昆明学院学报　2017, 39(3):95~98　ISSN 1674-5639　CN 53-1211/G4
Journal of Kunming University

纳米管结 $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$ 的拓扑指数计算

何国英[1],高　炜[2]
(1. 云南师范大学 经济与管理学院,云南 昆明 650500;2. 云南师范大学 信息学院,云南 昆明 650500)

摘要:在纳米科学中,材料的性质与其分子结构相关,可通过拓扑指数计算得到其物理化学性质. 作为一种常见结构,纳米管结已被广泛应用于材料科学及相关工程中. 因此,有必要计算它对应分子结构的化学指数,结果给出纳米管结 $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$的几类基于度的化学指数的精确计算公式. 作为补充结论,研究了H-环烃纳米片$[4n,2m]$的第四原子键连通指数. 所得理论结果在材料制造工程中具有潜在的应用价值.

关键词:理论材料;分子图;拓扑指数;纳米管结
中图分类号:O157.6　**文献标识码**:A　**文章编号**:1674-5639(2017)03-0095-04
DOI:10.14091/j.cnki.kmxyxb.2017.03.022

Topological Indices Computation of Nanotubes Junction $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$

HE Guoying[1], GAO Wei[2]
(1. College of Economy and Management, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan, China　650500;
2. College of Information, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan, China　650500)

Abstract: In the nato science, the material properties are related with its molecular structure and the physico-chemical properties are acquired by the topological index computation. Nanotubes junction, as a common structure in nano materials, is widely applied in material sciences and its engineering applications. It's necessary to calculate the topological indices of its molecular structure. The results showed the exact formulations for calculating the degree-based topological indices of nanotubes junction $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$. As the supplement, we obtain the fourth atom-bond connectivity index of H-naphtalenic nanosheet $[4n,2m]$. The theoretical results have potential applications in material manufacturing engineering.

Key words: theoretical material; molecular graph; topological index; nanotubes junction

随着化学实验条件的改善和生物化学技术的发现及应用,越来越多的化合物和药物孕育而生. 近年来,每年新发现的化合物、材料和药物都曾两位数增长. 如此大量的新化学结构,都要鉴定它们的物理、化学和生物特征,将使化学和制药领域的研究者工作量大大增加. 如何精确、有效、快捷地知道新物质的特性已成为目前科研工作者遇到的一个难题.

前期大量实验得出一个共识,化合物和药物的部分特性(如:熔点、沸点、毒性)和化学分子结构有密切的关联. 因此,研究者在分子结构图上定义了一些指标,通过计算指数来得知它们的化学性质. 该方法大大减轻了化合物和药物特性鉴定的工作量,即在不做实验的基础上,直接通过计算即可知道这些化学物质的特性,从而弥补了化学实验的缺陷.

其计算模型是把材料分子结构中的每个原子用顶点来表示,原子之间的化学键用边来表示,整个材料的化学分子结构就是一个分子图. 用 $G=(V(G),E(G))$来表示一个分子图,其中 $V(G)$和 $E(G)$分别表示分子

收稿日期:2017-04-06
基金项目:国家自然科学青年基金资助项目(11401519).
作者简介:何国英(1986—),女,云南大理人,讲师,硕士,主要从事材料科学及经济政策分析研究;高炜(1981—),男,浙江绍兴人,副教授,博士,主要从事理论化学、机器学习和图论研究.

图的顶点集合和边集合. 近年来,该领域的部分研究结果见文献[1-9].

设 $e=uv$ 是分子图 G 的一条边,$d(v)$ 是分子图顶点 v 的度. 文中几类常见的基于度的指数或多项式可参考文献[10]. Ghorbani 等人[11]引入了第四原子键连通指数如下:

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

其中对任意 $v\in V(G)$,$S(v)=\sum_{uv\in E(G)}d(u)$.

本文的贡献在于给出纳米管结 $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$ 的若干拓扑指数计算公式. 作为补充,得到了 H-环烃纳米片 $[4n,2m]$ 的第四原子键连通指数的计算公式.

1 主要计算结果

作为纳米材料中的一类重要结构,纳米管结 $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$ 是通过圈 C_n 上的两类图操作(Leapfrog Le 和 Capra Ca)而形成的,该两类操作的举例可见图 1 和图 2.

