

多壁碳纳米管的基于度的拓扑指数

彭波, 高炜

(云南师范大学 信息学院, 云南 昆明 650500)

摘要:利用边集合划分方法,对多壁碳纳米管 $MWCNA(m_1, m_2, \dots, m_i; n)$ 和 $MWCNB(n_1, n_2, \dots, n_i; m)$ 的化学键集合分别进行分类. 不同类型的化学键,其两端原子在分子图中的度值不同. 结合拓扑指数的定义,得到若干基于度的拓扑指数.

关键词:理论化学;分子图;多壁碳纳米管;拓扑指数

中图分类号:O157.6 **文献标识码:**A **文章编号:**1674-5639(2016)06-0066-06

DOI:10.14091/j.cnki.kmxyxb.2016.06.015

Degree-based Topological Indices of Multi-walled Carbon Nanotubes

PENG Bo, GAO Wei

(College of Information, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan, China 650500)

Abstract: In terms of edge set dividing trick, the chemical bond set of $MWCNA(m_1, m_2, \dots, m_i; n)$ and $MWCNB(n_1, n_2, \dots, n_i; m)$ are divided into several subsets, respectively. The degree values of atoms at the two ends of chemical bond from different subsets are distinguishing. Combining with the definitions of degree-based topological indices, the expression of several degree-based topological indices is determined.

Key words: theory chemical; molecular graph; multi-walled carbon nanotubes; topological index

早期的化学实验表明,化合物的化学性质和它的结构有密切的关系. 受此结果的启发,于是广大化学研究者就通过研究物质的化学结构来确定它的特性. 由此,理论化学也受到了化学、生物学、医学、材料学等众多学科的重视,同时其结果被应用到各项工程领域中. 其计算模型大致如下:把每个原子用顶点来表示,原子之间的化学键用边来表示,整个化学结构就是一个图,这样的图称为分子图. 设 G 是一个分子图,它的原子集合和化学键集合分别用顶点集 $V(G)$ 和边集 $E(G)$ 来表示. 相关研究内容可参考文献[1~10].

设 $e = uv$ 是图 G 的一条化学键(边). 用 $d(v)$ 表示顶点 v 的度. 下面介绍几类常见的基于度的指数或多项式.

广义 Randic 指数:

$$R_k(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u)d(v))^k.$$

广义和连通度:

$$\chi_k(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u) + d(v))^k.$$

调和指数:

$$H(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{2}{d(u) + d(v)}.$$

收稿日期:2016-06-30

基金项目:国家自然科学基金青年基金资助项目“图的调和染色及相关边划分问题研究”(11401519).

作者简介:彭波(1972—),男,云南昆明人,助理研究员,主要从事智能计算研究;高炜(1981—),男,浙江绍兴,副教授,博士,主要从事理论化学、机器学习和图论的研究.

调和多项式:

$$H(G, x) = \sum_{uv \in E(G)} 2x^{d(u)+d(v)-1}.$$

广义 Zagreb 指数:

$$M_{\{t_1, t_2\}}(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^{t_1} d(v)^{t_2} + d(u)^{t_2} d(v)^{t_1}).$$

第一 Zagreb 多项式:

$$M_1(G, x) = \sum_{uv \in E(G)} x^{d(u)+d(v)}.$$

第二 Zagreb 多项式:

$$M_2(G, x) = \sum_{uv \in E(G)} x^{d(u)d(v)}.$$

第三 Zagreb 多项式:

$$M_3(G, x) = \sum_{uv \in E(G)} x^{|d(u)-d(v|}.$$

第三 Zagreb 指数:

$$M_3(G) = \sum_{uv \in E(G)} |d(u) - d(v)|.$$

第一乘法 Zagreb 指数:

$$PM_1(G) = \prod_{e=uv \in E(G)} (d(u) + d(v)).$$

第二乘法 Zagreb 指数:

$$PM_2(G) = \prod_{e=uv \in E(G)} (d(u)d(v)).$$

第一重定义 Zagreb 指数:

$$\text{Re } Ze_1(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{d(u) + d(v)}{d(u)d(v)}.$$

第二重定义 Zagreb 指数:

$$\text{Re } Ze_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{d(u)d(v)}{d(u) + d(v)}.$$

第三重定义 Zagreb 指数:

$$\text{Re } Ze_3(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u) + d(v))d(u)d(v).$$

F 指数:

$$F(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^2 + d(v)^2).$$

M - 多项式:

$$M(G, x, y) = \sum_{\delta \leq i \leq j \leq \Delta} m_{ij}(G) x^i y^j.$$

广义 ABC 指数:

$$ABC_\lambda(G) = \sum_{uv \in E(G)} \left(\frac{d(u) + d(v) - 2}{d(u)d(v)} \right)^{-\lambda}.$$

增强 Zagreb 指数:

$$AZI(G) = \sum_{uv \in E(G)} \left(\frac{d(u)d(v)}{d(u) + d(v) - 2} \right)^3.$$

弱化倒数 Randic 指数:

$$RRR(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{(d(u) - 1)(d(v) - 1)}.$$

弱化第二 Zagreb 指数:

$$RM_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u) - 1)(d(v) - 1).$$

在上述表达式中 $m_{ij}(G) = |\{e = uv \mid d(u) = i, d(v) = j\}|$, t_1 和 t_2 为任意非负整数, k 是任意实数, $\lambda < 0$ 为实数.

