

# 锯齿状边缘突起与星状纳米管融合的拓扑指数计算

陈玉华, 高 炜

(云南师范大学 信息学院, 云南 昆明 650500)

**摘要:** 化学图论作为数学与化学的交叉学科, 已成为理论化学的重要研究内容. 锯齿状边缘突起和形状结构是纳米材料的两类常见结构, 对它们的化学性质进行研究有助于科学家了解与此类结构相关材料的基本特征. 因此, 通过顶点度计算和边集合划分的方法, 研究了锯齿状边缘突起与星状纳米管融合的化学结构, 并给出部分拓扑指数的具体计算公式. 所得结果在材料科学中有潜在的工程应用价值.

**关键词:** 理论化学; 分子图; 拓扑指数; 星状纳米管

**中图分类号:** O157.6 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674 - 5639 (2018) 03 - 0054 - 03

**DOI:** 10.14091/j.cnki.kmxyxb.2018.03.010

## Topological Index Computation of Zigzag Edge Coronoid Fused with Starphene Nanotubes

CHEN Yuhua, GAO Wei

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

**Abstract:** As an interdisciplinary discipline of mathematics and chemistry, chemical graph theory has become an important content of theoretical chemistry. Zigzag edge coronoid and starphene structures are two common types of nanomaterials, and studies of their chemical properties help scientists understand the basic characteristics of materials associated with such structures. In this paper, using the tricks of vertex degree calculation and edge set division, the chemical structure of zigzag edge coronoid fused with starphene nanotubes is studied. The formulas for the calculation of some topological indices are given. The results have potential engineering applications in materials science.

**Key words:** theoretical chemistry; molecular graph; topological index; starphene nanotube

## 0 引言

作为理论化学的重要组成部分, 化学图论的基本思想是对分子结构进行图建模, 用图论的方法解决化学领域中的理论问题. 具体的做法是: 将分子结构中的原子用图中的顶点表示, 将原子之间的化学键用顶点之间的边表示, 这样生成的图称为分子图. 通过定义在图上的拓扑指标计算, 从而对原化合物进行分析. 设  $G = (V(G), E(G))$  为分子图, 其图上的拓扑化学指数可理解成映射  $f: G \rightarrow \mathbb{R}^+$ , 即将每一个分子结构映射成对应的实数轴上的点. 历史上被定义的著名指数有维纳指数、离心连通指数、算术几何指数、图能量等. 相关的研究可参见文献[1 ~ 10]. 在下文中, 用  $d(v)$  表示顶点  $v$  的度, 并且设  $S(v) = \sum_{uv \in E(G)} d(u)$ .

本文所涉及的指数如下:

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

广义 Zagreb 指数 
$$M_{[t_1, t_2]}(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^{t_1} d(v)^{t_2} + d(u)^{t_2} d(v)^{t_1}),$$

其中  $t_1$  和  $t_2$  是任意两个非负整数.

第 3 Zagreb 指数 (也称为不均衡指数) 
$$M_3(G) = \sum_{uv \in E(G)} |d(u) - d(v)|.$$

收稿日期: 2018 - 03 - 13

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (11761083).

作者简介: 陈玉华 (1973—), 女, 云南丽江人, 讲师, 主要从事组合数学、图论算法研究.

第1、第2和第3修改的Zagreb指数分别为:

$$\begin{aligned}\text{ReZe}_1(G) &= \sum_{uv \in E(G)} \frac{d(u) + d(v)}{d(u)d(v)}; \\ \text{ReZe}_2(G) &= \sum_{uv \in E(G)} \frac{d(u)d(v)}{d(u) + d(v)}; \\ \text{ReZe}_3(G) &= \sum_{uv \in E(G)} (d(u) + d(v))d(u)d(v).\end{aligned}$$

$M$ -多项式

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

其中  $m_{ij}(G)$  表示  $d(u) = i$  且  $d(v) = j$  的边  $e = uv$  的数量.

广义原子键连通指数

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

其中  $\lambda < 0$  为整数.

退化倒数 Randić指数

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

退化第2 Zagreb指数

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

第1类乘法原子键连通指数

$$ABC_1 \Pi(G) = \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{d(u) + d(v) - 2}{d(u)d(v)}}.$$

第1类乘法几何算术指数

$$GA_1 \Pi(G) = \prod_{uv \in E(G)} \frac{2\sqrt{d(u)d(v)}}{d(u) + d(v)}.$$

第1类乘法算术几何指数

$$AG_1 \Pi(G) = \prod_{uv \in E(G)} \frac{d(u) + d(v)}{2\sqrt{d(u)d(v)}}.$$

第4类乘法原子键连通指数

$$ABC_4 \Pi(G) = \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{S(u) + S(v) - 2}{S(u)S(v)}}.$$

本文考虑的是文献[11]提出的锯齿状边缘突起与星状纳米管融合的化学结构, 记为  $ZCS(k, l, m)$ , 且只考虑  $k = l = m \geq 4$  的情况.

## 1 主要计算结果

本文利用边集合分割方法, 即根据一条边中两个顶点的度, 将整个边集合分成若干个子类. 通过对  $ZCS(k, l, m)$  ( $k = l = m \geq 4$  的情况) 的分析, 可知具体3类划分如下:

- 1)  $d(u) = d(v) = 2$ , 共有  $6(k + l + m) - 30$  条边;
- 2)  $d(u) = 2, d(v) = 3$ , 共有  $12(k + l + m) - 84$  条边;
- 3)  $d(u) = d(v) = 3$ , 共有  $21(k + l + m) - 39$  条边.

