



دانشکده علوم پایه
گروه ریاضی

پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد
در رشته ریاضی محض (گرایش جبر)

عنوان:

درباره فولرن‌های منفرد از نوع

هسته و مهره

استاد راهنما:

پروفسور سید علی رضا اشرفی

به وسیله:

محبوبه ساحلی

آذر ۱۳۸۸

تشکر و قدردانی

سپاس پروردگاری همتا را که در سایه الطاف بی‌پایانش چون خورشیدی فروزان پرتو افشان راهم شد تا در عبور از جاده پرفراز و نشیب زندگی تن به جهل و ظلمت نسپارم و در سایه سار علم و اندیشه تنفس کنم. بی‌تردید تهیه این مجموعه را مرهون تلاش و زحمات استاد راهنمایم، جناب آقای پروفیسور سید علی‌رضا اشرفی می‌دانم که فراتر از یک استاد راهنما، در نهایت صبر و شکیبایی، تشویق و راهنمایی نموده و در تمام مراحل مرا مورد لطف و محبت خویش قرار دادند. به همین لحاظ از ایشان که در این مجموعه یاریم نمودند، خالصانه و از صمیم قلب سپاسگزارم. وظیفه خود می‌دانم به اساتید بزرگوار جناب آقای دکتر محمدعلی ایران‌منش و جناب آقای دکتر بهنام بازیگران که این پایان‌نامه را مورد مطالعه قرار داده و هم‌چنین از جناب آقای دکتر سید حسین رسا نماینده محترم تحصیلات تکمیلی دانشگاه که در جلسه دفاع شرکت نمودند، مراتب تشکر و امتنان را تقدیم دارم.

چکیده

استفاده از روش‌های قدرت‌مند جبرخطی برای مطالعه فولرن‌ها اخیراً مورد توجه قرار گرفته است. گراف مهره و هسته از جمله این موارد هستند که در این پایان‌نامه به تفصیل مورد بررسی قرار خواهند گرفت. شاخص همبندی خروج از مرکز از جمله شاخص‌هایی است که بر اساس تابع فاصله گراف مورد مطالعه تعریف می‌شود. در این پایان‌نامه این شاخص برای نانولوله دسته‌بندی، زیگ‌زاگ، $TUC_4C_8(S)$ و $TUC_4C_8(R)$ و نانوستاره‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است. هم‌چنین ثابت می‌شود که در میان درخت‌ها گراف ستاره دارای کم‌ترین میزان شاخص و گراف مسیر دارای بیشترین مقدار است.

کلمات کلیدی: فولرن، ماتریس مجاورت، گراف هسته، گراف مهره، پیکربندی مینیمال، گروه خودریختی، شاخص همبندی خروج از مرکز.

رده‌بندی موضوعی: ۰۵C۲۵، ۰۵C۵۰، ۰۵C۹۰، ۰۵C۴۰.

فهرست مطالب

۱	مقدمات و پیش‌نیازها	۱
۱	۱-۱ گراف	۱
۵	۲-۱ جبر خطی	۵
۱۲	۳-۱ عمل گروه روی یک گراف	۱۲
۱۶	۲ گراف مهره و روش‌های توسعه آن	۱۶
۱۶	۱-۲ گراف‌های منفرد و ویژگی‌ها	۱۶
۲۳	۲-۲ ساختار گراف‌های مهره بزرگ‌تر	۲۳
۳۲	۳ ساختار گراف‌های منفرد	۳۲
۳۲	۱-۳ پایه مینیمال فضای هسته	۳۲

۳۴	۲-۳	پیکربندی‌های مینیمال
۳۷	۳-۳	پیکربندی‌های منفرد
۴۴		۴	تقارن و ارتباط آن با گراف
۴۴	۱-۴	طیف مدار
۴۸	۲-۴	مدارها و درایه‌های بردارهای ویژه
۴۹	۳-۴	علامات درایه‌های بردار ویژه
۵۴		۵	فولرن‌های مهره
۵۵	۱-۵	فولرن‌های مهره یکنواخت
۶۲	۲-۵	فولرن‌های مهره متعادل شده
۶۵		۶	شاخص همبندی خروج از مرکز
۶۵	۱-۶	محاسبه کران‌های شاخص همبندی خروج از مرکز
۷۴	۲-۶	محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز برای اعمال گراف‌ها
۷۵	۱-۲-۶	حاصل ضرب دکارتی
۷۷	۲-۲-۶	الحاق

۷۸	تفاضل متقارن	۳-۲-۶
۸۰	ترکیب	۴-۲-۶
۸۲	پیوند	۵-۲-۶
۸۴	حاصل ضرب تاج	۶-۲-۶
۸۶	کاربردها	۷-۲-۶

