به نام خداوند جان و خرد

کزین برتر اندیشه برنگذرد

۲۹۹۷۹

دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده علوم پایه

پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد ریاضی (محض)

محاسبه اندیس زجد نانو ستاره دندریمر

نگارش نبی‌اله غلامی

استاد راهنما دکتر علی ایرانمنش

استاد مشاور دکتر بیژن رنجبر

۱۳۸۶ /۹۷/۵۳

شهریور ۱۳۸۶

۶۹۹۷۹

سپاس

پیش از هر چیز خداوند را سپاسگزارم که با الطاف پنهان و پیدایش انجام این کـار را بـرایم آسـان ساخت. پس از آن از پدر و مادر گران‌قدرم نهایت سپاس را دارم که همواره با تلاش فراوان در همه-ی مراحل زندگی پشتیبان من بوده‌اند و از برادرانم که در طول تحصیلم مشوقم بودند سپاسگزارم بـه امید روزی که بتوانم جبران کنم.

در نهایت از راهنمایی‌های بی دریغ و روشن‌گرانه‌ی استاد ارجمندم جناب آقای دکتر ایرانمنش که همواره با رویی گشاده هدایت‌گر من بوده‌اند کمال تشکر را دارم. همچنین راهنمایی‌های استاد مشاور محترم جناب آقای دکتر رنجبر قابل ستایش و قدردانی است که در اینجا از ایشان هم کمال تشکّر را دارم.

چکیده

دندریمرها مولکول‌های بزرگ با ساختارهای منظمی هستند. از نقطه نظر شیمی پلیمری، دندریمرها ماکرومولکولهای مونودی اسپر (در اندازه و شکلهای یک جور) با یک ساختار منظم و چند شاخه-ای در بعد سه هستند. دندریمرها از سه قسمت مهم تشکیل شده‌اند: هسته، شاخه‌ها و گروههای پایانی (End groups). بسیاری از مولکولها و ترکیبهای شیمیایی به شکل گراف می‌باشند که هر راس نمایشگر یک اتم از مولکول است و همچنین پیوند کوالانسی بین اتمها متناظر با یالهای موجود بین راسهای گراف می‌باشد. این گراف بدست آمده از ترکیبات شیمیایی، گراف مولکولی نامیده می‌شود.

فرض کنید e یک یال از گراف همبند G بین راسهای u و v باشد دو مجموعه زیر را تعریف می‌کنیم:

$$N_1(e|G)=\{x\in V(G)\,|\,d(u,x)<d(v,x)\}\ \text{و}\ N_2(e|G)=\{x\in V(G)\,|\,d(v,x)<d(u,x)\}$$

تعداد اعضای $N_1(e|G)$ و $N_2(e|G)$ را به ترتیب با $n_1(e|G)$ و $n_2(e|G)$ نشان می‌دهیم. در این صورت اندیس زجد گراف G به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Sz(G)=\sum_{e\in E(G)} n_1(e|G)n_2(e|G)$$

ما در این پایان نامه اندیس زجد برخی از دندریمرهای نانوستاره را محاسبه می‌کنیم.

