بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه کاشان
دانشكده علوم پايه
گروه رياضي

پايان نامه
جهت اخذ درجه كارشناسي ارشد
رشته رياضي

عنوان :
محاسبه انديس توپولوژيك نانو تيوبها و گراف زنجير – زير گروه

استاد راهنما:
دكتر سيد عليرضا اشرفي

توسط :
امير لقمان

Jan . ۲۰۰۶

باسمه تعالی

تاریخ :

شماره:

پیوست:

دانشگاه کاشان

مدیریت تحصیلات تکمیلی دانشگاه

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

نام و نام خانوادگی دانشجو : امیر لقمان　　شماره دانشجویی : ۸۲۱۵۸۰۰۵

رشته : ریاضی　　دانشکده : علوم

عنوان پایان نامه : محاسبه اندیس توپولوژیک نانو تیوبها و گراف زنجیر – زیر گروه

این پایان‌نامه به مدیریت تحصیلات تکمیلی به منظور بخشی از فعالیتهای تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد ارایه می‌گردد.دفاع از پایان نامه در تاریخ ۸۴/۱۲/۲۳ مورد تأیید و ارزیابی هیأت داوران قرار گرفت و با نمره به عدد: ۲۰/ به حروف: بیست و درجه عالی به تصویب رسید.

اعضاء هیأت داوران

عنوان	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱. استاد راهنما :	دکتر سیّدعلیرضا اشرفی	استاد	
۲. متخصص و صاحب نظر از داخل دانشگاه :	دکتر احمد غلامی	استادیار	احمد غلامی
۳. متخصص و صاحب نظر خارج از دانشگاه :	دکتر علی ایرانمنش	دانشیار	
٤. نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه :	دکتر عبدالحمید بامنیری	استادیار	

فهرست مندرجات

تقدیم به

تقدیم به:

پدر و مادرم عزیزم

که هر چه دارم از دعای خیر و تلاش بی وقفه و راهنماییهای ارزنده آنهاست.

تشکر و قدردانی

سپاس پروردگار بی همتا را که سایه الطاف بی پایانش چون خورشیدی فروزان پرتو افشان راهم شد تا در عبور از جاده‌ی پر فراز و نشیب زندگی تن به جهل و ظلمت نسپارم و در سایه سار علم و اندیشه تنفس کنم. بی تردید تهیه‌ی این مجموعه را مرهون تلاش و زحمات استاد راهنمایم جناب آقای دکتر علیرضا اشرفی می دانم. به همین لحاظ از ایشان خالصانه و از صمیم قلب سپاسگزارم. هم چنین وظیفه‌ی خود می دانم به اساتید بزرگوار جناب آقای دکتر احمد غلامی و جناب آقای دکتر ایرانمنش که این پایان نامه را مورد مطالعه قرار دادند و هم چنین به جناب آقای دکتر بامنیری نماینده‌ی تحصیلات تکمیلی دانشگاه که در جلسه‌ی دفاع شرکت نمودند، مراتب تشکر و امتنان را تقدیم دارم. همچنین تشکر می کنم از ستاد فناوری نانو برای حمایتهایی که در این مدت از این پایان نامه داشته اند. در پایان از زحمات بی دریغ و خالصانه‌ی همه‌ی دوستان خوبم کمال تشکر و قدردانی را دارم و موفقیت همگان را از خداوند متعال خواستارم.

الهی چنان کن سرانجام کار   تو خشنود باشی و ما رستگار

امیر لقمان

اسفند ۱۳۸۴

چکیــده

فرض کنید G یک گراف باشد. اندیس PI گراف G با $PI(G)$ نمایش داده شده و به صورت $PI(G) = \sum_{e \in E(G)} [n_{eu}(e \mid G) + n_{ev}(e \mid G)]$ تعریف می شود. که $n_{eu}(e \mid G)$ تعداد یال های گراف G می باشد که به رأس u نزدیک ترند تا به v و $n_{ev}(e \mid G)$ تعداد یال هایی هستند که به رأس v نزدیک ترند تا به u.