۷ محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز برای نانوساختارها

۹۰	شاخص همبندی خروج از مرکز نانولوله دسته‌صندلی	۱-۷
۹۶	شاخص همبندی خروج از مرکز نانولوله زیگ‌زاگ	۲-۷
۱۰۲	شاخص همبندی خروج از مرکز نانولوله $TUC_{\phi} C_{\lambda}(S)$	۳-۷
۱۰۹	شاخص همبندی خروج از مرکز نانولوله $TUC_{\phi} C_{\lambda}(R)$	۴-۷
۱۲۰	محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز نانوستاره‌ها	۵-۷
۱۲۱	نانوستاره $NS_1[n]$	۱-۵-۷
۱۲۶	نانوستاره $NS_2[n]$	۲-۵-۷
۱۲۹	نانوستاره $NS_3[n]$	۳-۵-۷
۱۳۲	مراجع	
۱۴۷	فهرست کلمات پرکاربرد	

۱۵۱ Abstract

فهرست علائم و اختصارات

۱..... $V(G)$: مجموعه رئوس گراف G

۱..... $E(G)$: مجموعه یال‌های گراف G

۲..... $\delta(v)$: درجه رأس v

۲..... $|V(G)|$: مرتبه گراف G

۲..... $|E(G)|$: اندازه گراف G

۲..... $K_{m,n}$: گراف کامل دوبخشی

۲..... S_n : گراف ستاره

۳..... P_n : گراف مسیر با n رأس

۳..... C_n : گراف دور با n رأس

۳..... N_n : گراف تهی با n رأس

۳..... W_n : هرم n وجهی یا چرخ با $n + 1$ رأس

۳..... B_n : دوهرم n وجهی با $n + 2$ رأس

۳..... π_n : منشور n پهلو با $2n$ رأس

۳..... A_n : پادمنشور n پهلو با $2n$ رأس

۴..... Q_n : مکعب n بعدی با 2^n رأس

۴..... $d(u, v)$: کوتاهترین فاصله بین دو رأس u و v

۴..... $\varepsilon(u)$: خروج از مرکز رأس u

۴..... $D(G)$: قطر گراف G

۴..... $R(G)$: شعاع گراف G

۴..... $C(G)$: مرکز گراف G

۷..... $Span(S)$: زیرفضای پدیدآمده توسط S

۷..... $Ker(T)$: فضای بوج تبدیل خطی T

۷..... $Im(T)$: برد تبدیل خطی T

۷ η : پوچی

۷ dim : بعد

۸ $adj A$: ماتریس متمم (الحاقی) A

۸ A : ماتریس مجاورت گراف

۹ λ : مقدار ویژه

۱۰ ε_λ : فضای ویژه متناظر با λ

۱۲ $\gamma(G)$: مجموعه خودریختی‌های گراف G

۱۲ \mathbb{S}_n : مجموعه جایگشت‌های روی اعداد طبیعی از یک تا n

۱۲ P_σ : ماتریس جایگشتی متناظر با جایگشت σ

۱۲ $\pi(n)$: مجموعه تمام ماتریس‌های جایگشتی

۱۴ $[x]$: مدار x

۱۴ Ω_i : مدار تولیدشده توسط رأس i

۱۷ χ_t : هسته متناظر با درایه‌های غیرصفر

- ۱۷ CV : مجموعه رئوس هسته
- ۱۷ $C_0(G)$: فضای هسته
- ۱۷ $\varepsilon_0(A)$: فضای بوج (ماتریس مجاورت) گراف
- ۳۲ $wt(u)$: وزن بردار u
- ۳۴ MC : پیکربندی مینیمال
- ۳۴ SC : پیکربندی منفرد
- ۳۴ ρ : پیرامون
- ۳۳ B_{min} : پایه مینیمال
- ۴۰ $colsp(Q)^\perp$: فضای بردارهای ستونی عمود بر Q
- ۴۶ $C_{n:m}$: فولرن با n رأس و شماره ایزومر m
- ۴۹ G^+ : زیرگراف ساخته شده توسط رئوس متناظر با درایه‌های مثبت بردار ویژه هسته
- ۴۹ G^- : زیرگراف ساخته شده توسط رئوس متناظر با درایه‌های منفی بردار ویژه هسته
- ۴۹ G° : زیرگراف ساخته شده توسط رئوس متناظر با درایه‌های صفر بردار ویژه هسته