کلمات کلیدی: نانوستاره‌های دندریمر، اندیس زجد

فهرست

پیش گفتار ۱

فصل اول: مقدمه ۲

۱-۱- آشنایی با برخی مفاهیم وتعاریف ۳

۱-۲- نانوتکنولوژی چیست؟ ٦

۱-۳- اندیسهای توپولوژیکی و اهمیت آنها ۱۳

۱-٤- آشنایی با دندریمرها ۱٦

فصل دوم: محاسبه اندیس زجد چهار نوع نانوستاره ۱۹

۲-۱- محاسبه اندیس زجد نانوستاره نوع اول ۲۰

۲-۲- محاسبه اندیس زجد نانوستاره نوع دوم ۲۷

۲-۳- محاسبه اندیس زجد نانوستاره نوع سوم ۳۱

۲-٤- محاسبه اندیس زجد نانوستاره نوع چهارم ۳۸

فصل سوم: محاسبه اندیس زجد دندریمرهای استریل بنزن و نوع ۳-۱ .....٤۳

۳-۱- محاسبه اندیس زجد دندریمر استریل بنزن ٤٤

۳-۲- محاسبه اندیس زجد دندریمر نوع ۳-۱ ..... ٥۲

فصل چهارم: محاسبه اندیس زجد سه نوع دندریمر ٥۷

٤-۱- محاسبه اندیس زجد دندریمر نوع اول ٥۸

٤-٢- محاسبه اندیس زجد نفتالین ٦٤

٤-٣- محاسبه اندیس زجد دندریمر ٤،٤ – بیپیردینیوم ٦٩

فصل پنجم: محاسبه اندیس زجد سه نوع دندریمر پروفیرین ٧٥

٥-١- محاسبه اندیس زجد پروفیرین نوع اول ٧٦

٥-٢- محاسبه اندیس زجد پروفیرین نوع دوم ٨٤

٥-٣- محاسبه اندیس زجد پروفیرین نوع سوم ٨٦

مراجع ٩٤

واژه نامه فارسی به انگلیسی ٩٦

پیش گفتار:

نانو ستاره‌های دندریمر که به دلیل سطح تیز و گوشه‌دار خود به این نام مشهورند، از ذراتی هستند که توجه به آنها در حال رشد است و بطور فزاینده‌ای توجه کارشناسان در LANP و سایر آزمایشگاه‌های فوتونیک را به خود جلب کرده است. در فصل اول با دندریمرها آشنا می‌شویم و نانوستاره‌ها را معرفی می‌کنیم. همچنین در این فصل برخی اندیسهای توپولوژیکی و اهمیت و کاربرد آنها توضیح داده می‌شود. در این فصل از منابع [1-3,6-7,14] استفاده شده است.

در فصل دوم اندیس زجد چهار نوع نانوستاره را محاسبه کردیم به این صورت که ابتدا اندیس زجد را در حالتی که نانوستاره سه یا چهار مرحله رشد کرده است، محاسبه کردیم و در نهایت یک فرمول کلی برای اندیس زجد این نانوستاره‌ها بدست می‌آوریم. در این فصل از منابع [4-5,7-11] استفاده شده است.

در فصل سوم اندیس زجد را برای دو نوع دیگر از دندریمرها موسوم به استریل بنزن و دندریمر نوع ۳-۱ محاسبه کردیم. در این فصل از منابع [4-11] کمک گرفته شده است.

در فصل چهارم اندیس زجد را برای سه نوع دیگر از دندریمرها موسوم به دندریمر نوع اول و دندریمر نفتالین و دندریمر ٤،٤- بی پیریدینیوم محاسبه کردیم و از منابع [4-5,7-11-13] استفاده شده است.

در فصل پنجم اندیس زجد را برای سه نوع دیگر از دندریمرها موسوم به فلورنس محاسبه کردیم در این فصل از منابع [4-5,7-11,13] استفاده شده است.

حاصل کارهای تحقیقاتی صورت گرفته که در فصل‌های دوم تا پنجم، کارهای جدیدی است که تاکنون دو مقاله از آنها استخراج شده است و برای داوری به مجلات معتبر بین المللی ارسال شده است و مقالات دیگری نیز در دست تهیه است.

فصل اول

مقدمه

۱-۱- آشنایی با برخی مفاهیم و تعاریف

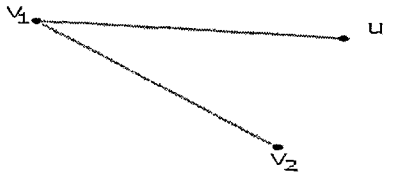
تعریف۱-۱-۱. گراف G با مجموعه رئوس آن (V) و مجموعه یالهای آن (E) نشان داده می‌شود.

لذا برای نگه داری یک گراف خاص تنها داشتن این دو کفایت می‌کند.

به عنوان نمونه اگر $V(G)=\{v_1,u,v_2\}$

$$E(G)=\{\{v_1,u\},\{v_1,v_2\}\}$$ ،

آنگاه تنها یک گراف متناظر با آنها وجود خواهد داشت که به صورت زیر می توان آن را نشان داد:



البته می دانیم که نحوه کشیدن یک گراف یکتا نمی باشد یعنی هر گراف را به طرق متفاوتی می توان رسم نمود و تنها چیزی که یکتاست، وجود یا نبود یالها بین رئوس مشخص می باشد.