1 多壁碳纳米管

碳纳米管是具有圆柱形纳米结构的碳的同素异形体. 这些圆柱状碳分子具有不同寻常的性质, 可应用于纳米技术、电子、光学和材料科学等领域. 纳米管是富勒烯结构家族的成员, 其名字是从它们长的空心结构得出. 并且, 碳纳米管可为无机和有机反应的无金属催化提供技术支持.

多壁结构的碳纳米管在 1991 年开始被陆续发现. 多壁碳纳米管是几个同心的石墨烯圆柱体, 相比较而言, 单壁纳米管则是单个圆柱体. 碳纳米管可广泛应用于诸多工程领域, 因而在不同的研究领域, 如化学物理和人工材料, 该结构已引起了相关人员的极大关注.

考虑从正六边形网格中切割得到的 $m_k \times n$ 四边形截面 $P_{m_k}^n$, 其中顶端和底端各有 $m_k (k = 1, 2, \dots, t)$ 个六边形, 侧边各有 n 个六边形(如图 1 所示). 对每个 $k = 1, 2, \dots, t$, 将 $P_{m_k}^n$ 的两个侧边粘合, 则得到多壁碳纳米管 $MWCNA(m_1, m_2, \dots, m_t; n)$, 其中 $3 \leq m_1 < m_2 < \dots < m_t$ 且 $n \geq 2$.

设对任意 $k = 1, 2, \dots, t, n_k$ 为偶数. 考虑从正六边形网格中切割得到的 $n_k \times m$ 四边形截面 $P_{n_k}^m$, 其中顶端和底端各有 $n_k (k = 1, 2, \dots, t)$ 个六边形, 侧边各有 m 个六边形(如图 2 所示). 对每个 $k = 1, 2, \dots, t$, 将 $P_{n_k}^m$ 的两个侧边粘合, 则得到多壁碳纳米管 $MWCNB(n_1, n_2, \dots, n_t; m)$, 其中 $4 \leq n_1 < n_2 < \dots < n_t$ 且 $m \geq 2$.

本文将给出上述两类多壁碳纳米管的若干重要基于度的拓扑指数. 为方便表示, 记 $G_1 = MWCNA(m_1, m_2, \dots, m_t; n), G_2 = MWCNB(n_1, n_2, \dots, n_t; m)$.

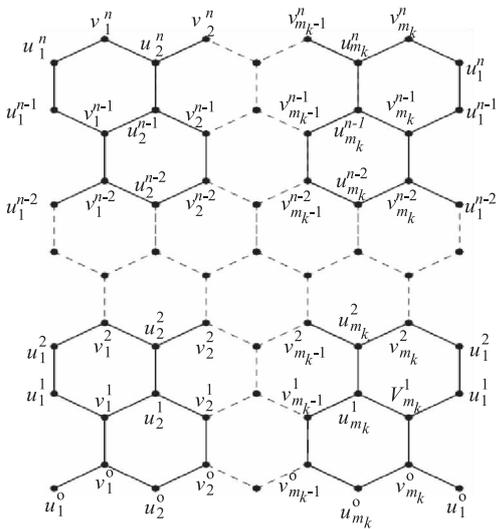


图1 $m_k \times n$ 四边形截面 $P_{m_k}^n$

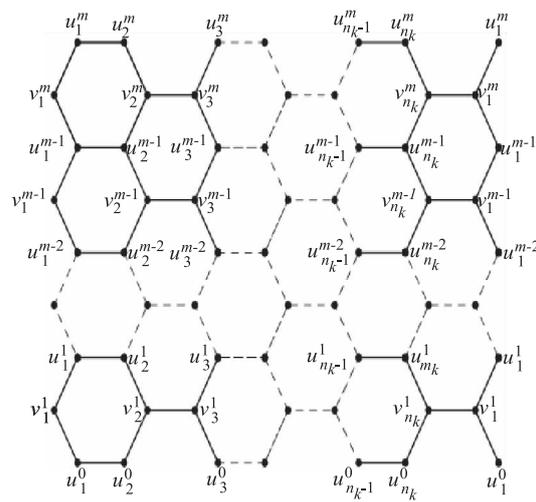


图2 $m_k \times n$ 四边形截面 $P_{n_k}^m$

2 主要计算结果

对于第一类多壁碳纳米管 $G_1 = MWCNA(m_1, m_2, \dots, m_t; n)$, 可知 $|V(G_1)| = 2(n+1) \sum_{k=1}^t m_k, |E(G_1)| = (3n+2) \sum_{k=1}^t m_k$. 其图中顶点的度为 2 或 3, 且有 $2 \sum_{k=1}^t m_k$ 个 2 度顶点, $2n \sum_{k=1}^t m_k$ 个 3 度顶点. 此外, 其边集合可划分为两个子集:

