

纳米星大分子的第 4 类 ABC 指数

汤子豪¹, 梁立¹, 高炜²

(1. 云南师范大学 数学学院, 云南 昆明 650500; 2. 云南师范大学 信息学院, 云南 昆明 650500)

摘要: 理论化学其中的一个重要作用就是用数学方法来预测化合物的性质. 在化学图论中, 其研究方法就是利用分子图上化学拓扑指标的计算来间接预测药物、材料等的特征, 并为反向工程提供理论依据. 基于上述目的, 给出一些特殊纳米星大分子结构的第 4 类乘法 ABC 指数计算公式.

关键词: 理论化学; 分子图; 拓扑指数; 第 4 类乘法 ABC 指数

中图分类号: O157.6 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674 - 5639 (2018) 06 - 0054 - 04

DOI: 10.14091/j.cnki.kmxyxb.2018.06.011

Computation of the Fourth Multiplicative ABC Index on Nanostar Dendrimers

TANG Zihao¹, LIANG Li¹, GAO Wei²

(1. College of Mathematics, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan, China 650500;

2. College of Information, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan, China 650500)

Abstract: An important role in theoretical chemistry is to use mathematical methods to predict the properties of compound. In chemical graph theory, its research method is to use the calculation of chemical topological indicators on the molecular graph to indirectly predict the characteristics of drugs, materials, etc., and provide theoretical basis for reverse engineering. It's because of this purpose that the fourth multiplication ABC index calculation formulas for some special nanostar dendrimer structures are given.

Key words: theoretical chemistry; molecular graph; topological index; fourth multiplicative ABC index

0 引言

理论化学的重要作用是为化学实验提供理论支持, 为其发展指明方向, 并指导和推进实际工作. 化学图论作为理论化学的一个分支, 其主要方法是利用化学图上拓扑指数的计算来获取对应化合物的性质. 其数学建模是, 将每个原子表示成图上的一个顶点, 而原子之间的化学键则表示成顶点之间的边. 这种由化合物建模得到的图称为分子图.

本文只考虑简单(分子)图, 设 $G = (V(G), E(G))$ 为分子图, 其中 $V(G)$ 是顶点集合, $E(G)$ 是边集合. 图上的拓扑化学指数可以看成函数 $f: G \rightarrow \mathbb{R}^+$, 它将每个化学结构映射成一个正实数. 而著名的指数有调和指数、维纳指数、Gutman 指数、PI 指数、Randic 指数等. 目前已经定义的将近 2 000 种指数大致可分成 3 类: 基于度的指数、基于距离的指数和基于谱的指数. 比如与能量相关的都是基于谱的拓扑指数. 相关内容可参考文献[1 ~ 10].

Estrada 等^[11] 定义的化学键连通指数(atom-bond connectivity index, 简称 ABC 指数) 如下:

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

其中 $d(v)$ 表示顶点 v 的度. 由于该指数是第 1 个被定义的 ABC 类型指数, 所以又称为第 1 类 ABC 指数.

收稿日期: 2018 - 03 - 12

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11761083).

作者简介: 汤子豪(1993—), 男, 湖北仙桃人, 硕士研究生, 主要从事理论化学、图论研究.

Kulli^[12] 引入第 1 类乘法 ABC 指数如下:

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

此外, Kulli^[13] 定义了第 4 类乘法 ABC 指数:

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

其中 $S(v) = \sum_{uw \in E(G)} d(u)$.

本文的贡献在于给出一些重要纳米星大分子的第 4 类 ABC 指数.

1 主要结论及证明

本节中给出几类特殊纳米星大分子的第 4 类 ABC 指数具体计算公式. 用到的方法主要是根据 $S(u)$ 和 $S(v)$ 的值将图的边集合划分成若干个子集.

首先考虑由 G_n 生成的 PAMAM 大分子记为 $PD_1[n]$, 其中 n 为阶数. 它共有 $12 \times 2^{n+2} - 23$ 个顶点和 $12 \times 2^{n+2} - 24$ 条边. 作为一个例子, $PD_1[3]$ 的结构如图 1 所示.

根据 $S(u)$ 和 $S(v)$ 的值, 其边集合的划分如表 1 所示.

