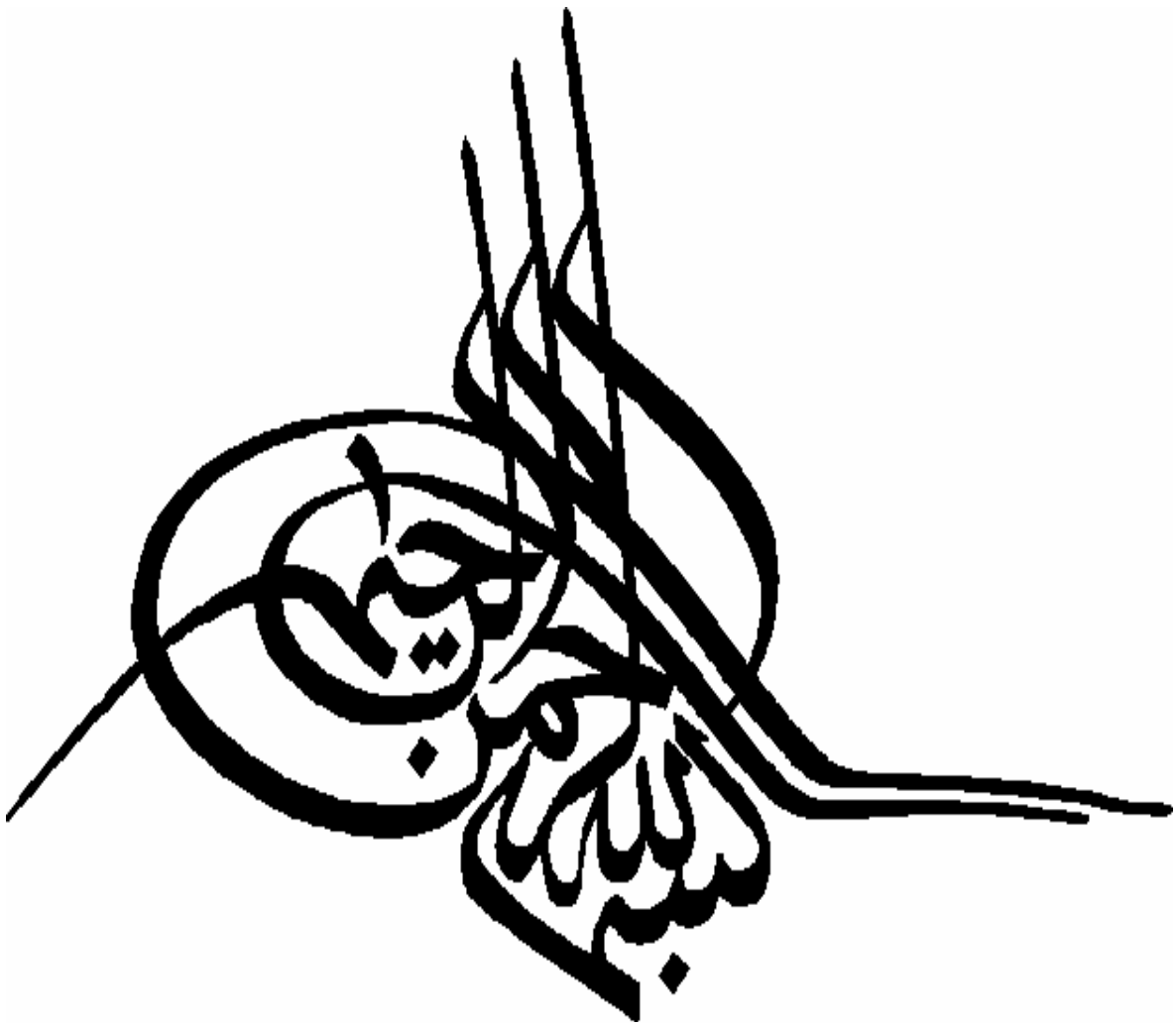


بسمه تعالی

دانشکده علوم ریاضی

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان‌نامه کارشناسی‌ارشد

اعضای هیئت داوران نسخهٔ نهایی پایان‌نامه **خانم ملیحه زراعتکارزیارت** رشته **ریاضی محض** تحت عنوان:«**محاسبه اندیس GA برای بعضی از نانولوله ها و نانوچنبره ها** » از نظر فرم و محتوا بررسی نموده و آنرا برای اخذ درجهٔ کارشناسی‌ارشد مورد تائید قرار دادند.