- 1) $e = uv; d(u) = 2, d(v) = 3$, 且这样的边 e 共有 $4 \sum_{k=1}^t m_k$ 条;

2) $e = uv: d(u) = d(v) = 3$, 且这样的边 e 共有 $(3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k$ 条.

根据基于度的拓扑指数的定义, 可得到如下计算结论:

$$\begin{aligned}
 R_k(G_1) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k \times 6^k + (3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k \times 9^k, \\
 \chi_k(G_1) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k \times 5^k + (3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k \times 6^k, \\
 H(G_1) &= (n + \frac{14}{15}) \sum_{k=1}^l m_k, \\
 H(G_1, x) &= 8 \sum_{k=1}^l m_k \times x^4 + (6n - 4) \sum_{k=1}^l m_k \times x^5, \\
 M_{\{t_1, t_2\}}(G_1) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k \times (2^{t_1} 3^{t_2} + 2^{t_2} 3^{t_1}) + (3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k \times 3^{t_1+t_2+1}, \\
 M_1(G_1, x) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k \times x^5 + (3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k \times x^6; \\
 M_2(G_1, x) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k \times x^6 + (3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k \times x^9; \\
 M_3(G_1, x) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k \times x + (3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k; \\
 M_3(G_1) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k. \\
 PM_1(G_1) &= 5^4 \sum_{k=1}^l m_k 6^{(3n-2) \sum_{k=1}^l m_k}; \\
 PM_2(G_1) &= 6^4 \sum_{k=1}^l m_k 9^{(3n-2) \sum_{k=1}^l m_k}. \\
 Re Ze_1(G_1) &= (2n - 2) \sum_{k=1}^l m_k; \\
 Re Ze_2(G_1) &= (\frac{9n}{2} + \frac{9}{5}) \sum_{k=1}^l m_k; \\
 Re Ze_3(G_1) &= (162n + 12) \sum_{k=1}^l m_k. \\
 F(G_1) &= (54n + 16) \sum_{k=1}^l m_k, \\
 M(G_1, x, y) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k \times x^2 y^3 + (3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k \times x^3 y^3, \\
 ABC_\lambda(G_1) &= 4 \sum_{k=1}^l m_k \times (\frac{1}{2})^{-\lambda} + (3n - 2) \sum_{k=1}^l m_k \times (\frac{4}{9})^{-\lambda}, \\
 AZI(G_1) &= (\frac{2 \cdot 187}{64} n + \frac{295}{32}) \sum_{k=1}^l m_k. \\
 RRR(G_1) &= (6n - 4 + 4\sqrt{2}) \sum_{k=1}^l m_k, \\
 RM_2(G_1) &= 12n \sum_{k=1}^l m_k.
 \end{aligned}$$

对于第二类多壁碳纳米管 $G_2 = MWCNB(n_1, n_2, \dots, n_l; m)$, 可知 $|V(G_2)| = (2m + 1) \sum_{k=1}^l n_k$, $|E(G_2)| = (3m + \frac{1}{2}) \sum_{k=1}^l n_k$. 其图中顶点的度为 2 或 3, 且有 $2 \sum_{k=1}^l n_k$ 个 2 度顶点, $(2m - 1) \sum_{k=1}^l n_k$ 个 3 度顶点. 此外, 其边集合可划分为 3 个子集:

1) $e = uv: d(u) = d(v) = 2$, 且这样的边 e 共有 $\sum_{k=1}^l n_k$ 条;

2) $e = uv: d(u) = 2, d(v) = 3$, 且这样的边 e 共有 $2 \sum_{k=1}^l n_k$ 条;

3) $e = uv: d(u) = d(v) = 3$, 且这样的边 e 共有 $(3m - \frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k$ 条.