در این پایان نامه اندیس PI نانو لوله های کربنی زیگ زاگ، صندلی و $C_۴C_۸(S)$ محاسبه می شوند. در پایان با معرفی زنجیر زیر گروه های یک گروه، روشی را معرفی می کنیم که به کمک آن می توان گراف $k-$ منتظم را تولید کرد.

واژگان کلیدی: گراف، گروه، نانو لوله های کربنی زیگ زاگ، صندلی و $C_۴C_۸(S)$، اندیس PI

ردهبندی موضوعی AMS : ۰۵۳۰۸۰، ۰۵۳۰۹۰

مقدمه

نظریه گراف کاربرد های فراوانی در علوم، خصوصاً شیمی دارد. هر مولکول دارای گرافی می باشد که به گراف مولکولی آن معروف است. این گراف حاوی خواص فیزیکی — شیمیایی مهمی از مولکول می باشد. اندیس توپولوژیک یک گراف مولکولی عددی است که به گراف آن مولکول نسبت داده می شود. این عدد بیان کننده ی بعضی از خواص مولکول می باشد. یکی از قدیمی ترین اندیس های توپولوژیک اندیس وینر می باشد که در مراجع [۱۹ – ۱۸]، [۲٦]، [۲۹ – ۲۸] و [۳۱] مورد بررسی قرار گرفته است.

یکی از جدید ترین اندیس های توپولوژیک، اندیس PI است که توسط پادماکار خادیکار در مراجع [۲۵ – ۲۱] تعریف شده و خواص آن مورد بررسی قرار گرفته است. این پایان نامه شامل سه فصل می باشد. در فصل اول مقدماتی از گراف و گروه آورده شده که در دو فصل بعدی مورد استفاده قرار می گیرد. در فصل دوم ابتدا اندیس PI را معرفی و سپس مقدار این اندیس را برای چند گراف مولکول ساده محاسبه می کنیم. در ادامه سه نانو لوله‌ی معروف کربنی را معرفی کرده و رابطه ای برای محاسبه اندیس

PI بدست می آوریم. این قسمت از پایان نامه بر اساس مراجع [۵ – ۱] تدوین یافته است. در نهایت در فصل سوم با در نظر گرفتن گروه G که توسط دو زیر گروه خود تولید می شود، روشی را معرفی می کنیم که بتوان به کمک آن گراف این گروه را تشکیل داد. در این پایان نامه تمام مطالبی که در مورد نانو لوله ها و مولکول های شیمی آورده شده استاندارد بوده و مطابق مراجع [۹]، [۱۵ – ۱۲] و [۳۰] می باشند. مطالب اصلی این پایان نامه بر اساس مراجع [۵ – ۱] و [۲۷] نوشته شده است.

فصل ۱

مقدمات و پیش‌نیازها

این فصل شامل دو بخش است. در بخش اول به مفاهیم و تعاریف اولیه در مورد گراف می پردازیم که در فصل دوم این پایان نامه به کار برده می شوند. در بخش دوم نیز مباحث مورد نیاز در مورد گروه ها ارائه می شوند.

۱—۱ گراف

بسیاری از وضعیت های دنیای واقعی را می توان به راحتی به وسیله ی نموداری متشکل از مجموعه نقاط و خطوطی که زوج های معینی از این نقاط را به هم وصل می کنند توصیف کرد. بعنوان مثال می توان نقاط را افراد در نظر گرفت و خطوط واصل بین زوج ها می توانند معرف دوست ها باشند.