- ۶۳..... NBO : مدار غیرکران دار در نظریه مولکولی هوکل
- ۶۵..... $\xi(G)$: شاخص همبندی خروج از مرکز
- ۶۷..... T_n : درخت با n رأس
- ۶۷..... $Z(v)$: مجموعه رئوسی که رأس خروج از مرکزشان برابر با v است.
- ۶۷..... ς : مرتبه مجموعه $Z(v)$
- ۷۵..... $\zeta(G)$: خروج از مرکز کل گراف G
- ۷۵..... $w(G)$: تعداد رئوس خوش - همبند در گراف G
- ۷۵..... $G_1 \square G_2$: حاصل ضرب دکارتی دو گراف G_1 و G_2
- ۷۷..... $G_1 \vee G_2$: الحاق دو گراف G_1 و G_2
- ۷۸..... $G_1 \oplus G_2$: تفاضل متقارن دو گراف G_1 و G_2
- ۸۰..... $G_1[G_2]$: ترکیب دو گراف G_1 و G_2
- ۸۲..... $G_1 + G_2$: پیوند دو گراف G_1 و G_2
- ۸۴..... $G_1 \circ G_2$: حاصل ضرب تاج دو گراف G_1 و G_2

۸۷ L_r : گراف نردبان با r رأس

۱۲۴ $[LM](G)$: ماتریس لایه

فهرست شکل‌ها

- ۱-۱ چند گراف معروف هندسی. ۳.....
- ۲-۱ گراف فولرن C_{20} . ۴.....
- ۱-۲ گراف‌های هسته با پوچی یک تا شش. ۱۷.....
- ۲-۲ دو گراف با پوچی یک و هسته‌های متفاوت. ۱۸.....
- ۳-۲ گراف G با رتبه ۶ و پوچی ۳. ۱۹.....
- ۴-۲ گراف P_7 با درایه‌های بردار ویژه متناظر. ۱۹.....
- ۵-۲ $R_9 = R_5 + R_6$ $R_5 + R_6 = R_7 + R_8$ $R_1 - R_2 + R_3 - R_4 = 0$. ۲۰.....
- ۶-۲ گراف‌های مهره G و G^* . ۲۴.....
- ۷-۲ گراف‌های مهره ساخته شده به وسیله درج یک رأس روی گراف مهره. ۲۶.....

- ۸-۲ گراف‌های G و G^a ۲۹
- ۹-۲ گراف مهره ساخته شده توسط اتصال مثلث و پنج ضلعی توسط مسیرهای فرد ۲۹
- ۱۰-۲ گراف E_n ۳۱
- ۱۱-۲ گراف‌های مهره از مرتبه ۷ ۳۱
- ۱-۳ گراف Y ۳۳
- ۲-۳ گراف‌های هسته و پیکربندی‌های مینیمال تولید شده توسط آن‌ها ۳۵
- ۳-۳ گراف منفرد G با پوچی یک ۳۷
- ۴-۳ ارتباط بین زیرگراف‌های گراف S ۴۱
- ۵-۳ گراف G و پیکربندی‌های مینیمال متناظر ۴۳
- ۱-۴ کوچک‌ترین فولرن مهره متعادل شده غیریکنواخت ۴۶
- ۲-۴ فولرن مهره مکعبی و یکنواخت $C_{۳۶:۱۴}$ و گراف مکعبی رأس انتقالی $C_{۱۲:۲}$ ۴۸
- ۳-۴ گراف همبند و رأس انتقالی G ۴۹
- ۱-۵ زیرگراف‌های هسته و پیکربندی‌های مینیمال فولرن $C_{۲۰}$ ۵۶

- ۲-۵ اولین ۲۴ فولرن مهره. ۵۷
- ۳-۵ کوچک‌ترین فولرن‌های مهره یکنواخت، متعادل‌شده، نه یکنواخت و نه متعادل‌شده. ۵۹
- ۴-۵ پوشش M ۶۰
- ۵-۵ فولرن $C_{36:14}$ ، پوشاندن با پوشش M و زیرگراف‌های تولید شده توسط درایه‌های مثبت و منفی. ... ۶۱
- ۶-۵ فولرن $C_{36:14}$ همراه با درایه‌های بردار ویژه صفر متناظر. ۶۲
- ۱-۶ مسیر بین دو رأس v_q و v_p شامل رأس w است، b شامل رأس w نیست. ۶۹
- ۶-۲ فرآیند تبدیل درخت T_n به درخت T'_n ۷۰
- ۳-۶ گراف آبنبات با ۱۲ رأس. ۷۲
- ۱-۷ نانولوله دسته‌صندلی یا آرمچیر. ۹۰
- ۲-۷ گراف نانولوله دسته‌صندلی با $p = 7$ و $q = 6$ ۹۱
- ۳-۷ نانولوله دسته‌صندلی با p فرد در سه حالت (i) ، (ii) و (iii) ۹۴
- ۴-۷ نانولوله دسته‌صندلی با p زوج در سه حالت (i) ، (ii) و (iii) ۹۵
- ۵-۷ نانولوله زیگ‌زاگ. ۹۶