进而再根据拓扑指数的定义可得如下结果:

$$\begin{aligned}H(ZCS(k, l, m)) &= \frac{74}{5}(k + l + m) - \frac{308}{5}, \\ M_{[t_1, t_2]}(ZCS(k, l, m)) &= (6(k + l + m) - 30)2^{t_1+t_2+1} + (12(k + l + m) - 84)(2^{t_1}3^{t_2} + 2^{t_2}3^{t_1}) \\ &\quad + (21(k + l + m) - 39)3^{t_1+t_2+1}, \\ M_3(ZCS(k, l, m)) &= 12(k + l + m) - 84, \\ \text{ReZe}_1(ZCS(k, l, m)) &= 30(k + l + m) - 126, \\ \text{ReZe}_2(ZCS(k, l, m)) &= \frac{519}{10}(k + l + m) - \frac{1893}{10}, \\ \text{ReZe}_3(ZCS(k, l, m)) &= 1590(k + l + m) - 5106, \\ M(ZCS(k, l, m), x, y) &= (6(k + l + m) - 30)x^2y^2 + (12(k + l + m) - 84)x^2y^3 \\ &\quad + (21(k + l + m) - 39)x^3y^3, \\ ABC_\lambda(ZCS(k, l, m)) &= (18(k + l + m) - 114)\left(\frac{1}{2}\right)^{-\lambda} + (21(k + l + m) - 39)\left(\frac{4}{9}\right)^{-\lambda},\end{aligned}$$

$$RRR(ZCS(k, l, m)) = (12(k + l + m) - 84) \sqrt{2} + (48(k + l + m) - 108),$$

$$RM_2(ZCS(k, l, m)) = 114(k + l + m) - 354.$$

$$ABC_1 \prod (ZCS(k, l, m)) = \left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^{18(k+l+m)-114} \left(\frac{2}{3}\right)^{21(k+l+m)-39},$$

$$GA_1 \prod (ZCS(k, l, m)) = \left(\frac{2\sqrt{6}}{5}\right)^{12(k+l+m)-84},$$

$$AG_1 \prod (ZCS(k, l, m)) = \left(\frac{5}{2\sqrt{6}}\right)^{12(k+l+m)-84}.$$

根据  $S(u)$  和  $S(v)$  的不同,将  $ZCS(k, l, m)$  ( $k = l = m \geq 4$  的情况) 的边集合分成如下 7 类:

- 1)  $S(u) = S(v) = 4$ , 共有 6 条边;
- 2)  $S(u) = 4, S(v) = 5$ , 共有 12 条边;
- 3)  $S(u) = S(v) = 5$ , 共有  $6(k + l + m) - 48$  条边;
- 4)  $S(u) = 5, S(v) = 8$ , 共有  $12(k + l + m) - 84$  条边;
- 5)  $S(u) = S(v) = 8$ , 共有  $6(k + l + m) - 54$  条边;
- 6)  $S(u) = 8, S(v) = 9$ , 共有  $12(k + l + m) - 60$  条边;
- 7)  $S(u) = S(v) = 9$ , 共有  $3(k + l + m) - 75$  条边.

结合第 4 类乘法原子键连通指数的定义可得到:

$$ABC_4 H(ZCS(k, l, m)) = \left(\sqrt{\frac{3}{8}}\right)^6 \left(\sqrt{\frac{7}{20}}\right)^{12} \left(\sqrt{\frac{8}{25}}\right)^{6(k+l+m)-48} \left(\sqrt{\frac{11}{40}}\right)^{12(k+l+m)-84} \\ \left(\sqrt{\frac{7}{32}}\right)^{6(k+l+m)-54} \left(\sqrt{\frac{5}{24}}\right)^{12(k+l+m)-60} \left(\sqrt{\frac{16}{81}}\right)^{3(k+l+m)-75}.$$

## 2 小结

本文通过对锯齿状边缘突起与星状纳米管融合的每对顶点  $d(u)$  和  $d(v)$  的值计算得到部分重要的拓扑指数的具体计算公式. 同时通过  $S(u)$  和  $S(v)$  的计算, 得到此类化学结构的第 4 类乘法原子键连通指数的具体计算公式.

### [参考文献]

- [1] 高伟, 梁立, 徐天伟. 树状纳米星的修改的 Szeged 指数 [J]. 西南大学学报 (自然科学版), 2016, 38 (11): 95-99.
- [2] 高伟, 贾志洋. 特殊纳米管的顶点带权维纳数 [J]. 黑龙江大学自然科学学报, 2016, 33 (3): 308-314.
- [3] GAO W, WANG W F, JAMIL M K, et al. Generalized atom-bond connectivity analysis of several chemical molecular graphs [J]. Bulgarian Chemical Communications, 2016, 48 (3): 543-549.
- [4] 彭波, 高伟. 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] GAO W, YAN L, SHI L. Generalized Zagreb index of polyomino chains and nanotubes [J]. Optoelectronics and Advanced Materials-Rapid Communications, 2017, 11 (2): 119-124.
- [6] GAO W, SIDDIQUI 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, FARAHANI M R, WANG S H, et al. On the edge-version atom-bond connectivity and geometric arithmetic indices of certain graph operations [J]. Applied Mathematics and Computation, 2017, 308: 11-17.
- [11] AKHTAR S, IMRAN M. On molecular topological properties of benzenoid structures [J]. Canadian Journal of Chemistry, 2016, 94 (8): 687-698.