اعضای هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	دکتر علی ایرانمنش	استاد	
۲- استاد ناظر داخلی	دکتر سیداحمد موسوی	دانشیار	
۳- استاد ناظر داخلی	دکتر علی رجایی	استادیار	
٤- استاد ناظر خارجی	دکتر علی معدن شکاف	استادیار	
٥- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر علی رجایی	استادیار	

آیین نامه چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه،دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته ریاضی محض است که در سال ۸۹ در دانشکده علوم ریاضی دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم/جناب آقای دکتر علی ایرانمنش ، مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر و مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت‌چاپ) را به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درمعرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب مهدی رادکاوه دانشجوی رشته ریاضی محض مقطع کارشناسی ارشد تعهد فوق وضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی:

تاریخ و امضا:

۸۹/۸/۱۴

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب، نرم افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین نامه های مصوب انجام شود.

ماده ٤- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ٥- این آیین‌نامه در ٥ ماده و یک تبصره در تاریخ ۸۷/٤/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/٤/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

«اینجانب ..... دانشجوی رشته ..... ورودی سال تحصیلی ۸۷ ..... مقطع ..... دانشکده ..... متعهد می شوم کلیه نکات مندرج در آئین نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته های علمی مستخرج از پایان نامه / رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آئین نامه فوق الاشعار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم»

امضا: .....

تاریخ: ۸۹/۸/۴

دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده علوم ریاضی

پایان‌نامه دوره کارشناسی‌ارشد ریاضی (محض)

عنوان :

محاسبه اندیس GA برای برخی نانولوله ها و نانوچنبره ها

نگارش :

ملیحه زراعتکار

استاد راهنما :

پروفسور علی ایرانمنش

آبان ۱۳۸۹

تقدیر و تشکر

سپاس خدایی که هر چه دارم از اوست

بر خود لازم می دانم از همسر دلسوز و مهربانم جناب آقای مهندس عوض زاده که در انجام این پایان نامه بی نهایت به بنده کمک نموده و همیشه همراه بنده بودند سپاسگذاری نمایم.

همچنین از استاد گرانقدرم پروفسور ایرانمنش که مرا راهنمایی فرمودند تشکر ویژه دارم.

تقدیم به

همسر مهربانم

پدر و مادر دلسوزم

و دخترک شیرینم آرتینا

چکیده

شاخص توپولوژی یک گراف عددی است که نسبت به یکریختی گراف ها پایاست و نشان دهنده ویژگی خاصی از آن گراف است. شاخص های توپولوژی بسیاری وجود دارد که کاربردهای زیادی در شیمی نظری پیدا کرده اند.

دسته ای از شاخص های توپولوژی که اخیرا مورد توجه قرار گرفته اند شاخص های Extended Connectivity هستند، شاخص هایی که بر اساس یالهای گراف تعریف می شوند. به عنوان مثال می توان از شاخص هندسی-عددی که با نماد اختصاری GA نمایش داده شده است نام برد که بر اساس درجه رئوس پایانی یالهای گراف است. این شاخص یکی از معروف ترین شاخص های توپولوژی برای مطالعه گرافهای مولکولی در شیمی است.

فرض کنیم G یک گراف و$V(G)$ و $E(G)$ به ترتیب مجموعه رئوس و یالهای آن باشند.

شاخص GA برای گراف G توسط ووکسویک به صورت زیر تعریف شد:

$$GA(G)=\sum_{uv\in E(G)}\frac{\sqrt{d_u d_v}}{1/2(d_u+d_v)}=\sum_{uv\in E(G)}\frac{2\sqrt{d_u d_v}}{d_u+d_v}$$

که منظور از d_u ، درجه راس u است.