تعریف ۱—۱.۱ گراف G یک سه تایی مرتب $(V(G), E(G), \psi_G)$، متشکل از مجموعه ی ناتهی $V(G)$ شامل رأس ها، مجموعه‌ی $E(G)$ شامل یال ها و تابع وقوع ψ_G است که به هر یال G، یک جفت نامرتب (نه لزوماً مجزا) از رأس های G را همراه می کند. اگر e یال و u و v رأس هایی باشند به قسمی که $\psi_G(e) = uv$، آن گاه می گوییم e، u را به v وصل می کند. در این حالت رأس های u و v را مجاور و یا همسایه می نامیم.

مثال ۱—۲.۱ گراف $G = (V(G), E(G), \psi_G)$ را در نظر می گیریم که در آن $V(G) = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$ و $E(G) = \{e_1, e_2, ..., e_8\}$ و ψ_G به صورت زیر تعریف می شود:

$$\psi_G(e_1) = v_1v_2 \;\;,\;\; \psi_G(e_2) = v_2v_3 \;\;,\;\; \psi_G(e_3) = v_3v_3 \;\;,\;\; \psi_G(e_4) = v_3v_4$$

$$\psi_G(e_5) = v_2v_4 \;\;,\;\; \psi_G(e_6) = v_4v_5 \;\;,\;\; \psi_G(e_7) = v_2v_5 \;\;,\;\; \psi_G(e_8) = v_2v_5.$$

اگر این نقاط را به همراه یال ها در صفحه رسم کنیم شکلی بدست می آید که در ۱—۱، رسم شده است.

تعریف ۱—۳.۱ یال با دو انتهای یکسان را طوقه و یال با دو انتهای مجزا را پیوند می نامیم. گرافی که شامل هیچ طوقه نباشد و همچنین هیچ دوتایی از پیوندهایش به یک زوج رأس متصل نباشند، گراف ساده نامیده می شود.

تعریف ۱—۴.۱ گراف G را متناهی می گوییم هرگاه مجموعه‌ی رأس های آن متناهی باشد. همچنین گرافی که شامل یک رأس باشد، گراف بدیهی و دیگر گراف ها را غیر بدیهی می نامیم.

تذکر ۱—۵.۱ از نماد $|V(G)|$ و $|E(G)|$ به ترتیب برای نمایش تعداد رأس ها و یال ها در گراف G استفاده می شود.

تعریف ۱—۶.۱ مکمل گراف ساده G را با $\overline{G}$ نمایش می دهیم و گرافی است ساده با مجموعه رأس های $V(G)$ که در آن دو رأس مجاورند اگر و تنها اگر آن رأس ها در G مجاور نباشند. بنابراین مجموعه یال های $\overline{G}$ به صورت زیر می باشد:

$$\overline{E} = \{\ uv \ \mid\ u, v \in V(G), uv \notin E(G)\ \}.$$

دو گراف G و H یکسان اند و می نویسیم $G = H$، اگر $V(G) = V(H)$، $E(G) = E(H)$ و $\psi_G = \psi_H$. اگر دو گراف یکسان باشند، آنها را به روشنی می توان به وسیله ی نمودارهای همانند نشان داد. البته این امکان وجود دارد که گراف هایی همانند نباشند ولی دارای یک نمودار باشند. نمودار دو گراف G و H به ترتیب در نمودار ۱—۱ و ۱—۲، کاملاً همانند هستند با این تفاوت که رأس ها و یال های آنها دارای نشان های گوناگون می باشند. گراف های G و H را در این مثال یکسان نیستند ولی یکریخت اند.

تعریف ۱—۷.۱ دو گراف G و H را یکریخت می گویند ($G \cong H$) اگر دو سوییهای $\theta : V(G) \longrightarrow V(H)$، $\phi : E(G) \longrightarrow E(H)$ موجود باشند به طوریکه $\psi_G(e) = uv$ اگر

و تنها اگر $\psi_H(\phi(e)) = \theta(u)\theta(v)$. جفت (θ, ϕ) از نگاشتها را یک یکریختی بین G و H می نامیم.