منظور از نحوه نگه داری گراف نیز نگه داری و ذخیره عناصر مشخصی از گراف می باشد که به کمک آنها بتوان فقط و فقط یک گراف متناظر با آن را بازیابی کرد.

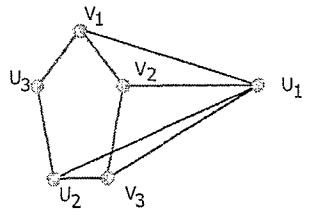
تعریف ۱-۱-۲. یک گشت در گراف G را این گونه تعریف می کنیم:

دنباله ای از رئوس به صورت $v_1v_2v_3...v_m$ که به ازای هر $0 \le i \le m-1$ داشته باشیم $v_iv_{i+1} \in E$.

بدیهی است که v_iv_{i+1} و $v_{i+1}v_{i+2}$ یالهای منتهی به راس v_i می باشند که در دنباله داده شده میتوانند پشت سر هم بیایند . (دو یال متوالی در دنباله یک گشت یا مجاور یا یکسان می باشند)

دقت کنید در یک گشت به صورت $vv_1v_2...v_m$ که آن را گشتی ما بین v و v_m تعریف می کنیم ، هم رئوس می توانند تکراری باشند هم یالها.

مثال. در گراف زیر دنباله $v_1u_1u_1u_2u_2u_1v_2v_3$ یک گشت ما بین v_1,v_2 می باشد که رئوس u_1,u_2 در آن تکرار شده اند و یال u_1u_2 هم ٤ بار پیموده شده است.



تعریف۱-۱-۳. طول یک گشت شامل m راس به صورت $vv_1v_2...v_m$ برابر با (m-1) است که بیانگر تعداد یالهایی است که این گشت می پیماید

تعریف ۱-۱-٤. اگر در یک گشت رئوس ابتدا و انتهای آن یکسان باشند یعنی به صورت $vv_1v_2...v_m=v_1$ باشد آن را یک گشت بسته می نامیم و بیانگر حرکتی روی یالها می باشد که در انتها به راس آغازین بازگشته ایم.

تعریف ۱-۱-۵. اگر در تعریف گشت این شر ط را هم اضافه کنیم که یال تکراری نداشته باشیم آن را گذر می نامیم. به عبارتی دیگر گذر، گشتی است که یال تکراری ندارد. طول گذر و رئوس ابتدایی و پایانی گذر نیز مانند گشت می باشد.

تعریف ۱-۱-٦. گذر بسته مانند گشت بسته، به گذری که رئوس ابتدایی و انتهایی آن یکسان باشند گذر بسته می‌گویند.

تعریف ۱-۱-۷. اگر علاوه بر یالها، رئوس یک گشت هم غیر تکراری باشند آن را مسیر می نامند.

تعریف ۱-۱-۸. گراف G را زیر گراف H گوییم اگر و فقط اگر $E(G)\subseteq E(H), V(G)\subseteq V(H)$ می‌نویسیم $G\subseteq H$.

تعریف ۱-۱-۹. گراف G را همبند گوییم، اگر و تنها اگر هر جفت از راسهای G، متعلق به یک مسیر باشد. یعنی بازای هر $u,v\in V(G)$ ، یک u,v-مسیر در G وجود داشته باشد. (u,v-مسیر، مسیری با نقطه ابتدایی u و نقطه انتهایی v می‌باشد.) در غیر این صورت، G را ناهمبند گوییم. در یک گراف همبند، فاصله از v تا w $d(v,w), w$ طول کوتاهترین مسیر از v تا w است.

تعریف ۱-۱-۱۰. افراز گراف G را یک لیست از زیرگرافها می‌گوییم، با این شرط که هر یال، دقیقا در یک زیرگراف ظاهر شود.

تعریف۱-۱-۱۱. یک درخت، گرافی همبند است که دور نداشته باشد.