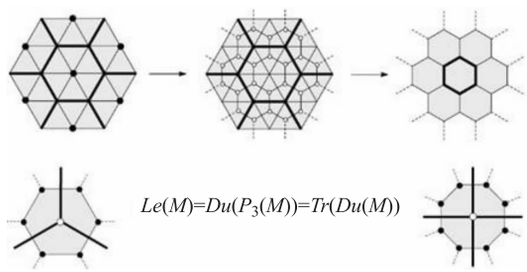

图1 图操作Leapfrog $Le(C_6)$

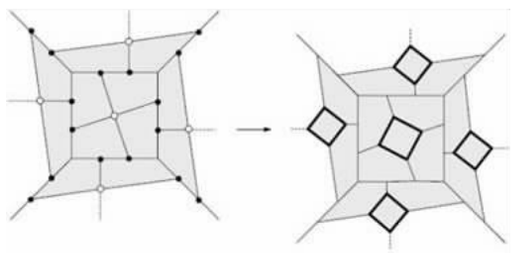

图2 图操作Capra $Ca(C_4)$

设 m,n,p 均为正整数,作为 $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$ 的基本单位,$Cas(C)$-$CaR(C)[1,1,1]$ 的结构如图 3 所示.

纳米管结 $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$ 的二维格可见图 4.

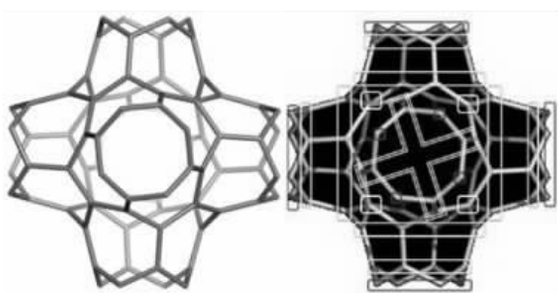

图3 纳米管结$Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$的基本单位$Cas(C)$-$CaR(C)[1,1,1]$

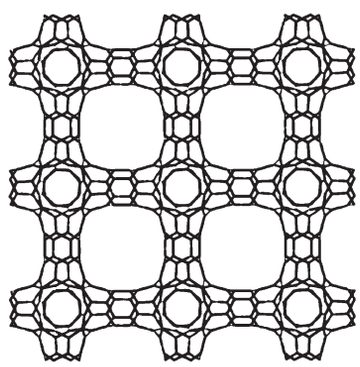

图4 纳米管结$Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$的二维格

通过计算可知,纳米管结 $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$ 共有 $80mnp$ 个顶点(原子)和 $220mnp-4mn-4mp-4np+4m+4n+4p-4$ 条边(化学键). 更进一步,其顶点集合可分成 2 个子集,其中度为 2 的顶点有 $8(mp+np+mn)$ 个,度为 3 的顶点有 $8(10mnp-mp-np-mn)$ 个. 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 $16(mp+np+mn)$ 条;

2) $e=uv$:$d(u)=d(v)=3$,且这样的边 e 共有 $220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4$ 条.

设 $G=Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$,根据拓扑指数的定义,可得:

$H(G,x)=32(mp+np+mn)x^4+(440mnp-40mn-40mp-40np+8m+8n+8p-8)x^5$;

$M_{\{t_1,t_2\}}(G)=16(mp+np+mn)(2^{t_1}3^{t_2}+2^{t_2}3^{t_1})+(220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4)\times 3^{t_1+t_2+1}$;

$$GA(G)=16(mp+np+mn)+(440mnp-40mn-40mp-40np+8m+8n+8p-8)\frac{\sqrt{6}}{5};$$

$$M_1(G,x)=16(mp+np+mn)x^5+(220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4)x^6;$$

$$M_2(G,x)=16(mp+np+mn)x^6+(220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4)x^9;$$

$$M_3(G,x)=16(mp+np+mn)x+(220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4);$$

$$M_3(G)=16(mp+np+mn);$$

$$PM_1(G)=5^{16(mp+np+mn)}6^{220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4};$$

$$PM_2(G)=6^{16(mp+np+mn)}9^{220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4};$$

$$\mathrm{Re}Ze_1(G)=80mnp;$$

$$\mathrm{Re}Ze_2(G)=330mnp-\frac{54}{5}mn-\frac{54}{5}mp-\frac{54}{5}np+6m+6n+6p-6;$$

$$\mathrm{Re}Ze_3(G)=11\,880mnp-600mn-600mp-600np+216m+216n+216p-216;$$

$$F(G)=3\,960mnp-152mn-152mp-152np+72m+72n+72p-72;$$

$$M(G,x,y)=16(mp+np+mn)x^2y^3+(220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4)x^3y^3;$$

$$ABC_\lambda(G)=16(mp+np+mn)\times(\frac{1}{2})^{-\lambda}+(220mnp-20mn-20mp-20np+4m+4n+4p-4)\times(\frac{4}{9})^{-\lambda};$$

$$RRR(G)=16(mp+np+mn)\sqrt{2}+(440mnp-40mn-40mp-40np+8m+8n+8p-8);$$

$$RM_2(G)=880mnp-48mn-48mp-48np+16m+16n+16p-16.$$

2　补充结果

环烃格的结构可以通过将方形网络嵌入在环面上来构造. 本文将 H-环烃纳米片$[4n,2m]$记为 HNPH$[4n,2m]$,其具体结构可参考图 5.