مثال ۱—۸.۱ دو گراف G و H با نمودارهای رسم شده در نمودار های ۱—۱ و ۱—۲ را در نظر می گیریم برای اثبات یکریختی این دو گراف دو نگاشت θ و ϕ را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$\theta(v_1) = y \ , \ \theta(v_2) = x \ , \ \theta(v_3) = u \ , \ \theta(v_4) = y \ , \ \theta(v_5) = w$$

و

$$\phi(e_1) = h \ , \ \phi(e_2) = g \ , \ \phi(e_3) = b \ , \ \phi(e_4) = a$$

$$\phi(e_5) = e \ , \ \phi(e_6) = c \ , \ \phi(e_7) = d \ , \ \phi(e_8) = f.$$

بنابر این نشان دادیم که این دو گراف یکریخت هستند.

در این مثال G و H ساختار همانند دارند و تنها در نام های رأس ها و یال ها متفاوت اند. اغلب وقتی گراف ها را رسم می کنیم، نشان ها را حذف می کنیم. گراف بی نشان را می توان به عنوان نماینده ی یک ردهٔ هم ارزی از گراف های یکریخت در نظر گرفت. تخصیص نشان ها به رأس ها و یال ها، عمدتاً به منظور رجوع به آنهاخواهد بود.

تذکر ۱—۹.۱ با توجه به تعریف یکریختی دو گراف اگر G و H دو گراف ساده باشند آنگاه این دو گراف یکریختند اگر و تنها اگر دو سویی $\theta : V(G) \longrightarrow V(H)$ موجود باشد به طوری که:

$uv \in E(G)$ اگر و تنها اگر $\theta(u)\theta(v) \in E(H)$.

تعریف ۱—۱.۱۰ گراف ساده ای را که در آن هر جفت از رأس های متمایز به وسیله یک یال به هم متصل باشند، گراف کامل می نامیم. در حد یکریختی، دقیقاً یک گراف کامل با n رأس وجود دارد که آن را با K_n نشان می دهیم.

تعریف ۱—۱.۱۱ گرافی که رأس های آن k تایی های مرتبی از صفرها و یک ها باشند را گراف k — مکعب می نامیم. در این گراف دو رأس به هم متصل می شوند اگر و تنها اگر فقط در یک مختص متفاوت با شند.

مثال ۱—۱.۱۲ نمودار های ۱—۳، ۱—۴ به ترتیب گراف K_5 و گراف ۳ — مکعبی می باشند.

تعریف ۱—۱.۱۳ گراف H زیر گراف G است، هرگاه $V(H) \subseteq V(G)$، $E(H) \subseteq E(G)$ و ψH تحدید ψG به $E(H)$ باشد. اگر H زیر گراف G باشد می نویسیم $H \subseteq G$. وقتی $H \subseteq G$ و $H \neq G$، H را زیر گراف سره G می نامیم.

فرض کنید که V' زیر مجموعه ناتهی V باشد. زیر گراف G را که مجموعه رأس هایش V' و مجموعه یال هایش شامل آن یال هایی از G باشد که هر دو انتهایشان در V' است، زیر گراف G القاء شده به وسیله V' نامیده و به صورت $G[V']$ نشان می دهیم. به علاوه می گوییم که $G[V']$ یک زیر گراف القایی G است. زیر گراف القایی $G[V \setminus V']$ را به صورت $G - V'$ نمایش می دهیم، این زیر گراف با حذف رأس های V' و یال هایی که رأس های V' بر آن ها قرار دارند از G حاصل می شود. همچنین اگر E' زیر مجموعه ی ناتهی از E باشد، به زیر گراف G که رأس هایش از رأس هایی تشکیل

یافته که یال ها در E' را به هم متصل می کنند و مجموعه یال هایش E' است، زیر گراف القایی به وسیله E' نامیده می شود. این زیر گراف را به صورت $G[E']$ نمایش می دهیم. زیر گراف $G[E \setminus E']$ را به صورت $G - E'$ نمایش می دهیم، این زیر گراف از حذف یال های E' از گراف G حاصل می شود. در حالت خاص اگر $E' = e$، به جای $G - \{e\}$ از $G - e$ استفاده می کنیم.