تعریف ۱-۱-۱۲. بسیاری از مولکولها و ترکیبهای شیمیایی به شکل گراف می‌باشند که هر راس نمایشگر یک اتم از مولکول است و همچنین پیوند کوالانسی بین اتمها متناظر با یالهای موجود بین راسهای گراف می‌باشد. این گراف بدست آمده از ترکیبات شیمیایی، گراف مولکولی نامیده می‌شود. یک گراف مولکولی می‌تواند یک مسیر، یک درخت و یا در حالت کلی یک گراف باشد. در هیدروکربنها که فقط از اتمهای کربن و هیدروژن تشکیل شده‌اند، اتمهای کربن را بعنوان رئوس گراف مولکولی و پیوندهای میان اتمهای کربن را بعنوان یال گراف در نظر می‌گیریم و از اتمهای هیدروژن صرفنظر می‌کنیم، زیرا وقتی اتمهای کربن شناخته شوند، مولکول شناخته می‌شود. زیرا در این صورت اتمهای هیدروژن به گونه‌ای اضافه می‌شوند که درجه رئوس اتمهای کربن را به ٤ برسانند، بنابراین می‌توان اتمهای هیدروژن را نادیده گرفت.

۱-۲- نانو تکنولوژی چیست؟

نانوتکنولوژی تولید کارآمد مواد و دستگاهها و سیستمها با کنترل ماده در مقیاس طولی نانومتر و بهره برداری از خواص و پدیده‌های نو ظهوری است که در مقیاس نانو توسعه یافته‌اند.

۱-۲-۱- یک نانومتر چقدر است؟

یک نانومتر یک میلیاردم متر (10^{-9}متر) است. این مقدار حدودا چهار برابر قطر یک اتم است. مکعبی با ابعاد ۲,۵ نانومتر ممکن است حدود ۱۰۰۰ اتم را شامل شود. در مقایسه یک جسم نانومتری با اندازه‌ای حدود ۱۰ نانومتر ، هزار برابر کوچکتر از قطر یک موی انسان است. امکان مهندسی در مقیاس مولکولی برای اولین بار توسط ریچارد فاینمن (R. Feynnman) ، برنده جایزه نوبل فیزیک مطرح شد. فاینمن طی یک سخنرانی در انستیتو تکنولوژی کالیفرنیا در سال ۱۹۵۹ اشاره کرد که اصول و مبانی فیزیک امکان ساخت اتم به اتم چیزها را رد نمی‌کند. وی اظهار داشت که می‌توان با استفاده از ماشینهای کوچک ماشینهایی به مراتب کوچکتر ساخت و سپس این کاهش ابعاد را تا سطح خود اتم ادامه داد. همین عبارتهای افسانه وار فاینمن راهگشای یکی از جذابترین زمینه‌های نانو تکنولوژی یعنی ساخت روباتهایی در مقیاس نانو شد. در واقع تصور در اختیار داشتن لشکری از نانو ماشینهایی در ابعاد میکروب که هر کدام تحت فرمان یک پردازنده مرکزی هستند، هر دانشمندی را به وجد می‌آورد. در رویای دانشمندانی مثل جی استورس هال (J. Storrs Hall)و اریک درکسلر (E.Drexler)این روباتها یا ماشینهای مونتاژکن کوچک تحت فرمان پردازنده مرکزی به هر شکل دلخواهی در می‌آیند. شاید در آینده‌ای نه چندان دور بتوانید به کمک اجرای برنامه ای در کامپیوتر ، تخت خوابتان را تبدیل به اتومبیل کنید و با آن به محل کارتان بروید.

۱-۲-۲- چرا این مقیاس طول اینقدر مهم است؟

خواص موجی شکل (مکانیک کوانتومی) الکترونهای داخل ماده و اثر متقابل اتمها با یکدیگر از جابجایی مواد در مقیاس نانومتر اثر می‌پذیرند. با تولید ساختارهایی در مقیاس نانومتر ، امکان کنترل خواص ذاتی مواد ازجمله دمای ذوب ، خواص مغناطیسی ، ظرفیت بار و حتی رنگ مواد بدون تغییر در ترکیب شیمیایی بوجود می‌آید. استفاده از این پتانسیل به محصولات و تکنولوژیهای جدیدی با کارآیی بالا منتهی می‌شود که پیش از این میسر نبود. نظام سیستماتیک ماده در مقیاس نانومتری ، کلیدی برای سیستمهای بیولوژیکی است. نانوتکنولوژی به ما اجازه می‌دهد تا اجزاء و ترکیبات را داخل سلولها قرار داده و مواد جدیدی را با استفاده از روشهای جدید خود_اسمبلی بسازیم. در روش خود_اسمبلی به هیچ روبات یا ابزار دیگری برای سرهم کردن اجزاء نیازی نیست. این ترکیب پر قدرت علم مواد و بیوتکنولوژی به فرآیندها و صنایع جدیدی منتهی خواهد شد. ساختارهایی در مقیاس نانو مانند نانو ذرات و نانولایه‌ها دارای نسبت سطح به حجم بالایی هستند که آنها را برای استفاده در مواد کامپوزیت ، واکنشهای شیمیایی ، تهیه دارو و ذخیره انرژی ایده‌ال می‌سازد. سرامیکهای نانوساختاری غالبا سخت‌تر و غیرشکننده‌تر از مشابه مقیاس میکرونی خود هستند. کاتالیزورهای مقیاس نانو راندمان واکنشهای شیمیایی و احتراق را افزایش داده و به میزان چشمگیری از مواد زائد و آلودگی آن کم می‌کنند .وسایل الکترونیکی جدید ، مدارهای کوچکتر و سریعتر و ... با مصرف خیلی کمتر می‌توانند با کنترل واکنشها در نانوساختار بطور همزمان بدست آیند. اینها تنها اندکی از فواید و مزایای تهیه مواد در مقیاس نانومتر است.