根据基于度的拓扑指数的定义, 可得到如下计算结论:

$$R_k(G_2) = \sum_{k=1}^l n_k \times 4^k + 2 \sum_{k=1}^l n_k \times 6^k + (3m - \frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times 9^k,$$

$$\chi_k(G_2) = \sum_{k=1}^l n_k \times 4^k + 2 \sum_{k=1}^l n_k \times 5^k + (3m - \frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times 6^k,$$

$$H(G_2) = (m - \frac{7}{15}) \sum_{k=1}^l n_k,$$

$$H(G_2, x) = 2 \sum_{k=1}^l n_k \times x^3 + 4 \sum_{k=1}^l n_k \times x^4 + (6m - 5) \sum_{k=1}^l n_k \times x^5,$$

$$M_{\lfloor t_1, t_2 \rfloor}(G_2) = \sum_{k=1}^l n_k \times 2^{t_1+t_2+1} + 2 \sum_{k=1}^l n_k \times (2^{t_1}3^{t_2} + 2^{t_2}3^{t_1}) + (3m - \frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times 3^{t_1+t_2+1}.$$

$$M_1(G_2, x) = \sum_{k=1}^l n_k \times x^4 + 2 \sum_{k=1}^l n_k \times x^5 + (3m - \frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times x^6;$$

$$M_2(G_2, x) = \sum_{k=1}^l n_k \times x^4 + 2 \sum_{k=1}^l n_k \times x^6 + (3m - \frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times x^9;$$

$$M_3(G_2, x) = 2 \sum_{k=1}^l n_k \times x + (3m - \frac{3}{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times 6^k;$$

$$M_3(G_2) = 2 \sum_{k=1}^l n_k.$$

$$PM_1(G_2) = 4 \sum_{k=1}^l n_k 5^2 \sum_{k=1}^l n_k 6^{(3m-\frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k};$$

$$PM_2(G_2) = 4 \sum_{k=1}^l n_k 6^2 \sum_{k=1}^l n_k 9^{(3m-\frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k}.$$

$$\text{Re } Ze_1(G_2) = (2m + 1) \sum_{k=1}^l n_k \times 6^k;$$

$$\text{Re } Ze_2(G_2) = (\frac{9}{2}m - \frac{7}{20}) \sum_{k=1}^l n_k;$$

$$\text{Re } Ze_3(G_2) = (162m - 59) \sum_{k=1}^l n_k.$$

$$F(G_2) = (54m - 11) \sum_{k=1}^l n_k,$$

$$M(G_2, x, y) = \sum_{k=1}^l n_k \times x^2 y^2 + 2 \sum_{k=1}^l n_k \times x^2 y^3 + (3m - \frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times x^3 y^3,$$

$$ABC_\lambda(G_2) = 3 \sum_{k=1}^l n_k \times (\frac{1}{2})^{-\lambda} + (3m - \frac{5}{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times (\frac{4}{9})^{-\lambda},$$

$$AZI(G_2) = (\frac{2187}{64}m - \frac{573}{128}) \sum_{k=1}^l n_k.$$

$$RRR(G_2) = (6m - 4 + 2\sqrt{2}) \sum_{k=1}^l n_k \times 6^k,$$

$$RM_2(G_2) = (12m - 5) \sum_{k=1}^l n_k.$$

3 小结

从分子图化学键集合的划分出发,利用拓扑指数的定义得到两类多壁碳纳米管几个重要拓扑指数的精确计算公式.这些拓扑指数能从不同的角度反映化合物的化学、生物、药物等特性,因此本文所得到的结果对多壁碳纳米管在生物、化学和材料学中的应用具有指导作用.

[参考文献]

- [1]高云,高炜.修改的维纳指数和修改的超维纳指数的若干结果[J].生物物理学,2015,3(3):59-66.
- [2]许冬冬,高炜.超维纳指数的若干结果[J].云南师范大学学报(自然科学版),2014,34(5):46-50.
- [3]宴立,高炜.关于哈拉里指数和多重维纳指数的注记[J].云南师范大学学报(自然科学版),2016,36(2):38-41.
- [4]彭波,高炜.几类分子结构的基于度的指数[J].数学理论与应用,2016,36(1):81-87.
- [5]高炜,梁立.给定参数下图的广义哈拉里指数[J].新乡学院学报,2016,33(33):1-3.
- [6]GAO W, SIDDQUI M K, IMRAN M, et al. Forgotten topological index of chemical structure in drugs[J]. Saudi Pharmaceutical Journal, 2016, 24: 258-264.
- [7]GAO W, FARAHANI M R, SHI L. Forgotten topological index of some drug structures[J]. Acta Medica Mediterranea, 2016, 32: 579-585.
- [8]GAO W, SHI L, FARAHANI M R. Distance-based indices for some families of dendrimer nanostars[J]. IAENG International Journal of Applied Mathematics, 2016, 46(2): 168-186.
- [9]GAO W, WANG W F. The eccentric connectivity polynomial of two classes of nanotubes[J]. Chaos, Solitons and Fractals, 2016, 89: 290-294.
- [10]GAO W. A note on general third geometric-arithmetic index of special chemical molecular structures[J]. 数学研究通讯, 2016, 32(2): 131-141.