در این پایان نامه تحقیقاتی روی این شاخص انجام می پذیرد که می توان به سه دسته عمده تقسیم کرد:

۱- محاسبه این شاخص برای گراف های مختلف

۲- پیدا کردن کران های مختلف برای این شاخص

۳- تعمیم های جدید از این شاخص

و همچنین شاخص GA برای نانو لوله های $HC_5C_7[p,q]$, $HAC_5C_7[p,q]$, $HAC_5C_6C_7[p,q]$, $VC_5C_7[p,q]$, $VAC_5C_7[p,q]$, $VAC_5C_6C_7[p,q]$, $SC_5C_7[p,q]$, $TUAC_6[p,q]$, $TUZC_6[p,q]$

محاسبه شده است و فرمول کلی برای هر کدام ارائه شده است. مراجع اصلی این پایان نامه [5] و [17] هستند.

واژگان کلیدی: شاخص توپولوژی، شاخص هندسی-عددی (GA)، شاخص سگد، شاخص PI، نانولوله، توصیف گر ساختار مولکولی.

فهرست

فصل اول: مقدمه ۱

۱-۱- پیشینه تاریخی ۲

فناوری نانو ۴

آشنایی با نانو لوله ها وخواص آنها ۵

انواع نانو لوله های کربنی وکاربرد آنها ۵

توصیف گر های مولکولی ۸

۱-۲- تعاریف و مفاهیم اولیه ۱۰

۱-۳- اهمیت و کاربرد شاخص های توپولوژیکی ۱۸

فصل دوم: شا خص توپولوژیکی هندسی-عددی (GA) مبتنی بر درجه رئوس پایانی یالها ۲۰

۲-۱- معرفی چند شاخص توپولوژیکی ۲۱

۲-۲- کران های بالا و پایین شاخص GA برای گراف های معمولی و گراف های شیمیایی. ۲۳

۲-۳- شاخص GA ابزار مناسبی برای تحقیقات QSPR/QSAR ۳۲

فصل سوم: یک شاخص هندسی- عددی جدید ۳۶

۳-۱- مقدمه ۳۷

۳-۲- کرانهایی برای دومین شاخص هندسی- حسابی ۴۰

۳-۳- آشنایی با درختهایی با ماکزیمم و مینیمم دومین شاخص هندسی- حسابی ۴۹

فصل چهارم: محاسبه شاخص GA برای برخی نانولوله ها و نانوچنبره ها ۵۳

۴-۱- محاسبه شاخص GA برای برخی گراف های مشهور ۵۴

۴-۲- محاسبه شاخص GA برای برخی نانولوله ها ۵۷

۴-۲-۱. محاسبه شاخص GA برای نانولوله $TUAC_6[p,q]$ ۵۷

۴-۲-۲. محاسبه شاخص GA برای نانولوله $TUZC_6[p,q]$ ۶۰

۴-۲-۳. محاسبه شاخص GA برای نانولوله $HC_5C_7[p,q]$ ۶۱

۴-۲-۴. محاسبه شاخص GA برای نانولوله $HAC_5C_7[p,q]$ ۶۳
۴-۲-۵. . محاسبه شاخص GA برای نانولوله $HAC_5C_6C_7[p,q]$ ۶۵
۴-۲-۶. محاسبه شاخص GA برای نانولوله $SC_5C_7[p,q]$ ۶۷
۴-۲-۷. محاسبه شاخص GA برای نانولوله $VC_5C_7[p,q]$ ۶۹
۴-۲-۸. محاسبه شاخص GA برای نانولوله $VAC_5C_7[p,q]$ ۷۱
۴-۲-۹. محاسبه شاخص GA برای نانولوله $VAC_5C_6C_7[p,q]$ ۷۲
فهرست منابع ۷۵

فصل اول

مقدمه

۱-۱- پیشینه تاریخی

در سالهای اخیر مطالعه شبکه های مولکولی با استفاده از مباحث نظریه گراف گسترش چشمگیری داشته و از جمله مباحث مطرح در این زمینه شاخص های توپولوژی گرافها هستند که به عنوان توصیف گرهای ساختاری معرفی می شوند. شاخص توپولوژی یک گراف عددی است که نسبت به یکریختی گراف ها پایا و مبین ویژگی خاصی از آن گراف می باشد.