۱-۲-۳- منافع نانوتکنولوژی چیست؟

مفهوم جدید نانوتکنولوژی آنقدر گسترده و ناشناخته است که ممکن است روی علم و تکنولوژی در مسیرهای غیرقابل پیش بینی تأثیر بگذارد. محصولات موجود نانوتکنولوژی عبارتند از: لاستیکهای مقاوم در برابر سایش که از ترکیب ذرات خاک رس با پلیمرها بدست آمده‌اند، شیشه‌هایی که خودبه خود تمیز می‌شوند، مواد دارویی که در مقیاس نانو ذرات درست شده‌اند، ذرات مغناطیسی باهوش برای پمپهای مکنده و روان سازها ، هد دیسکهای لیزری و مغناطیسی که با کنترل دقیق ضخامت لایه‌ها از کیفیت بالاتری برخوردارند، چاپگرهای عالی با استفاده از نانو ذرات با بهترین خواص جوهر و رنگ دانه و . ...

۱-۲-٤- مدلسازی مولکولی و نانوتکنولوژی

در سازمان دهی و دستکاری مواد در مقیاس نانو ، لازم است تمامی ابزار موجود جهت افزایش کارایی مواد و وسایل بکار گرفته شود. یکی از این ابزار ، شیمی تحلیلی ، خصوصا مدل سازی مولکولی و شبیه سازی است. امروزه ابزار تحقیقاتی فراگیری مانند روشهای شیمی تحلیلی مزیتهای فراوانی نسبت به روشهای تجربی دارند. نتیجه نهایی این امر ، کاهش اساسی در هزینه‌های آزمایشگاهی (مانند مواد ، انرژی ، تجهیزات) و زمان است." از طرف دیگر ، در شیمی تحلیلی سرمایه گذاری اولیه جهت تهیه نرم‌افزار و هزینه‌های وابسته از جمله سخت‌افزار جدید ، آموزش و تغییرات پرسنل بسیار بالا خواهد بود. ولی با بکار گیری هوشمندانه این ابزار می‌توان هریک از هزینه‌های اولیه را نه تنها از طریق صرفه‌جویی در هزینه آزمایشگاه بلکه بوسیله فراهم نمودن دانشی که منجر به بهینه سازی فرآیندها و عملکردها می‌شود، جبران ساخت.

این موضوع برای شیمیدانها بسیار مناسب است، ولی روشهای شبیه‌سازی چطور می‌توانند برای نانوتکنولوژیستها مفید واقع شود؟ محدودیتهای آزمایشگر در مقیاس نانو ، زمانی آشکار می‌شود که شگفتی جهان دانشمندان نظری وارد عمل می‌شود. در اینجا هنگامی که دانشمندان قصد قرار دادن هر یک از اتمها را در محل مورد نظر دارند قوانین کوانتوم وارد صحنه می‌شود. پیش‌بینی رفتار و خواص در محدوده‌ای از ابعاد برای نانوتکنولوژیستها حیاتی است. مدل‌سازی رایانه‌ای با بکارگیری قوانین اولیه مکانیک کوانتوم و یا شبیه‌سازیهای مقیاس میانی ، دانشمندان را به مشاهده و پیش‌بینی رفتار در مقیاس نانو و یا حدود آن قادر می‌سازد. مدلهای مقیاس میانی با بکارگیری واحدهای اصلی بزرگتر از مدلهای مولکولی که نیازمند جزئیات اتمی است، به ارائه خواص جامدات ، مایعات و گازها می‌پردازند. روشهای مقیاس میانی در مقیاسهای طولی و زمانی بزرگتری نسبت به شبیه‌سازی مولکولی عمل می‌کنند. می‌توان این روشها را برای مطالعه مایعات پیچیده ، مخلوطهای پلیمر و مواد ساخته‌شده در مقیاس نانو و میکرو بکار برد.