- ۶-۷ گراف نانولوله زیگزاگ با $p = 8$ و $q = 6$ ۹۷
- ۷-۷ نانولوله زیگزاگ با q زوج ۹۹
- ۸-۷ نانولوله زیگزاگ با q فرد ۱۰۱
- ۹-۷ نانولوله $TUC_4C_8(S)$ ۱۰۲
- ۱۰-۷ گراف نانولوله $TUC_4C_8(S)$ با $p = 3$ و $q = 5$ ۱۰۳
- ۱۱-۷ (i) با p فرد و (ii) برای p زوج ۱۰۴
- ۱۲-۷ قطر گراف در حالت $p \leq q + 1$ ۱۰۵
- ۱۳-۷ قطر گراف در حالت $p > q + 1$ ۱۰۵
- ۱۴-۷ نانولوله $TUC_4C_8(R)$ ۱۱۰
- ۱۵-۷ گراف نانولوله $TUC_4C_8(R)$ با $p = 4$ و $q = 3$ ۱۱۰
- ۱۶-۷ رئوس خروج از مرکز متناظر با نماینده‌های سه ردیف اول ۱۱۴
- ۱۷-۷ نانوستاره $NS_1[3]$ ۱۲۲
- ۱۸-۷ هسته گراف به همراه نماینده‌های آن ۱۲۳

۱۹-۷ زیرگراف اضافه شده به گراف در هر مرحله همراه با نماینده های آن. ۱۲۳.....

۲۰-۷ یگ گراف و افرازهای لایه ای متناظر. ۱۲۵.....

۲۱-۷ نانوستاره $NS_2[3]$. ۱۲۷.....

۲۲-۷ شماره گذاری رئوس هسته نانوستاره $NS_2[3]$. ۱۲۹.....

۲۳-۷ نانوستاره $NS_2[n]$. ۱۲۹.....

۲۴-۷ نماینده های گراف $NS_2[n]$. ۱۳۰.....

فهرست جدول‌ها

- ۵-۱ فولرن‌های مهره به همراه تعداد وجوه و درایه‌های مجزای بردارویژه و نوع گراف. ۵۹
- ۷-۱ کران‌های خروج از مرکز برای نانولوله زیگ‌زاگ با p زوج. ۹۸
- ۷-۲ کران‌های خروج از مرکز برای نانولوله زیگ‌زاگ با p فرد. ۱۰۰
- ۷-۳ تعداد ردیف‌ها در دو حالت مختلف برای نانولوله $TUC_4C_8(S)$ ۱۰۷
- ۷-۴ کران‌های خروج از مرکز برای نانولوله $TUC_4C_8(S)$ با q فرد. ۱۰۷
- ۷-۵ کران‌های خروج از مرکز برای نانولوله $TUC_4C_8(S)$ با q زوج. ۱۰۸
- ۷-۶ تعداد لوزی‌های نانولوله $TUC_4C_8(R)$ با p زوج در هر حالت. ۱۱۲
- ۷-۷ تعداد لوزی‌های نانولوله $TUC_4C_8(R)$ با p فرد در هر حالت. ۱۱۳
- ۷-۸ کران‌های خروج از مرکز برای نانولوله $TUC_4C_8(R)$ با p زوج و q فرد. ۱۱۴

۹-۷ کران‌های خروج از مرکز برای نانولوله $TUC_4C_8(R)$ با p و q زوج. ۱۱۶.....

۱۰-۷ کران‌های خروج از مرکز برای نانولوله $TUC_4C_8(R)$ با p و q فرد. ۱۱۷.....

۱۱-۷ کران‌های خروج از مرکز برای نانولوله $TUC_4C_8(R)$ با p فرد و q زوج. ۱۲۰.....

۱۲-۷ درجه، تعداد و خروج از مرکز نماینده‌های نانوستاره $NS_1[n]$. ۱۲۳.....

۱۳-۷ درجه، تعداد و خروج از مرکز نماینده‌های نانوستاره $NS_2[n]$. ۱۲۹.....

۱۴-۷ درجه، تعداد و خروج از مرکز نماینده‌های نانوستاره $NS_3[n]$. ۱۳۱.....