تعریف ۱—۱۴.۱ فرض کنید $G_۱$ و $G_۲$ زیر گراف های G باشند. می گوییم $G_۱$ و $G_۲$ مجزایند اگر هیچ رأس مشترکی نداشته باشند، و مجزا یال می باشند هرگاه یال مشترک نیز نداشته باشند. $G_۱ \cup G_۲$ زیر گرافی با مجموعه رأس های $V(G_۱) \cup V(G_۲)$ و مجموعه یال های $E_۱ \cup E_۲$ است. همچنین اگر $G_۱$ و $G_۲$ مجزا باشند، معمولاً اجتماع آنها را به صورت $G_۱ + G_۲$ نمایش می دهیم.

تعریف ۱—۱۵.۱ درجه رأس v در گراف G، برابر تعداد یال هایی از G است که رأس v بر آنها واقع می باشد. درجه رأس v را با $d_G(v)$ نمایش می دهیم. علاوه بر این گراف G را K — منتظم می نامیم هر گاه به ازای هر $v \in V(G)$، داشته باشیم $d_G(v) = K$. گراف منتظم نیز گرافی خواهد بود که برای یک K، K — منتظم باشد.

مثال ۱—۱۶.۱ گراف K — مکعب یک گراف K — منتظم است.

تعریف ۱—۱۷.۱ یک گشت به طول k، یک دنباله به صورت $v_۰, e_۱, v_۱, e_۲, ..., e_k, v_k$ می باشد که از رأس ها و یال ها به طوری که برای هر i، $e_i = v_{i-۱}v_i$ تشکیل شده است. یک گذر گشتی است که هیچ یال تکراری نداشته باشد، یک مسیر نیز گشتی

خواهد بود که رأس تکراری نداشته باشد. به عبارت دیگر فهرست مرتبی از رأس های متمایز $v_1, v_2, ..., v_n$ از گراف G را یک مسیر در نظر می گیریم به طوری که برای هر $2 \leq i \leq n$، $v_{i-1}v_i$ یک یال باشد. همچنین یک دور فهرست مرتبی از $v_1, v_2, ..., v_n$ است چنان که $v_1v_2, v_2v_3, ..., v_nv_1$ یال های G باشند. علاوه بر این یک v و u — مسیر یک مسیر با نقاط پایانی u و v است.

در یک گراف ساده یک گشت به وسیله دنباله رأس هایش کاملاً مشخص می شود. از این رو معمولاً یک مسیر، دور یا گشت را در یک گراف ساده با فهرست مرتب رأس هایش بیان می کنند.

تعریف ۱—۱.۱۸ طول کوتاهترین دور در گراف G را کمر گراف G می گوییم. اگر G شامل هیچ دوری نباشد، کمر آن را بینهایت تعریف می کنیم. همچنین بیشترین فاصله بین دو رأس G را قطر گراف G می نامند.

تعریف ۱—۱.۱۹ گراف G همبند است اگر به ازای هر جفت $u, v \in V(G)$ دارای یک v و u — مسیر باشد، در غیر این صورت ناهمبند خواهد بود. همچنین به زیر گراف های همبند ماکسیمال گراف G مؤلفه های G می گوییم.

لم ۱—۱.۲۰ یک گراف همبند است اگر و فقط اگر برای هر افراز رأس های آن به دو مجموعه ناتهی، یالی با نقاط پایانی در هر دو مجموعه وجود داشته باشد.