۱-۲-۵- رویکرد نانوتکنولوژی

علم نانو (Nano - science) و فناوری متکی بر آن یا به اختصار ، فناوری نانو (Nano-Technology) در کنار علوم و فناوریهای مرتبط با زیست شناسی و ژنتیک مولکولی ، علوم و فناوری اطلاعات ، مولفه‌های انقلاب سوم علمی - صنعتی عصر جدید را تشکیل می‌دهند. این انقلاب ادامه منطقی انقلابهای علمی اول و دوم است که منجر به پیدایش علوم و فناوریهای مقیاسهای ماکرو و میکرو گشتند. انقلاب سوم و بویژه مولفه‌های علوم و فناوری مقیاس نانو در آن برای اولین بار در تاریخ جوامع بشری امکان دستکاری و دخالت عمدی و اختیاری در خواص و

سازماندهی ماده فیزیکی و اساسی‌ترین سطوح آن ، یعنی مقیاسهای زیر اتمی و مولکولی را فراهم خواهد آورد.

۱-۲-٦- نقش نانو ساختارها در فناوری نانو

علم نانو ایجاد دانشهای بنیادی را هدف خود برای اعمال کنترل کامل بر ساختار و عملکرد ماده فیزیکی در مقیاسهای اتمی و مولکولی را قرار داده است و فناوری نانو نوید می‌دهد که این دانشها در آینده‌ای نه چندان دور در قالب مهندسی در آیند. از طریق فناوری نانو خواهیم توانست با جایگذاری تک اتمها و تک مولکولها در کنار یکدیگر از پایین به بالا ساختارهای نوینی را که به نانو ساختارها (Nano - Structures) موسوم‌اند و دارای خواص و عملکردهای کاملا نوین می‌باشند بوجود آورد. با استفاده از این ساختارها می‌توان دستگاهها ، ادوات و قطعات فوق ریزی که در مقیاسهای طولی و زمانی بسیار تقلیل یافته فعالیت می‌کنند، تولید نمود. نانو ساختارها سنگ بنای فناوری نانو هستند.

۱-۲-۷- انواع رویکردهای نانو تکنولوژی

علوم فناوری نانو عمیقا میان رشته‌ای بوده و دستاوردهای بس شگرفی برای بشریت خواهند داشت و افقهای کاملا جدیدی را برای پیشرفت و بهروزی جوامع و مبارزه موثر با بیماریها و گرسنگی خواهند گشود. رسیدن به مقیاس نانو از طریق رویکرد از پایین به بالا یکی از گزینه‌های علم و فناوری نانو است. رویکرد دیگر در علم فناوری نانو ، رویکرد از بالا به پایین ، یا بیرون کشیدن نانو ساختارها از درون ساختارهای بزرگتر است. این رویکرد به نام برنامه کوچک سازی (program miniaturization) مشهور گشته است و همراه با رویکرد اول ، بسترهای اساسی برای پیشرفت برنامه عظیم جهانی علوم فناوری نانو هستند. علوم فناوری نانو ، همراه با

فناوری زیستی متکی بر ژنتیک مولکولی که در برنامه بزرگ ژنوم انسانی متجلی گشته است، و فناوری اطلاعات که با پیشرفت عظیم قدرت محاسباتی رایانه‌ها ، در شکل ابر رایانه‌ها سکوهای گرافیک محاسباتی و رایانه‌های فردی ، جهش‌وار به پیش می‌رود، مبانی علم و فناوری قرن بیست و یکم را تشکیل می‌دهند و سیمای پیشرفت جوامع بشری را تا حداقل پنجاه سال آینده ترسیم می‌کنند.