شیمی ریاضی، شاخه ای از شیمی نظری است که برای بحث و پیشگویی ساختار مولکولی با استفاده از روشهای ریاضی و بدون نیاز به ماشینهای کوانتمی به کار می رود. نظریه گراف شیمی شاخه ای از شیمی ریاضی است که نظریه گراف را برای اینکه پدیده های شیمی را به صورت ریاضی مدلسازی کند به کار می رود، این نظریه نقش مهمی روی پیشرفت علوم شیمی در سا لهای اخیر داشته است.

قدیمیترین شاخص توپولوژی در سال ۱۹۴۷ توسط یک شیمیدان به نام هارولد وینر تعریف شد. وینر توسعه گسترده ای روی این توصیف گر توپولوژی انجام داد و آن را برای تعیین خواص فیزیکی انواع آلکانهای معروف مثل پارافین استفاده کرد.

همچنین وی توانست یک رابطه خطی بین شاخص وینر و نقطه جوش آلکانها بدست آورد.

شاخص های دیگری نیز بعدها برای مطالعه خاصیتهای شیمیایی و فیزیکی مواد معرفی شدند که امروزه در علوم مختلف مانند شیمی، فیزیک، زیست شناسی، و داروسازی کاربرد آنها دیده می شود که یکی از این شاخص ها شاخص هندسی – عددی (GA) است که توسط ووکسویک و فورچیولا پیشنهاد شد.

و برای خواص فیزیک- شیمی به طور مثال آنتروپی (واحد اندازه گیری ترمودینامیک)، آنتالپی تبخیر و آنتالپی استاندارد تبخیر و... به کار می رود و توان پیشگویانه بهتری نسبت به سایر شاخص ها دارد.

فناوری نانو

فناوری نانو یا نانوتکنولوژی رشته ای از دانش کاربردی و فناوری است که جستارهای گسترده ای را پوشش می دهد. موضوع اصلی آن نیز مهار ماده یا دستگاههای در ابعاد کمتر از یک میکرومتر، معمولاً حدود ۱-۱۰۰ نانومتر است.

در واقع نانو تکنولوژی فهم و به کارگیری خواص جدیدی از مواد و سیستمهایی در این ابعاد است که اثرات فیزیکی جدیدی عمدتاً متاثر از غلبه خواص کوانتومی بر خواص کلاسیک از خود نشان می دهد.

یک نانو متر یک میلیاردیم متر است که برای سنجش طول پیوندهای کربن-کربن یا فاصله میان دو اتم بازه ۱۲ تا ۱۵ نانومتر به کار می رود. همچنین طول یک جفت دی ان ای نزدیک به دو نانومتر است و از سوی دیگر کوچکترین باکتری سلول دار ۲۰۰ نانومتر است.

واژه فناوری نانو واژه ای است که اولین بار توسط نوربواناینگچی استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ برای توصیف ساخت مواد دقیقی که ابعاد آنها در حدود نانومتر می باشد مطرح شد.