اثبات. فرض کنیم G همبند است. با در نظر گرفتن افرازی از $V(G)$ به مجموعه های ناتهی S و T دو عضو $u \in S$ و $v \in T$ را انتخاب می کنیم. از آنجا که G همبند

می باشد دارای یک v و u — مسیر P خواهد بود. بعد از آخرین رأس P در S، P دارای یالی از S به T می باشد. بر عکس فرض می کنیم که G یک گراف ناهمبند، و H مؤلفه ای از G باشد. در این صورت هیچ یالی دقیقاً یک نقطه پایانی در H ندارد. این بدان معناست که افراز S و T، در حالی که $S = V(H)$ هیچ یالی با نقاط پایانی در هر دو مجموعه ندارد. ثابت کردیم اگر G ناهمبند باشد، آنگاه شرط افراز از اعتبار می افتد. ولذا، شرط افراز ایجاب می کند که G همبند باشد. $\square$

تذکر ۱—۲۱.۱ فرض کنیم مسیری بین u و v در G وجود دارد. در این صورت فاصله بین u، v در G برابر است با طول کوتاهترین v و u — مسیردر گراف G. این مقدار را با $d_G(u,v)$ نشان می دهیم. اگر هیچ مسیری وجود نداشته باشد که u را به v وصل کند، $d_G(u,v)$ نامتناهی تعریف می شود.

لم ۱—۲۲.۱ برای هر گراف ساده G، حداقل یکی از دو گراف G، $\overline{G}$ همبند است.

اثبات. اگر G همبند باشد حکم ثابت است. فرض می کنیم G همبند نبوده و u و v دو رأس مجاور در G باشند. به دلیل همبند نبودن G، می توان راسی را در G مانند t یافت به طوری که t با هیچ یک از دو رأس u و v مجاور نباشد. چون u و t در G مجاور نیستند، بنابراین $ut \in E(\overline{G})$ و به دلیل این که v و t در G مجاور نیستند، $vt \in E(\overline{G})$. بنابراین یک مسیر از u به v در گراف $\overline{G}$ وجود دارد و در نتیجه $\overline{G}$ همبند است. $\square$

تعریف ۱—۲۳.۱ گراف G یک (m,n) — قفس نامیده می شود هرگاه G یک گراف m — منتظم با کمر n و با کمترین تعداد رأس باشد. در حالت $m = ۳$، گراف حاصله را

قفس مکعبی می نامیم.

مثال ۱—۲۴.۱ در نمودار های ۱—۵، ۱—٦، ۱—۷ و ۱—۸ چهار قفس مکعبی نمایش داده شده که به ترتیب به گراف پترسن، گراف هیوود، گراف مک گی و گراف توته — کاکستر معروف می باشند. گراف های فوق به ترتیب دارای کمر ۵، ٦، ۷ و ۸ می باشند.

تعریف ۱—۲۵.۱ دو یال $e_۱ = u_۱v_۱$ و $e_۲ = u_۲v_۲$ در گراف G موازی هستند هرگاه داشته باشیم:

$$Min\{\ d(u_۱, u_۲), d(u_۱, v_۲)\ \} = Min\{\ d(v_۱, u_۲), d(v_۱, v_۲)\ \}.$$

۱—۲ گروه

تعریف ۱—۱.۲ گروه G و مجموعه دلخواه S را در نظر می گیریم. گوییم گروه G بر مجموعه S عمل می کند اگر تابعی مانند $G \times S \longrightarrow S$ وجود داشته باشد (که معمولاً با $(g, x) \mapsto gx$ نشان می دهیم)، به طوری که به ازای هر $x \in S$ و $g_۱, g_۲ \in G$ داشته باشیم:

$$(g_۱g_۲)x = g_۱(g_۲x) \qquad \text{و} \qquad ex = x$$

مثال ۱—۲.۲ گروه متقارن S_n را در نظر می گیریم. یک عمل گروه S_n بر مجموعه $I_n = \{۱, ۲, ..., n\}$ به صورت $(\sigma, x) \mapsto \sigma(x)$ تعریف می شود.