۱-۲-۸- فناوری نانو در آینده نه چندان دور

واقعیت این است که بشر در آستانه بزرگترین تحول و دگرگونی تاریخ خود قرار دارد و این تحول همه چیز را در همه عرصه‌های زندگی بشر ، بطور انقلابی دگرگون خواهد ساخت .فناوری نانو ، جهان را در آستانه بزرگترین انقلاب تاریخ قرار داده است. در سایه انقلاب فناوری نانو توانمندیهای تازه‌ای در تولید و کاربرد ابزار میکرو الکترونیک یکی پس از دیگری پدیدار خواهد شد. با استفاده از این فناوری ابزار و وسایل لازم با بهره گیری از روشهای ساخت مولکولی مشابه با آنچه در اندام انسانی روی می‌دهد تولید می‌شوند. پیامدهای فناوری نانو با توجه به این نکته که این فناوری می‌تواند در نقطه تلاقی دانش اطلاعات و دانش زیستی عمل نماید کاملا حیرت انگیز خواهد بود .رایانه‌های مولکولی با اجزا ارگانیک و زنده در تماس و ارتباط خواهند بود. انسانها در ۲۵ سال آینده وسایل اطلاع رسانی شخصی خود را در حالی با خود حمل خواهند کرد که آن را به نوعی پوشیده‌اند و نیروی لازم برای آن را از انرژی جنبشی ناشی از راه رفتن خود تامین می‌کنند. محیط کار ما بطور مجازی و مطابق نیاز و سلیقه ما همه جا همراه خواهد بود و مردم همه دنیا با حجم زیادی از اطلاعات در هر زمان و مکان قابل دسترسی خواهند بود. هنگام سفر نیز خودروهای رایانه‌ای و هوشمند خود راننده در ارتباط شبکه‌ای با پایگاههای مرکزی بوده و

دسترسی دائمی به آخرین اطلاعات مورد نیاز امکان پذیر خواهد بود و قبل از رسیدن به خانه، لوازم منزل و محیط خانه را با برنامه ریزی و ارتباط با یکدیگر مطابق دلخواه ما آماده خواهند کرد.

در زمینه فناوری میکرو الکترومکانیکها (MEMS) ما به وسایلی دست پیدا خواهیم کرد که در آنها حسگرها و فرستنده‌ها و گیرنده‌ها در حداقل اندازه خود بوده و با چنین وسایلی زندگی ما به شدت متحول خواهد شد. به عنوان نمونه هنگام بیماری پزشکان همزمان با ما و یا حتی زودتر از ما از آن آگاه خواهند شد. در زمینه فناوری زیستی امکان همانند سازی انسان و سایر موجودات زنده، گزینش جنسیت و حتی صفات خاص در نوزادان فراهم شده و امکان درمان بسیاری از بیماریهای حاد و مزمن حسی عصبی با فناوری کشت سلولی مقدور خواهد شد.

۱-۲-۹- چشم انداز علم نانو تکنولوژی

انقلاب جهانی تکنولوژی با تغییرات اجتماعی ، اقتصادی ، سیاسی و فردی در سراسر جهان همراه است. همچون انقلابهای کشاورزی و صنعتی در گذشته ، این انقلاب تکنولوژی نیز از پتانسیل دگرگون سازی کیفیت زندگی و طول عمر ، متحول سازی کار و صنعت ، تغییر و تبدیل ثروت ، جابجایی قدرت در سطح ملتها و در درون ملتها و افزایش تنش و تعارض برخوردار است. پیامدهای انقلاب یاد شده بر سلامتی بشر شاید شگفت آورترین آنها باشد. چرا که خط شکنیهای علمی، کیفیت و طول زندگی انسان را به مراتب بهتر خواهند کرد .بیوتکنولوژی نیز ما را قادر خواهد ساخت ارگانیزمهای زنده از جمله خودمان را شناسایی نموده ، چگونگی فعالیتشان را درک کنیم، آنها را دستکاری کرده ، بهبود بخشیده و تحت کنترل در آوریم .تکنولوژی اطلاعات امروزه بویژه در کشورهای توسعه یافته تحولات انقلابی برای زندگی ما به ارمغان آورده و خود عامل توان آفرین عمده‌ای برای سایر روندها به شمار می‌رود.

