 353-357, 2012.

[23] A. Graovac, M. Ghorbani, M. A. Hosseinzadeh, “Computing fifth geometric-arithmetic index for nanostar dendrimers,” J. Math. Nanosci. 1, 33-42, 2011.

[24] P. Wilczek, “new geometric-arithmetic indices,” MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 79, 5-54, 2018.

[25] S. Moradi, S. Baba-Rahim, “Two types of geometric-arithmetic indices of nanotubes and nanotori,” MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 69, 165-174, 2013.

[7] M. Dehmer, K. Varmuza, D. Bonchev, “Statistical modelling of molecular descriptors in QSAR/QSPR,” Volume 2 atthias;Varmuza, Kurt - John Wiley, 2012.

[8] K. Roy, S. Kar, R.N. Das, “A primer on QSAR/QSPR modeling: Fundamental Concepts,” New York, Springer-Verlag, 2015.

[9] H. Timmerman, R. Todeschini, V. Consonni, R. Mannhold, H. Kubinyi, “Handbook of Molecular Descriptors,” Weinheim, Wiley-VCH, 2002.

[10] J. Devillers, A. T. Balaban, “Topological indices and related descriptors in QSAR and QSPR,” Gordon and Breach Science Publishers, Singapore. 1999.

[11] P. E. John, M. V. Diudea, “Wiener index of zig-zag Polyhex nanotubes,” CROATICA CHEMICA ACTA, 77, 127-132, 2004.

[12] M. V. Diudea, C. L. Nagy, “Periodic nanostructures,” Springer, Dordrecht, 2007.

[13] M. Eliasi, B. Taeri, “Szeged and Balaban indices of zigzag polyhex nanotubes,” MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 56, 383-402, 2006.

[14] M. Eliasi, B. Taeri, “Balaban index of zigzag polyhex nanotorus,” J. Compute. Theor. Nanosci., 4, 1174-1178, 2006.

[15] A. Heydari, “Hyper Wiener index of C4C8(S) nanotubes,” Curr. Nanosci. 6(2), 137–140, 2010.

[16] A. R. Ashrafi, F. Cataldo, A. Iranmanesh, O. Ori (Eds.), “Topological modelling of nanostructures and extended systems,” Springer, 2013.

[17] A. Taherpour, “Quantitative relationship study of mechanical structure properties of empty

- [35] M. Eliasi, B. Taeri, "Distance in zig-zag polyhex nanotubes," *Current Nanoscience*, 5(4), 514-518, 2009.
- [36] A. T. Balaban, "Highly discriminating distance based numerical descriptor," *Chem. Phys. Lett.* 89, 399-404, 1982.
- [37] M. Knora, R. Skrekovski, A. Tepeh, "Mathematical aspects of Balaban index," *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 79, 685-716, 2018.
- [38] I. Gutman, "A formula for the Wiener number of trees and its extension to graphs containing cycles," *Graph Theory Notes*, 27, 9-15, 1994.
- [39] P. V. Khadikar, S. Karmarkar, V. K. Agrawal, J. Singh, A. Shrivastava, I. Lukovits, M. V. Diudea, "Szeged index-Applications for drug modelling," *Lett. Drug. Des. Discov*, 2, 606-624, 2005.
- [26] S. Chen, W. Liu, "The Geometric-Arithmetic Index of Nanotubes," *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 7, 1993-1995, 2010.
- [27] N. Soleimani, M. J. Nikmehr, H. Agha Tavallae, "Computation of the different topological indices of nanostructures," *J. Natn. Sci. Foundation Sri Lanka*, 43 (2), 127 - 133, 2015.
- [28] M. R. Farahani, "Some connectivity indices and zagreb index of polyhex nanotubes," *Acta Chim Slov.* 59(4), 779-83, 2012.
- [29] H. Wiener, "Structural determination of paraffin boiling points," *J. Am. Chem. Soc.*, 69, 17-20, 1947.
- [30] D. J. Klein, I. Lukovits, I. Gutman, "On the definition of the hyper-Wiener index for cycle-containing structures," *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 35, 50-52, 1995.
- [31] H. P. Schultz, "Topological Organic Chemistry. 1. Graph Theory and Topological Indices of Alkanes," *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 29, 227-228, 1989.
- [32] D. Plavsic, S. Nikolic, N. Trinajstic, Z. Mihalic, "On the Harary index for the characterization of chemical graphs," *J. Math. Chem.* 22, 235-250, 1993.
- [33] D. Janezic, A. Milicevic, S. Nikolić, N. Trinajstic, "Graph theoretical matrices in chemistry," in: *Mathematical Chemistry Monographs*, vol. 3, University of Kragujevac, Kragujevac, 3, (a) p. 62-64, (b) p. 79-80, (c) p. 80-81, 2007.
- [34] A. T. Balaban, D. Mills, O. Ivanciuc, S. C. Basak, "Reverse Wiener indices," *Croat. Chem. Acta*, 73(4), 923-941, 2000.



On geometric-arithmetic indices of single-walled zig-zag nanotubes

M. Eliasi¹ | A. Iranmanesh^{2,*}

¹Department of mathematics, Khansar Faculty of Mathematics and Computer Science, Isfahan

²Department of Pure Mathematics, Faculty of Mathematical Sciences, Tarbiat Modares University

Abstract: Topological indices have significant applications in QSAR/QSPR studies, which allow the prediction of physical and chemical properties for many chemical structures based on statically validated analysis starting from a small data set. With regard to nano structures, the problem is that the calculation of an index, which is the first step towards its application, usually is an immensely complicated subject. Consequently, computing the value of the index, will be the central issue rather than considering its application or comparing with other easy-computing indices. In this paper, the arithmetic-geometric indices and their generalizations in relation to the single-walled zig-zag nanotubes (TUHC₆ [2p, q]) have been investigated. Our results proved that the values of these families of indices are approximately equal to the number of the edges of their molecular graphs. From this point of view, the computation of such indices, for single-walled Zig-Zag nanotubes, is worthless. Instead, an edge version of distance-based topological indices has been proposed. We found and compared relationships between some of these new indices and the total energy of TUHC₆ [2p, q] nanotubes.

Keywords: Topological index, Single-walled zig-zag nanotube, Arithmetic-geometric indices, Total energy, Molecular graph