آشنایی با نانو لوله ها و خواص آنها

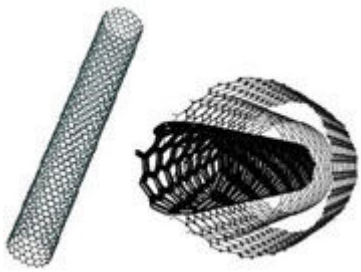
نانولوله های کربنی که از صفحات کربن به ضخامت یک اتم و به شکل استوانه ای توخالی ساخته شده است، در سال ۱۹۹۱ توسط سامیو ایجیما (از شرکت NEC ژاپن) کشف شد. خواص ویژه و منحصر به فرد آن از جمله مدول یانگ بالا و استحکام کششی خوب از یک طرف و طبیعت کربنی بودن نانولوله ها (به خاطر اینکه کربن ماده ای است کم وزن، بسیار پایدار و ساده جهت انجام فرایندها که نسبت به فلزات برای تولید ارزانتر می باشد) باعث شده که در دهه گذشته شاهد تحقیقات مهمی در کارایی و پرباری روشهای رشد نانولوله ها باشد. کارهای نظری و علمی زیادی نیز بر روی ساختار اتمی و ساختارهای الکترونی نانولوله ها متمرکز شده است.

کوششهای گسترده ای نیز برای رسیدگی به خواص مکانیکی شامل مدول یانگ و استحکام کششی و سازو کار و عیوب و اثر تغییر شکل نانولوله ها بر خواص الکتریکی صورت گرفته، می توان گفت این علاقه ویژه به نانولوله ها از ساختار و ویژگی بی نظیر آنها سرچشمه می گیرد.

اگر قبول کنیم که روش های تولید به کمک فناوری نانو به دوران طلایی خود رسیده است باید نانولوله های کربنی را بچه های طلایی این دوران به شمار آوریم.

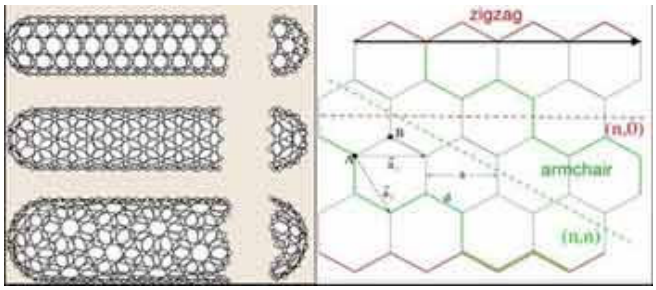
انواع نانولوله های کربنی و کاربرد آنها

نانولوله های کربنی به دو دسته کلی نانولوله های کربنی تک دیوار (SWNT) و نانولوله های کربنی چند دیواره (MWNT) تفسیم می شود. چنانچه نانولوله کربنی فقط شامل یک لوله از گرانیت باشد نانولوله تک دیواره و اگر شامل تعدادی از لوله های متحدالمرکز باشد نانولوله چند دیواره نامیده می شود.



شکل۱-۱-آشنایی با انواع نانولوله های کربنی

نانولوله های تک جداره را نیز می توان بر حسب آرایش اتم های کربنی مقطع لوله به سه دسته مهم، دسته صندلی (Arm chair) و کایرال (Chairal) که دارای خاصیت فلزی هستند و نانولوله های تک جداره که فقط از کربن و یک ساختار ساده (ورقه هایی از شش ضلعی منظم) تشکیل شده اند طبقه بندی کرد. نانولوله های کربنی ممکن است به طور گسترده در تقویت مواد، صفحه نمایش مسطح با انتشار میدانی، حسگرهای شیمیایی، دارورسانی و علم نانوالکترونیک کاربرد یابند. در ادامه به مواردی از کاربردهای نانولوله های کربنی اشاره خواهیم کرد.



شکل۱-۲-آشنایی با انواع نانولوله های تکجداره

۱- به عنوان تقویت کننده در کامپوزیتها

نانو لوله ها یکی از مستحکمترین مواد به شمار می روند. این موضوع، کاربرد نانولوله هـای کربن را به عنوان ماده پرکننـده در تولیـد نانوکامپوزیتهـا را بـه خـوبی روشـن مـی سـازد. کامپوزیتهای با پایه نانولوله های کربنی دارای نسبت استحکام به وزن بالا هستند و مصارف گسترده ای در صنعت دارند.