۱-۳- اندیسهای توپولوژیکی و اهمیت آنها

۱-۳-۱- تعریف اندیس توپولوژیکی

اندیسهای توپولوژیکی اعدادی حقیقی هستند که تحت اتومورفیسم‌های گراف پایا می‌باشند. بدین صورت که برای دو گراف یکریخت اندیسهای توپولوژیکی برابر می‌باشند. اولین اندیس توپولوژیکی در سال ۱۹٤۷ توسط وینر برای تشریح روابط بین خواص فیزیکی- شیمیایی ترکیبات آلی مطرح شد. او اندیس وینر[1] را برای تشخیص خواص فیزیکی نوعی از آلکانها بنام پارافین استفاده کرد. پس از آن کار روی اندیس وینر ادامه یافت و حاصل این تلاشها، یافتن نتایج بیشتر در مورد این اندیس بود. همچنین در طول این تحقیقات، اندیسهای توپولوژیکی دیگری تعریف شدند. امروزه اندیسهای توپولوژیکی متعددی از جمله PI ، شولتز[2]، Szeged و ... وجود دارند ولی بجز اندیس وینر، برای سایر اندیسها کاربردهای زیادی کشف نشده است.

۱-۳-۲- اهمیت اندیسهای توپولوژیکی

اگر جرم اتمی یک مولکول افزایش پیدا کند نقطه ذوب یا جوش هم افزایش پیدا می‌کند. اگر نمودار تغییرات جرم مولکولی بر حسب خواص (نقطه ذوب) را رسم کنیم به هیچ وجه خطی نیست و این به ما این امکان را نمی‌دهد که اگر خاصیتی را داشته باشیم، ساختار آن را پیدا کنیم. در اینجا ریاضیات گسسته به کمک ما می‌آید و به جای جرم مولکولی اعدادی را به مولکول نسبت می‌دهد که تغییراتش با خواص و فعالیت مولکول خطی یا از معادله ثابتی پیروی کند. در واقع اگر اسکلت کربنی مولکول را یک گراف فرض کنیم و برای این ماتریس مجاورت و یا فاصله (بستگی

---

[1] Wienr index
[2] Schultz index

به نوع شاخص دارد) بنویسیم، منظور این است که این گراف را بصورت ماتریس نمایش دهیم. آنوقت با یک سری محاسبات روی ماتریس به عددی خواهیم رسید که مختص به همان ساختار مولکول ما است و می‌تواند تغییراتش با تغییرات خواص و فعالیت مولکولها خطی باشد یا از معادله خاصی پیروی کند. که این عدد همان اندیس توپولوژیکی می‌باشد. به این کارها در شیمی QSAR می‌گویند. بسیاری از موفقیتهای مطالعات QSAR بر پایه مفهوم عدد وینر است. زیرا نشان داده است که اندیس وینر یک ترکیب ارتباط قوی با خواص شیمیایی آن ترکیب دارد.

۱-۳-۳- بعضی از اندیسهای توپولوژیکی

تعریف ۱-۳-۳-۱. اندیس وینر یک گراف همبند برابر با مجموع فواصل بین تمامی راسهای متمایز آن گراف می‌باشد. بنابراین عدد وینر گراف G به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$W(G)=\frac{1}{2}\sum_{v,w\in V} d(v,w)$$

تعریف ۱-۳-۳-۲. فرض کنیم G یک گراف باشد. مطابق با نمادهای قبل مجموعه راسهای G را با $V(G)$ و مجموعه یالهای آن را با $E(G)$ نمایش می‌دهیم. فرض کنیم $e=uv$ یک یال گراف G باشد. دو کمیت $n_{eu}(e|G)$ و $n_{ev}(e|G)$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$n_{eu}(e|G)$ تعداد یالهایی از G است که به u نسبت به v نزدیکترند و $n_{ev}(e|G)$ تعداد یالهایی از G است که به v نسبت به u نزدیکترند. همچنین تعداد یالهایی که از دو انتهای e به یک فاصله‌اند را با $N(e)$ نمایش می‌دهیم. به عبارت دیگر اگر فرض کنیم:

$$G_{u,e}=\{x\in V(G)\,|\,d(u,x)<d(v,x)\} \quad \text{و} \quad G_{v,e}=\{x\in V(G)\,|\,d(u,x)>d(v,x)\} \quad \text{و}$$