定理 1　设 HNPH$[4n,2m]$为 H-环烃纳米片$[4n,2m]$,则其第四原子键连通指数可表示为:

$$ABC_4(\mathrm{HNPH}[4n,2m])=2m\sqrt{\frac{11}{42}}+\frac{m}{2}\sqrt{14}+\frac{2m}{3}\sqrt{2}+2m\sqrt{\frac{5}{6}}+\frac{176mn-41m}{9}.$$

证明　通过分析图 5 所示图的结构,将 HNPH$[4n,2m]$的所有边按照 $S(u)$和 $S(v)$的值划分成 6 个边子集如下:

E_1:其中 $S(u)=6,S(v)=8$;

E_2:其中 $S(u)=6,S(v)=7$;

E_3:其中 $S(u)=8,S(v)=8$;

E_4:其中 $S(u)=7,S(v)=9$;

E_5:其中 $S(u)=8,S(v)=9$;

E_6:其中 $S(u)=9,S(v)=9$.

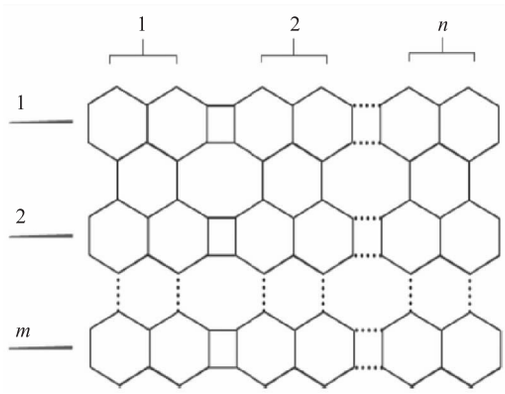

图5　H-环烃纳米片[4*n*, 2*m*]

通过图结构分析和计算,得到每一类边子集各自包含的边数为:$|E_1|=6m$, $|E_2|=|E_4|=2m$, $|E_3|=|E_5|=4m$, $|E_6|=44mn-17m$. 从而有

$$ABC_4(\mathrm{HNPH}[4n,2m])=\sum_{uv\in E(\mathrm{HNPH}[4n,2m])}\sqrt{\frac{S(u)+S(v)-2}{S(u)S(v)}}$$

$$=\sum_{uv\in E_1}\sqrt{\frac{S(u)+S(v)-2}{S(u)S(v)}}+\sum_{uv\in E_2}\sqrt{\frac{S(u)+S(v)-2}{S(u)S(v)}}+\sum_{uv\in E_3}\sqrt{\frac{S(u)+S(v)-2}{S(u)S(v)}}+$$

$$\sum_{uv\in E_4}\sqrt{\frac{S(u)+S(v)-2}{S(u)S(v)}}+\sum_{uv\in E_5}\sqrt{\frac{S(u)+S(v)-2}{S(u)S(v)}}+\sum_{uv\in E_6}\sqrt{\frac{S(u)+S(v)-2}{S(u)S(v)}}$$

$$=6m\sqrt{\frac{6+8-2}{6\times 8}}+2m\sqrt{\frac{6+7-2}{6\times 7}}+4m\sqrt{\frac{8+8-2}{8\times 8}}+2m\sqrt{\frac{7+9-2}{7\times 9}}+$$

$$4m\sqrt{\frac{8+9-2}{8\times 9}}+(44mn-17m)\sqrt{\frac{9+9-2}{9\times 9}}$$

$$=2m\sqrt{\frac{11}{42}}+\frac{m}{2}\sqrt{14}+\frac{2}{3}\sqrt[m]{2}+2m\sqrt{\frac{5}{6}}+\frac{176mn-41m}{9}.$$

3 小结

本文利用分子图边集合的划分以及拓扑指数的定义得到纳米管结 $Cas(C)$-$CaR(C)[m,n,p]$ 几个重要的基于度的拓扑指数的精确计算公式. 此外,根据边分割技术,将 H-环烃纳米片 $[4n,2m]$ 的边集划分成 6 个子集,并且计算每个子集的大小,最后通过第四原子键连通指数的定义得到对应的计算公式. 这些理论结果对纳米管结在生物、医学、化学、制药和材料学中的应用具有积极的指导作用.

[参考文献]

[1]高炜,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]高炜,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]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.

[4]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.

[5]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.

[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 topoloical 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]彭波,高炜. 多壁碳纳米管的基于度的拓扑指数[J]. 昆明学院学报,2016,38(6):66 -71.

[11]GHORBANI M,JALILI M. Computing a new topological index of nano structures[J]. Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures,2009,4(4):681 -685.