۲- استفاده در نمایشگرهای تشعشع میدانی

یکی از مشکلات دستگاههای نشر میدان امروزی، عدم پایداری میـدان هـای تولیـدی در بازه های زمانی طولانی است. این مشکل را می توان با استفاده از نانولوله های کربنی حـل نمود. مزایای استفاده از نمایشگرهای تولید شده با استفاده از نانولوله های کربنی نسبت بـه نمایشگرهای کریستال مایع، سرعت واکنش بالاتر نسبت به محرک های الکتریکی، مصرف انرژی کمتر، درخشنگی مناسبتر، میدان مغناطیس پایینتر و دمای کاری بالاتر است که بـر پایه همین مزایا، شرکت هایی مانند سامسونگ نمایشگرهای رنگـی بـا اسـتفاده از نانولولـه های کربنی تولید کرده اند.

۳- استفاده از نانو لوله های تک دیواره در صنعت الکترونیک

نانولوله ها به میزان قابل توجهی سخت و قوی بوده و هادی جریان الکتریسیته و گرما می باشند این خواص سبب استفاده از این مواد در صنعت الکترونیک شده است.

۴- ساخت نانوماشین ها با استفاده از نانولوله های کربنی

نانولوله های کربنی همچنین برای استفاده در ساخت نانوماشین ها پیشنهاد شده اند نانولوله ها به طور مناسبی با ساختارهای مختلف جانشین شده اند که می توانند به عنوان محورها در نانوماشین ها عمل کنند ممکن است نانولوله های مختلف با همدیگر تشکیل چرخ دنده دهند تا حرکت چرخشی مختلفی را انتقال دهند. این امر ار طریق ساخت دنده های چرخ دنده بر روی نانولوله ها می تواند انجام شود.

توصیف گرهای مولکولی

روشی برای محاسبه همزمان توصیف گرهای نانولوله ها و نانوچنبره ها ارائه شده که این روش با استفاده از خواص ذاتی شکل مولکولها مانند تقارن انجام می شود، که با تبدیل ساختار مولکولی نانولوله ها و نانوچنبره ها به گراف امکان استفاده از روابط بین گراف ها در محاسبه اعداد توصیف گر مولکول ها و پیش بینی خواص آنها فراهم می شود.از مباحث مطرح در شیمی ارتباط کمی بین ساختار(شکل) یک مولکول و خواص شیمیایی، فیزیکی، زیستی آن است و به دلیل بیان این خواص بر اساس اعداد برای پیدا کردن ارتباط بین آنها باید ساختار مولکول را نیز بر حسب اعداد توصیف کرد، به این اعداد توصیف گرهای مولکول می گویند. از جمله

مهمترین توصیف گرها، شاخص ها و چند جمله ای های توپولوژیک هستند کـه در بـسیاری از شاخه های علوم به ویژه برای پیش بینی خواص مولکول ها استفاده می شوند.

مشکل بـودن بدسـت آوردن توصـیف گرهـای مولکـولی نانولولـه هـا و نـانوچنبره هـا ناشـی از پیچیدگی و بزرگ بودن مولکول هاست. اولین گام در استفاده از توصیف گرها محاسبه آنهاسـت که برای این منظور ابتدا به مولکول نانولوله ها یا نانوچنبره ها یـک گـراف نظیـر مـی شـود بـه طوری که اتمهای مولکول رئوس گراف و پیوند های شیمیایی بین اتم ها، یـال هـای گـراف را تشکیل می دهند. در این حالت می توان از خواص ذاتی این گـراف ماننـد تقـارن ویـا قـضایای موجود در نظریه گراف ها مثل دو بخشی بودن وغیره برای محاسبه توصیف گرهای آنها استفاده کرد.

با بدست آوردن روابط عددی بین خواص شیمیایی، فیزیکی و میکروبیولوژی این مولکـول هـا و توصیف گرهای آنها می توان بسیاری از این خواص را قبل از ساخت مولکول پیش بینی کـرد و طراحی مولکول را به گونه ای انجام داد که در راستای هدف معینی کاربرد داشته باشد. توصیف گرهای مولکولی نقش مهمی در شیمی، داروسازی وغیـره بـازی مـی کننـد کـه در میـان آنهـا شاخص های توپولوژی جایگاه بالایی دارند.