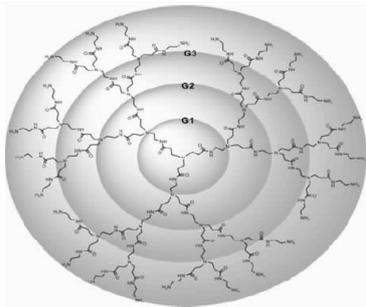


图1 $n=3$ 时的PAMAM大分子

表 1 根据 $S(u)$ 和 $S(v)$ 的 $E(PD_1[n])$ 划分

$(S(u), S(v))$, 其中 $uv \in E(PD_1[n])$	边数
(2,3)	3×2^n
(3,4)	3×2^n
(3,5)	$6 \times 2^n - 3$
(4,5)	$9 \times 2^n - 6$
(5,5)	$18 \times 2^n - 9$
(5,6)	$9 \times 2^n - 6$

定理 1 设 $n \in N, PD_1[n]$ 的第 4 类乘法 ABC 指数为:

$$ABC_4\Pi(PD_1[n]) = \left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^{3 \times 2^n} \left(\sqrt{\frac{5}{12}}\right)^{3 \times 2^n} \left(\sqrt{\frac{2}{5}}\right)^{6 \times 2^n - 3} \left(\sqrt{\frac{7}{20}}\right)^{9 \times 2^n - 6} \left(\sqrt{\frac{8}{25}}\right)^{18 \times 2^n - 9} \left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^{9 \times 2^n - 6}.$$

证明 根据表 1 和第 4 类乘法 ABC 指数的定义, 有

$$ABC_4\Pi(PD_1[n]) = \prod_{uv \in E(PD_1[n])} \sqrt{\frac{S(u) + S(v) - 2}{S(u)S(v)}} = \left(\sqrt{\frac{2+3-2}{2 \times 3}}\right)^{3 \times 2^n} \left(\sqrt{\frac{3+4-2}{3 \times 4}}\right)^{3 \times 2^n} \left(\sqrt{\frac{3+5-2}{3 \times 5}}\right)^{6 \times 2^n - 3} \left(\sqrt{\frac{4+5-2}{4 \times 5}}\right)^{9 \times 2^n - 6} \left(\sqrt{\frac{5+5-2}{5 \times 5}}\right)^{18 \times 2^n - 9} \times \left(\sqrt{\frac{5+6-2}{5 \times 6}}\right)^{9 \times 2^n - 6}.$$

进而得到结论.

其次考虑由 G_n 生成的四硫富瓦大分子(tetrathiafulvalene dendrimer) 记为 $TD_2[n]$, 其中 n 为阶数. 它共有 $31 \times 2^{n+2} - 74$ 个顶点和 $35 \times 2^{n+2} - 85$ 条边. 作为一个例子, $TD_2[2]$ 的结构如图 2 所示.

根据 $S(u)$ 和 $S(v)$ 的值, 其边集合的划分如表 2 所示.

定理 2 设 $n \in N, TD_2[n]$ 的第 4 类乘法 ABC 指数为:

$$ABC_4\Pi(TD_2[n]) = \left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^{2^{n+2}} \left(\sqrt{\frac{7}{18}}\right)^{2^{n+2}-4} \left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right)^{2^{n+2}} \left(\sqrt{\frac{8}{25}}\right)^{7 \times 2^{n+2}-16} \left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^{11 \times 2^{n+2}-24} \times \left(\sqrt{\frac{2}{7}}\right)^{3 \times 2^{n+2}-8} \left(\sqrt{\frac{5}{18}}\right)^{2^{n+2}-4} \left(\sqrt{\frac{11}{42}}\right)^{8 \times 2^{n+2}-24} \left(\sqrt{\frac{12}{49}}\right)^{2 \times 2^{n+2}-5}.$$

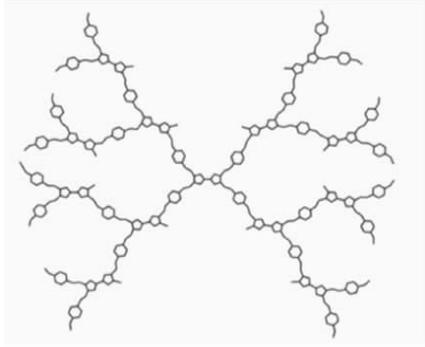


图2 $n=2$ 时的四硫富瓦大分子

表2 根据 $S(u)$ 和 $S(v)$ 的 $E(TD_2[n])$ 划分

$(S(u), S(v))$, 其中 $uv \in E(PD_2[n])$	边数
(2,4)	$2^n + 2$
(3,6)	$2^n + 2 - 4$
(4,6)	2^{n+2}
(5,5)	$7 \times 2^n - 16$
(5,6)	$11 \times 2^n - 24$
(5,7)	$3 \times 2^n - 8$
(6,6)	$2^{n+2} - 4$
(6,7)	$8 \times 2^{n+2} - 24$
(7,7)	$2 \times 2^{n+2} - 5$

证明 根据表2 和第4类乘法 ABC 指数的定义,有

$$\begin{aligned}
 ABC_4\Pi(TD_2[n]) &= \prod_{uv \in E(TD_2[n])} \sqrt{\frac{S(u) + S(v) - 2}{S(u)S(v)}} = \left(\sqrt{\frac{2+4-2}{2 \times 4}}\right)^{2^{n+2}} \left(\sqrt{\frac{3+6-2}{3 \times 6}}\right)^{2^{n+2}-4} \\
 &\quad \left(\sqrt{\frac{4+6-2}{4 \times 6}}\right)^{2^{n+2}} \left(\sqrt{\frac{5+5-2}{5 \times 5}}\right)^{7 \times 2^{n+2}-16} \left(\sqrt{\frac{5+6-2}{5 \times 6}}\right)^{11 \times 2^{n+2}-24} \times \left(\sqrt{\frac{5+7-2}{5 \times 7}}\right)^{3 \times 2^{n+2}-8} \\
 &\quad \left(\sqrt{\frac{6+6-2}{6 \times 6}}\right)^{2^{n+2}-4} \left(\sqrt{\frac{6+7-2}{6 \times 7}}\right)^{8 \times 2^{n+2}-24} \left(\sqrt{\frac{7+7-2}{7 \times 7}}\right)^{2 \times 2^{n+2}-5}.
 \end{aligned}$$

进而得到结论.

最后考虑由 G_n 生成的 POPAM 大分子记为 $POD_2[n]$, 其中 n 为阶数. 它共有 $2^{n+5} - 10$ 个顶点和 $2^{n+5} - 11$ 条边. 作为一个例子, $POD_2^{[2]}$ 的结构如图3 所示.

根据 $S(u)$ 和 $S(v)$ 的值, 其边集合的划分如表3 所示.

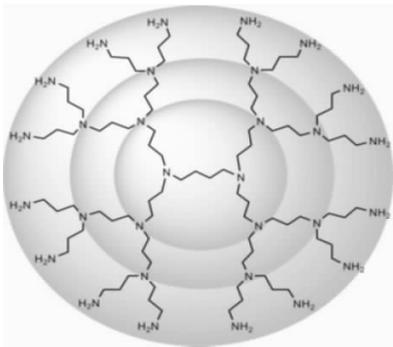


图3 $n=2$ 时的POPAM大分子

表3 根据 $S(u)$ 和 $S(v)$ 的 $E(POD_2[n])$ 划分

$(S(u), S(v))$, 其中 $uv \in E(POD_2[n])$	边数
(2,3)	2^{n+2}
(3,4)	2^{n+2}
(4,4)	1
(4,5)	$3 \times 2^{n+2} - 6$
(5,6)	$3 \times 2^{n+2} - 6$

定理3 设 $n \in N, POD_2[n]$ 的第4类乘法 ABC 指数为:

$$ABC_4\Pi(POD_2[n]) = \left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^{2^{n+2}} \left(\sqrt{\frac{5}{12}}\right)^{2^{n+2}} \left(\sqrt{\frac{3}{8}}\right) \left(\sqrt{\frac{7}{20}}\right)^{3 \times 2^{n+2}-6} \left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^{3 \times 2^{n+2}-6}.$$

证明 根据表3 和第4类乘法 ABC 指数的定义,有

$$\begin{aligned}
 ABC_4\Pi(POD_2[n]) &= \prod_{uv \in E(POD_2[n])} \sqrt{\frac{S(u) + S(v) - 2}{S(u)S(v)}} \\
 &= \left(\sqrt{\frac{2+3-2}{2 \times 3}}\right)^{2^{n+2}} \left(\sqrt{\frac{3+4-2}{3 \times 4}}\right)^{2^{n+2}} \left(\sqrt{\frac{4+4-2}{4 \times 4}}\right) \left(\sqrt{\frac{4+5-2}{4 \times 5}}\right)^{3 \times 2^{n+2}-6} \\
 &\quad \left(\sqrt{\frac{5+6-2}{5 \times 6}}\right)^{3 \times 2^{n+2}-6}.
 \end{aligned}$$

进而得到结论.

2 小结

本文通过对每对顶点 $S(u)$ 和 $S(v)$ 的值计算, 将3类纳米星大分子化合物的边集合进行了划分, 再利用第4类乘法ABC指数的定义得到对应的计算公式. 其主要结果在材料学和化学领域有潜在的工程应用价值.

[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] 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] 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] ESTRADA E, TORRES L, RODRIGUEZ L, et al. An atombond connectivity index: modelling the enthalpy of formation of alkanes [J]. Indian Journal of Chemistry A, 1998, 37 (10): 849 - 855.
- [12] KULLI V R. Multiplicative connectivity indices of certain nanotubes [J]. Annals of Pure and Applied Mathematics, 2016, 12 (2): 169 - 176.
- [13] KULLI V R. Two new multiplicative atom bond connectivity indices [J]. Annals of Pure and Applied Mathematics, 2017, 13 (1): 1 - 7.

